

#### ESTUDO DE EFEITOS DE DIFUSÃO PREFERENCIAL EM ESCOAMENTOS REATIVOS DE BIOCOMBUSTIVEIS

Ricardo Luiz Soares Júnior

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: Albino José Kalab Leiroz. Marcelo José Colaço

Rio de Janeiro Abril de 2016

#### ESTUDO DE EFEITOS DE DIFUSÃO PREFERENCIAL EM ESCOAMENTOS REATIVOS DE BIOCOMBUSTIVEIS

Ricardo Luiz Soares Júnior

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSITUTO 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. Albino José Kalab Leiroz, Ph.D.

Prof. Marcelo José Colaço, D.Sc.

Prof. Aldélio Bueno Caldeira, D.Sc.

Prof. Carlos Eduardo Leme Nóbrega, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL ABRIL DE 2016 Soares Júnior, Ricardo Luiz

Estudo de Efeitos de Difusão Preferencial em Escoamentos Reativos de Biocombustíveis./ Ricardo Luiz Soares Júnior. – Rio de Janeiro: UFRJ/ COPPE, 2016.

XIX, 105 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Albino José Kalab Leiroz

Marcelo José Colaço

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Mecânica, 2016.

Referências Bibliográficas: p. 86-93.

 Difusão preferencial. 2. Número de Lewis não-unitário.
Chamas difusivas laminares. 4. Modelo de chama fina. I. Leiroz, Albino José Kalab *et al*. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Mecânica. III. Título

Aos meus pais, Ricardo e Lúcia, por todo incentivo e ajuda.

# AGRADECIMENTOS 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 hidrocarbonetos, e a conclusão desta dissertação.

### AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à Deus pois devemos a Ele devemos toda honra e toda glória.

Aos meus pais, Ricardo e Lúcia, e a todos familiares por todo carinho, apoio incentivo incondicional aos meus estudos.

Aos meus orientadores, Albino José Kalab Leiroz e Marcelo José Colaço, pelos ensinamentos, apoio, motivação e pelas importantes contribuições que foram indispensáveis para a realização deste trabalho.

Aos professores do Departamento de Engenharia Mecânica pelos conhecimentos transmitidos e que ajudaram de forma direta ou indireta na neste trabalho

A toda equipe do Laboratório de Máquinas Térmicas (LMT) por toda ajuda e presteza.

Aos meus colegas de LMT, Gabriel Veríssimo, Cesar Pacheco, Massoudi, Inoussa, Jorge e em especial aos meus amigos Felipe Brandão e Gabriel Romero pelos vários momentos de descontração e debates que tornaram esse período muito prazeroso. E não podia deixar de esquecer, das infinitas caronas que o Gabriel Romero me ofereceu no trajeto de volta para Niterói.

E a todos os outros que de alguma forma contribuíram para a conclusão deste trabalho.

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

#### ESTUDOS DE EFEITOS DE DIFUSÃO PREFERENCIAL EM ESCOAMENTOS REATIVOS DE BIOCOMBUSTIVEIS

Ricardo Luiz Soares Júnior

Abril/2016

Orientador: Albino José Kalab Leiroz Marcelo José Colaço

Programa de Engenharia Mecânica

O presente trabalho avalia os efeitos de difusão preferencial em um escoamento reativo, assiximétrico, confinado em um duto cilíndrico. A análise da reação de combustão é feita para dois combustíveis diferentes, metano e etanol, tendo o ar como oxidante. Considera-se também que o mecanismo de cinética química é composto por uma reação global, irreversível, de passo único e taxa infinita. A avaliação da difusão preferencial é feita utilizando a formulação proposta na literatura, a qual utiliza os escalares conservados fração de mistura generalizada e excesso de entalpia, estendendo assim a formulação clássica para números de Lewis não-unitários. As propriedades termodinâmicas e de transporte são consideradas dependentes da temperatura. As quantidades de interesse do escoamento reativo são obtidas utilizando o Método dos Volumes Finitos em uma malha estruturada. Os resultados são obtidos para diferentes números de Lewis tanto para o combustível quanto para o oxidante, e mostram o comportamento geral dos perfis de velocidade, temperatura, fração mássica e fração de mistura influenciados por este parâmetro. Os resultados são comparados com o caso do número de Lewis unitário.

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

#### STUDY OF THE EFFECTS OF PREFERENCIAL DIFFUSION IN BIOFUELS REACTIVE FLOWS

Ricardo Luiz Soares Júnior

April/2016

Advisors: Albino José Kalab Leiroz Marcelo José Colaço

Department: Mechanical Engineering

The present work evaluates the effects of preferential diffusion in axysimmetric confined reactive flow. The analysis of combustion reaction is conduct for two different fuels, Methane and Ethanol, with Air as the oxidising agent. A global, single step, irreversible with infinitely fast rate reaction is considered as a model for the chemical kinectic mechanism. The preferential diffusion is evaluated using the formulation proposed in the literature, which uses the generalized mixture fraction and excess enthalpy as conserved scalar, extending thus the classical formulation for non-unitary Lewis numbers. Temperature variation of thermophysical properties is considered in the developed model. The quantities of interest of reactive flow is obtained using the Finite Volume Method in a structured mesh. The results are obtained for different numbers of Lewis as much for fuel and oxidizer, and show the general behavior of the speed, temperature, mass fraction and mixture fraction profiles influenced by this parameter. The results are compared with the case of the unitary Lewis number.

# **SUMÁRIO**

| LISTA DE FIGURAS   | XI   |
|--|------|
| LISTA DE TABELAS   | XVI  |
| LISTA DE SÍMBOLOS  | XVII |
| CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO  | 1    |
| 1.1. Motivação   | 1    |
| 1.2. Objetivo  | 6    |
| 1.3. Organização do Trabalho                                   | 7    |
| CAPÍTULO 2 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA                             | 8    |
| 2.1. Chamas Difusivas  |      |
| 2.2. CHAMAS DIFUSIVAS DE METANO                                | 11   |
| 2.3. CHAMAS DIFUSIVAS DE ETANOL                                | 17   |
| 2.4. CHAMAS DIFUSIVAS COM DIFUSÃO PREFERENCIAL                 |      |
| CAPÍTULO 3 – FORMULAÇÃO MATEMÁTICA                             |      |
| 3.1. Equações de Conservação para Escoamentos Reativos         |      |
| 3.2. Formulação em Variáveis Primitivas                        |      |
| 3.2.1 Condições de Contorno para as Equações de Conservação    |      |
| 3.3. Adimensionalização das Equações de Conservação            |      |
| 3.3.1 Condições de Contorno Adimensionalizadas                 |      |
| 3.4. MODELO DE CHAMA FINA                                      | 30   |
| 3.4.1 Escalar Conservado - Formulação Clássica ( $Le = 1$ )    |      |
| 3.4.2 Escalar Conservado – Formulação de Liñan ( $Le \neq 1$ ) |      |
| 3.4.3 Condições de Contorno para o Modelo de Chama Fina        |      |
| CAPÍTULO 4 – METODOLOGIA NUMÉRICA                              | 38   |
| 4.1. Geração da Malha  |      |
| 4.2. Função de Interpolação                                    |      |
| 4.3. Acoplamento Pressão-Velocidade                            |      |
| 4.4. Condições de Contorno                                     |      |

| 4.5. Solução do Sistema de Equações Algébricas     |         |
|--|---------|
| 4.6. Critérios de Convergência                     | 44      |
| CAPÍTULO 5 – VERIFICAÇÃO                           | 45      |
| 5.1. Estudo de Convergência de Malha               | 45      |
| CAPÍTULO 6 – RESULTADOS                            | 51      |
| 6.1. CHAMA DIFUSIVA DE METANO                      |         |
| 6.2. CHAMA DIFUSIVA DE ETANOL                      | 68      |
| CAPÍTULO 7 – CONCLUSÕES                            | 83      |
| 7.1. Sugestões Para Trabalhos Futuros              |         |
| REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS                         | 86      |
| APÊNDICE A- DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE CONSERVA | AÇÃO 94 |
| APÊNDICE B- RESULTADOS ADICIONAIS                  | 104     |
| B.1 : Chama Difusiva de Metano                     | 104     |
| B.2 : Chama Difusiva de Etanol                     | 105     |

## LISTA DE FIGURAS

| Figura 1.1: Evolução do consumo da energia total e da energia per capita e evolução |
|---|
| da população mundial. Adaptado de EHRLICH et al (2012) 1                            |
| Figura 1.2: Fluxo Energético. BEN (2015)  |
| Figura 2.1: Estrutura genérica de uma chama difusiva laminar. Adaptado de           |
| POINSOT e VEYNANTE (2005)   |
| Figura 2.2: Geometria da chama no modelo BURKE E SCHUMANN (1928).                   |
| ROSEIRA JUNIOR (2005) 10  |
| Figura 2.3: Esquema do queimador. Adaptado de MITCHELL et al. (1980) 12             |
| Figura 2.4: Queimador SESHADRI (1986) e TSUJI (1982). Adaptado de KEYES e           |
| SMOOKE (1987)14   |
| Figura 3.1: Esquema do sistema físico analisado                                     |
| Figura 4.1: Refinamento próximo a $x_1 = 0$ . (a) Domínio físico. (b) Domínio       |
| computacional. (MALISKA, 2004)  |
| Figura 4.2: Refinamento próximo as paredes. (a) Domínio físico. (b) Domínio         |
| computacional. (MALISKA, 2004) 40   |
| Figura 4.3: Refinamento próximo a $x_{1c} = 0$ . (a) Domínio físico. (b) Domínio    |
| computacional. (MALISKA, 2004) 40   |
| Figura 5.1: Distribuição dos pontos nas malhas. (a) Malha 40x40. (b) Malha 80x80.   |
| (c) Malha 160x160   |
| Figura 5.2: Campo de velocidade axial – teste de convergência de malha 48           |
| Figura 5.3: Linhas de corrente – teste de convergência de malha                     |
| Figura 5.4: Campo de temperatura para as três malhas testadas                       |
| Figura 5.5: Campo de fração de mistura para as três malhas testadas                 |
| Figura 6.1: Esquema do queimador analisado. (SAUER, 2012) 51                        |
| Figura 6.2: Perfis de fração mássica de CH4 para diferentes números de Lewis nas    |
| posições axiais: 1,2 cm (a,b); 2,4 cm (c,d); 5,0 cm (e,f) 54                        |
| Figura 6.3: Perfis de fração mássica de O2 na chama de metano para diferentes       |
| números de Lewis nas posições axiais: 1,2 cm (a,b); 2,4 cm (c,d); 5,0 cm            |
| (e,f)   |

Figura 6.4: Perfis de fração mássica de N2 na chama de metano para diferentes números de Lewis nas posições axiais: 1,2 cm (a,b); 2,4 cm (c,d); 5,0 cm 

Figura 6.5: Perfis de temperatura na chama de metano ao longo do eixo de simetria (r = 0):  $Le_0 = 0,50 - 1,50$  e  $Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 1,00$  e

- $Le_F = 0.50 1.50.$  57
- Figura 6.6: Perfis de temperatura na chama de metano para diferentes números de Lewis nas posições axiais: 1,2 cm (a,b); 2,4 cm (c,d); 5,0 cm (e,f)...... 58
- Figura Perfis temperatura na chama de 6.7: de metano para: (a)  $Le_0 = 0.50$  e  $Le_F = 1.00$ ; (b)  $Le_0 = 0.75$  e  $Le_F = 1.00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25$  e  $Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50$  e  $Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 1,50$ .

.....

| Figura | 6.8   | 8: Perfis       |      | de         | fraç   | ão     | molar               | (   | le CH <sub>4</sub> : |   |
|--------|-------|-----------------|------|------------|--------|--------|---------------------|-----|----------------------|---|
|        | (a)   | $Le_0 = 0,50$   | e    | $Le_F = 1$ | 1,00;  | (b)    | $Le_0 = 0,75$       | e   | $Le_F = 1,00;$       |   |
|        | (c)   | $Le_0 = 1,25$   | e    | $Le_F = 1$ | 1,00;  | (d)    | $Le_0 = 1,50$       | e   | $Le_F = 1,00;$       |   |
|        | (e)   | $Le_0 = 1,00$   | e    | $Le_F = 0$ | 0,50;  | (f)    | $Le_0 = 1,00$       | e   | $Le_{F} = 0,75;$     |   |
|        | (g)   | $Le_0 = 1,00$   | e    | $Le_F = 1$ | 1,25;  | (h)    | $Le_0 = 1,00$       | ) e | $Le_{F} = 1,50.$     |   |
|        |       |                 |      | •••••      |        | •••••  |                     |     | 6                    | 1 |
| Figura | 6.9:  | Perfis de       | fraç | ão mol     | ar de  | e 0    | <sub>2</sub> na cha | ma  | de metano            |   |
|        | (a)   | $Le_0 = 0,50$   | e    | $Le_F = 1$ | 1,00;  | (b)    | $Le_0 = 0,75$       | e   | $Le_{F} = 1,00;$     |   |
|        | (c)   | $Le_0 = 1,25$   | e    | $Le_F = 1$ | 1,00;  | (d)    | $Le_0 = 1,50$       | e   | $Le_{F} = 1,00;$     |   |
|        | (e)   | $Le_0 = 1,00$   | e    | $Le_F = 0$ | 0,50;  | (f)    | $Le_0 = 1,00$       | e   | $Le_F = 0,75;$       |   |
|        | (g)   | $Le_0 = 1,00$   | e    | $Le_F = 1$ | 1,25;  | (h)    | $Le_0 = 1,00$       | ) e | $Le_F = 1,50.$       |   |
|        |       |                 |      |            |        | •••••• |                     |     | 62                   | 2 |
| Figura | 6.10: | Perfis de       | fraç | ção mo     | lar de | e N    | na cha              | ma  | de metano:           |   |
|        | (a)   | $Le_0 = 0,50$   | e    | $Le_F = 1$ | 1,00;  | (b)    | $Le_0 = 0,75$       | e   | $Le_F = 1,00;$       |   |
|        | (c)   | $Le_0 = 1,25$   | e    | $Le_F = 1$ | 1,00;  | (d)    | $Le_0 = 1,50$       | e   | $Le_F = 1,00;$       |   |
|        | (e)   | $Le_0 = 1,00$   | e    | $Le_F = 0$ | 0,50;  | (f)    | $Le_0 = 1,00$       | e   | $Le_{F} = 0,75;$     |   |
|        | (g)   | $Le_{0} = 1,00$ | e    | $Le_F = 1$ | 1,25;  | (h)    | $Le_0 = 1,00$       | ) e | $Le_{F} = 1,50.$     |   |

| Figura   | 6.11:        | Perfis de                              | fraçã   | ão molar       | de C       | $O_2$ na chai          | ma          | de metano:       |      |
|----------|--------------|--|---------|----------------|------------|------------------------|-------------|------------------|------|
|          | (a)          | $Le_{O} = 0,50$                        | e       | $Le_{F} = 1,0$ | 0; (b)     | $Le_{0} = 0,75$        | e           | $Le_{F} = 1,00;$ |      |
|          | (c)          | $Le_0 = 1,25$                          | e       | $Le_{F} = 1,0$ | 0; (d)     | $Le_0 = 1,50$          | e           | $Le_{F} = 1,00;$ |      |
|          | (e)          | $Le_0 = 1,00$                          | e       | $Le_F = 0,5$   | 50; (f)    | $Le_0 = 1,00$          | e           | $Le_F = 0,75;$   |      |
|          | (g)          | $Le_0 = 1,00$                          | e       | $Le_{F} = 1,2$ | 5; (h)     | $Le_0 = 1,00$          | e           | $Le_F = 1,50.$   |      |
|          |              |  |         | •••••          |            |                        |             |                  | . 64 |
| Figura   | 6.12:        | Perfis de                              | fraçă   | ão molar       | de H       | <sub>2</sub> O na chai | ma          | de metano:       |      |
|          | (a)          | $Le_0 = 0,50$                          | e       | $Le_{F} = 1,0$ | 0; (b)     | $Le_0 = 0,75$          | e           | $Le_F=1,00;$     |      |
|          | (c)          | $Le_0 = 1,25$                          | e       | $Le_{F} = 1,0$ | 0; (d)     | $Le_0 = 1,50$          | e           | $Le_F = 1,00;$   |      |
|          | (e)          | $Le_0 = 1,00$                          | e       | $Le_{F} = 0,5$ | 60; (f)    | $Le_0 = 1,00$          | e           | $Le_F = 0,75;$   |      |
|          | (g)          | $Le_0 = 1,00$                          | e       | $Le_{F} = 1,2$ | 5; (h)     | $Le_0 = 1,00$          | e           | $Le_F = 1,50.$   |      |
|          |              |  | •••••   |                |            |                        | •••••       |                  | . 65 |
| Figura   | 6.13:        | Perfis de                              | e f     | ração de       | mistu      | ıra (posição           | 0           | de chama):       |      |
|          | (a)          | $Le_0 = 0,50$                          | e       | $Le_{F} = 1,0$ | 0; (b)     | $Le_0 = 0,75$          | e           | $Le_{F} = 1,00;$ |      |
|          | (c)          | $Le_0 = 1,25$                          | e       | $Le_{F} = 1,0$ | 0; (d)     | $Le_0 = 1,50$          | e           | $Le_{F} = 1,00;$ |      |
|          | (e)          | $Le_0 = 1,00$                          | e       | $Le_{F} = 0,5$ | 60; (f)    | $Le_0 = 1,00$          | e           | $Le_F = 0,75;$   |      |
|          | (g)          | $Le_0 = 1,00$                          | e       | $Le_{F} = 1,2$ | 5; (h)     | $Le_0 = 1,00$          | e           | $Le_F = 1,50.$   |      |
|          |              |  | •••••   |                |            |                        | •••••       |                  | . 66 |
| Figura   | 6.14:        | Perfis                                 | de      | velocidad      | e axia     | al (linhas             | de          | corrente):       |      |
|          | (a)          | $Le_0 = 0,50$                          | e       | $Le_{F} = 1,0$ | 0; (b)     | $Le_0 = 0,75$          | e           | $Le_F = 1,00;$   |      |
|          | (c)          | $Le_0 = 1,25$                          | e       | $Le_{F} = 1,0$ | 0; (d)     | $Le_0 = 1,50$          | e           | $Le_F = 1,00;$   |      |
|          | (e)          | $Le_0 = 1,00$                          | e       | $Le_{F} = 0,5$ | 60; (f)    | $Le_0 = 1,00$          | e           | $Le_F = 0,75;$   |      |
|          | (g)          | $Le_0 = 1,00$                          | e       | $Le_{F} = 1,2$ | 5; (h)     | $Le_0 = 1,00$          | e           | $Le_F = 1,50.$   |      |
|          |              |  |         | •••••          |            |                        | •••••       |                  | . 67 |
| Figura 6 | 5.15: Pe     | rfis de tempe                          | ratur   | a na chama     | de etan    | ol ao longo d          | o eix       | o de simetria    |      |
|          | ( <i>r</i> = | = 0): (a) <i>L</i>                     | $e_0 =$ | : 0,50 – 1,    | 50 e L     | $e_F = 1,00;$ (        | b) <i>L</i> | $e_0 = 1,00$ e   |      |
|          | Le           | r = 0,50 - 1,                          | ,50     | •••••          |            |                        | •••••       |                  | . 69 |
| Figura 6 | 6.16: Pe     | rfis de tempe                          | eratui  | ra na cham     | a de eta   | nol para difer         | entes       | s números de     |      |
|          | Lev          | vis nas posiçõ                         | ões ax  | kiais: 1,2 cr  | n (a,b); 2 | 2,4 cm (c,d); 5        | 5,0 cr      | n (e,f)          | . 70 |
| Figura 6 | 5.17: Per    | fis de C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O | H pa    | ra diferente   | s númer    | os de Lewis na         | as po       | sições axiais:   |      |
|          | 1,2          | cm (a,b); 2,4                          | cm (    | c,d); 5,0 cn   | n (e,f)    |                        | •••••       |                  | . 71 |
| Figura 6 | 5.18: Pe     | rfis de O <sub>2</sub> na              | chan    | na de etanc    | l para di  | ferentes núm           | eros        | de Lewis nas     |      |
|          | pos          | ições axiais: 1                        | 1,2 ci  | m (a,b); 2,4   | cm (c,d    | ); 5,0 cm (e,f)        |             |                  | . 72 |

| Figura | 6.20: | Perfis c        | le    | temperatura      | na    | chama de                | e  | tanol para:                       |      |
|--------|-------|-----------------|-------|------------------|-------|-------------------------|----|-----------------------------------|------|
|        | (a)   | $Le_{0} = 0,50$ | ) e   | $Le_F = 1,00;$   | (b)   | $Le_0 = 0,75$           | e  | $Le_F = 1,00;$                    |      |
|        | (c)   | $Le_0 = 1,25$   | 5 e   | $Le_F = 1,00;$   | (d)   | $Le_0 = 1,50$           | e  | $Le_F = 1,00;$                    |      |
|        | (e)   | $Le_0 = 1,00$   | ) e   | $Le_{F} = 0,50;$ | (f)   | $Le_0 = 1,00$           | e  | $Le_{F} = 0,75;$                  |      |
|        | (g)   | $Le_0 = 1,00$   | e     | $Le_F = 1,25;$   | (h)   | $Le_0 = 1,00$           | e  | $Le_{F} = 1,50.$                  |      |
|        |       |                 | ••••• |                  | ••••• |                         |    |                                   | . 75 |
| Figura | 6.2   | 1: Perfi        | S     | de fraçã         | ĭo    | molar o                 | de | C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH: |      |
|        | (a)   | $Le_0 = 0,50$   | ) e   | $Le_{F} = 1,00;$ | (b)   | $Le_0 = 0,75$           | e  | $Le_{F} = 1,00;$                  |      |
|        | (c)   | $Le_0 = 1,25$   | 5 e   | $Le_F = 1,00;$   | (d)   | $Le_0 = 1,50$           | e  | $Le_F = 1,00;$                    |      |
|        | (e)   | $Le_0 = 1,00$   | ) e   | $Le_F = 0,50;$   | (f)   | $Le_0 = 1,00$           | e  | $Le_F = 0,75;$                    |      |
|        | (g)   | $Le_0 = 1,00$   | e     | $Le_F = 1,25;$   | (h)   | $Le_0 = 1,00$           | e  | $Le_F = 1,50.$                    |      |
|        |       |                 | ••••• |                  | ••••• |                         |    |                                   | . 76 |
| Figura | 6.22: | Perfis de       | fr    | ação molar       | de    | O <sub>2</sub> na char  | ma | de etanol:                        |      |
|        | (a)   | $Le_0 = 0,50$   | ) e   | $Le_{F} = 1,00;$ | (b)   | $Le_0 = 0,75$           | e  | $Le_F = 1,00;$                    |      |
|        | (c)   | $Le_0 = 1,25$   | 5 e   | $Le_{F} = 1,00;$ | (d)   | $Le_0 = 1,50$           | e  | $Le_F = 1,00;$                    |      |
|        | (e)   | $Le_0 = 1,00$   | ) e   | $Le_F = 0,50;$   | (f)   | $Le_0 = 1,00$           | e  | $Le_F = 0,75;$                    |      |
|        | (g)   | $Le_0 = 1,00$   | e     | $Le_{F} = 1,25;$ | (h)   | $Le_0 = 1,00$           | e  | $Le_F = 1,50.$                    |      |
|        |       |                 |       |                  |       |                         |    |                                   | . 77 |
| Figura | 6.23: | Perfis de       | fra   | ção molar c      | le (  | CO <sub>2</sub> na cha  | ma | de etanol:                        |      |
|        | (a)   | $Le_0 = 0,50$   | ) e   | $Le_{F} = 1,00;$ | (b)   | $Le_{0} = 0,75$         | e  | $Le_{F} = 1,00;$                  |      |
|        | (c)   | $Le_0 = 1,25$   | 5 e   | $Le_{F} = 1,00;$ | (d)   | $Le_0 = 1,50$           | e  | $Le_{F} = 1,00;$                  |      |
|        | (e)   | $Le_0 = 1,00$   | ) e   | $Le_F = 0,50;$   | (f)   | $Le_0 = 1,00$           | e  | $Le_F = 0,75;$                    |      |
|        | (g)   | $Le_{O} = 1,00$ | e     | $Le_F = 1,25;$   | (h)   | $Le_0 = 1,00$           | e  | $Le_F = 1,50.$                    |      |
|        |       |                 | ••••• |                  |       |                         |    |                                   | . 79 |
| Figura | 6.24: | Perfis de       | fra   | ção molar c      | le I  | H <sub>2</sub> O na cha | ma | de etanol:                        |      |
|        | (a)   | $Le_0 = 0,50$   | ) e   | $Le_{F} = 1,00;$ | (b)   | $Le_0 = 0,75$           | e  | $Le_F = 1,00;$                    |      |
|        | (c)   | $Le_0 = 1,25$   | 5 e   | $Le_{F} = 1,00;$ | (d)   | $Le_0 = 1,50$           | e  | $Le_F = 1,00;$                    |      |
|        | (e)   | $Le_0 = 1,00$   | ) e   | $Le_{F} = 0,50;$ | (f)   | $Le_0 = 1,00$           | e  | $Le_F = 0,75;$                    |      |
|        | (g)   | $Le_0 = 1,00$   | e     | $Le_F = 1,25;$   | (h)   | $Le_0 = 1,00$           | e  | $Le_F = 1,50.$                    |      |
|        |       |                 |       |                  |       |                         |    |                                   | . 80 |

