



ANÁLISE DE ESCOAMENTOS REATIVOS DE BIOCOMBUSTÍVEIS EM DUTOS

Vinicius Maron Sauer

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

Maio de 2012

ANÁLISE DE ESCOAMENTOS REATIVOS DE BIOCOMBUSTÍVEIS EM DUTOS

Vinicius Maron Sauer

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

Examinada por:

Prof. Albino José Kalab Leiroz, Ph.D.

Prof. Marcelo José Colaço, D.Sc.

Prof. Emanuel Negrão Macêdo, D.Sc.

Dr. Fernando Fachini Filho, Ph.D

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MAIO DE 2012

Sauer, Vinicius Maron

Análise de Escoamentos Reativos de Biocombustíveis em Dutos/ Vinicius Maron Sauer – Rio de Janeiro: UFRJ/ COPPE, 2012

XVIII, 117 p.: il.; 29,7 cm

Orientadores: Albino José Kalab Leiroz

Marcelo José Colaço

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Meânica, 2012.

Referências Bibliográficas: p. 106-117.

1. Chamas laminares difusivas. 2. Modelo de chama fina.
3. Entrada Hidrodinâmica. I. Leiroz, Albino José Kalab, *et al.*
II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Mecânica. III. Título.

DEDICATÓRIA

*“Aos meus pais, Anibal e Mariza,
à minha irmã, Sheila,
e ao amor da minha vida, Fernanda.”*

AGRADECIMENTO À ANP

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

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

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

AGRADECIMENTOS

Aos meus orientadores, Albino José Kalab Leiroz e Marcelo José Colaço, pela motivação, apoio, ajuda, compreensão, reconhecimento e contribuições importantes, que foram indispensáveis para a realização deste trabalho. Muito obrigado.

A todos os professores do Departamento de Engenharia Mecânica que ajudaram de forma direta ou indireta neste trabalho pelo apoio, pelas palavras de incentivo e por acreditarem em minha capacidade.

À toda a equipe do Laboratório de Máquinas Térmicas, em especial aos engenheiros Nauberto R. Pinto, Pedro P. Pereira e Wilson S. V. Maior, que muito me ensinaram, e as secretárias Rosalva M. Silva, Rosália M. Silva e Márcia Alves por toda ajuda e presteza.

Aos funcionários da secretaria acadêmica Tito L. J. Barbosa e Vera L. P. S. Noronha, pelos momentos sempre agradáveis durante os procedimentos burocráticos.

Aos meus amigos da pós-graduação, em especial ao meu companheiro de sala, Jean M. de Pinho, e aos amigos Ivana F. de Sousa, Ivana Gabriela dos Santos Cerqueira e José Martim C. Junior pelos momentos que tornaram esse período muito prazeroso e por todas as refeições compartilhadas.

À minha família pela ajuda nessa jornada.

À minha esposa Fernanda pelo seu amor, compreensão e por acreditar em mim em todos esses onze anos.

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

ANÁLISE DE ESCOAMENTOS REATIVOS DE BIOCOMBUSTÍVEIS EM DUTOS

Vinicius Maron Sauer

Maio/ 2012

Orientadores: Albino José Kalab Leiroz
Marcelo José Colaço

Programa de Engenharia Mecânica

O presente trabalho descreve o estudo de escoamentos reativos axissimétricos confinados em dutos cilíndricos. A análise da reação de combustão é realizada para dois combustíveis diferentes — Metano e Etanol — tendo como oxidante o Ar em condições ambiente. A variação das propriedades termodinâmicas e de transporte com a temperatura é considerada pelo modelo. O mecanismo de cinética química considera uma reação global, irreversível, de passo único e de taxa infinita. O escoamento reativo é resolvido numericamente por meio do Método dos Volumes Finitos em uma malha estruturada. Os resultados obtidos são comparados com resultados numéricos e experimentais da literatura e mostram o comportamento geral dos campos de velocidade, fração mássica e temperatura para as condições de simulação adotadas. Os efeitos do combustível utilizado nos perfis das quantidades de interesse são apresentados e discutidos.

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

ANALYSIS OF BIOFUELS REACTIVE FLOWS IN DUCTS

Vinicius Maron Sauer

May/ 2012

Advisors: Albino José Kalab Leiroz
Marcelo José Colaço

Department: Mechanical Engineering

A study on axisymmetric confined reactive flow is presented in the present work. The reactive flow analysis is conducted for two different fuels — Methane and Ethanol — with Air as the oxidizing agent. Temperature variation of thermophysical properties is considered in the developed model. A global, single-step, irreversible, with infinitely fast rate reaction is considered. The Finite Volume Method is used to solve the reactive flow conservation equations on a structured grid. The obtained results are initially verified using numerical and experimental literature data. Results show the general behavior and fuel influence on velocity, mass fraction and temperature profiles within the solution domain for the adopted simulation conditions.

SUMÁRIO

Capítulo 1 - Introdução.....	1
1.1. Objetivo	4
1.2. Revisão de Literatura.....	6
1.2.1. Chamas Difusivas Laminares	6
1.2.2. Primeiros Esforços para a Análise de Chamas Difusivas Laminares.....	7
1.2.3. Chamas Laminares Utilizando Metano	9
1.2.4. Chamas Difusivas Laminares de Etanol.....	20
Capítulo 2 - Modelo Matemático.....	24
2.1. Equações de Conservação para Sistemas Multicomponentes	24
2.2. Formulação de Shvab-Zeldovich.....	25
2.3. Modelo de Chama Fina.....	28
2.3.1. Frações de Mistura - Escalares Conservados	33
2.4. Condições de Contorno	38
Capítulo 3 - Metodologia.....	39
3.1. Transformação de Coordenadas	39
3.1.1. Transformação Algébrica	43
3.2. Função de Interpolação.....	46
3.3. Acoplamento Pressão-Velocidade.....	49
3.4. Condições de Contorno	55

3.4.1. Condições de Contorno para a Pressão	55
3.4.2. Condições de Contorno para a Velocidade e Outras Variáveis.....	56
3.5. Solução do Sistema de Equações Algébricas	57
3.6. Critérios de Convergência	59
Capítulo 4 - Verificação	60
4.1. Entrada Hidrodinâmica.....	60
4.1.1. Região Hidrodinamicamente Desenvolvida	61
4.1.2. Região em Desenvolvimento Hidrodinâmico	66
4.2. Entrada Térmica	67
4.2.1. Temperatura Prescrita na Parede	70
4.2.2. Fluxo de Calor Prescrito na Parede	71
Capítulo 5 - Resultados	73
5.1. Chama Difusiva de Metano	74
5.2. Chama Difusiva de Etanol.....	90
5.3. Variações nas Condições de Entrada.....	98
5.3.1. Variação da Velocidade de Entrada	98
5.3.2. Variação na Temperatura de Entrada	100
Capítulo 6 - Conclusão	103
6.1. Sugestões para trabalhos futuros	105
Capítulo 7 - Referências	106

ÍNDICE DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1.1: Energia em algumas fontes de energia. Adaptado de (WALTHER e AHN, 2006)	2
Figura 1.2: Esquema do sistema analisado.....	5
Figura 1.3: Queimadores industriais. (a) Visualização externa; (b) Ilustração do funcionamento. (ECLIPSE, 2012).....	5
Figura 1.4: Representação do problema de Burke-Schumann. Adaptado de GLASSMAN e YETTER (2008).	7
Figura 1.5: Esquema do queimador. Adaptado de MITCHELL <i>et al.</i> (1980)....	10
Figura 1.6: Queimador Tsuji. Adaptado de KEYES e SMOOKE (1987).....	13
Figura 3.1: Volume elementar. (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995)....	43
Figura 3.2: Refinamento próximo a $x_1 = 0$. (a) Domínio físico. (b) Domínio computacional.....	44
Figura 3.3: Refinamento próximo as paredes. (a) Domínio físico. (b) Domínio computacional.....	45
Figura 3.4: Refinamento próximo a $x_{1c} = 0$. (a) Domínio físico. (b) Domínio computacional.....	46
Figura 4.1: Desenvolvimento de camada limite hidrodinâmica laminar em um tubo circular.....	61
Figura 4.2: Erros relativos médios das velocidades axiais para os números de Reynolds avaliados.....	64
Figura 4.3: Erros relativos médios das pressões para os números de Reynolds avaliados.....	65