| Figura | 6.25: | Perfis         | de    | fração    | de    | mistu  | ra (posição     | (   | de chama):       |     |
|--------|-------|----------------|-------|-----------|-------|--------|-----------------|-----|------------------|-----|
|        | (a)   | $Le_0 = 0,5$   | 0 e   | $Le_F =$  | 1,00; | (b)    | $Le_0 = 0,75$   | e   | $Le_{F} = 1,00;$ |     |
|        | (c)   | $Le_0 = 1,2$   | 5 e   | $Le_F =$  | 1,00; | (d)    | $Le_0 = 1,50$   | e   | $Le_{F} = 1,00;$ |     |
|        | (e)   | $Le_0 = 1,0$   | 0 ε   | $Le_F =$  | 0,50; | (f)    | $Le_0 = 1,00$   | e   | $Le_F = 0,75;$   |     |
|        | (g)   | $Le_{0} = 1,0$ | 0 e   | $Le_F =$  | 1,25; | (h)    | $Le_0 = 1,00$   | e   | $Le_{F} = 1,50.$ |     |
|        | ••••• |                |       |           |       |        | •••••           |     | ••••••           | 81  |
| Figura | 6.26: | Perfis         | de    | veloci    | dade  | axia   | l (linhas       | de  | corrente):       |     |
|        | (a)   | $Le_0 = 0,5$   | 0 e   | $Le_F =$  | 1,00; | (b)    | $Le_{0} = 0,75$ | e   | $Le_{F} = 1,00;$ |     |
|        | (c)   | $Le_0 = 1,2$   | 5 e   | $Le_F =$  | 1,00; | (d)    | $Le_0 = 1,50$   | e   | $Le_{F} = 1,00;$ |     |
|        | (e)   | $Le_0 = 1,0$   | 0 ε   | $Le_F =$  | 0,50; | (f)    | $Le_0 = 1,00$   | e   | $Le_{F} = 0,75;$ |     |
|        | (g)   | $Le_0 = 1,0$   | 0 e   | $Le_F =$  | 1,25; | (h)    | $Le_0 = 1,00$   | e   | $Le_{F} = 1,50.$ |     |
|        | ••••• | ••••••         | ••••• |           |       |        |                 |     | ••••••           | 82  |
| Figura | B.1:  | Perfis d       | le    | velocidad | de r  | adial  | na chama        | . ( | le metano:       |     |
|        | (a)   | $Le_0 = 0,5$   | 0 e   | $Le_F =$  | 1,00; | (b)    | $Le_0 = 0,75$   | e   | $Le_{F} = 1,00;$ |     |
|        | (c)   | $Le_0 = 1,2$   | 5 e   | $Le_F =$  | 1,00; | (d)    | $Le_0 = 1,50$   | e   | $Le_{F} = 1,00;$ |     |
|        | (e)   | $Le_0 = 1,0$   | 0 ε   | $Le_F =$  | 0,50; | (f)    | $Le_0 = 1,00$   | e   | $Le_F = 0,75;$   |     |
|        | (g)   | $Le_0 = 1,0$   | 0 e   | $Le_F =$  | 1,25; | (h)    | $Le_0 = 1,00$   | e   | $Le_{F} = 1,50.$ |     |
|        | ••••• |                |       |           |       |        |                 |     |                  | 104 |
| Figura | B.2:  | Perfis         | de    | velocida  | de    | radial | na cham         | a   | de etanol:       |     |
|        | (a)   | $Le_0 = 0,5$   | 0 e   | $Le_F =$  | 1,00; | (b)    | $Le_0 = 0,75$   | e   | $Le_F = 1,00;$   |     |
|        | (c)   | $Le_0 = 1,2$   | 5 e   | $Le_F =$  | 1,00; | (d)    | $Le_0 = 1,50$   | e   | $Le_F = 1,00;$   |     |
|        | (e)   | $Le_0 = 1,0$   | 0 ε   | $Le_F =$  | 0,50; | (f)    | $Le_0 = 1,00$   | e   | $Le_F = 0,75;$   |     |
|        | (g)   | $Le_0 = 1,0$   | 0 e   | $Le_F =$  | 1,25; | (h)    | $Le_0 = 1,00$   | e   | $Le_{F} = 1,50.$ |     |
|        | ••••• |                |       |           |       |        |                 |     |                  | 105 |

## LISTA DE TABELAS

| Tabela 1.1: Consumo total de petróleo no Brasil no período de 2005 a 2014. BEN |    |
|--|----|
| (2015)   | 3  |
| Tabela 3.1: Grandezas Características  | 28 |
| Tabela 3.2: Parâmetro de geração de calor                                      | 36 |
| Tabela 5.1: Valores de CFL para o intervalo de tempo inicial                   | 46 |
| Tabela 5.2: Malhas utilizadas no teste de convergência                         | 46 |
| Tabela 6.1: Casos estudados  | 53 |

# LISTA DE SÍMBOLOS

| Α            | Fator pré-exponencial  |
|--------------|--|
| $c_p$        | Calor específico à pressão constante em unidade de mássica     |
| $\bar{d}$    | Coeficiente do algoritimo SIMPLEC                              |
| D            | Termo difusivo   |
| D            | Coeficiente de Difusão   |
| е            | Energia interna específica                                     |
| Ε            | Energia de ativação  |
| f            | Força de corpo   |
| F            | Combustível  |
| g            | Componente da aceleração gravitacional                         |
| h            | Entalpia específica  |
| Н            | Excesso de entalpia  |
| J            | Jacobiano  |
| L            | Comprimento  |
| М            | Massa/ Número de pontos da malha na direção axial              |
| <i></i><br>М | Fluxo de massa   |
| n            | Ordem de reação  |
| Ν            | Componente inerte/ Número de pontos da malha na direção radial |
| Р            | Pressão/ Produto   |
| Q            | Taxa de calor gerado por unidade mássica de combustível        |
| r            | Distância radial   |
| R            | Constante universal dos gases; Raio                            |
| S            | Termo fonte  |
| S            | Coeficiente estequiométrico mássico                            |
| t            | Tempo  |
| Т            | Temperatura  |
| и            | Velocidade axial   |
| U            | Velocidade na direção transformada                             |
| v            | Velocidade radial  |

| V              | Vetor velocidade                                  |
|----------------|---|
| V              | Velocidade na direção transformada; Volume        |
| V              | Vetor velocidade de difusão mássica               |
| W              | Massa molecular                                   |
| $\overline{W}$ | Massa molecular média                             |
| X              | Fração Molar                                      |
| x              | Distância axial                                   |
| Y              | Fração mássica                                    |
| Ζ              | Fração de mistura; Fração de mistura generalizada |

#### Letras Gregas

| α                 | Coeficiente de refinamento de malha; difusividade térmica |
|-------------------|---|
| $\overline{lpha}$ | Coeficiente de interpolação                               |
| β                 | Coeficiente de refinamento de malha                       |
| $ar{eta}$         | Coeficiente de interpolação                               |
| Г                 | Coeficiente de transporte                                 |
| Δ                 | Variação  |
| η                 | Direção transformada                                      |
| λ                 | Condutividade térmica                                     |
| μ                 | Viscosidade dinâmica                                      |
| ν                 | Número de mols  |
| ξ                 | Direção transformada                                      |
| ρ                 | Massa específica  |
| σ                 | Erro  |
| τ                 | Coeficiente de refinamento de malha                       |
| τ                 | Tensor de tensões   |
| $\phi$            | Escalar conservado  |
| ω                 | Taxa de reação em unidade mássica                         |

#### Sobrescritos

| 0 | Estado de referênc | ia |
|---|--------------------|----|
|   |                    |    |

- *t* Instante de tempo
- $\phi$  Escalar conservado
- \* Valor estimado no algoritimo SIMPLEC
- ' Correção no algoritimo SIMPLEC

#### Subscritos

| 0         | Instante de tempo inicial |  |  |  |  |  |  |
|-----------|---------------------------|--|--|--|--|--|--|
| а         | Ar                        |  |  |  |  |  |  |
| A∞        | Entrada de ar             |  |  |  |  |  |  |
| k         | Espécie química           |  |  |  |  |  |  |
| f         | Frente de chama           |  |  |  |  |  |  |
| е         | Face leste                |  |  |  |  |  |  |
| Ε         | Ponto leste               |  |  |  |  |  |  |
| F         | Combustível               |  |  |  |  |  |  |
| $F\infty$ | Entrada de combustível    |  |  |  |  |  |  |
| М         | Mistura                   |  |  |  |  |  |  |
| n         | Face norte                |  |  |  |  |  |  |
| Ν         | Ponto norte               |  |  |  |  |  |  |
| nb        | Faces vizinhas            |  |  |  |  |  |  |
| NB        | Pontos vizinhos           |  |  |  |  |  |  |
| 0         | Oxidante                  |  |  |  |  |  |  |
| Р         | Ponto central             |  |  |  |  |  |  |
| S         | Face sul                  |  |  |  |  |  |  |
| S         | Ponto sul                 |  |  |  |  |  |  |
| x         | Direção axial             |  |  |  |  |  |  |
| W         | Face oeste                |  |  |  |  |  |  |
| W         | Ponto oeste               |  |  |  |  |  |  |

### Capítulo 1 - Introdução

#### 1.1. Motivação

A importância da energia para indústria, transporte e geração de eletricidade tornase cada vez mais profunda em nossos dias. A queima de combustíveis fósseis é sem dúvida o mais importante método primário de conversão de energia e que permanecerá ainda como o mais importante por vários anos.

A combustão tem desempenhado um importante papel na civilização humana seja no aspecto prático ou místico. Desde que o homem descobriu como criar fogo, nós dependemos da combustão para realizar uma grande variedade de tarefas. O fogo foi utilizado inicialmente para aquecimento e cozimento, e posteriormente usado na fabricação de ferramentas e armas. Para todos os efeitos práticos, não foi até o início da revolução industrial no século XIX que o homem começou a aproveitar realmente o poder da combustão. Desde então a humanidade fez um rápido progresso na aplicação dos sistemas de combustão e muitas indústrias passaram a existir como resultado direto deste feito que foi a revolução industrial. E, ao mesmo tempo, a revolução industrial também levou a um aumento sem precedentes no consumo de energia pela nossa civilização afim de manter a qualidade de vida.



Figura 1.1: Evolução do consumo da energia total e da energia per capita e evolução da população mundial. Adaptado de EHRLICH *et al* (2012)

Como mostrado na Fig. no texto dado, o uso total de energia no mundo cresceu mais do que 20 vezes desde o século XIX EHRLICH et al (2012). Tal crescimento foi causado tanto pelo aumento da população mundial quanto pela expansão do consumo de energia per capita.



Figura 1.2: Fluxo Energético. BEN (2015)

A Fig. 1.2 é um gráfico de fluxo de energia que mostra oferta de energia e seu consumo no Brasil em 2014. A principal fonte de energia hoje são os combustíveis fósseis, isto é, carvão, petróleo, gás natural, somente o petróleo e seus derivados

constituem quase 40% da oferta de energia (BEN 215). No entanto, o que permanece inalterado é o fato de que a combustão continua sendo o método primário de conversão de energia mais utilizado.

Apesar de serem recursos finitos, os combustíveis fósseis, principalmente o petróleo, são responsáveis por uma grande demanda. Para suportar a alta demanda de produção e consumo é necessário a utilização em grande escala de tal fonte energética, o que acarreta numa série de impactos locais e até global ao meio ambiente (WAZILEWSKI, 2012). Dentre os impactos causados pelo petróleo e seus derivados, é possível citar a aspiração dos gases hidrocarbonetos e a possibilidade de incêndio, a contaminação dos recursos hídricos e solos provocadas por vazamentos, além do lançamento de gases causadores do efeito estufa na atmosfera. De acordo com o BEN 2015 (Balanço Energético Nacional), se considerarmos um intervalo de 10 anos (2005 a 2014), o maior consumo de petróleo aconteceu em 2014, onde a marca atingiu 121.008·10<sup>3</sup> m<sup>3</sup> de petróleo, conforme mostra a Tab. 1.1.

Tabela 1.1: Consumo total de petróleo no Brasil no período de 2005 a 2014. BEN (2015)

|            |         |               |         |         |         |         |         |         |         | 103 m <sup>3</sup> |         |
|------------|---------|---------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|--------------------|---------|
| FLUXO      | 2005    | 2006          | 2007    | 2008    | 2009    | 2010    | 2011    | 2012    | 2013    | 2014               |         |
| PRODUÇÃO   | 94.997  | 100.241       | 101.755 | 105.618 | 113.519 | 119.595 | 122.445 | 120.244 | 117.711 | 131.129            |         |
| IMPORTAÇÃO | 19.916  | 19.421        | 24.120  | 22.122  | 21.762  | 19.659  | 19.258  | 20.017  | 22.891  | 20.317             |         |
| EXPORTAÇÃO | -15.930 | -21.357       | -24.454 | -25.138 | -30.503 | -36.645 | -35.080 | -30.951 | -23.046 | -30.112            |         |
| VARIAÇÃO   |         |               |         |         |         |         |         |         |         |                    |         |
| DEESTOQUES | -156    | 156           | 804     | 262     | 171     | 1 207   | 1 104   | 1 409   | 620     | 561                | 226     |
| PERDAS     |         | 004           | -303    | -1/1    | -1.397  | 1.104   | -1.408  | 030     | 301     | -320               |         |
| E AJUSTES  |         |               |         |         |         |         |         |         |         |                    |         |
| CONSUMO    | 98.827  | 08 827 00 100 | 00.100  | 101.059 | 102 421 | 102 201 | 102 712 | 105 215 | 100.040 | 110 117            | 121 009 |
| TOTAL      |         | 70.027 99.109 | 101.038 | 102.431 | 105.581 | 105./15 | 105.215 | 109.940 | 110.117 | 121.008            |         |

Embora o Brasil apresente um potencial expressivo no que diz respeito à energia de origem fóssil, a necessidade de mudança na matriz energética brasileira é evidente em virtude da dependência energética e dos impactos ambientais causados na retirada e consumo. Não à toa, as exigências feitas sobre os sistemas reativos mudam constantemente com o tempo e tornam-se cada vez mais rigorosas. A segurança e confiabilidade em tais sistemas sempre foram essenciais, contudo a ênfase em transferências de calor eficazes, uniformidade de temperatura, aumento dos equipamentos, eficiência e controle, e mais recentemente, emissões de gases ao meioambiente e ruído têm evoluído ao longo do tempo para melhoria desses sistemas. Desta forma, torna-se imprescindível o incentivo, a busca e o aprimoramento na pesquisa de tais sistemas e na utilização de fontes energéticas renováveis. De acordo com COELHO et al. (2006), nos EUA existem incentivos fiscais para o desenvolvimento de etanol à base de milho. Já na França e Alemanha, a produção de biocombustíveis é baseada em culturas oleaginosas. No Brasil, o grande potencial de produção de energias renováveis é destacado por (GOLDEMBERG E LUCON 2007).

O Brasil apresenta bom potencial para exploração de fontes renováveis de energia devido a suas condições naturais e de acordo com o Ministério de Minas e Energia (2012), a matriz energética brasileira é a mais renovável do mundo. Enquanto os países mais desenvolvidos utilizam 14% de fontes renováveis em suas matrizes, o Brasil utiliza 45%. Os programas de álcool, biodiesel e de incentivo às fontes alternativas de energia consolidam-se num momento de crescimento sustentável da economia tornando o momento oportuno para se pensar em um novo projeto de desenvolvimento, que seja capaz de aliar crescimento econômico, inclusão social e sustentabilidade ambiental.

Dado os desafios energéticos e ambientais que a sociedade enfrenta, é importante que usemos a combustão como método eficiente, ambientavelmente responsável e seguro. Melhorias na tecnologia envolvendo os sistemas reativos requerem um entendimento quantitativo e qualitativo sobre esse fenômeno. A combustão é por natureza uma matéria interdisciplinar e para compreendê-la necessitamos do conhecimento sobre alguns fundamentos como: turbulência, transferência de calor e massa, cinética química, entre outros. A natureza complexa na aplicação prática de sistemas reativos, combinados com a falta de modelos analíticos confiáveis no passado, encorajaram pesquisadores a contar fortemente com métodos empíricos com o intuito de predizer desempenho e desenvolver novos produtos. Felizmente, o campo da combustão ganhou considerável conhecimento nas últimas décadas, o qual é utilizado na indústria por engenheiros para projetar sistemas reativos de uma forma mais rigorosa e eficiente.

Hoje ferramentas de diagnóstico e instrumentação, com capacidades inimagináveis a poucos anos atrás, permitem a pesquisadores e engenheiros reunir informações detalhadas em ambientes hostis envolvendo a combustão tanto no nível macroscópico quanto no microscópico. Lasers, espectroscopia, sistemas de câmeras ultravioleta, são utilizados como métodos não intrusivos para ganhar informações quantitativas e qualitativas como campo de temperaturas, velocidade, concentração de

4

espécies, visualização do escoamento, tamanho de partícula. Sistemas avançados de instrumentação e diagnóstico estão sendo transferidos para além dos laboratórios em aplicações no campo prático. As informações obtidas com esses sistemas têm ajudado consideravelmente nosso conhecimento sobre os sistemas reativos além de serem ferramentas indispensáveis na validação de modelos (BAUKAL e SCHWARTZ, 2001).

O advento de computadores cada vez mais rápidos e potentes teve um profundo impacto na forma como engenheiros modelam sistemas reativos. A técnica de fluidodinâmica computacional passou fornecer informações detalhadas das características dos escoamentos reativos para melhor compreensão dos fenômenos complexos envolvidos e permite que avalições quantitativas sejam realizadas. A fluidodinâmica computacional aliada com validações feitas por métodos experimentais, embora técnicas experimentais sejam financeiramente custosas, tornam o CFD uma importante ferramenta na pesquisa, desenvolvimento, análise e projeto de equipamentos envolvendo escoamentos reativos (WU 2014).

Refino de óleo, processos químicos e geração de potência são atividades que pertencem a industrias que necessitam de grande aporte de energia, uma variedade de aplicações envolvendo combustão estão presentes nessas atividades como: queimadores, aquecedores, caldeiras, sistemas de cogeração, *flares*. Os sistemas reativos presentes nessas industrias apresentam desafios únicos relacionados a uma gama de composição de combustíveis utilizada. Esses equipamentos precisam ser flexíveis para poder operar de modo seguro, confiável, eficiente e de forma ambientalmente responsável sobre uma variedade de composições de combustíveis e condições (BAUKAL e SCHWARTZ, 2001).

Diversos fenômenos de combustão são fortemente afetados pelos processos difusivos dos reagentes. Uma vez que as difusividades das espécies químicas envolvidas no processo de combustão não são iguais, é razoável esperar que a concentração local de reagentes será dependente da extensão com que as difusividades diferem. Esta modificação na concentração através da difusão preferencial pode por sua vez, afetar o comportamento da chama. De fato, a estrutura e a estabilidade, da chama são significativamente influenciadas por vários parâmetros acoplados incluindo: radiação, química, instabilidades, termodifusão e difusão preferencial. A difusão preferencial devido a diferença nas intensidades entre a difusão de massa e a difusão de calor em um meio, pode ser caracterizada pelo número de Lewis (*Le*), definido como a razão entre a difusividade mássica e a difusividade térmica, sendo este considerado um importante

fator. A presença de uma grande disparidade taxas de transferência de calor e massa faz com o número de Lewis varie significativamente na chama.

#### 1.2. Objetivo

A presente dissertação se concentra na realização da análise dos efeitos de difusão preferencial em um escoamento laminar, confinado, axissimétrico e com propriedades variáveis no qual ocorre o processo de combustão difusiva de um biocombustível. A configuração do sistema físico analisado é equivalente ao utilizado por MITCHELL *et al.* (1980). Maiores detalhes do sobre o sistema, incluindo as características do modelo, são apresentadas nos Cap. 3 e 5.

Será utilizada a formulação desenvolvida por LIÑAN E WILLIANS (1993) baseada na combinação das equações de conservação de energia e espécies para a eliminação dos termos de reação, as quais serão substituídas pelas equações de conservação com os escalares conservados de fração de mistura Z e excesso de entalpia H.

A solução para os campos de velocidade, pressão, fração de mistura e excesso de entalpia será obtida por meio da solução numérica acoplada do escoamento, utilizando variáveis primitivas e o método dos volumes finitos em uma malha generalizada com arranjo co-localizado das variáveis. A variação das propriedades de transporte e termodinâmicas será admitida através de leis de potências. As reações químicas são consideradas por meio de uma reação global, irreversível e infinitamente rápida, consistente com o modelo de chama fina.