Figura 4.4: Perfil do erro relativo da velocidade axial para o escoamento hidrodinamicamente desenvolvido de Reynolds igual a (a) 100 e (b) 2000.	66
Figura 4.5: Perfil de velocidade em desenvolvimento ao longo do eixo de simetria ($r = 0$).	67
Figura 4.6: Desenvolvimento da camada-limite térmica em um tubo circular resfriado.	68
Figura 4.7: Erro percentual da temperatura média ao longo do tubo.	70
Figura 4.8: Número de Nusselt local: temperatura prescrita na parede.	71
Figura 4.9: Número de Nusselt local: fluxo de calor prescrita nas paredes.	72
Figura 5.1: Esquema do sistema analisado.	73
Figura 5.2: Distribuição dos pontos na malha 80×80	75
Figura 5.3: Comparação dos perfis de (a) Temperatura, (b) Velocidade Axial, (c) Fração de Mistura ao longo do eixo de simetria obtidas utilizando malhas de 80×80 e 100×100 pontos.	76
Figura 5.4: Comparativo dos perfis de fração mássica de CH_4 nas posições axiais (a) 1,2 cm; (b) 2,4 cm; (c) 5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL <i>et al.</i> , 1980).	78
Figura 5.5: Comparativo dos perfis de fração mássica de O_2 nas posições axiais (a) 1,2 cm; (b) 2,4 cm; (c) 5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL <i>et al.</i> , 1980).	79
Figura 5.6: Comparativo dos perfis de fração mássica de N_2 nas posições axiais (a) 1,2 cm; (b) 2,4 cm; (c) 5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL <i>et al.</i> , 1980).	80

Figura 5.7: Comparativo dos perfis de fração mássica de CO_2 nas posições axiais (a) 1,2 cm; (b) 2,4 cm; (c) 5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL <i>et al.</i> , 1980).....	81
Figura 5.8: Comparativo dos perfis de fração mássica de H_2O nas posições axiais (a) 1,2 cm; (b) 2,4 cm; (c) 5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL <i>et al.</i> , 1980).....	82
Figura 5.9: Comparativo dos perfis de temperatura ao longo do eixo de simetria. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL <i>et al.</i> , 1980)	84
Figura 5.10: Comparativo dos perfis de temperatura nas posições axiais (a) 1,2 cm; (b) 2,4 cm; (c) 5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL <i>et al.</i> , 1980).....	85
Figura 5.11: Comparativo dos perfis de velocidade axial nas posições axiais (a) 1,2 cm, (b) 2,4 cm, (c) 5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL <i>et al.</i> , 1980).....	86
Figura 5.12: Perfis na chama de metano de: (a) Temperatura; (b) Fração molar de CH_4 ;	88
Figura 5.13: Perfis na chama de etanol de velocidade axial (linhas de corrente). Dutos de altura (a) 0,9 cm; (b) 0,7 cm; (c) 0,5 cm.	89
Figura 5.14: Comparativos dos perfis de temperatura das chamas de metano e etanol ao longo do eixo de simetria.	91
Figura 5.15: Comparativo dos perfis das chamas de metano e etanol na posição axial $x = 1,2$ cm ao longo da direção radial. (a) Fração molar de combustível; (b) Fração molar de O_2 ; (c) Fração molar de N_2 ; (d) Fração molar de CO_2 ; (e) Fração molar de H_2O ; (f) Temperatura.....	93

Figura 5.16: Comparativo dos perfis das chamas de metano e etanol na posição axial $x = 2,4$ cm ao longo da direção radial. (a) Fração molar de combustível; (b) Fração molar de O_2 ; (c) Fração molar de N_2 ; (d) Fração molar de CO_2 ; (e) Fração molar de H_2O ; (f) Temperatura..... 94

Figura 5.17: Comparativo dos perfis das chamas de metano e etanol na posição axial $x = 5,0$ cm ao longo da direção radial. (a) Fração molar de combustível; (b) Fração molar de O_2 ; (c) Fração molar de N_2 ; (d) Fração molar de CO_2 ; (e) Fração molar de H_2O ; (f) Temperatura..... 95

Figura 5.18: Perfis na chama de etanol de: (a) Temperatura; (b) Fração molar de CH_4 ; (c) Fração molar de O_2 ; (d) Fração molar de N_2 ; (e) Fração molar de CO_2 ; (f) Fração molar de H_2O ; (g) Fração de Mistura (posição da chama); (h) Velocidade axial (linhas de corrente). 97

Figura 5.19: Comparativo entre o escoamento regular de etanol e com variações ao longo do eixo axial. (a) Frações molares e (b) Temperatura com aumento de velocidade do combustível; (c) Frações molares e (d) Temperatura com aumento de velocidade do oxidante; (e) Frações molares e (f) Temperatura com aumento de velocidade das duas correntes..... 99

Figura 5.20: Comparativo entre o escoamento regular de etanol e com variações ao longo do eixo axial. (a) Frações molares e (b) Temperatura com aumento da temperatura de admissão do combustível; (c) Frações molares e (d) Temperatura com da temperatura de admissão do oxidante; (e) Frações molares e (f) Temperatura com aumento da temperatura de admissão das duas correntes..... 101

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Fator pré-exponencial
B	Termo fonte da equação
c_p	Calor específico à pressão constante em unidade mássica
\bar{d}	Coefficiente do algoritmo SIMPLEC
D	Termo difusivo
D	Coefficiente de difusão
e	Energia interna específica
E	Energia de ativação
f	Função de acoplamento
\mathbf{f}	Força de corpo
F	Combustível
g	Componente da aceleração gravitacional
h	Entalpia específica
J	Jacobiano da transformação
L	Comprimento
M	Massa/ Número de pontos da malha na direção axial
\dot{M}	Fluxo de massa
n	Ordem de reação
N	Componente inerte/ Número de pontos da malha na direção radial
P	Pressão/ Produto
Q	Taxa de calor gerado por unidade mássica de combustível
r	Distância radial

R	Constante universal dos gases; Raio
s	Coefficiente estequiométrico mássico
S	Termo fonte
t	Tempo
T	Temperatura
u	Velocidade axial
U	Velocidade na direção transformada
v	Velocidade radial
\mathbf{v}	Vetor velocidade
V	Velocidade na direção transformada/ Volume
\mathbf{V}	Vetor velocidade de difusão mássica
W	Massa molecular
\bar{W}	Massa molecular média
x	Distância axial
Y	Fração mássica
Z	Fração de mistura

Letras Gregas

α	Métrica da transformação/ Coeficiente de refinamento de malha
$\bar{\alpha}$	Coeficiente de interpolação
β	Coeficiente de refinamento de malha
$\bar{\beta}$	Coeficiente de interpolação
Γ	Coeficiente de transporte
Δ	Varição
δ	Erro

η	Direção transformada
λ	Condutividade térmica
μ	Viscosidade dinâmica
ν	Número de mols
ξ	Direção transformada
ρ	Massa específica
τ	Tempo característico/ Coeficiente de refinamento de malha
$\boldsymbol{\tau}$	Tensor de tensões
ϕ	Escalar conservado
ω	Taxa de reação em unidade mássica

Sobrescritos

0	Estado de referência
t	Instante de tempo
ϕ	Escalar conservado
*	Valor estimado no algoritmo SIMPEC
'	Correção no algoritmo SIMPLEC

Subscritos

0	Instante de tempo inicial
a	Ar
A_∞	Entrada de ar
k	Espécie química
f	Frente de chama
e	Face leste

<i>E</i>	Ponto leste
<i>F</i>	Combustível
F_{∞}	Entrada de combustível
<i>M</i>	Mistura
<i>n</i>	Face norte
<i>N</i>	Ponto norte
<i>nb</i>	Faces vizinhas
<i>NB</i>	Pontos vizinhos
<i>O</i>	Oxidante
<i>P</i>	Ponto central
<i>s</i>	Face sul
<i>S</i>	Ponto sul
<i>x</i>	Direção axial
<i>w</i>	Face oeste
<i>W</i>	Ponto oeste

Capítulo 1 - Introdução

A crescente demanda por processos de combustão mais eficientes e cujas emissões contenham a menor quantidade de poluentes possível, bem como o aumento do consumo de fontes de energia não renováveis, fomentam a busca pela maior compreensão dos processos envolvidos nos sistemas reativos. Isso porque o uso de sistemas reativos como fonte de energia térmica para um processo ou outros sistemas, tais como turbinas a gás, motores Otto e Diesel, e motores à combustão externa, como caldeiras, são aplicações muito comuns.

As opções de combustíveis para o uso nos sistemas reativos, até alguns anos atrás, eram praticamente restritas aos derivados de petróleo. Porém, o petróleo não é facilmente encontrado na natureza e possui disponibilidade limitada, uma vez que sua formação demanda condições muito específicas, além de tempo. Apesar disso, o uso de hidrocarbonetos, em especial, os derivados de petróleo, como fonte de energia deve perdurar por muitos anos, principalmente nos sistemas móveis (automóveis, aviões, navios, etc.), que demandam maiores potência e longos períodos de operação. Isso porque fontes de energia alternativas aos hidrocarbonetos ainda se encontram em um estágio de desenvolvimento que impede a consideração das mesmas, efetivamente, como substitutas dos hidrocarbonetos. Essa comparação pode ser realizada por meio da Fig. 1.1, que mostra como um motor a combustão e o poder calorífico dos hidrocarbonetos melhor se posicionam frente às baterias e células combustíveis em termos de densidade de energia e potência. Ou seja, a queima de combustíveis a base de hidrocarbonetos líquidos é, ainda, uma importante estratégia para a produção de alto torque e potência por sua alta densidade de energia.