As avaliações feitas utilizam o metano e o etanol como combustível. Os resultados numéricos do modelo utilizando a formulação de LIÑAN (1991) para diferentes números de Lewis, tanto para o combustível como para o oxidante, são comparados com os resultados provenientes de SAUER (2012), o qual utiliza a formulação clássica com escalares conservados (número de Lewis unitário).

#### 1.3. Organização do Trabalho

O Capítulo 2 tem por finalidade posicionar o trabalho no contexto da literatura, fazendo uma revisão bibliográfica onde são abordados os trabalhos experimentais e numéricos que estudaram a combustão difusiva laminar, com foco principal na combustão de metano e etanol e também no estudo da difusão preferencial

O Capítulo 3 apresenta a formulação matemática do problema. Neste capítulo são formuladas as equações que modelam o problema do escoamento reativo do presente trabalho. São apresentadas duas formulações para o modelo de chama fina, o clássico e o proposto por LIÑAN (1991) para número de Lewis não unitário.

O Capítulo 4 apresenta a metodologia numérica empregada para a solução computacional do problema proposto no Cap. 3, isto é, é apresentada a técnica de geração da malha, a função de interpolação utilizada, o tipo de acoplamento pressão-velocidade empregado, como as condições de contorno são tratadas.

O Capítulo 5 apresenta a análise de convergência de malha para um caso específico do problema proposto.

O Capítulo 6 investiga alguns casos reativos sujeitos à condição de difusão preferencial, contemplando diferentes número de Lewis para combustível e oxidante.

O Capítulo 7 finaliza com a apresentação das conclusões do trabalho e com as sugestões para futuros estudos.

### Capítulo 2 – Revisão Bibliográfica

Neste capítulo será feita uma revisão bibliográfica com o objetivo de apresentar os trabalhos de destaque ao que se refere o estudo das chamas difusivas. Será destacado a utilização do metano e do etanol como combustíveis, posicionando o presente trabalho no contexto geral da literatura.

Serão abordados desde trabalhos experimentais com diferentes geometrias de escoamento, aos estudos numéricos desenvolvidos de modo a dar base aos experimentos, como também validá-los.

Sendo assim, a presente revisão bibliográfica foi dividida em quatro blocos, onde o primeiro apresenta os primeiros trabalhos sobre chamas difusivas laminares. No segundo serão mostrados trabalhos numéricos e experimentais sobre chamas difusivas laminares utilizando metano, desta mesma forma, o terceiro bloco abordará as chamas difusivas laminares utilizando etanol. No quarto e último bloco, serão abordados os trabalhos referentes aos efeitos da difusão preferencial em chamas difusivas laminares, ou seja, a relaxação do número de Lewis unitário.

#### 2.1. Chamas Difusivas

O termo chama difusiva define um certo tipo de chama em que combustível e oxidante estão incialmente separados, encontrando-se na região onde ocorre a combustão, ou seja, na zona de reação, formando uma superfície de chama. O fenômeno de combustão nas chamas difusivas é predominantemente controlado pela difusão de calor e massa e outros fenômenos de mistura (GLASSMAN e YETTER, 2008). Nessas chamas a taxa de mistura é menor que a taxa de reação, ou podemos dizer que o tempo de mistura é muito maior que o tempo de reação. Isto corresponde a altos valores do número de Damköhler, definido como a razão entre um tempo característico de mistura e um tempo característico para reação química (KUO, 2005). Como se pode ver na Fig 2.1 a chama difusiva compreende duas zonas: a zona de difusão onde se encontra o combustível e o oxidante, separado lado a lado; e a zona de reação, onde o calor é gerado. A zona de reação se

encontra entre o combustível e o oxidante. A região de queima é controlada pela difusão dos reagentes na direção da zona de reação.



Figura 2.1: Estrutura genérica de uma chama difusiva laminar. Adaptado de POINSOT e VEYNANTE (2005).

As chamas difusivas laminares também constituem o componente básico do modelo *flamelet*, no qual a estrutura das chamas difusivas turbulentas é interpretada como uma composição de um conjunto de chamas difusivas laminares (POINSOT e VEYNANTE, 2005). Elas são, portanto, uma boa fonte de dados para comparação, além de poderem ser utilizadas como um caso de teste de referência, a fim de verificar a precisão do modelo flamelet CARBONELL *et al.* (2008).

Um clássico exemplo de chama difusiva laminar foi descrito quantitativamente de forma pioneira por BURKE e SCHUMANN (1928). A análise do problema foi feita utilizando uma geometria com dois tubos cilíndricos concêntricos, com um gás combustível escoando internamente, enquanto o oxidante (Ar) escoa inicialmente com mesma velocidade pelo cilindro externo. A chama difusiva laminar cilíndrica é então produzida na borda do cilindro interno.

O formato de chama observado pode ser dividido em duas classes: sobre-ventilado e sub-ventilado. Se a vazão de ar aumentar, a quantidade de oxidante será maior que a quantidade necessária para completar a combustão, forçando a superfície da chama a convergir para o eixo do cilindro, obtendo assim o formato sobre-ventilado. Caso a vazão de ar diminua, a quantidade de oxidante será insuficiente para completar a combustão deixando de queimar parte do combustível, o que força a superfície da chama expandir em direção as paredes do cilindro externo buscando o oxidante necessário à reação, dessa forma a chama será sub-ventilada.

A Fig. 2.2 ilustra os dois casos abaixo.



Figura 2.2: Geometria da chama no modelo BURKE E SCHUMANN (1928). ROSEIRA JUNIOR (2005).

A abordagem por eles realizada utilizou a hipótese da taxa de reação infinitamente rápida, com isso a zona de combustão se torna extremamente fina e o processo de mistura só se torna responsável pela taxa de queima, pela posição e tamanho da chama (LIÑAN, 1963). Uma série de outras simplificações levaram a única equação de conservação unidimensional resultando em uma solução analítica fechada. O formato e altura de chama produzidos obtiveram boa concordância com experimentos.

A mesma hipótese, devido aos bons resultados produzidos por Burke e Schumann, foi utilizada por HOTTEL e HAWTHORNE (1949), WOHL *et al.* (1949), YAGI e SAJI (1953) na predição do comprimento de chamas não-confinadas para os regimes laminar e turbulento. Através de uma aproximação considerada rudimentar eles obtiveram uma expressão para o comprimento de chama com uma função desconhecida, a qual foi determinada empiricamente através de dados obtidos em seus experimentos (LIÑAN, 1963). BARR (1953) alterou a análise desenvolvida por Burke e Schumann e a aplicou em estudos de chamas confinadas nas quais as velocidades dos escoamentos de ar e combustível pudessem ser diferentes. Essas análises, entretanto, não contemplavam a transferência de quantidade de movimento entre o escoamento de combustível e a vizinhança do mesmo. Uma formulação mais abrangente foi proposta por SHVAB (1948) e ZELDOVICH (1949). FAY (1954) calculou, também através da hipótese de Burke e Schumann, o formato e outras características de uma chama difusiva laminar obtida de um jato lançado em ambiente aberto. COHEN et al (1958) e MOORE e ZLOTNICK (1961) também utilizaram a hipótese de taxa de reação infinitamente rápida no estudo de chamas difusivas em camadas limites. Estudos semelhantes foram realizados por SPALDING (1954), SPALDING (1961) e SPALDING e JAIN (1962) a fim de se relacionar a taxa de consumo de combustível por unidade de área em extinção com essa mesma taxa em uma chama pré-misturada. GOLDBURG e CHENG (1965) trataram o problema fluidodinâmico de maneira mais detalhada que os anteriores. Os trabalhos subsequentes de outros pesquisadores objetivaram o refinamento das hipóteses feitas por Burke e Schumann na análise da chama fina. Alguns outros trabalhos de destaque na área de chamas difusivas laminares foram apresentados por GOSMAN *et al.* (1969) e ROPER (1977).

#### 2.2. Chamas Difusivas de Metano

O metano é um importante hidrocarboneto utilizado como combustível, estando em condições padrão no estado gasoso, constitui aproximadamente 90% da composição do gás natural. Além de ser um subproduto em muitos processos industriais, é também produzido durante a combustão de muitos hidrocarbonetos (KUO, 2005). A sua estrutura molecular possui altas energias de ligação entre carbono e hidrogênio, conferindo-lhe assim algumas características únicas em sua combustão como por exemplo, alta temperatura de ignição, baixa velocidade de chama, entre outras (TURNS, 2000).

O processo de combustão do metano possui uma cinética química bastante compreendida se comparada a outros hidrocarbonetos, envolvendo dezenas de espécies químicas e centenas de reações químicas elementares (TURNS, 2000). Por exemplo, o (GRI-MESH 3.0) envolve 325 reações químicas elementares e 53 espécies químicas. Contudo, apesar de ter uma cinética detalhada será visto nos artigos mais antigos que esta cinética é substituída por uma única reação global, já que a intenção é a obtenção de características gerais sobre a chama como, campos de velocidade, temperatura, concentração, presentes na combustão completa.

Diversos resultados experimentais disponíveis na literatura (GORDON et al.,1994) foram — e ainda são — utilizados por inúmeros pesquisadores para a validação de suas simulações ou testes de diferentes metodologias empregadas na solução de escoamentos reativos (SAUER, 2012). O trabalho apresentado por MITCHELL *et al.* (1980) comparou resultados experimentais de uma chama difusiva laminar confinada de metano com a solução numérica de um escoamento reativo representativo do mesmo. Os resultados numéricos e experimentais foram utilizados para a validação de resultados numéricos obtidos para os mesmos casos em diferentes análises.

O experimento realizado por MITCHELL *et al.* (1980) consiste em dois tubos concêntricos, o interno com raio de 0.635 cm e o externo com 2,54 cm, os quais passam respectivamente uma corrente de combustível e uma corrente de ar, e ao se misturarem, reagiam, entrando em combustão, conforme apresentado na Fig. 2.3.



Figura 2.3: Esquema do queimador. Adaptado de MITCHELL et al. (1980)

Para que os perfis de velocidade de ar e combustível na entrada fossem mantidos uniformes foram colocadas telas distribuídas no interior dos tubos. Uma chapa de latão perfurada foi colocada na entrada do queimador para permitir que os escoamentos fossem paralelos e com temperatura uniforme. Também foi utilizado um cilindro de vidro temperado servindo para confinar a chama e definir as condições de contorno.

Os perfis de temperatura e a concentração de espécies de interesse dos autores foram medidos em três alturas diferentes acima da placa de latão. As medições de temperaturas e de velocidades foram respectivamente feitas por termopares e por velocimetria a laser Dopler. No modelo numérico usado por MITCHELL *et al.* (1980) foi considerado o conceito de chama fina de BURKE e SCHUMANN (1928), também foram incluídos efeitos convectivos e difusivos em ambas as direções coordenadas e variação de propriedades termofísicas. No escoamento considerado bidimensional foram introduzidas as varáveis vorticidade e função de corrente de forma a eliminar os termos de pressão das equações de momento. As equações foram discretizadas através do método de diferenças finitas, resultando em um sistema de equações algébrico não linear e resolvido através do método da direção implícita alternada (*Alternating Direction Implicit* – ADI). Os resultados numéricos obtiveram boa concordância com os dados obtidos o experimento, e também o modelo desenvolvido foi capaz de predizer os efeitos da variação de vazão dos reagentes, razão de equivalência, preaquecimento dos reagentes, escoamento, e do diâmetro dos combustores em chamas difusivas laminares confinadas.

No trabalho de KEYES e SMOOKE (1987) foi apresentado um modelo para chamas difusivas contracorrente utilizando incialmente o conceito de chama fina. Dois arranjos foram analisados, o primeiro foi de SESHADRI (1986) e o segundo de TSUJI (1982) (Fig.2.3). O modelo foi aprimorado para um mecanismo de reação mais complexo com 46 reações elementares. As equações de quantidade de movimento foram abordadas utilizando a aproximação de camada limite, usando funções de similaridade, e assim transformando o sistema de equações diferenciais parciais (EDP's) em um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO's). Utilizando o método de Newton em uma malha adaptativa, os resultados obtidos tanto para o arranjo de SESHADRI (1986) quanto para o arranjo de TSUJI (1982) foram comparados com os resultados apresentados por MITCHELL *et al.* (1980). Concluiu-se que o modelo de chama fina ofereceu uma boa estimativa inicial quando comparado com o modelo com o mecanismo de reação mais complexo e com resultados experimentais.



Figura 2.4: Queimador SESHADRI (1986) e TSUJI (1982). Adaptado de KEYES e SMOOKE (1987).

Dois outros estudos subsequentes feitos por SMOOKE *et al* (1989) e SMOOKE *et al* (1990) apresentaram novos resultados numéricos e experimentais para uma configuração de chama produzida por um escoamento co-corrente de metano e ar, similar ao apresentado por BURKE e SCHUMANN (1928), ambos os trabalhos utilizaram a formulação de vorticidade e função de corrente e também utilizaram como estimativa inicial o modelo de chama fina. O mecanismo de reação apresentado SMOOKE *et al* (1989) era composto de 42 reações elementares, já em SMOOKE *et al* (1990) foi utilizado um novo mecanismo de reação, por sua vez mais completo, composto por 79 reações elementares e 26 espécies químicas. Os resultados desses estudos incluíam uma descrição detalhada do escoamento e as reações químicas a ele associado.

Outros trabalhos semelhantes como SMOOKE e GIOVANGIGLI (1992), SMOOKE *et al* (1992) e NORTON *et al* (1993) apresentaram os resultados já obtidos em trabalhos anteriores com resultados produzidos por pequenas modificações no mecanismo de reação.

A utilização das variáveis de vorticidade e função de corrente nas equações de conservação tem o intuito de eliminar o termo de pressão da equação de quantidade de movimento. Contudo, essa formulação acaba restringindo-se somente a problemas bidimensionais, além de acarretar em condições de contorno mais difíceis de serem implementadas (PLETCHER *et al.*, 1997). Em razão dessas restrições XU e SMOOKE (1993) apresentaram uma formulação na qual se consideravam as equações de

conservação por meio de variáveis primitivas. No trabalho foram comparados o método de Newton e o algoritmo SIMPLER (PATANKAR, 1980) para a consideração das equações por meio de variáveis primitivas. As reações químicas foram consideradas por meio do modelo de chama fina e a variação das propriedades termofísicas com a temperatura foi considerada por meio de relações matemáticas simples. Os resultados, obtidos utilizando uma malha segregada, apresentaram menores divergências com relação aos resultados experimentais obtidos por MITCHELL et al. (1980), com os quais os mesmos foram comparados. Em um estudo posterior XU et al. (1993) utilizaram o mesmo algoritmo para simular um escoamento reativo com propriedades variáveis e um mecanismo de reação envolvendo 45 reações elementares e 15 espécies químicas. A primeira solução foi obtida para uma chama não confinada de metano. Já a segunda tratava da chama confinada abordada no estudo anterior (XU e SMOOKE, 1993). Os resultados mostraram boa aproximação com relação aos experimentais (MITCHELL et al., 1980) e a comparação com a solução obtida por meio da formulação que utilizava vorticidade e função corrente com a formulação por meio de variáveis primitivas mostrou que a segunda apresenta maior robustez e precisão em função da implementação mais natural das condições de contorno desse tipo de formulação.

Em ERN e GIOVANGIGLI (1998) a influência da difusão térmica foi investigada numericamente em chamas pré-misturadas de hidrogênio e ar e metano e ar, mecanismo de reação complexos e modelos detalhados de coeficientes de transporte foram utilizados. Todos os coeficientes de transporte da mistura, incluindo os coeficientes de difusão de térmica, são avaliados por meio de novos algoritmos que forneceram, a custos computacionais moderados, aproximações precisas, as quais derivadas da teoria cinética dos gases. Os resultados numéricos mostram que a difusão térmica é importante para uma previsão precisa das estruturas de chamas controladas pela difusão do que em chamas pré-misturadas.

O método das linhas (SELÇUK *et al.*, 2002) foi utilizado por TARHAN e SELÇUK (2003) para a solução numérica do escoamento reativo abordado por MITCHELL *et al.* (1980) através de um código computacional paralelizado. As reações químicas foram abordadas por meio do modelo de chama fina e os resultados comparados com os obtidos anteriormente por XU e SMOOKE (1993), da mesma forma que os coeficientes de transporte e propriedades termodinâmicas. O acoplamento entre a pressão e a velocidade foi considerado por meio de um método não iterativo (OYMAK e SELÇUK, 1996). Foi também realizada a comparação de diferentes métodos para a solução das equações diferenciais ordinárias obtidas pela aplicação do método das linhas às equações de conservação. Os resultados obtidos apresentaram boa aproximação tanto com os resultados experimentais (MITCHELL *et al.*, 1980) quanto 18 com os resultados numéricos anteriores (XU e SMOOKE, 1993), com os quais os mesmos foram comparados. A solução do mesmo problema utilizando três diferentes mecanismos de reação, contendo 1, 5 e 10 reações elementares, coeficientes de transporte e propriedades termodinâmicas detalhadas foi realizada posteriormente pelos mesmos autores (TARHAN e SELÇUK, 2007). Os resultados foram apresentados tanto para o regime transiente quanto para o regime permanente, sendo que os últimos foram comparados com os resultados experimentais de MITCHELL *et al.* (1980). Os mesmos apresentaram melhor representatividade dos resultados experimentais que os obtidos anteriormente (TARHAN e SELÇUK, 2003), em função da abordagem mais sofisticada do mecanismo de reação, dos coeficientes de transporte e das propriedades termodinâmicas.

DARBANDI E BANAEIZADEH (2006) utilizaram o método dos elementos finitos baseados em elementos para a obtenção da solução do escoamento reativo experimentalmente obtido por NORTON *et al* (1993). O modelo de chama fina foi utilizado para contemplar as reações químicas do sistema. Foram considerados variáveis primitivas em arranjo colocalizado por meio da formulação introduzida por DARBANDI E BOSTANDOOST (2005). Os resultados, obtidos utilizando a viscosidade da mistura variável com a temperatura, apresentaram boa aproximação com relação ao experimento NORTON *et al* (1993), mesmo com o uso de malhas menos refinadas.

UYGUR *et al* (2008) apresentaram a solução numérica do escoamento reativo estudado experimentalmente por MITCHELL *et al.* (1980), considerando transferência de calor por radiação e o mecanismo de reação compostos por uma reação global. O campo de pressões foi obtido utilizando o método multigrid por meio de estágios de predição-correção. A influência desse método de cálculo do campo de pressões foi comparada com a obtida no trabalho anterior, apresentado pelos mesmos autores UYGUR *et al* (2006). As mesmas características forma obtidas na solução numérica, de modo que a utilização da transferência de calor por radiação permitiu a obtenção de uma melhor estimativa para o campo de temperaturas.

Em SAUER (2012) foi feita a análise de um escoamento reativo laminar baseado no experimento de MITCHELL *et al.* (1980). Para a solução do escoamento usou-se método dos volumes finitos em uma malha generalizada com arranjo co-localizado das variáveis. As reações químicas foram consideradas por meio de uma reação global, irreversível e infinitamente rápida, consistente com o modelo de chama fina. As avaliações efetuadas utilizaram o metano e o etanol como combustível. Os resultados numéricos para o metano foram comparados com dados experimentais e também com resultados numéricos presentes na literatura, essa comparação apresentou boa aproximação com os resultados de XU e SMOOKE (1993) e TARHAN e SELÇUK (2003), sendo algumas vezes mais próximo dos dados experimentais de MITCHELL *et al.* (1980) do que os trabalhos citados. Os resultados para o etanol foram comparados com o do metano e a principal diferença encontrada foi na altura de chama, a qual foi menor devido ao etanol ser um combustível oxigenado e apresentar coeficiente estequiométrico menor que do metano.

#### 2.3. Chamas Difusivas de Etanol

O etanol ( $C_2H_5OH$ ) é frequentemente mencionado como combustível alternativo, podendo ser produzido em grandes quantidades através de insumos agrícolas, como canade-açúcar, milho, trigo e etc. Devido a atual importância as quais os biocombustíveis, como o etanol, torna-se fundamental a realização de estudos sobre as características da combustão sobre diversas condições.

Não são muitos os trabalhos encontrados na literatura que abordam o tema das chamas difusivas de etanol em comparação com os de chamas pré-mituradas, alguns desses estudos serão apresentados a seguir.

Para facilitar a modelagem dos processos de combustão em que o etanol é utilizado como combustível, é vantajoso utilizar um mecanismo de cinética química para validação com os dados experimentais, no entanto os mecanismos de reação considerados para a combustão do etanol apresentam uma complexidade bem maior se comparadas com o metano. Segundo PETROVA e WILLIAMS (2006) esses mecanismos podem atingir milhares de reações elementares, inclusive tendo como composto intermediário o próprio metano. Sendo assim, o trabalho de SMITH e GORDON (1956), analisou experimentalmente chamas difusivas co-correntes de diferentes hidrocarbonetos, incluindo o etanol, maior atenção à queima de etanol tem sido direcionada à cinética química da reação, e não à análise da chama desenvolvida. No entanto, a utilização de mecanismos cada vez mais complexos não é, necessariamente, um ponto positivo para a
obtenção de previsões mais precisas do comportamento das chamas de etanol SAUER (2012).

LYU e CHEN (1991) estudaram uma chama difusiva produzida pela evaporação do combustível em uma placa plana vertical e também nas paredes de um cilindro, para as condições de pressão atmosférica e sub-atmosférica. O modelo numérico utilizado na solução desta chama considerou o uso de escalares conservados, aproximação de camada limite por meio de similaridade, Lewis unitário e equilíbrio parcial para contemplar as reações químicas. Segundo investigações feitas por SIBULKIN (1988) os efeitos da transferência de calor por radiação puderam ser desprezados neste modelo. As propriedades foram admitidas variáveis com a temperatura. Para geometrias cilíndricas a análise foi estendida para considerar os efeitos de curvatura. Os resultados mostraram que o uso de similaridade obteve sucesso para a placa plana, contudo não para a geometria cilíndrica, e ainda que a variação das propriedades tem feito significativo na taxa de queima.

Estudos experimentais e numéricos foram realizados por SEISER *et al* (2007) com o intuito de validar o mecanismo de cinética química desenvolvido por MARINOV (1999), avaliando também a extinção e autoignição das chamas. Sendo assim, chamas difusivas e pré-misturadas de etanol foram produzidas por escoamentos laminares não uniformes em configuração contracorrente, no qual a formação de chama ocorria no plano de estagnação formado pelos dois jatos. Os resultados numéricos foram obtidos pelo pacote FlameMaster usando condições equivalentes as do experimento. Os valores das condições críticas de extinção obtidos numericamente representaram com boa aproximação os resultados experimentais.

SAXENA e WILLIAMS (2007) investigaram a combustão do etanol com base em um mecanismo de cinética química que consistia em 192 reações elementares, 36 espécies químicas, aumentado por 53 passos adicionais de reação e 14 espécies adicionais para contemplar a formação de óxidos de nitrogênio, e 43 passos e 7 espécies para a consideração da formação de compostos 22 envolvendo três átomos de carbono. Os resultados experimentais foram produzidos através de um queimador contracorrente. Para a obtenção do resultado numérico foram considerados os efeitos de difusão multicomponente, efeito Soret, perda de calor do dióxido de carbono por radiação, efeitos de empuxo desprezíveis e condição de contorno de velocidade uniforme, da mesma forma que no experimento. Foram comparados os resultados experimentais com os numéricos,

18

os quais apresentaram boa concordância com os dados obtidos experimentalmente, justificados, principalmente, pelas medições da água com boa precisão.

GAN e YANG (2009) avaliaram experimentalmente chamas difusivas de etanol líquido produzidas em um escoamento coaxial em tubos capilares verticais, em que no tubo interno escoa o combustível (etanol) e no tubo externo o ar. As vazões de ar e combustível foram precisamente controladas por uma bomba de seringa. Foram observados e medidos os formatos de chama produzidos considerando diferentes vazões através de uma câmera de alta velocidade, os comprimentos e larguras de chamas foram relacionados com o número de Reynolds e Froude respectivamente. Os resultados obtidos experimentalmente foram comparados com a teoria clássica de chamas difusivas. Estes resultados experimentais indicaram que a relação do número de Reynolds com o comprimento de chama possui alguns desvios com a teria clássica, possivelmente porque a força de empuxo não pode ser desprezada em pequenas chamas difusivas confinadas, também pôde se concluir que ambos, combustível liquido e gasoso possuem mecanismos similares para chamas permanentes, e ainda que o momento é controlado pelo empuxo neste tipo de chama, influenciando nas larguras obtidas.

Estudos experimentais foram executados por TANOUE *et al* (2010) na avaliação da extinção e autoignição de chamas de etanol, iso-octano e n-heptano produzidas por um escoamento contracorrente, cujo objetivo era investigar as características da extinção e autoignição em chamas difusivas comparando-as com as chamas pré-misturadas. Os dados experimentais foram obtidos para várias razões de equivalência. Foram feitas comparações entre os resultados experimentais dos três combustíveis com simulações numéricas para o etanol utilizando um código computacional desenvolvido por NISHIOKA *et al* (1996), também foram utilizados na simulação outros três mecanismos, o MRN99 desenvolvido por MARINOV (1999), o FDC00 por FISCHER *et al* (1996) e o SDG05 San Diego mecanismo. As conclusões obtidas foram que as chamas difusivas de etanol são mais difíceis de se extinguirem enquanto chamas de iso-octano se extinguem mais facilmente, e ainda que a autoignição do etanol ocorre em temperaturas mais elevadas que o n-heptano. No caso das chamas pré-misturadas para uma dada razão de equivalência para o etanol as velocidades laminares de queima são maiores enquanto no iso-octano são menores.

DUBEY *et al.* (2011) simularam uma chama em configuração contracorrente e verificaram o mecanismo de cinética química utilizado, o qual era composto por uma reação global. A simulação foi feita utilizando o pacote computacional FLUENT. Foram

considerados efeitos de radiação e propriedades termodinâmicas dependentes da concentração de espécies e da temperatura. Os dados relativos às características de extinção da chama foram comparados com resultados experimentais disponíveis na literatura (SEISER *et al.*, 2007), e os mesmos apresentaram boa previsibilidade por parte da solução numérica obtida.

#### 2.4. Chamas Difusivas com Difusão Preferencial

As chamas difusivas laminares são comumente estudadas considerando que o mecanismo de reações químicas é do tipo infinitamente rápido e que o número de Lewis é unitário. Essas aproximações permitem a introdução de escalares passivos, os quais tornam-se uma ferramenta para análises e predições.

A difusão preferencial devido a diferença nas intensidades entre a difusão de massa e a difusão de calor em um meio, pode ser caracterizada pelo número de Lewis (*Le*), definido como a razão entre a difusividade mássica e a difusividade térmica, sendo este considerado um importante fator.

LEE e CHUNG (1991) estudaram os efeitos da difusão preferencial em uma chama cilíndrica, semelhante a estudada por BURKE E SCHUMANN (1928), os quais foram analisados utilizando o método de perturbação e o método de função de Green. Os resultados mostraram que o formato da chama sofre influência com a variação do número de Lewis. No caso em que o Lewis do combustível diminui (difusão de massa mais rápida que difusão térmica) a chama se torna maior, esse mesmo efeito é provocado pelo aumento na vazão de combustível na entrada do queimador. Reciprocamente, a diminuição do Lewis do oxidante provoca o efeito contrário no tamanho da chama.

Os efeitos da difusão preferencial em chamas difusivas também foram analisados por LAW e CHUNG (1982) e CHUNG e LAW (1983), onde foram observados os efeitos sobre o campo de temperaturas e extinção. É razoável que fenômenos como abertura de ponta, tamanho de fuligem e aumento abrupto da chama seguido pela sua extinção, possam ser explicados com base na difusão preferencial.

LINÂN *et al* (1994) realizaram uma simulação direta de um processo de combustão controlado por difusão com número de Lewis não-unitário para combustível, oxidante e produtos, deste modo contabilizando os efeitos da difusão preferencial nos

campos de temperatura e concentração de espécies. A formulação utilizada, apresentada em LIÑAN (1991), foi baseada na combinação das equações de conservação a fim de eliminar os termos fontes associados a reação química, método este similar ao apresentado por BURKE E SCHUMANN (1928) para Lewis unitário. As simulações foram feitas para um jato axissimétrico de combustível em um ambiente em que oxidante se encontrava estagnado, foram deixados de lado os efeitos provocados pela expansão térmica e a variação dos coeficientes de transporte devido a liberação de calor. Os resultados mostraram que a frente de chama se movia em direção ao combustível ou oxidante devido aos efeitos da difusão preferencial, e ainda que a localização da temperatura máxima talvez não coincidisse com a chama.

A influência do número de Lewis para reagentes na estrutura da chama foi investigada por CUENOT e POINSOT (1996). Eles estudaram a influência do Lewis nãounitário resultante tanto da difusão preferencial quanto da termo-difusão. Um método assintótico, apresentado por LIÑAN (1974), foi utilizado. Os resultados apresentados por eles mostraram que quando os dois Lewis (oxidante e combustível) são iguais e menor que um, as altas taxas de difusão aumentam os efeitos de prolongamento da chama e esta é extinta com baixa taxa de dissipação. Para o caso em que o Lewis é maior que um, os resultados foram capazes de predizer que a taxa de dissipação crítica é maior que um valor de referência, no entanto para diferentes Lewis entre os reagentes, a taxa de dissipação crítica pode assumir qualquer valor, dependendo da temperatura dos reagentes e da fração estequiométrica.

LIU *et al* (2000) estudaram chamas difusivas produzidas por um escoamento foi contracorrente. Uma análise assintótica foi feita para avaliar os efeitos da radiação na extinção da chama com número de Lewis não unitário. Foi mostrado que o Lewis do combustível tem muito mais impacto na posição da chama e na dissipação de calor que o Lewis do oxidante. Os resultados por eles apresentados também revelaram as diferenças nos mecanismos pelos quais o Lewis do oxidante e combustível afetam a temperatura adiabática de chama.

SHAMIM (2006) apresentou um estudo numérico, o qual investigou os efeitos do número de Lewis não-unitário e diferente para combustível e oxidante acoplados com os efeitos de perdas por radiação e instabilidade. Os efeitos de instabilidades foram simulados considerando uma chama submetida a variações na concentração de combustível com diferentes modulações de frequência. Diferentes números de Lewis foram simulados (Lewis variando de 0.5 até 2) para chamas produzidas em um escoamento laminar contracorrente, a qual a chama se forma no plano de estagnação. Os resultados mostraram que os campos de temperaturas em chamas estáveis, com Lewis para combustível e oxidante diferentes, são geralmente menos sensíveis do que aqueles em chamas com Lewis uniforme, o Lewis do combustível tem forte impacto sobre o campo de temperaturas. O efeito acoplado do número de Lewis com as instabilidades geram um importante impacto na dinâmica da chama, principalmente em altas modulações de frequência quando o Lewis assume altos valores. Também foi mostrado que os efeitos da difusão preferencial tornaram-se mais pronunciado em altas vazões para altos valores de Lewis do combustível, podendo causar a extinção da chama, as quais submetidas a moderadas modulações de frequência.

Um estudo numérico e experimental foi apresentado por SANTA et al (2007) sobre uma chama esférica produzida por uma esfera porosa, os experimentos foram realizados em um ambiente com microgravidade. Os resultados numéricos foram produzidos para um escoamento vindo de uma esfera porosa em direção a um ambiente em repouso, ambos regimes permanente e transiente foram analisados, levou-se em conta também uma fase radiante de gás opticamente espessa. Os resultados numéricos mostram que para o escoamento em baixas velocidades e longos tempos de residência implicam em um aumento da radiação e dos efeitos difusivos. Apesar das temperaturas adiabáticas de chama similares, as medições feitas pelo experimento e obtidas pelos resultados numéricos apresentaram uma variação de até 700 K no campo de temperaturas, a redução no campo de temperaturas está relacionado com o tamanho da chama mas o tempo característico do escoamento e o número de Lewis também influenciam o campo, e que segundo LAW e CHUNG (1982) e CHUNG e LAW (1983) em chamas esféricas apenas o Lewis do oxidante tem efeito significativo sobre a chama. Os resultados também mostraram que se a chama for não radiante e estiver em equilíbrio o Lewis do oxidante tem um forte efeito. Para uma diminuição de 10% no número de Lewis, o aumento de temperatura no regime permanente chegou a 200 K. No entanto, para chamas radiantes e em regime transiente os efeitos do número de Lewis são pequenos. No caso das chamas esféricas apenas o Lewis do oxidante tem efeito significativo sobre a chama

Motivado pelos efeitos de difusão preferencial no qual o número de Lewis desempenha um importante papel em chamas difusivas, o presente trabalho posiciona-se na área de simulação numérica de escoamentos reativos, axissimétricos, confinados em dutos cilíndricos em configuração co-corrente, utilizando a formulação proposta por LIÑAN (1991) e assim, investigando a influência do número de Lewis tanto do combustível como do oxidante em chamas difusivas de metano e etanol.

# Capítulo 3 – Formulação Matemática

Os escoamentos reativos em sistemas multicomponentes são governados por três leis de conservação, são elas: conservação de massa, conservação de quantidade de movimento e conservação de energia. Essas leis de conservação podem ser apresentadas matematicamente como equação da continuidade, equação de conservação de quantidade de movimento, equação de conservação de energia e equação de conservação de espécies químicas. Adicionando uma equação de estado, o modelo matemático fica constituído de um número suficiente de equações para descrever o movimento do fluido em um sistema reativo multicomponente (KUO, 2005).

O sistema de equações governantes pode ser convenientemente formulado em suas variáveis primitivas, isto é, componentes de velocidade, pressão, temperatura e frações mássicas das espécies.

A construção detalhada destas equações pode ser feita de diversas maneiras, as quais são muito bem detalhadas em diversos livros textos como KUO (2005), WILLIANS (1965) e BIRD *et al* (2002).

#### 3.1. Equações de Conservação para Escoamentos Reativos

As equações de conservação para escoamentos reativos com propriedades variáveis, apresentadas por KUO (2005) e WILLIAMS (1965), são escritas abaixo.

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla P - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \sum_{k=1}^{N} Y_k \boldsymbol{f}_k$$
(3.2)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho c_p T) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} c_p T) = \nabla \cdot (k \nabla T) - q \dot{\omega}_k$$
(3.3)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_k) = \nabla \cdot (\rho D_k \nabla Y_k) + \dot{\omega_k}$$
(3.4)

As equações (3.1), (3.2), (3.3) e (3.4) representam respectivamente as equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e espécies na forma vetorial.

E ainda uma equação de estado fechando o sistema,

$$\rho = \frac{P\bar{W}}{RT} \tag{3.5}$$

As equações acima em regime transiente tratam o fluido como meio contínuo. As equações da continuidade e de espécies são a exata representação da lei de conservação de massa para misturas e sistemas multicomponentes. Para as equações de conservação de quantidade de movimento é considerada a hipótese de fluido Newtoniano que exibe uma relação linear entre a tensão e a taxa de deformação.

A equação de conservação de energia está convenientemente escrita em termos da temperatura, sendo esta a forma mais prática tanto para análises teóricas ou computacionais. O vetor fluxo de calor considera somente o efeito de condução, representado pela lei de Fourier em (3.6), fluxo de calor devido a radiação pode ser desprezado no presente trabalho devido a baixa absortividade dos gases. O efeito Dufour, isto é o fluxo de calor produzido pelas velocidades de difusão de massa devido ao gradiente de temperatura é pequeno, portanto será omitido, assim com seu efeito recíproco, o efeito Soret. Os efeitos de radiação e interdifusão também são omitidos.

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_{conducão} = -\lambda \nabla T \tag{3.6}$$

Os efeitos de dissipação viscosa e o trabalho de pressão também serão desprezados na equação de conservação de energia, considerando a hipótese de escoamento em baixa velocidade.

A equação de conservação de espécies (3.4) considera que a difusão de massa é regida pela Lei de Fick, desta forma a velocidade de difusão pode ser escrita como,

$$\mathbf{V}_{k} = -\frac{1}{Y_{k}} D_{k} \nabla Y_{k} \tag{3.7}$$

O coeficiente de difusão da espécie k pode ser aproximado como

$$D_k = \frac{1 - X_k}{\sum_{j \neq k}^K \frac{X_k}{D_{ik}}}$$
(3.8)

$$X_k = Y_k \frac{\overline{W}}{W_k} \tag{3.9}$$

## 3.2. Formulação em Variáveis Primitivas

Dadas as considerações descritas anteriormente as Eqs. (3.1)-(3.4) podem ser expressas para um sistema de coordenadas cilíndricas bidimensional e axissimétrico, respectivamente como.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} (\rho r \mathbf{u}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r \mathbf{v}) = 0$$
(3.10)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}(\rho r \mathbf{u}\mathbf{u}) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho r \mathbf{u}\mathbf{v}) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}\left(r\mu\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x}\right) + \frac{1}{3}\frac{\partial}{r}\frac{\partial}{\partial x}\left(r\mu\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right) - \frac{2}{3}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}\left[\mu\frac{\partial(r\mathbf{v})}{\partial x}\right] + \rho g$$
(3.11)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}(\rho r uv) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho r vv) = -\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}\left(r\mu\frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu\frac{\partial v}{\partial r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu\frac{\partial v}{\partial x}\right) - \frac{2}{3}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\mu\frac{\partial (rv)}{\partial x}\right] + \frac{2}{r}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right] - \frac{2}{3}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right] - \frac{2}{r^2} + \frac{2}{3}\frac{\mu}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(rv) + \frac{2}{3}\frac{\mu}{r}\frac{\partial u}{\partial x}$$
(3.12)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}(\rho r u c_p T) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho r v c_p T) = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}\left[r\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right] + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\lambda\frac{\partial T}{\partial r}\right] - q\dot{\omega}_k$$
(3.13)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}(\rho r u Y_k) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho r v Y_k) = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}\left[\rho r D_k\frac{\partial Y_k}{\partial x}\right] + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\rho r D_k\frac{\partial Y_k}{\partial r}\right] + \dot{\omega}_k$$
(3.14)

#### 3.2.1 Condições de Contorno para as Equações de Conservação

O sistema de combustão representado na Fig. 3.1 o qual é baseado no experimento realizado por MITCHEL et al. (1980), consiste essencialmente em um queimador formado por dois tubos concêntricos de raios  $R_0$  e  $R_F$  nos quais, escoam ar e combustível respectivamente.



Figura 3.1: Esquema do sistema físico analisado

Quando os dois gases se encontram no exterior dos dutos uma chama difusiva de formato definido se forma. Assim como no experimento o queimador é confinado por um cilindro, ajudando desta forma a definir as condições de contorno, expressas por:

$$\frac{\partial u}{\partial r} = v = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial P}{\partial r} = 0, \qquad \qquad \frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0, \qquad \qquad k = 1, 2, \dots, K \qquad (3.15)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \qquad P = P_a, \qquad \frac{\partial Y_k}{\partial x} = 0, \qquad k = 1, 2, \dots, K$$
(3.16)

$$u = u_{F_{r}}$$
  $v = 0$ ,  $T = T_{F}$ ,  $Y_{k} = Y_{F}$ ,  $0 < r < R_{F}$  (3.17)

 $u = u_0, \qquad v = 0, \qquad T = T_0, \qquad Y_k = Y_0, \qquad R_F < r < R_0$ (3.18)

$$u = v = \frac{\partial T}{\partial r} = 0,$$
  $\frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0,$   $k = 1, 2, ..., K$  (3.19)

As condições de contorno presentes em (3.15) e (3.16) representam respectivamente as condições de contorno de simetria (r = 0) e na saída (x = L). Já as condições de contorno na entrada (x = 0) estão presentes em (3.17) e (3.18) e as condições de contorno na parede ( $r = R_0$ ) estão expressas em (3.19).

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

## 3.3. Adimensionalização das Equações de Conservação

As equações de conservação apresentadas na seção anterior estão na forma dimensional. Estas equações podem ser adimensionalizadas definindo convenientemente as grandezas características, as quais estão apresentadas na tabela abaixo.

| Grandezas Características |                 |  |  |
|---------------------------|-----------------|--|--|
| Comprimento               | R <sub>o</sub>  |  |  |
| Velocidade                | u <sub>a</sub>  |  |  |
| Pressão                   | $p_a$           |  |  |
| Temperatura               | $T_0 e T_b$     |  |  |
| Peso molecular            | Wa              |  |  |
| Massa específica          | $ ho_a$         |  |  |
| Viscosidade               | $\mu_a$         |  |  |
| Condutividade térmica     | $\lambda_a$     |  |  |
| Difusividade térmica      | α <sub>a</sub>  |  |  |
| Calor específico          | c <sub>pa</sub> |  |  |

Tabela 3.1: Grandezas Características

Considerando que o subscrito a representa as propriedades do ar e  $T_0$  e  $T_b$ representam respectivamente as temperaturas da chama e do ar na entrada. Tomando as variáveis dimensionais por meio de um asterisco, as variáveis adimensionais são:

$$x = \frac{x^{*}}{R_{o}}, \quad r = \frac{r^{*}}{R_{o}}, \quad u = \frac{u^{*}R_{o}}{\alpha_{a}}, \quad v = \frac{v^{*}R_{o}}{\alpha_{a}}, \quad \rho = \frac{\rho^{*}}{\rho_{a}}$$

$$P = \left(\frac{P^{*} - P_{a}}{\rho_{a}\alpha_{a}^{2}}\right)R_{o}^{2}, \quad T = \frac{T^{*} - T_{0}}{T_{b} - T_{0}}, \quad \mu = \frac{\mu^{*}}{\mu_{a}}, \quad \lambda = \frac{\lambda^{*}}{\lambda_{a}},$$

$$c_{p} = \frac{c_{p}^{*}}{c_{p}}, \quad D_{k} = \frac{D_{k}^{*}}{D_{a}}, \quad h_{f_{k}}^{0} = \frac{h_{k}^{*}}{c_{p}}(T_{b} - T_{0}), \quad \omega_{k} = \frac{\omega_{k}^{*}R_{o}^{2}}{\rho_{a}\alpha_{a}}$$
(3.20)

Substituindo as variáveis adimensionais acima nas equações de conservação resulta em um sistema de equações de conservação adimensional. Após agrupar os parâmetros adimensionais e rearranjar as equações de forma conveniente são apresentadas abaixo

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} (\rho r u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r v) = 0 \qquad (3.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} (\rho r u u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r u v) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{Pr} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left( r \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{1}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left( r \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \frac{\partial (r v)}{\partial x} \right] \right\} \qquad (3.22)$$

$$+ \frac{1}{Fr} \rho$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}(\rho r \mathbf{u} \mathbf{v}) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho r \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{1}{Pr}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}\left(r\mu\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial r}\right)\right] + \frac{1}{Pr}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}\left(r\mu\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)\right] + \frac{1}{Pr}\left\{-\frac{2}{3}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\mu\frac{\partial(r\mathbf{v})}{\partial x}\right] + \frac{2}{3}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\mu\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right]\right\} + \frac{1}{Pr}\left[-\frac{2\mu v}{r^2} + \frac{2}{3}\frac{\mu}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r\mathbf{v}) + \frac{2}{3}\frac{\mu}{r}\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right]$$

$$(3.23)$$

As Eqs. (3.21)-(3.23) representam respectivamente conservação de massa, da quantidade de movimento axial e radial em sua forma adimensional.

Considerando o valor de  $c_p$  constante no intervalo de temperaturas considerado nas integrais da equação da energia. As equações de conservação de espécies e energia adimensionais são respectivamente,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{k}) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}(\rho r u Y_{k}) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho r v Y_{k}) = \frac{1}{Le_{k}}\left\{\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}\left[\rho r \alpha \frac{\partial Y_{k}}{\partial x}\right] + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\rho r \alpha \frac{\partial Y_{k}}{\partial r}\right]\right\} + \dot{\omega}_{k}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_{p}T) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}(\rho r u c_{p}T) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho r v c_{p}T) = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}\left[\rho r \alpha \frac{\partial T}{\partial x}\right] + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\rho r \alpha \frac{\partial T}{\partial r}\right] - \sum_{k=1}^{N}h_{f_{k}}^{0}\dot{\omega}_{k}$$

$$(3.24)$$

e a equação de estado adimensional é

$$\rho = \overline{W} \left[ \frac{P(\rho_a \alpha_a^2) + P_a}{T(T_b - T_0) + T_0} \right] \frac{W_a}{R\rho_a}$$
(3.26)

onde R é a constante universal dos gases.

Os parâmetros adimensionais presentes nas equações acima são: o número de Froude, número de Prandtl e número de Lewis, representados respectivamente por

$$Fr = \frac{u_a^2}{gR_o} \tag{3.27}$$

$$Pr = \frac{\mu_a c_{p_a}}{\lambda_a} \tag{3.28}$$

$$Le = \frac{\lambda_a}{\rho_a c_{p_a} D_a} \tag{3.29}$$

#### 3.3.1 Condições de Contorno Adimensionalizadas

O sistema de equações adimensionais apresentado na Seç. 3.3 pode ser resolvido com as seguintes condições de contorno:

$$u = u_{F_{,}}$$
  $v = 0$ ,  $T = T_{F}$ ,  $Y_{k} = Y_{F}$ ,  $x = 0$ ,  $0 < r < R_{F}$  (3.30)

$$u = u_0, \quad v = 0, \quad T = T_0, \quad Y_k = Y_0, \quad x = 0, \quad R_F < r < R_0$$
 (3.31)

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial Y_k}{\partial x} = 0, \qquad P = P_a, \qquad x = \frac{L}{R_o}, \qquad 0 < R < R_o \qquad (3.32)$$

$$\frac{\partial u}{\partial r} = v = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial P}{\partial r} = \frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0, \qquad r = 0, \qquad 0 < x < L \qquad (3.33)$$

$$u = v = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0, \qquad r = R_0, \qquad 0 < x < L \qquad (3.34)$$

### 3.4. Modelo de Chama Fina

O modelo de chama fina, o qual foi introduzido por BURKE E SCHUMANN (1928) e utilizado posteriormente por diversos pesquisadores, faz a hipótese de que a reação química está confinada em fina zona de reação em que combustível e oxidante não podem coexistir, isto é, separa a região onde há somente combustível da região onde há somente oxidante. Combustível e oxidante escoam em direção à zona de reação em proporções estequiométrica, condição que se faz necessária para que os reagentes sejam completamente consumidos. Nesse modelo as reações são descritas através de uma reação global irreversível de passo único, correspondendo a uma conversão infinitamente rápida

dos reagentes em produtos estáveis. Desta forma, o combustível F reage com o oxigênio do ar,  $O_2$ , para gerar os produtos de acordo com a reação global irreversível,

$$F + s_0 O_2 \to (1 + s_0) Produtos \tag{3.35}$$

na qual  $s_0$  representa a massa de oxigênio queimada por unidade de massa de combustível consumido.