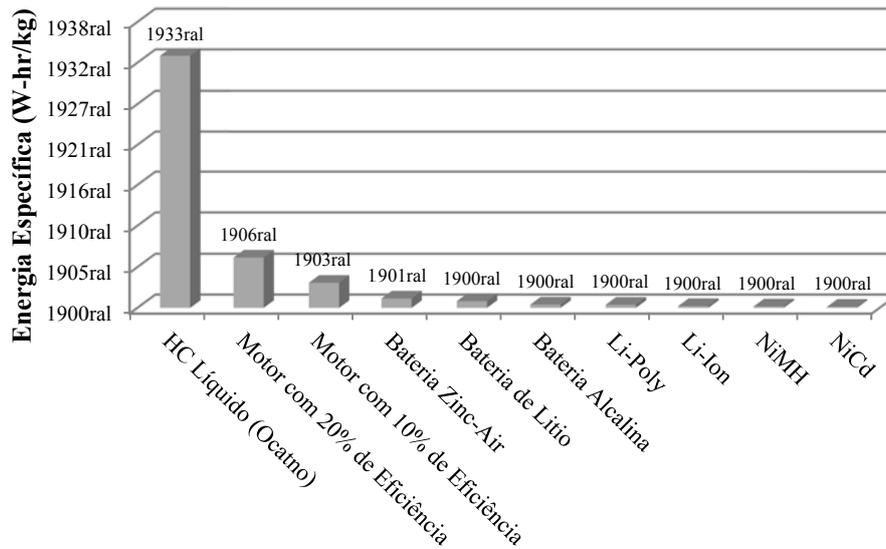


Figura 1.1: Energia em algumas fontes de energia. Adaptado de (WALTHER e AHN, 2006)

A busca por hidrocarbonetos alternativos aos derivados de petróleo, principalmente os renováveis — de disponibilidade limitada apenas pela taxa de produção de suas matérias primas —, tem sido uma constante desde meados do século XX. No Brasil, desde a década de 1970, o etanol derivado da cana de açúcar é considerado o principal substituto dos combustíveis derivados de petróleo. As principais razões para o uso do etanol são o custo do combustível e efeitos ambientais; como combustível renovável, o etanol qualifica-se em programas de conservação de recursos naturais (U.S. DEPARTMENT OF ENERGY, 1999). O interesse na redução das emissões nos processos de combustão também atrai interesse para o etanol, pois se acredita que o uso de combustíveis oxigenados ou aditivos oxigenados afetam diretamente na redução dos óxidos de nitrogênio (NO_x) reduzindo a temperatura máxima atingida pela chama e também auxilia na oxidação de monóxido de carbono e na redução da formação de fuligem, favorecendo as rotas de oxidação em detrimento às rotas de pirólise (SAXENA, 2007). No entanto, pesquisas ainda devem ser realizadas para a melhor compreensão dos processos envolvidos na queima desse combustível; tanto experimental — por meio de medições —, quanto teoricamente.

O desenvolvimento de técnicas de medição não intrusivas tornou possível a investigação dos fenômenos existentes no processo de combustão de maneira que o sistema seja o menos perturbado possível; uma das desvantagens de técnicas tradicionais de medição (MITCHELL, 1975). No entanto, essas são, em geral, mais custosas financeiramente e demandam mais tempo, além não serem adequadas ao uso em instalações em maiores escalas e requererem considerável trabalho para o projeto dos equipamentos, pós-processamento das imagens e para a análise dos resultados. Ainda assim, o detalhamento das informações obtidas dos experimentos tem grande relevância para a validação de modelos físicos e fornecem valiosas informações para o desenvolvimento de sistemas de maior complexidade. Os experimentos associados à simulação computacional permitem o desenvolvimento de novos sistemas combustíveis, mais complexos, eficientes e menos poluentes, além da melhor compreensão e desenvolvimento dos atuais.

A técnica da fluidodinâmica computacional (CFD, sigla em inglês para *Computational Fluid Dynamics*), por outro lado, pode fornecer informações detalhadas das características dos escoamentos reativos para a melhor compreensão dos fenômenos complexos envolvidos na combustão e permite que avaliações quantitativas sejam realizadas. A contínua evolução na capacidade de memória e processamento dos computadores digitais e o desenvolvimento de algoritmos e ambientes de pós-processamento mais eficientes permitiram que fosse possível a obtenção de simulações computacionais detalhadas de escoamentos reativos, em chamas laminares ou turbulentas, possibilitando a avaliação de sua estrutura e dinâmica.