A taxa de reação para a Eq. (3.35) é dada por uma lei heurística cuja forma é equivalente à da Lei de Ação das Massas (KUO, 2005) (por não se tratar de uma reação elementar), na qual se considera a constante específica as de taxa de reação global em uma faixa limitada de condições operacionais. Essa taxa de reação é dependente das frações mássicas de combustível e oxidante  $Y_F$  e  $Y_O$ , e da temperatura T, na forma (KUO, 2005, LIÑAN, 2002),

$$\frac{dF}{dt} = \dot{\omega_F} = \frac{\dot{\omega_{O_2}}}{s_0} = \frac{\dot{\omega_{Produtos}}}{1 - s_0} = \rho A \exp\left(-\frac{E}{R_u T}\right) Y_F^{n_F} Y_{O_2}^{n_O}$$
(3.36)

na qual  $\omega_k$  representa ao taxa de produção (consumo) da espécie k por unidade de volume e tempo, R a constante universal dos gases,  $n_F$  e  $n_O$  as ordens de reação, E a energia de ativação e A o fator pré-exponencial.

## 3.4.1 Escalar Conservado - Formulação Clássica ( $L_e = 1$ )

A formulação clássica utilizando escalares conservados é extremamente útil quando se assume que as transformações químicas ocorrem através de uma reação direta em passo único na forma da Eq. (3.35), dada genericamente por.

$$\sum_{k=1}^{N} \nu'_{k} W_{k} \to \sum_{k=1}^{N} \nu''_{k} W_{k}$$
(3.37)

Definindo,

$$h_{RP} = -\sum_{k=1}^{N} h_{f_k}^0 \, \dot{\omega}_k = -\sum_{k=1}^{N} h_{f_k}^0 (\nu'_k - \nu''_k) \, W_k \tag{3.38}$$

As Eqs. (3.24) e (3.25), através dessa formulação, podem ser linearmente combinadas, considerando a hipótese do número Lewis unitário, em uma única equação

de conservação livre dos termos fonte (reação química) através do escalar conservado, chamado de fração de mistura. A equação resultante da combinação linear é,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Z) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Z) = \nabla \cdot [\rho D \nabla(Z)]$$
(3.39)

onde Z é o escalar conservado e D é o coeficiente de difusão da mistura. As equações de conservação de massa e da quantidade de movimento permanecem as mesmas escritas em (3.21), (3.22) e (3.23). O ponto mais importante dessa formulação é a possibilidade de recuperar os perfis temperatura e os perfis de fração mássica das espécies através da solução da equação do escalar conservado (3.39). Denotando as variáveis localizadas sobre a frente de chama por meio do subscrito f, pode-se mostrar que a posição de chama  $r_f$  na coordenada axial x pode ser obtida utilizando a expressão,

$$Z_{f} = \frac{1}{S+1} = \left(1 + \frac{s_{O}Y_{F_{F\infty}}}{Y_{O_{A\infty}}}\right)^{-1}$$
(3.40)

onde a razão estequiométrica ar-combustível,

$$S = \frac{s_0 Y_{F_{F\infty}}}{Y_{O_{A\infty}}} \tag{3.41}$$

na qual os subscritos  $F \infty$  e  $A \infty$  representam os fluxos de combustível e ar na entrada (x = 0), respectivamente.

Usando o resultado da Eq. (3.39) pode-se gerar expressões para temperatura e frações mássicas na região do combustível e oxidante da chama. Então, para a região do combustível,

$$T = ZT_{F\infty} + \left(T_{A\infty} + Y_{O_{A\infty}} - \frac{h_{RP}}{c_p}\right)(1 - Z)$$
(3.42)

$$Y_F = ZY_{F_{F\infty}} + Y_{O_{A\infty}} \frac{W_F v_F}{W_O s_O} (1 - Z)$$
(3.43)

$$Y_0 = 0 \tag{3.44}$$

$$Y_p = Y_{O_{A\infty}} \frac{W_P v_P}{W_0 s_0} (1 - Z)$$
(3.45)

$$Y_N = Y_{N_{A\infty}}(1-Z) + ZY_{N_{F\infty}}$$
(3.46)

e para a região do oxidante,

$$T = (1 - Z)T_{A\infty} + \left(T_{F\infty} + Y_{F_{A\infty}} - \frac{h_{RP}}{c_p}\right)Z$$
(3.47)

$$Y_F = 0 \tag{3.48}$$

$$Y_{O} = (Z - 1)Y_{O_{A\infty}} - Y_{F_{F\infty}} \frac{W_{O} \nu_{O}}{W_{F} \nu_{F}} Z$$
(3.49)

$$Y_p = Y_{F_F\infty} \frac{W_P \nu_P}{W_F \nu_F} Z$$
(3.50)

$$Y_N = Y_{N_{A\infty}}(1-Z) + ZY_{N_{F\infty}}$$
 (3.51)

No caso de haver dois produtos:

$$\nu_F F + \nu_0 O_2 + \nu_N N_2 \to P_1 \nu_{P_1} + P_2 \nu_{P_2} + \nu_N N_2 \tag{3.52}$$

As frações mássicas  $Y_{p_1} e Y_{p_2}$  são encontradas através das relações abaixo,

$$Y_{p_1} = \left(\frac{W_{P_1}v_{P_1}}{W_{P_1}v_{P_1} + W_{P_2}v_{P_2}}\right)Y_p \tag{3.53}$$

$$Y_{p_1} = \left(\frac{W_{P_2} v_{P_2}}{W_{P_1} v_{P_1} + W_{P_2} v_{P_2}}\right) Y_p \tag{3.54}$$

## 3.4.2 Escalar Conservado – Formulação de Liñan ( $L_e \neq 1$ )

A formulação apresentada na seção anterior foi utilizada inicialmente por BURKE E SCHUMANN (1928) com o modelo de chama fina. Embora a análise de Burke e Schumann estivesse restrita a hipótese do número de Lewis unitário (equidifusão térmica e mássica), é possível generalizar esta formulação para números de Lewis diferentes de um. Esta formulação é apresentada por LIÑAN (1991) e é a que será considerada para geração dos resultados.

Seguindo a metodologia anteriormente apresentada, pode-se novamente eliminar os termos de reação através de combinações lineares entre as equações de conservação de energia e espécies. Primeiramente as Eqs. (3.24) e (3.25) podem ser reescritas da seguinte forma,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_F) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_F) - \frac{1}{Le_F} \nabla \cdot [\rho \alpha \nabla (Y_F)] = \dot{\omega}_F$$
(3.55)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_0) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_0) - \frac{1}{Le_0} \nabla \cdot [\rho \alpha \nabla (Y_0)] = s_0 \dot{\omega}_F$$
(3.56)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho T) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}T) - \nabla \cdot [\rho \alpha \nabla(T)] = -\frac{h_{RP}}{c_p}$$
(3.57)

A equação de conservação para Z pode ser obtida subtraindo da Eq. (3.55) a Eq. (3.56) dividida por  $s_0$ , a equação obtida,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Z) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Z) = \frac{1}{Le(Z)} \nabla \cdot [\rho D \nabla(Z)]$$
(3.58)

na qual a variável Z é uma função de acoplamento normalizada a qual se difunde sem reação através da superfície de chama, definida por,

$$Z = \frac{S\widehat{Y_F} - \widehat{Y_O} + 1}{S + 1}$$
(3.59)

onde,

$$\widehat{Y_F} = \frac{Y_F}{Y_{F_{F\infty}}} \tag{3.60}$$

$$\widehat{Y_0} = \frac{Y_0}{Y_{0A\infty}} \tag{3.61}$$

e a razão estequiométrica generalizada ar-combustível é

$$S = \frac{s_0 Y_{F_{A\infty}}}{Y_{O_{A\infty}}} \frac{Le_0}{Le_F}$$
(3.62)

A fração de mistura estequiométrica, a qual define a posição da chama, é definida por,

$$Z_{f} = \frac{1}{S+1} = \left(1 + \frac{s_{O}Y_{F_{A\infty}}}{Y_{O_{A\infty}}}\frac{Le_{O}}{Le_{F}}\right)^{-1}$$
(3.63)

e a função Le(Z) é definida por

$$Le(z) = Le_F \qquad \text{se } Z > Z_f$$
  

$$Le(z) = Le_0 \qquad \text{se } Z < Z_f \qquad (3.64)$$

onde  $Le_F$  e  $Le_O$  representam respectivamente o número de Lewis do combustível e do oxidante.

A Eq. (3.58) é uma equação de conservação não-linear para a fração de mistura generalizada, a qual junto com a Eq. (3.64) é usada para substituir as Eqs. (3.55) e (3.56).

Uma equação similar, livre do termo de reação, é desenvolvida combinando linearmente as Eqs. (3.55)-(3.57), com o intuito de substituir a Eq. (3.57). Desta forma, somando a Eqs. (3.55)-(3.57), considerando a Eq. (3.56) multiplicada por  $S/s_0$  e a Eq. (3.57) multiplicada por  $(1 + S) C_p/h_{RP}$ , a equação de conservação para o excesso de entalpia obtida de tal combinação linear é escrita como.

$$N(z)\left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho Z) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Z)\right) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} H) = \nabla \cdot [\rho D \nabla(H)]$$
(3.65)

Utilizando a Eq. (3.58), a Eq. (3.65) pode ser convenientemente escrita da seguinte forma,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} H) = \nabla \cdot [\rho D \nabla (H)] - \frac{N(Z)}{Le(Z)} \nabla \cdot [\rho D \nabla (Z)]$$
(3.66)

na qual o excesso de entalpia H é definido por

$$H = \widehat{Y_F} + \widehat{Y_0} - 1 + (1+S)Le_F c_p (T - T_0) \frac{1}{qY_{F_{A\infty}}}$$
(3.67)

e onde,

$$N(z) = (Le_F - 1)(S + 1)/S ext{ se } Z > Z_f ext{ (3.68)}$$

$$N(z) = (1 - Le_0)(S + 1) ext{ se } Z < Z_f ext{ (3.68)}$$

Utilizando as Eqs. (3.58) e (3.66) gera-se expressões para a temperatura e frações mássicas na região do combustível e oxidante da chama como funções de *Z* e *H*. Essas expressões para as variáveis de interesse são escritas como

$$H + \left(1 + \frac{1}{S}\right)(1 - Z) = (1 + S)Le_F c_p (T - T_0) / Y_{F_{F_{\infty}}} h_{RP}$$
(3.69)

$$\widehat{Y_F} = \frac{Z(S+1) - 1}{S}$$
(3.70)

$$\widehat{Y_0} = 0 \tag{3.71}$$

para a região do combustível,

$$H + (1+S)Z = (1+S)Le_F c_p (T - T_0) / Y_{F_{F_{\infty}}} h_{RP}$$
(3.72)

$$\widehat{Y_F} = 0 \tag{3.73}$$

$$\widehat{Y_0} = 1 - (1 + S)Z$$
 (3.74)

e para a região do oxidante.

As frações mássicas de produtos e inerte podem ser calculadas da mesma forma que na Seç. 3.4.1.

As variações das propriedades termofísicas, massa específica, viscosidade dinâmica e do coeficiente de difusão com a temperatura são consideradas no presente trabalho. A dependência da massa específica é admitida por meio da aplicação da equação dos gases perfeitos. Considerando o processo de combustão isobárico, temos que

$$\rho = \frac{\rho_0 T_0}{T} \tag{3.75}$$

A viscosidade dinâmica e a difusividade térmica são consideradas dependentes pela lei de potência sugerida por CARPIO et al (2012),

$$\mu = \rho \alpha = T^{\sigma} \tag{3.76}$$

na qual,  $\sigma = 0,7$ .

O parâmetro de geração de calor  $h_{RP}/c_p$  é determinado a partir dos valores para o poder calorífico inferior do combustível e do calor específico. A tabela abaixo mostra os valores utilizados para cada combustível. Os valores de  $h_{RP}$  e  $c_p$  para os respectivos combustíveis estão presente em TURNS (2000).

Tabela 3.2: Parâmetro de geração de calor

| Combustível | $h_{RP}/c_p(kJ)$ |
|-------------|------------------|
| Metano      | 22,481           |
| Etanol      | 19,936           |

#### 3.4.3 Condições de Contorno para o Modelo de Chama Fina

O modelo agora passa a ter duas equações contendo os escalares conservados Z e H, estas substituem as equações de fração mássica e energia respectivamente, além das equações de conservação de massa e da quantidade de movimento. Dado isto, as condições de contorno para o sistema podem ser reescritas como,

$$u = u_{F}, \quad v = 0, \quad H = 0, \quad Z = 1, \quad x = 0, \quad 0 < r < R_F$$
 (3.77)  
 $u = u_0, \quad v = 0, \quad H = 0, \quad Z = 0, \quad x = 0, \quad R_F < r < R_0$  (3.78)

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial Z}{\partial x} = 0, \qquad P = P_a, \qquad x = \frac{L}{R_o}, \qquad 0 < R < R_o \qquad (3.79)$$

$$\frac{\partial u}{\partial r} = v = \frac{\partial H}{\partial r} = \frac{\partial P}{\partial r} = \frac{\partial Z}{\partial r} = 0, \qquad r = 0, \qquad 0 < x < L \qquad (3.80)$$

$$u = v = \frac{\partial H}{\partial r} = \frac{\partial H}{\partial r} = 0,$$
  $r = R_0, \qquad 0 < x < L$  (3.81)

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

# Capítulo 4 – Metodologia Numérica

A metodologia que será descrita neste capítulo foi utilizada na construção de um código computacional escrito em linguagem FORTRAN. O código desenvolvido por SAUER (2012) é utilizado para resolver as equações diferenciais parciais que governam o problema exposto no capítulo anterior. Este código foi feito considerando a formulação clássica, descrita na Seç.3.4.1, para os escalares conservados (Lewis unitário) resolvendo o sistema envolvendo as equações de conservação de massa, de quantidade de movimento e de fração de mistura.

Portanto, o presente trabalho modifica o código de SAUER (2012) acrescentando uma equação adicional no sistema, que é a equação de conservação para o excesso de entalpia (*H*). Apesar do acréscimo de mais uma equação no programa, a metodologia numérica empregada por SAUER (2012), a qual será apresentada resumidamente nas próximas seções, não sofreu grandes modificações.

A técnica numérica empregada para a solução das equações diferenciais parciais é o Método dos Volumes Finitos, uma vez que esta satisfaz os princípios de conservação em nível discreto, pois, se o que se busca com o método. A fim de melhorar a fluidez do presente texto o código desenvolvido por SAUER (2012) será nomeado como VSAUER.

A discretização completa das equações de conservação estão presentes em SAUER (2012) e também podem ser vistas no Ap. A.

#### 4.1. Geração da Malha

A geração da malha, isto é, a discretização do domínio computacional presente em VSAUER é feita utilizando uma discretização estruturada, ou seja, os volumes elementares são formados por linhas coordenadas. O sistema coordenado empregado é ortogonal, o qual apresenta grande vantagem na aplicação das condições de contorno que envolvem a derivada normal da função na fronteira.

A transformação algébrica em VSAUER é caracterizada por funções que associam as coordenadas nos dois domínios, o físico e o transformado, estas funções são tratadas independentemente, ou seja, nos casos em que uma função de transformação em uma direção utiliza somente a coordenada de uma única direção do domínio físico em sua formulação. Este tipo de formulação, cujas as funções são apresentadas por PLETCHER *et al.* (1997), faz-se necessário devido à necessidade de refinamento das equações de conservação em regiões em que grandes gradientes são esperados.

Para o refinamento em regiões próximas de  $x_1 = 0$ , a transformação na direção  $x_1$  tem a forma,

$$\xi_{1}(x_{1}) = \frac{\ln\left[\left(\beta + 1 - \frac{x_{1}}{L_{x_{1}}}\right) / \left(\beta - 1 + \frac{x_{1}}{L_{x_{1}}}\right)\right]}{\ln\left(\frac{\beta + 1}{\beta - 1}\right)}, \quad 1 < \beta < \infty$$
(4.1)

na qual  $L_{x_1}$  é o comprimento máximo na direção  $x_1$  e  $\beta$  é um coeficiente que aproxima os pontos na região próximo de  $x_1 = 0$  à medida que  $\beta$  se aproxima de 1, conforme representado na Fig 4.1.



Figura 4.1: Refinamento próximo a  $x_1 = 0$ . (a) Domínio físico. (b) Domínio computacional. (MALISKA, 2004)

Para a transformação somente na região próxima a  $x_1 = L_{x_1}$  ou tanto nessa região quanto na próxima a  $x_1 = 0$ , a função de transformação na direção  $x_1$  tem a forma,

$$\xi_1(x_1) = \alpha + (1 - \alpha) \frac{\ln\left\{ \left[ \beta + \frac{x_1(2\alpha + 1)}{L_{x_1}} - 2\alpha \right] / \left[ \beta - \frac{x_1(2\alpha + 1)}{L_{x_1}} - 2\alpha \right] \right\}}{\ln\left(\frac{\beta + 1}{\beta - 1}\right)}$$
(4.2)

em que, para  $\alpha = 0$ , a malha será refinada na região próxima a  $x_1 = L_{x_1}$  apenas, enquanto que, para  $\alpha = 1/2$ , a malha será refinada igualmente próximo a  $x_1 = 0$  e  $x_1 = L_{x_1}$ . Essa última representada na Fig. 4.2.



Figura 4.2: Refinamento próximo as paredes. (a) Domínio físico. (b) Domínio computacional. (MALISKA, 2004)

Para a transformação que aproxima os pontos a um ponto específico no interior do domínio  $(0 \le x_1 \le L_{x_1})$  é dada por

$$\xi_1(x_1) = \beta_n + \frac{1}{\tau} \sinh^{-1} \left[ \left( \frac{x_1}{x_{1c}} - 1 \right) \sinh(\tau \beta_n) \right]$$
(4.2)

para,

$$\beta_n = \frac{1}{2\tau} \ln \left[ \frac{1 + (e^{\tau} - 1) (x_{1c}/L_{x_1})}{1 + (e^{-\tau} - 1) (x_{1c}/L_{x_1})} \right], \quad 0 < \tau < \infty$$
(4.3)

na qual  $\tau$  é o parâmetro que controla a atração dos pontos para a região próxima a  $x_{1c}$ , e tem valor zero se nenhum refinamento é desejado. A Fig. 4.3 representa esta transformação.



Figura 4.3: Refinamento próximo a  $x_{1c} = 0$ . (a) Domínio físico. (b) Domínio computacional. (MALISKA, 2004)

#### 4.2. Função de Interpolação

Para a avaliação do escalar conservado e de suas derivadas nas interfaces dos volumes elementares é necessário o emprego de uma função de interpolação, segundo MALISKA (2004) a escolha da função de interpolação é um assunto de extrema importância, uma vez que a qualidade da função de interpolação reflete a qualidade da difusão numérica embutida na solução final. Desta forma, o método empregado em VSAUER é o denominado WUDS (*Weighted Upstream Differencing Scheme*) (RAIBTHBY E TORRANCE, 1974).

Nesse esquema a função de interpolação exata é associada a dois coeficientes  $\alpha$  e  $\beta$  que dependem do número de Peclet de malha e servem como pesos entre a advecção e a difusão. Os valores do escalar conservado  $\phi$  e de sua derivada na interface são escritas, tomando a face leste como exemplo, por,

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_e\right)\phi_P + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e\right)\phi_E \tag{4.4}$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{e} = \bar{\beta}_{e} \left( \frac{\phi_{E} - \phi_{P}}{\Delta x_{e}} \right) \tag{4.5}$$

e as expressões para os coeficientes  $\bar{\alpha}$  e  $\bar{\beta}$ , são dados por,

$$\bar{\alpha} = \frac{r_i^2}{10 + 2r_i^2} \tag{4.6}$$

$$\bar{\beta} = \frac{1 + 0.005 r_i^2}{1 + 0.05 r_i^2} \tag{4.7}$$

em que  $r_i$  representa a razão entre o fluxo advectivo e o difusivo na direção coordenada, dado, por exemplo, para a face leste por,

$$r_e = \frac{M_e}{D_{11e}} \tag{4.8}$$

Além disso, as derivadas cruzadas que envolvem a derivada em uma direção com a face do volume normal a outra direção coordenada são aproximadas por diferenças finitas centrais e médias aritméticas.

#### 4.3. Acoplamento Pressão-Velocidade

A solução correta das equações de quantidade de movimento será obtida quando o campo de pressões introduzido nas equações de Navier-Stokes gerar velocidades que satisfaçam a equação da continuidade.

Na construção de qualquer algoritmo, a realimentação adequada do processo é fundamental para se obter uma boa velocidade de convergência. No caso do acoplamento em questão, o residual de massa, computado através da equação da continuidade, é o dado fundamental para indicar a maneira como o novo campo de pressões deve ser alterado. Ao mesmo tempo, este novo campo de pressões deve, juntamente com as mais recentes velocidades, satisfazer as equações de movimento (MALISKA, 2004).

O algoritmo de acoplamento pressão-velocidade empregado em VSAUER é o SIMPLEC (SIMPLE-Consistent), de VAN DOORMAL E RAITHBY (1984), o qual segue os mesmos passos do algoritmo SIMPLE, com a diferença que as equações de conservação da quantidade de movimento são manipuladas tal que a correção das equações da velocidade omitem os termos que são menos significativos que aqueles omitidos no SIMPLE (VERSTEEG E MALALASEKERA, 1995).

### 4.4. Condições de Contorno

As condições de contorno são tratadas em VSAUER através de volumes fictícios. As possibilidades consideradas são:  $\phi$  prescrito, fronteira com fluxo de  $\phi$  prescrito, condição localmente parabólica e condição de simetria.

Para o caso de fronteira de  $\phi$  prescrito, os valores do mesmo se encontram no centro dos volumes e a condição é estabelecida para a face, faz-se então uma média entre os dois volumes adjacentes. Para o ponto fictício adjacente a fronteira leste do domínio, por exemplo,

$$\phi_w = \frac{\phi_P - \phi_W}{2} \tag{4.9}$$

Já para o caso de fronteira com fluxo de  $\phi$  prescrito é utilizada a equação de difusão da propriedade de  $\phi$ . Por exemplo, para o ponto fictício adjacente à face norte do domínio,

$$q''_{S} = D_{12s} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \Big|_{s} + D_{22s} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \Big|_{s}$$
(4.10)

Para a condição localmente parabólica é definido o valor da variável  $\phi$  no ponto fictício igual ao do ponto adjacente no domínio, na direção em que a condição deve ser aplicada.

Já para a condição de simetria foi necessário fazer uma distinção entre a direção para a qual se está considerando. Isso se deve porque nessa condição, o fluxo normal a superfície de simetria é nulo e a componente de velocidade que atravessa a fronteira deve ser nula, portanto para cada uma das componentes do vetor velocidade retomam-se as condições definidas anteriormente.

Por último, as condições de contorno para pressão são tratadas, substituindo em cada um dos contornos o valor prescrito da velocidade, de modo que a parcela do termo fonte relacionado à fronteira avaliada é sempre zero. Isto ocorre devido as condições de contorno do problema serem todas dadas em função da velocidade.

### 4.5. Solução do Sistema de Equações Algébricas

Como já foi mencionado, o método utilizado para transformação das equações de conservação é o dos volumes finitos através do qual, as equações diferenciais parciais (EDP) são convertidas em um sistema de equações algébricas (SEA). Nesse sistema temse uma matriz de coeficientes formada pelos coeficientes da EDP analisada e um vetor composto pelas variáveis das mesmas, na qual cada elemento representa a variável no ponto central de cada um dos volumes de controle que dividem o domínio.

São dois os métodos numéricos presentes em VSAUER para a solução do SEA. O SOR (*Sucessive Overrelaxation*), no qual um coeficiente de relaxação é utilizado na atualização do vetor de varáveis no método iterativo de Gauss-Seidel (CONTE e DE BOOR, 1980), e o método ADI (*Alternative Direction Implicit*) (PLETCHER et al., 1997). No caso o SOR é utilizado, por exemplo, para a obtenção da solução da equação de conservação da quantidade de movimento. O método ADI é utilizado para a solução do sistema cuja a variável é a pressão. Neste caso, ao final de cada iteração completa do método ADI é utilizada a técnica de correção por blocos (*Block Correction*) apresentada em (PRAKASH E PATANKAR, 1981) a fim de aumentar a taxa de convergência do método, dessa forma uma correção é aplicada a cada uma das linhas (ou colunas) do domínio. Contudo, como o problema em questão apresenta geométrica cilíndrica, a correção na direção radial não apresenta influência significativa na taxa de convergência segundo PRAKASH e PATANKAR (1981). Logo, a correção é realizada apenas "por linhas".

#### 4.6. Critérios de Convergência

Os critérios de convergência utilizados em VSAUER para interromper a execução do código (regime permanente), ou para selecionar o vetor solução do sistema de equações algébricas são três.

O primeiro é o módulo da diferença entre o máximo e o mínimo valor do campo, na forma,

$$\left|\frac{\phi_P^{t+1} - \phi_P^t}{\phi_{max} - \phi_{min}}\right| \le \Theta \tag{4.11}$$

em que t representa o instante de tempo quando o critério utilizado para se avaliar se o regime permanente foi alcançado.

Para a consideração do regime permanente, é feita a avaliação entre o máximo e o mínimo valor do campo ponderado pelo valor do passo de tempo, isto é,

$$\frac{|\phi_P^{t+1} - \phi_P^t|}{\Delta t} \le \sigma \tag{4.12}$$

O terceiro critério é o da norma do resíduo, esse critério é utilizado juntamente com o critério da Eq. (4.11) para a saída do algoritmo de correção pressão-velocidade.

$$L_2 \ge \left[\sum_{i=1}^{N} |residuo_i|^2\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$(4.13)$$

1

## Capítulo 5 – Verificação

Para avaliar a capacidade do programa desenvolvido foi escolhido um caso teste, em que o número de Lewis do combustível e oxidante são iguais. Para este caso,

$$Le_F = Le_0 = 0,75 (5.1)$$

O estudo de convergência de malha para este caso teste, é feito verificando até onde estas podem ter o seu grau de refinamento reduzido sem afetar a acurácia dos resultados. O estudo é conduzido objetivando assim um ganho no tempo de processamento dos resultados que serão apresentados no capítulo seguinte.

#### 5.1. Estudo de Convergência de Malha.

Nos capítulos anteriores as equações de conservação foram escritas considerando o regime transiente. Consequentemente, para comparação dos resultados numéricos em regime permanente é necessária a utilização de um critério avaliando se a solução numérica não apresenta evolução temporal.

A condição utilizada para a seleção do  $\Delta t$  presente em VSAUER é a CFL (Courant-Friedrichs-Lewy). O valor utilizado para este número é dado por,

$$CFL = \frac{MAX(u)\Delta t}{MIN(\Delta x)}$$
(5.2)

Considerando que para a integração das equações de conservação no tempo foi utilizada uma formulação totalmente implícita, a qual implica em um sistema de equações algébricas incondicionalmente estável, isto é, o intervalo de tempo é limitado por precisão. Faz-se, então, necessário uma escolha adequada para o valor do intervalo de tempo, pois ao resolver mais de uma equação o problema de acoplamento pode limitar severamente o valor de  $\Delta t$  (MALISKA, 2004).

Dessa forma, para o caso teste analisado, o valor inicial para o intervalo de tempo obedece a seguinte relação,

$$\Delta t = CFL \frac{MIN(\Delta x)}{MAX(u)}$$
(5.3)

Na qual o fator  $\gamma$ , obtido por meio de testes e apresentado na Tab. 5.1, é utilizado de forma a assegurar que a solução dos sistemas de equações para as malhas empregadas no caso teste não venha a ter ocorrências de instabilidades.

| Malha   | CFL   |
|---------|-------|
| 40x40   | 0,08  |
| 80x80   | 0,04  |
| 160x160 | 0,008 |

Tabela 5.1: Valores de CFL para o intervalo de tempo inicial.

As tolerâncias utilizadas na solução iterativa do sistema de equações algébricas para as velocidades e para a correção de pressão foram respectivamente,  $10^{-7}$  e  $10^{-2}$ . Já para a fração de mistura e excesso de entalpia foi  $10^{-7}$ . O procedimento iterativo que trata o acoplamento pressão-velocidade é considerado convergido quando variações inferiores a  $5 \times 10^{-4}$  forem obtidas ou quando a norma  $L_2$  do resíduo for inferior a  $10^{-7}$ . A tolerância para o teste de regime permanente para as velocidades é de  $5 \times 10^{-5}$ .

As malhas utilizadas no teste de convergência de malha foram selecionadas para que a comparação entre as mesmas seja feita considerando o incremento do mesmo número de pontos em ambas as direções coordenadas. As malhas utilizadas no teste de convergência estão organizadas na Tab. 5.1, na qual M representa o número de pontos na direção x e N representa o número de pontos na direção r.

| М   | Ν   | $\begin{array}{c} \textbf{Total} \\ (M \times N) \end{array}$ | Total com pontos<br>fictícios |
|-----|-----|---|-------------------------------|
| 40  | 40  | 1600  | 1764                          |
| 80  | 80  | 6400  | 6724                          |
| 160 | 160 | 25600   | 26244                         |

Tabela 5.2: Malhas utilizadas no teste de convergência.

Vale ressaltar que as malhas utilizadas não são uniformes, como pode ser observado na Fig.5.1, a qual representa a distribuição de pontos nas três malhas utilizadas. A concentração de pontos é sempre feita nas regiões em que elevados gradientes nos perfis dos resultados são esperados (parede do tubo interno e próximo a entrada) por meio das transformações algébricas apresentadas na Sec. 4.1.



Figura 5.1: Distribuição dos pontos nas malhas. (a) Malha 40x40. (b) Malha 80x80. (c) Malha 160x160.

Os resultados para a convergência dos campos de velocidade, temperatura e fração de mistura são apresentados sobrepondo-se os respectivos campos com as três malhas utilizadas, isto faz-se necessário devido a não-linearidade das funções utilizadas na transformação algébrica para a geração da malha.

A solução do campo de velocidades para as três malhas testadas é apresentada na Fig. 5.2, é possível observar que na região próxima a entrada as soluções são bastantes semelhantes, assim como na região na qual os jatos de combustível e oxidante se encontram, isto se deve principalmente ao fato de nesta região haver um acréscimo na contração do número de pontos devido ao refinamento da malha. Contudo na região central do queimador próxima a parede do tubo as soluções apresentam uma divergência bem acentuada, que pode ser explicada por apresentar uma forte recirculação nesta área, como pode ser visto na Fig. 5.3 que mostra as linhas de corrente.



Figura 5.2: Campo de velocidade axial – teste de convergência de malha



Comparando as velocidades máximas na direção axial para as três malhas, a diferença relativa entre a malha de 40x40 pontos e a de 80x80 é da ordem de  $5 \times 10^{-2}$ , já a diferença relativa, da malha de 40x40 com a de 160x160 é de  $1 \times 10^{-2}$ . Com relação a malha de 80x80 com a de 160x160 a diferença relativa é de  $1 \times 10^{-3}$ , apresentando um ganho de uma ordem de grandeza quando comparado com a diferença relativa entre a malha menos refinada e a mais refinada.

A solução do campo de temperaturas apresentado na Fig. 5.4, também é utilizado para comparar os resultados produzidos pelas três malhas. Assim como para o campo de velocidades, a região próxima à entrada apresenta soluções muito semelhantes, o que também é devido a concentração de pontos neste local. Diferentemente das soluções para o campo de velocidades, mesmos nas regiões mais afastadas da entrada, as soluções para as três malhas testadas apresentam boa convergência, vindo a aparecer maiores diferenças somente nas regiões mais próximas da saída do queimador. Com relação às temperaturas

máximas para as três malhas, a diferença relativa entre as malhas de 40x40 e a de 80x80 é da ordem de  $5 \times 10^{-3}$ , e entra a malha de 40x40 e 160x160 é de  $8 \times 10^{-2}$  e entre 80x80 e 160x160 é  $8 \times 10^{-3}$ . Constatando assim que o campo de temperaturas apresenta melhor convergência que o campo de velocidades.



Figura 5.4: Campo de temperatura para as três malhas testadas.

O último campo avaliado no teste de convergência de malha é o campo fração de mistura, presente na Fig. 5.5. É possível observar que das soluções apresentadas para os dois campos anteriores, este é o que apresenta menor divergência nas soluções para as três malhas testadas, apresentando boa convergência em todo o domínio do queimador.

Da análise de convergência feita é possível concluir que, apenas o campo de velocidades apresentou maiores diferenças entre as soluções para as malhas testadas e os campos de temperatura e fração de mistura mostraram boa convergência em quase todo o domínio do queimador, principalmente este último. Considerando que o campo de velocidades é o mais crítico para a convergência, o ideal seria a opção pela malha mais

refinada (160x160), contudo o custo computacional para esta malha é muito alto, visto que o tempo de simulação para a malha de 40x40 foi da ordem de minutos, para a malha intermediária foi da ordem de poucas horas e a de 160x160 foi de algumas semanas. Levando em consideração o ganho de precisão em relação ao tempo de simulação, a malha escolhida para geração dos resultados de resultados que serão apresentados no capítulo seguinte é a de 80x80 pontos.



Figura 5.5: Campo de fração de mistura para as três malhas testadas.

# Capítulo 6 – Resultados

Os resultados que serão apresentados nas próximas seções foram produzidos com base em um sistema equivalente ao analisado numérica e experimentalmente por MITCHELL *et al.* (1980), o qual está representado em um esquema na Fig.6.1. O número de Reynolds do experimento é 317,61 justificando assim o escoamento laminar.



Figura 6.1: Esquema do queimador analisado. (SAUER, 2012)

Os parâmetros geométricos do sistema e as condições de operação são presentados a seguir:

• Parâmetros Geométricos:

$$R_{o} = 2,54 \times 10^{-2} m$$
$$R_{F} = 6,35 \times 10^{-3} m$$

$$\blacktriangleright L = 3 \times 10^{-1} m$$

- Condições de operação
  - > Pressão na saída do combustor:  $P_a = 1,0 atm$
  - For Temperatura de entrada:  $T_a = 298 K$
- Linha de Combustível
  - Velocidade axial:  $u_F = 4.5 \ cm/s$
  - $\blacktriangleright \quad \text{Velocidade radial: } v_F = 0 \ cm/s$
  - $\succ$  Temperatura:  $T_F = 298 K$
  - $\succ$  Composição:  $Y_F = 1,0$
- Linha de Oxidante
  - ▶ Velocidade axial:  $u_0 = 9,88 \ cm/s$
  - Velocidade radia:  $v_0 = 0 \ cm/s$
  - $\blacktriangleright$  Temperatura:  $T_o = 298 K$
  - > Composição:  $Y_{O_2} = 0,232; Y_{N_2} = 0,768$

#### 6.1. Chama Difusiva de Metano

Os resultados da simulação para a chama de metano são obtidos segundo a reação global escrita abaixo.

$$CH_4 + 2(O_2 + 3,76N_2) \rightarrow CO_2 + 2H_2O + 7,52N_2$$
 (6.1)

Os resultados apresentados para os perfis de fração mássica de CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> e o perfil de temperatura em diferentes posições axiais (1,2 cm, 2,4 cm, 5,0 cm) do queimador foram obtidos por meio do código computacional, os quais são utilizados para fins de comparação com os resultados obtidos por SAUER (2012) e com os resultados experimentais obtidos por MITCHEL *et al* (1980). Os casos apresentados são para variações do  $Le_0$  e  $Le_F$  com intervalos de 0,25, conforme a Tab. 6.1.

|        | Le <sub>0</sub> | $Le_F$ | Le <sub>0</sub> | $Le_F$ |
|--------|-----------------|--------|-----------------|--------|
| Caso 1 | 0,25            | 1,00   | 1,00            | 0,25   |
| Caso 2 | 0,50            | 1,00   | 1,00            | 0,50   |
| Caso 3 | 1,00            | 1,00   | 1,00            | 1,00   |
| Caso 4 | 1,25            | 1,00   | 1,00            | 1,25   |
| Caso 5 | 1,50            | 1,00   | 1,00            | 1,50   |

Tabela 6.1: Casos estudados

Algumas considerações realizadas no presente trabalho diferem das utilizadas por SAUER (2012), como por exemplo, a utilização da formulação proposta por LIÑAN (1991) para número de Lewis não-unitário e também, como é avaliado o parâmetro de geração de calor  $(h_{RP}/c_p)$ . As comparações dos resultados obtidos no presente trabalho com os resultados produzidos por SAUER (2012) para Le = 1 são importante para avaliação da influência do número de Lewis do combustível e oxidante na chama.

Os resultados mostrados nas Figs. 6.2 e 6.3 para as frações mássicas de  $CH_4$  e  $O_2$  indicam que conforme  $Le_0$  aumenta em relação ao caso de SAUER (2012), o oxidante se difunde com mais facilidade, de forma que a disponibilidade de oxidante para chama é maior. O efeito oposto ocorre quando o  $Le_0$  diminui, isto é, há menos oxidante disponível para a chama e consequentemente a chama fica mais curta.

Efeitos semelhantes são observados quando o  $Le_F$  varia, quando este diminui em relação ao caso de SAUER (2012), isto é o combustível se difunde com mais facilidade, o que faz com que a disponibilidade de combustível para a chama aumente. O efeito contrário ocorre quando  $Le_F$  diminui.

Outro fato que pode ser observado é que na Fig. 6.2e a fração mássica de combustível não está presente para o caso  $Le_0 = 0.50$ ,  $Le_F = 1.00$  pois, para esta posição axial (x = 5 cm) a altura de chama é menor do que a posição avaliada. Isto pode ser confirmado no gráfico da Fig. 6.3 (e) pois, justamente pelo modelo de chama fina adotado não pode haver oxidante na região de combustível, como a fração mássica de oxigênio para esta posição axial não tende a zero é fato que a chama é menor que a referida posição axial.

As frações mássicas de N<sub>2</sub> presente nos gráficos da Fig. 6.4 quase não apresentam variações a medida que tanto o  $Le_0$  quanto o  $Le_F$  variam, uma vez que este gás é considerado inerte no presente estudo.


Figura 6.2: Perfis de fração mássica de CH<sub>4</sub> para diferentes números de Lewis nas posições axiais: 1,2 cm (a,b); 2,4 cm (c,d); 5,0 cm (e,f).



Figura 6.3: Perfis de fração mássica de O<sub>2</sub> na chama de metano para diferentes números de Lewis nas posições axiais: 1,2 cm (a,b); 2,4 cm (c,d); 5,0 cm (e,f).



Figura 6.4: Perfis de fração mássica de N<sub>2</sub> na chama de metano para diferentes números de Lewis nas posições axiais: 1,2 cm (a,b); 2,4 cm (c,d); 5,0 cm (e,f).

A altura de chama pode ser definida como a posição axial na qual se localiza a maior temperatura ao longo do eixo de simetria. Este método utilizado para determinar a altura de chama é o mesmo utilizado por SAUER (2012), uma vez que o resultados de SAUER (2012) são comparados com resultados experimentais, este método se mostra mais simples do que considerar a posição em que  $Y_F = Y_0 = 0$ . A Fig. 6.5 mostra as diferentes alturas de chama para os diferentes casos avaliados. É observado que quando o número de  $Le_0$  diminui a temperatura máxima aumenta e a altura chama fica menor comparado com o caso de SAUER (2012) e o contrário ocorre quando o  $Le_0$  aumenta, chegando a atingir uma  $T_{máx} = 3350$  K e uma altura de 3,5 cm para o caso  $Le_0 = 0,50$  e para  $Le_0 = 1,50$ , uma  $T_{máx} = 1670$  K e uma altura de 29,0 cm. Já quando o  $Le_F$  aumenta a chama tende a ficar com menor altura e quando  $Le_F$  diminui o oposto ocorre. No caso em que  $Le_F$  varia e o  $Le_0$  permanece constante, as temperaturas máximas ficaram menores que o caso feito por SAUER (2012) como por exemplo para  $Le_F = 0,50$ , a altura de chama foi de 27 cm e a  $T_{máx} = 1600$  K e para  $Le_F = 1,50$ , a altura é de 14,0 cm e a  $T_{máx} = 1500$  K.

Outro fato a ser notado é que a altura de chama obtida experimentalmente tem valor aproximado de 5,8 cm, já para todos os casos simulados as alturas de chama são superestimadas. Esse comportamento dos resultados se deve não só a variação do número de Lewis, tanto para o combustível como para o oxidante, no comportamento da altura da chama como também ao modelo de chama fina devido ao usa da taxa de reação infinita. Os perfis de temperatura estão apresentados nas Figs. 6.5 e 6.6.



Figura 6.5: Perfis de temperatura na chama de metano ao longo do eixo de simetria (r = 0):  $Le_0 = 0,50 - 1,50$  e  $Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 0,50 - 1,50$ .



Figura 6.6: Perfis de temperatura na chama de metano para diferentes números de Lewis nas posições axiais: 1,2 cm (a,b); 2,4 cm (c,d); 5,0 cm (e,f).

Os resultados presentes nas Fig. 6.2-6.4 quando comparados com os resultados experimentais indicam a capacidade do presente trabalho em capturar a tendência dos resultados experimentais apesar, dos perfis de fração mássica de  $CH_4 e O_2$  fornecerem valores com discrepância superior a 100% em todas as posições consideradas.

A estrutura geral dos campos dos campos de velocidade, frações mássicas, temperatura e fração de mistura da chama difusiva de  $CH_4$  obtida numericamente são apresentados nas Figs. 6.7-6.14. As características observadas nas posições axiais x = 1,2cm, x = 2,4 cm e x = 5,0 cm são visualizadas em toda a estrutura da chama. É possível ver a evolução dos perfis de frações molares de CH<sub>4</sub> e  $O_2$  mais achatados e mais largos a medida que  $Le_0$  diminui e mais alongados e finos a medida que  $Le_0$  aumenta. Assim como estes ficam mais finos e mais achatados quando  $Le_F$  aumenta e o contrário ocorre quando  $Le_F$  diminui. Nota-se também, a impossibilidade de penetração de combustível na região do oxidante e vice-versa fazendo jus ao modelo de chama fina. Também são apresentados os perfis de fração molar de N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O nas Fig. 6.10, 6.11 e 6.12.

A Fig. 6.14 apresenta também a velocidade axial no domínio, pode-se observar que as maiores velocidades estão ao longo da linha de centro em virtude da maior temperatura nessa região e dos efeitos de convecção natural. Além disso, pode ser notado pelas linhas de corrente que tanto combustível quanto o ar que entram no sistema escoam no sentido do escoamento em desenvolvimento. Os efeitos da força de corpo aceleram o escoamento no interior da chama enquanto ar entra no sistema pela saída para balancear a quantidade de movimento na entrada e conservar o fluxo de massa. O escoamento reverso ocorre próximo à parede devido ao empuxo produzido pela geração de calor da reação química. A recirculação ajuda a causar o estreitamento e maior extensão da chama no sistema confinado.

Os perfis de fração de mistura e a posição da chama calculada pela Eq. (3.61) são apresentada na Fig. 6.13 e revelam os diferentes formatos de chama para os diferentes casos. Quando o  $Le_0$  diminui em relação ao caso de SAUER (2012) a chama fica mais achatada e quando este aumenta a chama tende a ficar com um formato mais fino e delgado. Quando o  $Le_F$  diminui a chama tende a ficar com maior altura e com um formato mais largo, assim como quando  $Le_F$  aumento a chama fica com menor altura e mais delgada.

Os campos de velocidade radial para a chama difusiva de metano apresentam uma variação muito pequena com relação ao número de Lewis e estão apresentados no Ap. B.



Figura 6.7: Perfis de temperatura na chama de metano para: (a)  $Le_0 = 0,50 e Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75 e Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25 e Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50 e Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,50$ .



Figura 6.8: Perfis de fração molar de CH<sub>4</sub>: (a)  $Le_0 = 0,50 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 1,50$ .



Figura 6.9: Perfis de fração molar de O<sub>2</sub> na chama de metano (a)  $Le_0 = 0,50$  e  $Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75$  e  $Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25$  e  $Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50$  e  $Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 1,00$  e  $Le_F = 1,50$ .



Figura 6.10: Perfis de fração molar de N<sub>2</sub> na chama de metano: (a)  $Le_0 = 0,50 e Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0.75 e Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25 e Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50 e Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00e Le_F = 1,50$ .



Figura 6.11: Perfis de fração molar de CO<sub>2</sub> na chama de metano: (a)  $Le_0 = 0,50$  e  $Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75$  e  $Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25$  e  $Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50$  e  $Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 1,50$ .



Figura 6.12: Perfis de fração molar de H<sub>2</sub>O na chama de metano: (a)  $Le_0 = 0,50 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 1,50$ .



Figura 6.13: Perfis de fração de mistura (posição de chama): (a)  $Le_0 = 0,50 e Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75 e Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25 e Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50 e Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,50$ .



Figura 6.14: Perfis de velocidade axial (linhas de corrente): (a)  $Le_0 = 0,50 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 1,50$ .

## 6.2. Chama Difusiva de Etanol

Considerando a mesma configuração do sistema utilizado para a queima de metano, obtêm-se os perfis das quantidades de interesse para a queima do etanol. A reação global para a queima de etanol é dada por

$$C_2H_5OH + 3(O_2 + 3,76N_2) \rightarrow 2CO_2 + 3H_2O + 13,16N_2$$
(6.2)

Uma característica muito importante do etanol é que ele é um combustível oxigenado, isto torna-se importante na hora de avaliar os perfis de fração mássica e a distribuição de temperatura na chama.