1.1. Objetivo

O presente trabalho tem como objetivo a realização da análise de um escoamento laminar, confinado, axissimétrico e com propriedades variáveis no qual ocorre o processo de combustão difusiva de um biocombustível. A solução para os campos de velocidade, pressão, temperatura e espécies do escoamento reativo é 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 é 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 efetuadas utilizam o metano e o etanol como combustível. Os resultados do modelo são comparados com dados experimentais obtidos a partir da queima de metano. Apesar do sofisticado mecanismo de reação do etanol, o presente texto tem foco apenas na análise de características gerais do uso de etanol como combustível em um combustor co-corrente equivalente aos empregados na queima de metano (MITCHELL *et al.*, 1980).

O sistema físico analisado consiste de um escoamento formado a partir da mistura, e conseqüente reação química, de duas correntes forçadas em um duto cilíndrico. A configuração utilizada para o modelo é equivalente à utilizada por (MITCHELL *et al.*, 1980), e é apresentada na Fig. 1.2. Maiores detalhes sobre o sistema, incluindo as características do modelo, são apresentados no Cap. 5.

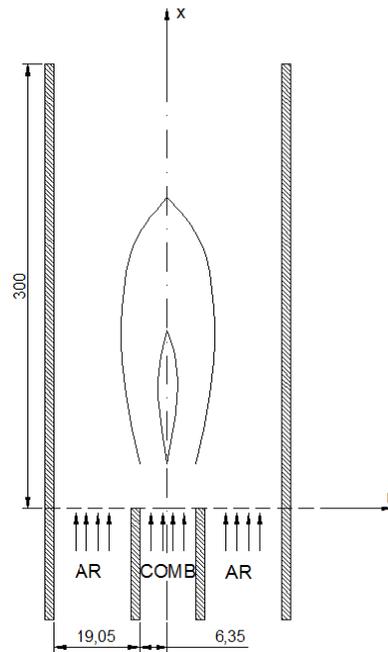


Figura 1.2: Esquema do sistema analisado.

O modelo tem como motivação queimadores industriais tais como os apresentados na Fig. 1.3.



Figura 1.3: Queimadores industriais. (a) Visualização externa; (b) Ilustração do funcionamento. (ECLIPSE, 2012)

Com os resultados obtidos no trabalho pretende-se colaborar, por meio da análise da combustão, com a redução de consumo de combustível, redução de emissões, compreensão física dos processos envolvidos na combustão de biocombustíveis, melhoria na predição dos campos de temperatura, com impacto no projeto mecânico de equipamentos, segurança e prevenção de acidentes.

O presente trabalho foi realizado com suporte da ANP por meio do PRH-37.

1.2. Revisão de Literatura

A presente seção apresenta uma breve revisão dos trabalhos disponíveis na literatura que contextualizam e fundamentam o presente trabalho.

1.2.1. Chamas Difusivas Laminares

As chamas difusivas ocupam posição destacada nas aplicações práticas, já que grande parte dos sistemas combustores utiliza esse tipo de chama, também denominadas não pré-misturadas (WILLIAMS, 1965), na presença de escoamentos turbulentos.

O termo chama difusiva foi introduzido no artigo de BURKE e SCHUMANN (1928) para chamas em que combustível e oxidante estão inicialmente separados, misturando-se na região onde ocorre a combustão, formando uma superfície de chama. O fenômeno de combustão nas chamas difusivas é predominantemente controlado pela difusão e outros fenômenos de mistura (GLASSMAN e YETTER, 2008). Essa característica as distingue das chamas pré-misturadas, nas quais combustível e oxidante são previamente misturados antes da ignição, e em que o desenvolvimento da combustão é majoritariamente controlado pela cinética química ou controlado tanto pela cinética quanto pela mistura (LAW, 2006). Elas 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). Dessa maneira, a compreensão das chamas difusivas laminares pode também ser considerada um requisito para a modelagem correta das chamas difusivas turbulentas.

As últimas décadas foram marcadas pelo desenvolvimento de muitos trabalhos dedicados ao estudo desse tipo de chama. Nas próximas seções é apresentada uma breve revisão dos mesmos.

1.2.2. Primeiros Esforços para a Análise de Chamas Difusivas Laminares

BURKE e SCHUMANN (1928) apresentaram a primeira análise de um problema de chama difusiva laminar. O modelo clássico de Burke-Schumann consiste em uma chama difusiva cilíndrica formada por dois escoamentos concêntricos; um interno, de combustível, proveniente de um orifício de pequeno diâmetro, e outro, externo, de ar, com mesma velocidade, mas de diâmetro maior.

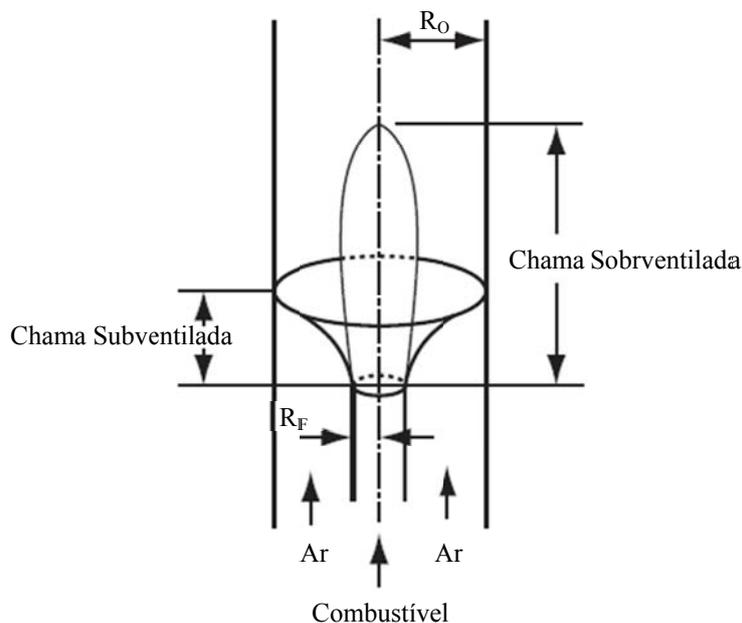


Figura 1.4: Representação do problema de Burke-Schumann. Adaptado de GLASSMAN e YETTER (2008).

A Fig. 1.4 ilustra o problema de Burke-Schumann para os casos de chama sobre e subventilada. A abordagem por eles realizada utilizou uma equação de conservação unidimensional obtida por meio de uma série de simplificações. Esse modelo foi

testado exaustivamente em chamas laminares cilíndricas (CHUNG e LAW, 1984). O mesmo forneceu previsões razoáveis sobre o tamanho, forma e influência das variáveis no comprimento da chama (KUO, 2005).

Os bons resultados obtidos por Burke e Schumann levaram vários outros pesquisadores a aplicarem uma abordagem similar a outros tipos de chamas. WOHL *et al.* (1949) e HOTTEL e HAWTHORNE (1949), independentemente, aplicaram essa análise a chamas difusivas não confinadas. 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). BROWNE e POWELL (1957), POWELL e BROWNE (1957), e CLARKE (1967) também analisaram o conceito de chama fina, proposto por Burke e Schumann. Eles concluíram que o modelo físico-químico descrevia adequadamente o comportamento geral de chamas difusivas. GOLDBURG e CHENG (1965) trataram o problema fluidodinâmico de maneira mais detalhada que os anteriores. Os trabalhos desenvolvidos por outros pesquisadores objetivaram o refinamento das hipóteses utilizadas na análise da chama fina realizada por Burke e Schumann. Alguns outros trabalhos representativos foram apresentados por GOSMAN *et al.* (1969) e ROPER (1977).

1.2.3. Chamas Laminares Utilizando Metano

O metano, em função de sua simplicidade estrutural — se comparado a outros hidrocarbonetos ou compostos orgânicos — além de sua disponibilidade no estado gasoso nas condições padrão, é o combustível mais amplamente utilizado para a análise de escoamentos reativos (TURNS, 2000). Consequentemente, é aquele cuja cinética química é também a melhor compreendida dentre os hidrocarbonetos (TURNS, 2000). Entretanto, apesar de se tratar do hidrocarboneto mais simples, um dos mecanismos de reação mais completos utilizados nas pesquisas (GRI-Mech 3.0) envolve 325 reações químicas elementares e expressões para as taxas de reação, e parâmetros termoquímicos para 53 espécies químicas nelas envolvidas (SERAUSKAS, 2000).

O uso de mecanismos de reação mais sofisticados é importante quando se pretende analisar a formação de compostos intermediários ou certos poluentes. Para os casos em que são desejadas informações mais gerais, como por exemplo, uma estimativa do campo de temperatura, da posição e altura da chama, e das frações molares de compostos presentes na combustão completa do hidrocarboneto, o uso de mecanismos mais simples pode ser considerado satisfatório, dependendo do nível de precisão que o projeto demande.

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. Dentre esses, está o de MITCHELL *et al.* (1980), que obtiveram resultados experimentais para uma chama confinada de metano e os compararam à solução numérica de um escoamento reativo representativo do mesmo. Esses resultados numéricos e experimentais foram utilizados posteriormente para a validação de resultados numéricos obtidos para o mesmo caso em diferentes análises.