Como definido anteriormente, a altura da chama é considerada como a temperatura máxima posicionada ao longo do eixo de simetria. Os resultados expostos na Fig. 6.15 mostram as temperaturas máximas e as alturas de chama do etanol para diferentes números de Lewis. Se uma comparação for feita entre a Fig. 6.15 e a Fig. 6.5, é possível verificar que para todos os casos de números de Lewis apresentados, a altura de chama do etanol é sempre menor que a de metano, contudo as temperaturas máximas obtidas são sempre maiores também, exceto para o caso de SAUER (2012) em que o metano e o etanol apresentaram a mesma temperatura máxima.

Além do fato do número de Lewis influenciar na altura de chama, outro fato que justifica uma altura de chama etanol ser que a de metano reside no fato do coeficiente estequiométrico  $s_0$  do etanol ter valor 2,087, enquanto que o valor desse mesmo termo para a reação de metano ser igual a 4,0.

A análise feita para os perfis de temperatura de metano avaliando a influência do número de Lewis também valem para o etanol. Sendo assim, os perfis de temperatura em diferentes posições axiais são apresentados na Fig 6.16.

Os perfis de frações mássicas ao longo do eixo radial estão apresentados nas Figs. 6.17-6.19. Comparando as figuras citadas anteriormente com as que representam estes mesmos perfis para o metano, é possível notar pelas as frações molares de combustível e oxigênio que a chama de etanol é mais estreita que a de metano. Isto também fica claro se for observado os perfis radiais de temperatura presentes na Fig 6.16. O fato do etanol ser um combustível oxigenado pressupõe tal característica para a chama.

Outro fato a ser notado é que semelhantemente ao caso explicitado anteriormente  $(Le_0 = 0.50, Le_F = 1.00)$  para o perfil de fração mássica de metano na posição axial 5,0

cm, os perfis de fração mássica de etanol para o caso  $Le_0 = 0.50$ ,  $Le_F = 1.00$  nas posições axiais 2,4 cm e 5,0 cm e para o caso  $Le_0 = 0.75$ ,  $Le_F = 1.00$  na posição axial 5,0 cm também não aparecem. Assim como antes, isso ocorre porque a altura de chama é menor que a altura em que o perfil foi obtido. Os respectivos perfis de fração mássica de oxigênio comprovam isto.



Figura 6.15: Perfis de temperatura na chama de etanol ao longo do eixo de simetria (r = 0): (a)  $Le_0 = 0,50 - 1,50$  e  $Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 0,50 - 1,50$ .



Figura 6.16: Perfis de temperatura na chama de etanol para diferentes números de Lewis nas posições axiais: 1,2 cm (a,b); 2,4 cm (c,d); 5,0 cm (e,f).



Figura 6.17: Perfis de C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH para diferentes números de Lewis nas posições axiais: 1,2 cm (a,b); 2,4 cm (c,d); 5,0 cm (e,f).



Figura 6.18: Perfis de O<sub>2</sub> na chama de etanol para diferentes números de Lewis nas posições axiais: 1,2 cm (a,b); 2,4 cm (c,d); 5,0 cm (e,f).



Figura 6.19: Perfis de N<sub>2</sub> na chama de etanol para diferentes números de Lewis nas posições axiais: 1,2 cm (a,b); 2,4 cm (c,d); 5,0 cm (e,f).

A estrutura geral dos campos de velocidade, frações molares, temperatura e fração de mistura da chama difusiva de etanol obtida numericamente é apresentada nas Figs. 6.21-6.28. Comparativamente com as respectivas figuras dos campos para o metano é possível observar que a chama de etanol é menos alongada e mais estreita, esta última característica é devida a maior presença de átomos de oxigênio na estrutura do combustível como também é influenciada pelas variações do número de Lewis. A impenetrabilidade do combustível na região do oxidante e vice-versa também é observada. Os perfis de fração de mistura e posição de chama, obtidos através da Eq. 3.63 estão representados na Fig.6.27. Como consequência também do coeficiente estequiométrico  $s_0$ , além da influência na altura de chama, observam-se maiores concentrações molares de H<sub>2</sub>O e CO<sub>2</sub> na chama de etanol. A maior concentração de N<sub>2</sub> na região do combustível na chama de etanol, com relação a chama de metano, é explicada em função da estequiometria, que prevê a presença de mais moléculas de nitrogênio na combustão. Na região do oxidante, como esperado, o valor dessa concentração molar de N<sub>2</sub> tende para o valor característico da fração molar de nitrogênio no ar.

Os campos de velocidade radial para a chama difusiva de etanol apresentam uma variação muito pequena com relação ao número de Lewis e estão apresentados no Ap. B.



Figura 6.20: Perfis de temperatura na chama de etanol para: (a)  $Le_0 = 0,50 e Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75 e Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25 e Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50 e Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00 e 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,50$ .



Figura 6.21: Perfis de fração molar de C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH: (a)  $Le_0 = 0,50$  e  $Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75$  e  $Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25$  e  $Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50$  e  $Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00$  e 0,50; (f)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 1,50$ .



Figura 6.22: Perfis de fração molar de O<sub>2</sub> na chama de etanol: (a)  $Le_0 = 0,50 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 1,50$ .



Figura 6.23: Perfis de fração molar de N<sub>2</sub> na chama de etanol: (a)  $Le_0 = 0,50$  e  $Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75$  e  $Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25$  e  $Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50$  e  $Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00$  e  $Le_F = 1,50$ .



Figura 6.23: Perfis de fração molar de CO<sub>2</sub> na chama de etanol: (a)  $Le_0 = 0,50 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 1,50$ .



Figura 6.24: Perfis de fração molar de H<sub>2</sub>O na chama de etanol: (a)  $Le_0 = 0,50 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50 \text{ e } Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00 \text{ e } Le_F = 1,50$ .



Figura 6.25: Perfis de fração de mistura (posição de chama): (a)  $Le_0 = 0,50 e Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75 e Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25 e Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50 e Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,50$ .



Figura 6.26: Perfis de velocidade axial (linhas de corrente): (a)  $Le_0 = 0,50 e Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75 e Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25 e Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,50 e Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,50$ .

## Capítulo 7 – Conclusões

A análise de um escoamento axissimétrico confinado em duto cilíndrico foi realizado no presente trabalho. Foram utilizados como combustível para a comustão metano e etanol, e como oxidante o ar. Para o modelo matemático foi utilizado a formulação proposta por LIÑAN (1991) para contemplar o número de Lewis nãounitário, a qual trabalha com combinções lineares com as equações de energia e espécies a fim de eliminar os termos de reação, essas equações são substituídas pelas equações de conservação de fração de mistura generalizada e excesso de entalpia livres de termos fontes. A cinética química foi tratada com um reação global, irreversível, de passo único e taxa infinintamente rápida. O método dos Volumes Finitos foi utilzado para a solução numérica do escoamento utilizando uma malha estruturada com um arranjo de varáveis co-localizado. O método de interpolação utilizado foi o WUDS e o tratamento do acoplamento pressão-velocidade foi feito através do algorítimo SIMPLEC. As propriedades termodinâmicas e de transporte foram tratadas como sendo dependetes da temperatura através de leis de potência. Os campos de fração mássicas (molares), temperatura e fração de mistura foram obtidos utilizando a solução dos escalares conservados fração de mistura generalizada e excesso de entalpia.

As soluções numéricas dos escoamentos reativos de metano e etanol foram avaliadas para diferentes valores do número de Lewis. O número de Lewis foi variado de 0,50 a 1,50, com passo de 0,25 tanto para o metano como para o etanol. Os resultados obtidos foram comparados com o caso feito por SAUER (2012), o qual considera somente o caso de Lewis unitário.

O escoamento reativo no qual se considerou a combustão do metano com o ar apresentou resultados satisfatórios, visto que o modelo utilizado no presente trabalho conseguiu captar os efeitos da variação do número de Lewis. Observou-se que este parametro afetou de maneira significativa os campos de temperatura, frações mássica de combustível e oxigênio, além do campo de fração de mistura quando comparados com o caso de Lewis unitário.

Os resultados do escoamento reativo utilizando o etanol foram apresentaram efeitos similares sob a influencia da variação do número de Lewis, estes resultados foram comparados com a solução numérico da chama de metano. As principais diferenças se

deram na altura e largura da chama, uma vez que o etanol apresentou menores alturas de chama e formato mais delgado. Uma caracterítica que também teve influência no formato de chama, é o fato do etanol ser um combustível oxigenado, refletindo em diferenças significativos no coeficiente estequimétrico.

O número de Lewis como foi estudado é um importante parâmetro no estudo da disfusão preferencial em chamas difusivas, conclui-se que este número possui significativa influência em diversas característca das chama, provocando mudanças expressivas no formato e altura de chama, assim como no campo de temperaturas devido a desigualdade ente a difusão de calor e massa.

Outro fato que pode ser concluído é que a inclusão do número de Lewis nãounitário não resolve a diferença significativa dos perfis dos resultados quando comparados com os resultados experimentais de MITCHEL *et al* (1980) o que mostra a necessidade de mais estudos a fim de ter resultdos mais próximos dos resultados experimentais.

## 7.1. Sugestões Para Trabalhos Futuros

Os resultados obtidos no presente estudo podem ser estendidos de diversas formas. A consideração dos componentes da mistura na avaliação das propriedades termodinâmicas e de transporte é uma primeira análise que pode ser realizada, de modo a reduzir os efeitos de utilização de um único componente da mistura. O tratamento das reações químicas considerando taxa finita e mecanismos sofisticados de reação é uma alternativa mas que aumenta em muito o custo computacional, o que pode reduzir sua atratividade em aplicações que necessitam de menor tempo para a obtenção de resultados, no entanto são imprescindiveis na avaliação e formação de compostos intermediários e poluentes como NO<sub>x</sub> e CO.

Outras condições de contorno na parede podem ser conisderadas não se limitando a utilizada no presente trabalho (parede adiabática), os efeitos de parede sólida, como efeitos de convecção também podem ser aplicados, contudo as condições de contorno para tais efeitos, segundo LIÑAN (1991) são de difícil dedução para a formulaçao apresentada no presente trabalho.

Do ponto de vista numérico, o uso de malhas adaptativas são um alternativa para melhorar os resultados na região da chama, principalmente no que concerne a altura de chama refinando a malha nos locais onde se encontram os maiores gradientes de temperatura. Contudo, o custo computacional aumenta pois a cada instante de tempo é necessário o estabelecimento de uma nova malha, além disso em alguns problemas podem apresentar descontinuidade nas métricas associadas a malha, sendo necessário resolver uma equação a mais, o que consequentemente aumenta o custo computacional .

## **Referências Bibliográficas**

AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS – ANP. *Dados Estatísticos 2015*. Disponível em: http://www.anp.gov.br/?id=548>. Acesso em: 20 nov. 2015.

BAUKAL, C. E. e SCHWARTZ, R. E., *The John Zink Combustion Handbook*. 1<sup>a</sup> ed. Boca Raton: CRC Press, 2001.

BURKE, S. P. e SCHUMANN, T. E. W., Diffusion Flames. *Industrial and Engineering Chemistry*, 20, n. 10, pp. 998-1004, 1928.

CARBONELL, D., PEREZ-SEGARRA, C. D., Flamelet Mathematical Models for Non-Premixed Laminar Combustion, *Combustion and Flame*, 156, pp. 334-347, 2009.

CHUNG, S. H. e LAW, C. K., Structure and Extinction of Convective Difusion Flames with General Lewis Numbers. *Combustion and Flame*, 52, pp. 59-79, 1983

CHUNG, S. H. e LAW, C. K., Burke-Schumann Flames with Streamwise and Preferencial Diffusion. *Combustion Science and Technology*, 37, pp. 21-46, 1984.

COELHO, S. T. Brazilian sugarcane ethanol: lessons learned. Energy for SustainableDevelopment.v.X,n.2,2006.Disponívelem:www.bioenergytrade.org/downloads/coelhonovdec05.pdf>.Acesso em: 25/11/2014.

CONTE, S. D. e DE BOOR, C., *Elementary Numerical Analisys: An Algorithmic Approach*. 3<sup>a</sup>. ed. Nova Iorque: McGraw Hill, 1980.

CUENOT, B. e POINSOT, T., Assymptotic and Numerical Study of Diffusion Flames with Variable Lewis Number and Finite Rate Chemistry. *Combustion and Flame*, 104, pp. 111-137, 1996.

DANDEKAR, A., COLLINS, L. R., Effect of Non-Unity Lewis Number on Premixed Flame Propagation Through Isotropic Turbulence. *Combustion and Flame*, 101, pp. 428-440, 1995.

DARBANDI, M. e BANAEIZADEH, A., Developing a Bi-Implicit Finite Volme Element Method to Solve Nonpremixed Diffusion Flame. In: LIU, G. R., TAN, V. B. C., HAN, X. *Computational Methods*. Dordrecht: Springer, p. 203-213, 2006.

DARBANDI, M. e BOSTANDOOST, S. M., A New Formulation Toward Unifying the Velocity Role in CollocatedVariable Arrangement. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 47, pp. 361-382, 2005.

DUBEY, R., BHADRAUAH, K., RAGHAVAN, V., On the Estimation and Validation of Global Single-Step Knetics Parameters of Ethanol-Air Oxidation Using Diffusion Flame Extinction Data. *Combustion Science and Technology*, 183, pp. 43-50, 2011.

EHRLICH, P. R., KAREIVA, P. M., DAILY, G. C., Securing Natural Capital and Expanding Equity to Rescale Civilization. *Nature*, 486, pp. 68-73, 2012.

FISCHER, S. L., DRYER, L. F., CURRAN, J. H., The Reaction Kinetics of Dimethyl Ether. I: High-Temperature Pyrolysis and Oxidation in Flow Reactors. *International Journal of Chemical Kinetics*, 32, pp. 713-740, 2000

GAN, Y. e YANG, Z., Characteristics of Small Diffusion Flames ina Confined Space. Proceedings of the ASME 2009 2nd Micro/Nanoscale Heat & Mass Transfer International Conference, pp. 1-5, 2009.

GLASSMAN, I. e YETTER, R. A., Combustion. 4ª. ed. San Diego: Elsevier, 2008.

GOLDEMBERG, J. e LUCON, O., Energia e Meio Ambiente no Brasil. *Revista Estudos Avançados* [online], 21 (59), pp. 7–20, 2007. GORDON, A. S., LI, S. C., LIBBY, P. A. *et al.*, Influence of Initial Velocity Distributions on the Heigth of Methane-Air Nonpremixed Flames. *Combustion Science and Technology*, 100, pp. 395-399, 1994.

GOSMAN, A. D., PUN, W. M., RUNCHAL, A. K. et al., Heat and Mass Transfer in Recirculating Flows. Nova Iorque: Academic Press, 1969.

HOTTEL, H. C. e HAWTHORNE, W. R., *Diffusion in Laminar Flame Jets*. Third Symposium on Combustion and Flame and Explosion Phenomena, Baltimore: The Williams and Wilkins Company, pp. 254-266, 1949.

KATTA, V. R., GOSS, L. P., ROQUEMORE, W. M., Effect of Non-unity Lewis Number and Finite-Rate Chemistry on the Dynamics of a Hydrogen-Air Jet Diffusion Flame, *Combustion and Flame*, 96, pp. 60-74, 1996.

KIM, J. S., WILLIAMS, F. A., Extinction of Diffusion Flames with Non-Unity Lewis Numbers, *Journal of Engineering Mathematics*, 31, pp. 101-118, 1997.

KUO, K. K., Principles of Combustion. 2ª. ed. Nova Jersey: John Wiley & Sons, 2005.

LAW, C. K., e CHUNG, S. H., Steady State Diffusion Flame Structure with Lewis Number Variations. *Combustion Science and Technology*, 29, pp. 129-145, 1982.

LEE, S. R. e CHUNG, S. H., Effect of Streamwise and Preferential Diffusion on Cylindrical Burke-Schumann Flames. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 5, pp. 45-52, 1991

LIÑAN, A., On the Structure of Laminar Diffusion Flames. California Institute Technology, Pasadena, California, USA, 1963.

LIÑÁN, A., *Diffusion-Controlled Combustion*. Mechanics for a New Mellennium, Illinois: Springer Netherlands, pp. 487-502, 2002.

LIÑAN, A., ORLANDI, P., VERZICCO, R. *et al*, Effects of Non-Unity Lewis Numbers in Diffusion Flames. *Proceedings of the Summer Program 1994*, Center for Turbulence Research, pp. 5-18, 1994

LIU, F., SMALLWOOD, J. G., GULDER, L. O. *et al.* Asymptotic Analysis of Radiative Extinction in Counterflow Diffusion Flames of Non-Unity Lewis Nunbers. *Combustion and Flame*, 121, pp. 275-287, 2000.

LYU, H.-Y. e CHEN, L.-D., Numerical Modeling of Buoyant Ethanol-Air Wick Diffusion Flames. *Combustion and Flame*, 87, pp. 169-181, 1991.

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

MARCHI, C. H. e MALISKA, C. R., A Nonorthogonal Finite-Volume Method for the Solution of All Speed Flows Using Co-Located Variables. *Numerical Heat Transfer, Part B*, n. 26, pp. 293-311, 1994.

MARINOV, N., A Detailed Chemical Kinetic Model for High Temperature Ethanol Oxidation. *International Journal of Chemical Kinetics*, 31, pp. 183-220, 1999.

MITCHELL, R. E., SAROFIM, A. F., CLOMBURG, L. A., Experimental and Numerical Investigation of Conf'med Laminar Diffusion Flames. *Combustion and Flame*, 37, pp. 37-244, 1980.

NORTON, T. S., SMYTH, K. T., MILLER, J. H. *et al.*, Comparison of Experimental and Computed Species Concentration and Temperature Profiles in Laminar, Two-Dimensional Methane/Air Flames. *Combustion Science and Technology*, 90, pp. 1-34, 1993.

NISHIOKA, M., LAW, K. C., TAKENO, T., A Flame-Controlling Continuation Method for Generating S-Curve Responses with Detailed Chemistry. *Combustion and Flame*, 104, pp. 328-3420, 1996.
OYMAK, O. e SELÇUK, N., Method-of-Lines Solution of Time-Dependent Two-Dimensional Navier-Stokes Equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 23, pp. 455-466, 1996.

PATANKAR, S. V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Nova Iorque: McGraw-Hill Book Company, 1980.

PETROVA, M. V. e WILLIAMS, F. A., A Small Detailed Chemical-Kinetic Mechanism for Hydrocarbon Combustion. *Combustion and Flame*, 144, pp. 526-544, 2006.

PLETCHER, R., TANNEHILL, J. C., ANDERSON, D., Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer. Filadélfia: Taylor & Francis, 1997.

POINSOT, T. e VEYNANTE, D., *Theoretical and Numerical Combustion*. 2<sup>a</sup>. ed. Fliladélfia: Edwards, 2005.

PRAKASH, C. e PATANKAR, S. V., Combined Free and Forced Convection in Vertical Tubes with Radial Internal Fins. *Trasactions of the ASME Journal of Heat Transfer*, 103, n. 3, pp. 566-572, 1981.

RAITHBY, G. D. e TORRANCE, K. E., Upstream-Weighted Differencing Schemes and Their Application to Elliptic Problems Involving Fluid Flow. *Computer and Fluids*, 2, pp. 191-206, 1974.

ROPER, F. G., The Prediction of Laminar Jet Diffusion FLame Sizes: Part I. Theoretical Model. *Combustion and Flame*, 29, pp. 219-226, 1977.

SAUER, V. M., Análise de Escoamentos Reativos de Biocombustíveis em Dutos. Dissertação de M.Sc., Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2012.

SAXENA, P. e WILLIAMS, F. A., Numerical and Experimental Studies of Ethanol Flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31, pp. 1149-1156, 2007.

SEISER, R., HUMER, S., SESHADRI, K. *et al.*, Experimental Investigation of Methanol and Ethanol Flames in Nonuniform Flows. *Proceedings of the Combustion Institue*, 31, pp. 1173-1180, 2007.

SELÇUK, N., TARHAN, T., TANRIKULU, S., Comparison of Method of Lines and Finite Diference Solutions of 2-D Navier-Stokes Equations for Transient Laminar Pipe Flow. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 53, pp. 1615-1628, 2003.

SETTARI, A. e AZIZ, K., A Generalization of the Additive Correction Methods fot the Iterative Solution of Matrix Equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 10, n. 3, pp. 506-521, 1973.

SHAMIM, T., The Effect of Lewis Number on Radiative Extinction and Flamelet Modeling. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45, pp. 1249-1259, 2002.

SHAMIM, T., Effect of Unequal Fuel and Oxidizer Lewis Numbers on Flame Dynamics. *International Journal of Thermal Science*, 45, pp. 1213-1223, 2006.

SHVAB, V. A., Svyaz' mezhdu temperaturnymi i skorostnymi polyami gazovogo. Isseledovanie Protsessov Goreniya Natural'nogo Topliva, 1948.

SIBULKIN, M., Free convection diffusion flames from burning solid fuels. Progress in Energy and Combustion Science, 14, pp. 195-212, 1988.

SMITH, S. R. e GORDON, A. S., Studies of Diffusion Flames. II. Diffusion Flames of Some Simple Alcohols. *The Journal of Physical Chemistry*, 60, n. 8, pp. 1059-1062, 1956.

THERMAL DATA. Disponível em http://webserver.dmt.upm.es/~isidoro/dat1/

TANOUE, K., BABA, T., MATSUNAGA, T., Experimental Study of Combustion of Ethanol and Primary Reference Fuels in Laminar Nonuniform Flows. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33, pp 1029-1035, 2010.

The San Diego Mechanism, Version 20051201. Disponível em <a href="http://maeweb.ucsd.edu/~combustion/">http://maeweb.ucsd.edu/~combustion/</a>>.

TSUJI, H., Counterflow Diffusion Flames. *Progress in Energy and Combustion Science*, 8, pp. 93-119, 1982.

TURNS, S., *Introduction to Combustion:* Concepts and Applications. 2<sup>a</sup>. ed. Singapura: Mcgraw Hill, 2000.

UYGUR, A. B., SELÇUK, N., TUNCER, I. H., A Non-Iterative Pressure Based Scheme for the Computation of Reacting Radiating Flows. *International Journal of Thermal Sciences*, 47, pp. 209-220, 2008.

VALLE, R. M., Escoamento Laminar em Placas de Orifício - Análise Teórica e Experimental em Regime Permanente e Transiente. Tese de D.Sc., Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, Brasil, 1995.

VALLE, R. M. e MALISKA, C. R., Análise Numérica e Experimental de um Escoamento Pulsante Laminar Através de uma Placa de Oríficio. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, v. 11, n. 1, pp. 657-668, 1995.

VAN DOORMAL, J. P e RAITHBY, G. D., Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Imcompressible Fluid Flow, *Numerical Heat Transfer*, 7, pp.147-163, 1984.

VERSTEEG, H. K. e MALALASEKERA, W., An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method. Harlow: Prentice Hall, 1995.

WAZILEWSKI, W.T. *Estudo da Estabilidade do Biodiesel de Crambe e Soja*. Dissertação de M.Sc., Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Cascavel, PR, Brasil, 2012.

WILLIAMS, F. A., Combustion Theory. Palo Alto: Addison-Wesley, 1965.

WOHL, K., GAZLEY, C., KAPP, N., *Diffusion Flames*. Third Symposium on Combustion, Flame and Explosion Phenomena, Baltimore: The Williams and Wilkings Company, pp. 288-300, 1949.

WU, F., Dynamics and Chemistry of Laminar and Turbulent Expanding Flames Ph.D. dissertation, Princeton University, Princeton, USA, 2014.

XU, Y. e SMOOKE, M. D., Application of a Primitive Variable Newton's Method for the Calculation of an Axisymmetric Laminar Diffusion Flame. *Journal of Computational Physics*, 104, pp. 99-109, 1993.

XU, Y., SMOOKE, M. D., LIN, P. *et al.*, Primitive Variable Modeling of Multidimensional Laminar Flames. *Combustion Science and Technology*, 90, n. 5-6, pp. 289-313, 1993.

ZELDOVICH, Y. B., *On the Theory of Combustion of Initially Unmixed Gases*. NACA. Washington, p. 20, Tradução do artigo de 1949 do mesmo autor, 1951.

## Apêndice A– Discretização das Equações de Conservação.

O sistema de coordenadas cilíndricas é limitado para a solução de problemas mais gerais, nos quis são abordadas geometrias irregulares. Por isso, a divisão do domínio é feita utilizando um novo sistema de coordenadas, denominadas curvilíneas ou generalizadas (MALISKA, 2004) que melhor se adequam à essas geometrias. Como os volumes de controle são obtidos são obtidos através de uma discretização que segue um sistema de coordenadas globais, a discretização, ou a malha resultante, é denominada estruturada, uma vez que cada volume interno tem o mesmo número de vizinhos (MALISKA, 2004).

Em duas dimensões, as superfícies do volume de controle são as superfícies coordenadas. As coordenadas curvilíneas de um ponto estão relacionadas pelas equações de transformação dadas por

$$\xi = \xi(x, r) \tag{A.1}$$

$$\eta = \eta(x, r) \tag{A.2}$$

Os termos das equações de conservação envolvem as derivadas das variáveis conservadas. Por essa razão, é necessário relacionar essas derivadas nas equações no domínio transformado com as equivalentes no domínio físico. Para tanto, define-se (MALISKA, 2004) o jacobiano da transformada como,

$$J = \xi_x \eta_x - \xi_r \eta_r \tag{A.3}$$

Considera-se a equação de conservação na forma

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{1}{r} \nabla (r\mathbf{F}) = S \tag{A.4}$$

na qual,

$$\mathbf{F} = Ei - Fj \tag{A.5}$$

$$Q = \rho r \phi \tag{A.6}$$

$$E = \rho u \phi - \Gamma^{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \tag{A.7}$$

$$F = \rho v \phi - \Gamma^{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \tag{A.8}$$

em que  $\phi$  é um escalar genérico que representa uma propriedade conservada, como massa, quantidade de movimento, energia, etc., e  $\Gamma^{\phi}$  representa o coeficiente de transporte associado. As componentes *E* e *F* representam as componentes em coordenadas cilíndricas do fluxo advectivo e difusivo do escalar  $\phi$ .

Realizando o mesmo procedimento utilizado para a obtenção de uma equação em coordenadas generalizadas a partir de um sistema de coordenadas cartesianas (MALISKA, 2004), para coordenadas cilíndricas, a equação geral de conservação em coordenadas generalizadas tem a forma (VALLE e MALISKA, 1995),

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho \phi}{J} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \xi} (r \rho U \phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \eta} (r \rho V \phi) = \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \xi} r \Gamma^{\phi} J \alpha_{11} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + r \Gamma^{\phi} J \alpha_{12} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( r \Gamma^{\phi} J \alpha_{21} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + r \Gamma^{\phi} J \alpha_{22} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) + \frac{S^{\phi}}{J}$$
(A.9)

na qual,

$$\alpha_{11} = \frac{(\xi_x^2 + \xi_r^2)}{J^2} \tag{A.10}$$

$$\alpha_{22} = \frac{(\eta_x^2 + \eta_r^2)}{J^2}$$
(A.11)

$$\alpha_{12} = \alpha_{21} = \frac{(\xi_x \eta_x - \xi_r \eta_r)}{J^2}$$
(A.12)

$$U = u\frac{\xi_x}{J} + v\frac{\xi_r}{J} \tag{A.13}$$

$$V = u\frac{\eta_x}{J} + v\frac{\eta_r}{J} \tag{A.14}$$

Como para o método dos volumes finitos é imaterial a forma geométrica do volume de controle (MALISKA, 2004), o estando o mesmo definido com algum tipo de

construção, a etapa seguinte é a integração das equações de conservação sobre o volume de controle no tempo, resultando na seguinte equação,

$$\frac{M_p \phi_p - M_p^0 \phi_p^0}{\Delta t} + \dot{M}_e \phi_e - \dot{M}_w \phi_w + \dot{M}_n \phi_n - \dot{M}_s \phi_s =$$

$$= \left[ D_{11} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + D_{12} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right]_w^e + \left[ D_{21} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + D_{22} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right]_s^n + L \left[ \frac{S^{\phi}}{J} \right]_p \Delta V$$
(A.15)

na qual a integração no tempo é realizada considerando-se a formulação totalmente implícita, o operador  $L[\cdot]$  representa uma aproximação numérica do termo entre colchetes e,

$$M_p = \frac{\rho_P}{J_P} \Delta V \tag{A.16}$$

$$M_p^0 = \frac{\rho_P^0}{J_P} \Delta V \tag{A.17}$$

$$\dot{M}_e = (r\rho U)_e \Delta \eta \tag{A.18}$$

$$\dot{M}_w = (r\rho U)_w \Delta \eta \tag{A.19}$$

$$\dot{M}_n = (r\rho V)_n \Delta \xi \tag{A.20}$$

$$\dot{M}_s = (r\rho V)_s \Delta \xi \tag{A.21}$$

representam, respectivamente, a massa no instante  $t + \Delta t$  e no instante t no interior do volume de controle, e os fluxos de massa através das faces do volume de controle. Já os coeficientes presentes nos termos difusivos são dados por

$$D_{11} = r\Gamma^{\phi} J \alpha_{11} \Delta \eta \tag{A.22}$$

$$D_{12} = r\Gamma^{\phi} J \alpha_{12} \Delta \eta \tag{A.23}$$

$$D_{21} = r\Gamma^{\phi} J \alpha_{21} \Delta \xi \tag{A.24}$$

$$D_{22} = r\Gamma^{\phi} J \alpha_{22} \Delta \xi \tag{A.25}$$

com volume, no domínio transformado dado por,

$$\Delta V = r_P \Delta \xi \Delta \eta \tag{A.26}$$

os subscritos (P, e, w, n, s) presentes nas expressões referenciam os pontos da malha, representada na Fig. , e o sobrescrito 0, o instante anterior.

Como foi explicitado no Cap. 4 o método de interpolação utilizado para avaliar  $\phi$  e suas derivadas nas interfaces dos volumes elementares é o WUDS (*Weighted Upstream Differencing Scheme*) (RAITHBY e TORRANCE, 1974). Dessa forma os valores de  $\phi$  nas interfaces, ou nos pontos de integração se preferirmos, do volume elementar são calculados por

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_e\right)\phi_P + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e\right)\phi_E \tag{A.27}$$

$$\phi_w = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_w\right)\phi_W + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_w\right)\phi_P \tag{A.28}$$

$$\phi_n = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_n\right)\phi_P + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_n\right)\phi_N \tag{A.29}$$

$$\phi_s = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_s\right)\phi_s + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_s\right)\phi_P \tag{A.30}$$

As derivadas diretas, que são parte do fluxo difusivo, são dadas por

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_{e} = \bar{\beta}_{e} \frac{(\phi_{E} - \phi_{P})}{\Delta \xi} \tag{A.31}$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_{W} = \bar{\beta}_{W} \frac{(\phi_{P} - \phi_{W})}{\Delta \xi} \tag{A.32}$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_n = \bar{\beta}_n \frac{(\phi_N - \phi_P)}{\Delta \xi} \tag{A.33}$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_{s} = \bar{\beta}_{s} \frac{(\phi_{P} - \phi_{S})}{\Delta \xi} \tag{A.34}$$

enquanto as derivadas cruzadas, aproximadas por diferenças centrais, são dadas por

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_{e} = \frac{\phi_{N} + \phi_{NE} - \phi_{S} - \phi_{SE}}{4\Delta \eta}$$
(A.35)

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_{W} = \frac{\phi_{N} + \phi_{NW} - \phi_{S} - \phi_{SW}}{4\Delta \eta} \tag{A.36}$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_n = \frac{\phi_E + \phi_{NE} - \phi_W - \phi_{NW}}{4\Delta \xi} \tag{A.37}$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_{s} = \frac{\phi_{s} + \phi_{sE} - \phi_{w} - \phi_{sW}}{4\Delta \xi} \tag{A.38}$$

As expressões para os coeficientes  $\bar{\alpha} \in \bar{\beta}$ , são dados por

$$\bar{\alpha} = \frac{r_i^2}{10 + 2r_i^2}$$
(A.39)

$$\bar{\beta} = \frac{1 + 0.005r_i^2}{1 + 0.05r_i^2} \tag{A.40}$$

em que r é a razão entre o fluxo advectivo e difusivo na direção coordenada, dado por

$$r = \frac{\dot{M}}{D} \tag{A.41}$$

Subtraindo a equação de conservação de quantidade de movimento da equação da continuidade, obtida utilizando  $\phi = 1$  na Eq. (A.15),

$$\frac{M_p - M_p^0}{\Delta t} + \dot{M}_e - \dot{M}_w + \dot{M}_n - \dot{M}_s = 0$$
(A.42)

obtém-se a equação algébrica representativa da equação de conservação para a variável  $\phi$ , discretizada para o volume elementar com centro em *P* 

$$A_p \phi_p + A_e \phi_E + A_w \phi_W + A_n \phi_N + A_s \phi_S + A_{ne} \phi_{NE} + A_{nw} \phi_{NW} + A_{se} \phi_{SE} + A_{sw} \phi_{SW} = B$$
(A.43)

em que os coeficientes são dados por

$$A_p = -\sum (A_{nb}) + \frac{M_p^0}{\Delta t} \tag{A.44}$$

$$A_{e} = \dot{M}_{e} \frac{1}{2} - \left| \dot{M}_{e} \right| \bar{\alpha}_{e} - \frac{D_{11e} \bar{\beta}_{e}}{\Delta \xi} + \frac{D_{21s} - D_{21n}}{4\Delta \xi}$$
(A.45)

$$A_{w} = -\dot{M}_{w} \frac{1}{2} - \left| \dot{M}_{w} \right| \bar{\alpha}_{w} - \frac{D_{11w} \bar{\beta}_{w}}{\Delta \xi} + \frac{D_{21n} - D_{21s}}{4\Delta \xi}$$
(A.46)

$$A_{n} = \dot{M}_{n} \frac{1}{2} - \left| \dot{M}_{n} \right| \bar{\alpha}_{n} - \frac{D_{22n} \bar{\beta}_{n}}{\Delta \eta} + \frac{D_{12w} - D_{12e}}{4\Delta \eta}$$
(A.47)

$$A_{s} = -\dot{M}_{s}\frac{1}{2} - |\dot{M}_{s}|\bar{\alpha}_{s} - \frac{D_{22s}\bar{\beta}_{s}}{\Delta\eta} + \frac{D_{12e} - D_{12w}}{4\Delta\eta}$$
(A.48)

$$A_{ne} = -\frac{D_{12e}}{4\Delta\eta} - \frac{D_{21n}}{4\Delta\xi} \tag{A.49}$$

$$A_{nw} = \frac{D_{12w}}{4\Delta\eta} + \frac{D_{21n}}{4\Delta\xi} \tag{A.50}$$

$$A_{se} = \frac{D_{12e}}{4\Delta\eta} + \frac{D_{21s}}{4\Delta\xi} \tag{A.51}$$

$$A_{sw} = -\frac{D_{12w}}{4\Delta\eta} - \frac{D_{21s}}{4\Delta\xi}$$
(A.52)

$$B = L \left[\frac{S^{\phi}}{J}\right]_{P} \Delta V + \frac{M_{p}^{0} \phi_{p}^{0}}{\Delta t}$$
(A.53)

Ao tratar a equação de conservação de quantidade de movimento o termo de pressão deve ser separado do termo fonte. Esses dois termos são avaliados usando-se diferenças centrais. Para as pressões, por exemplo, em um ponto no interior do domínio, isto é, afastado dos contornos,

$$L\left[\frac{S^{u}}{J}\right]_{P} = \frac{P_{E} - P_{W}}{2\Delta\xi} \left(\frac{\xi_{x}}{J}\right)_{P} + \frac{P_{N} - P_{S}}{2\Delta\eta} \left(\frac{\eta_{x}}{J}\right)_{P}$$
(A.54)

$$L\left[\frac{S^{\nu}}{J}\right]_{P} = \frac{P_{E} - P_{W}}{2\Delta\xi} \left(\frac{\xi_{r}}{J}\right)_{P} + \frac{P_{N} - P_{S}}{2\Delta\eta} \left(\frac{\eta_{r}}{J}\right)_{P}$$
(A.55)

No caso analisado, a massa específica não varia significativamente com a pressão, mas tem variação considerável com a temperatura. Como a massa específica não depende de *P*, a equação de estado utilizada para o cálculo de  $\rho$  dependeria apenas de *T*, ou seja,  $\rho = \rho(T)$ , na qual *T* é determinada através da equação de conservação de energia. Assim procedendo, a equação de estado passa a ser uma equação para  $\rho$ , e a pressão passa a não possuir uma equação evolutiva, sendo sua influência apenas através do seu gradiente nas equações de movimento. O objetivo é, então encontrar um valor para *P* nas equações de movimento de forma que as velocidades obtidas satisfaçam a conservação de massa. A equação de conservação de massa passa a ser uma restrição que deve ser obedecida pelo campo de velocidades, e não mais uma equação evolutiva para qualquer variável. Uma equação, entretanto, pode ser obtida a partir da equação da continuidade, e, para tanto, faz-se o uso de uma variante do método SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) (PATANKAR e SPALDING, 1972).

No método SIMPLE, as equações das velocidades são obtidas a partir das equações de movimento. Se um campo de pressões  $P^*$  for introduzido na Eq. (A.43), obtém-se, para o caso em que a mesma representa a equação de Navier-Stokes,

$$A_p \phi_P^* + \sum A_{nb} \phi_{NB}^* = -L \left[ \frac{P^{\phi^*}}{J} \right] \Delta V + B^{\phi}$$
(A.56)

em que,

$$\sum A_{nb}\phi_{NB}^{*} = A_{e}\phi_{E}^{*} + A_{w}\phi_{W}^{*} + A_{n}\phi_{N}^{*} + A_{s}\phi_{S}^{*} + A_{ne}\phi_{NE}^{*} + A_{nw}\phi_{NW}^{*} + A_{se}\phi_{SE}^{*} + A_{sw}\phi_{SW}^{*}$$
(A.57)

Subtraindo-se a equação com o campo correto de pressões da equação com os valores estimados (A.56), obtém-se,

$$A_p \phi'_P = -\sum A_{nb} \phi'_{NB} - L \left[\frac{P^{\phi'}}{J}\right] \Delta V \tag{A.58}$$

na qual os sobrescritos indicam a diferença entre os valores exatos e os estimados, ou seja, a correção necessária para que o valor estimado seja igual ao correto.

$$\phi' = \phi - \phi^* \tag{A.59}$$

Para a análise da Eq. (A.58) considera-se que o arranjo das variáveis do domínio é o denominado co-localizado. Esse arranjo é assim chamado pelo fato de todas as variáveis utilizarem o mesmo volume de controle. Além disso, empregar o arranjo co-localizado significa usar um único volume de controle para realizar todas as integrações; com isso, o cálculo das áreas para a determinação dos fluxos das diferentes propriedades é o mesmo, facilitando a construção e a implementação do código computacional do algorítimo.

Em razão da dificuldade em se analisar o termo  $\sum A_{nb}\phi'_{NB}$ , é necessária uma abordagem para o tratamento do mesmo. A abordagem utilizada no presente trabalho é a denominada SIMPLEC em alusão ao método SIMPLE, com a diferença da letra "C", representativa de *Consistent*. Esta abordagem consiste na consideração de que  $\phi'_P$  pode ser aproximado por uma média dos termos de sua vizinhança, de modo que,

$$\phi_P' \approx \frac{\sum A_{nb} \phi_{NB}'}{\sum A_{nb}} \tag{A.60}$$

Resultando, para uma aproximação para a pressão tal qual a utilizada nas Eqs (A.54) e (A.55) em que as equações para as velocidades da forma

$$u_p = u_P^* - \bar{d}_P^u \left[ \frac{P_E - P_w}{2\Delta\xi} \left( \frac{\xi_x}{J} \right)_P + \frac{P_N - P_S}{2\Delta\eta} \left( \frac{\eta_x}{J} \right)_P \right] \Delta V \tag{A.61}$$

$$v_p = v_P^* - \bar{d}_P^v \left[ \frac{P_E - P_W}{2\Delta\xi} \left( \frac{\xi_x}{J} \right)_P + \frac{P_N - P_S}{2\Delta\eta} \left( \frac{\eta_x}{J} \right)_P \right] \Delta V$$
(A.62)

nas quais,

$$\bar{d}_p^{\phi} = \bar{d}_p = \frac{\Delta t}{\left(M_p^0\right)_p} \tag{A.63}$$

As velocidades corrigidas são, então, substituídas na equação da continuidade em regime permanente

$$\dot{M}_e - \dot{M}_w + \dot{M}_n - \dot{M}_s = 0 \tag{A.64}$$

ou melhor,

$$(r\rho U)_e \Delta \eta - (r\rho U)_w \Delta \eta + (r\rho V)_n \Delta \xi - (r\rho V)_s \Delta \xi = 0$$
(A.65)

De acordo com a Eq. (A.65), as velocidades envolvidas são as velocidades contravariantes. Construindo as mesmas nas faces dos volumes a partir das equações das velocidades corrigidas (A.61) e (A.62), considerando-se: a contribuição da pressão apenas na mesma direção coordenada, a aproximação dos coeficientes  $\bar{d}_i^{\phi}$  nas interfaces pela média dos valores nos centros (com *i* representado as faces norte, sul, leste e oeste do volume de controle) e variações de massa específica desprezíveis no volume (MALISKA, 2004), a equação da continuidade toma a forma,

$$A_{p}P_{P}' + A_{e}P_{E}' + A_{w}P_{W}' + A_{n}P_{n}' + A_{s}P_{s}' = B$$
(A.66)

na qual

$$A_p = -\sum A_{nb} \tag{A.67}$$

$$A_e = r_e \alpha_{11e} \bar{d}_e \Delta \eta^2 \tag{A.68}$$

$$A_w = r_w \alpha_{11w} \bar{d}_w \Delta \eta^2 \tag{A.69}$$

$$A_n = r_n \alpha_{22n} \bar{d}_n \Delta \xi^2 \tag{A.70}$$

$$A_s = r_s \alpha_{22s} \bar{d}_s \Delta \xi^2 \tag{A.71}$$

$$B = (r_e U_E^* - r_w U_W^*) \Delta \eta + (r_n V_n^* - r_s V_S^*) \Delta \xi$$
 (A.72)

Os parâmetros para a solução anterior são necessários em posições nas quais não há informação na malha. Para obter os valores em questão é necessário criar uma pseudoequação, de modo que os pontos vizinhos possam ser usados (MARCHI e MALISKA, 1994). Utilizando a equação para a pressão estimada (A.56) para cada um dos pontos E, W,  $N \in S$ , obtém-se uma equação para as velocidades estimadas na fronteira. Por exemplo, para a face leste,

$$(A_p)_e \phi_e^* = -\sum (A_{nb} \phi_{NB}^*)_e - L \left[\frac{P^{\phi^*}}{J}\right]_e \Delta V + L \left[\frac{S^{\phi^*}}{J}\right]_e \Delta V + \frac{M_e^0 \phi_e^0}{\Delta t}$$
(A.73)

obtida por meio da interpolação linear das equações

$$\left(A_{p}\right)_{p}\phi_{P}^{*} = -\sum_{p}\left(A_{nb}\phi_{NB}^{*}\right)_{P} - L\left[\frac{P\phi^{*}}{J}\right]_{P}\Delta V + L\left[\frac{S\phi^{*}}{J}\right]_{P}\Delta V + \frac{M_{P}^{0}\phi_{P}^{0}}{\Delta t}$$
(A.74)

$$\left(A_{p}\right)_{E}\phi_{E}^{*} = -\sum_{E}(A_{nb}\phi_{NB}^{*})_{E} - L\left[\frac{P^{\phi^{*}}}{J}\right]_{E}\Delta V + L\left[\frac{S^{\phi^{*}}}{J}\right]_{E}\Delta V + \frac{M_{E}^{0}\phi_{E}^{0}}{\Delta t}$$
(A.75)

fornecendo,

$$\phi_e^* = \frac{\left(A_p\right)_e}{\left(A_p\right)_p + \left(A_p\right)_E} \tag{A.76}$$

tal que

$$(A_p)_e = -\sum (A_{nb}\phi_{NB}^*)_P - \sum (A_{nb}\phi_{NB}^*)_E - 2L \left[\frac{P^{\phi^*}}{J}\right]_e \Delta V + L \left[\frac{S^{\phi^*}}{J}\right]_P \Delta V + L \left[\frac{S^{\phi^*}}{J}\right]_E \Delta V + \frac{(M_P^0 + M_E^0)\phi_e^0}{\Delta t}$$
(A.77)

conforme mostrado por MALISKA (2004) e, em mais detalhes, para coordenadas cilíndricas por VALLE (1995).

Com os valores das velocidades  $u_i^* \in v_i^*$ , calculam-se as velocidades contravariantes nas faces  $U_i^* \in V_i^*$ .

## **Apêndice B– Resultados Adicionais**

## B.1 : Chama Difusiva de Metano



Figura B.1: Perfis de velocidade radial na chama de metano: (a)  $Le_0 = 0,50 e Le_F = 1,00$ ;(b)  $Le_0 = 0,75 e Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25 e Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,75 e Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,50$ .



## B.2 : Chama Difusiva de Etanol

Figura B.2: Perfis de velocidade radial na chama de etanol: (a)  $Le_0 = 0,50 e Le_F = 1,00$ ; (b)  $Le_0 = 0,75 e Le_F = 1,00$ ; (c)  $Le_0 = 1,25 e Le_F = 1,00$ ; (d)  $Le_0 = 1,75 e Le_F = 1,00$ ; (e)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,50$ ; (f)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 0,75$ ; (g)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,25$ ; (h)  $Le_0 = 1,00 e Le_F = 1,50$ .