O experimento realizado por MITCHELL *et al.* (1980) era composto por um tubo cilíndrico no qual combustível e oxidante, foram forçadas de modo co-corrente, e ao se misturarem, reagem, entrando em combustão, conforme apresentado na Fig. 1.5. O queimador consistia de dois tubos concêntricos de latão de raio 0,635 e 2,54 cm. O perfil de velocidade das duas correntes na entrada foi mantido uniforme por meio de telas distribuídas no interior dos tubos que conduziam as mesmas ao queimador. Na região de entrada foi também colocada uma chapa de latão perfurada, de modo a assegurar que os dois escoamentos fossem paralelos e com perfil uniforme de temperatura. Um cilindro de vidro temperado foi usado para produzir a chama confinada e definir as condições de contorno do sistema.

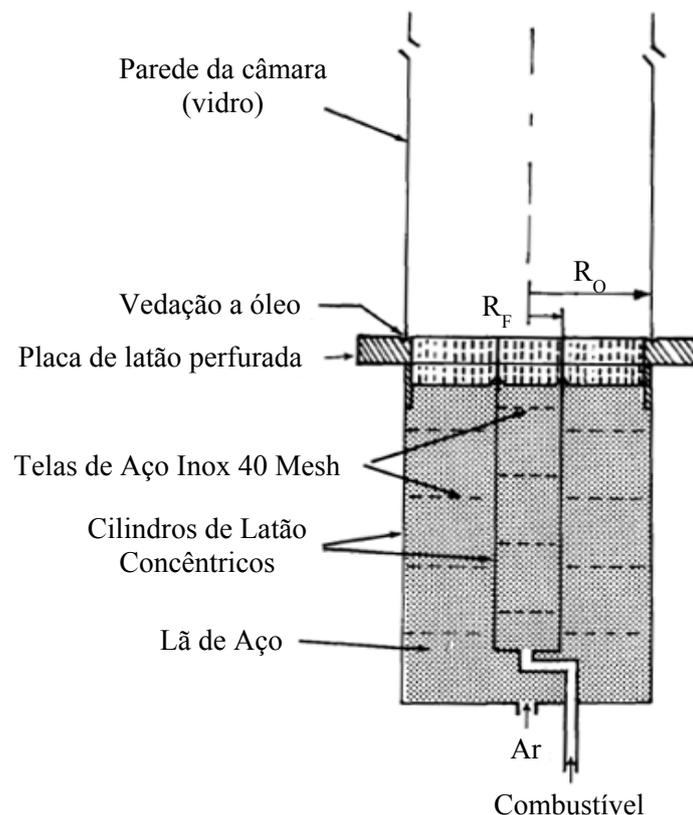


Figura 1.5: Esquema do queimador. Adaptado de MITCHELL *et al.* (1980).

Metano com 98% de pureza e ar comprimido alimentavam o queimador através de suas respectivas linhas. Orifícios críticos controlavam as vazões de metano a 5,7

cm³/s e ar a 187,7 cm³/s, respectivamente. Após a ignição, uma chama difusiva de metano de forma e altura definidas era produzida no sistema. Os perfis de temperatura e concentração de espécies químicas consideradas importantes pelos autores foram medidos em três diferentes alturas acima da placa de latão. As medições de temperatura foram realizadas utilizando termopares e correções devidas à condução de calor e radiação foram realizadas de modo a determinar as temperaturas locais da mistura gasosa. Amostras foram retiradas do queimador e analisadas por cromatografia. As velocidades foram determinadas por meio de anemometria por laser Doppler. Detalhes do experimento foram descritas em detalhes por MITCHELL *et al.* (1980).

O modelo numérico apresentado por MITCHELL *et al.* (1980) considerou um escoamento bidimensional e forneceu a representação completa da velocidade, temperatura e dos campos de concentração molares estabelecidos pelas chamas difusivas laminares. Para tanto, foi empregado o conceito de chama fina de BURKE e SCHUMANN (1928) para o cálculo de uma chama cilíndrica axissimétrica laminar confinada. Foram incluídos efeitos convectivos e difusivos em ambas as direções coordenadas e variação de propriedades termofísicas. As equações de conservação, transformadas por meio da formulação vorticidade e função corrente, foram resolvidas numericamente utilizando-se a técnica de diferenças finitas. Os resultados numéricos mostraram-se relativamente precisos com relação aos dados obtidos experimentalmente e o modelo se mostrou útil em estimativas prévias da variação de vazão dos reagentes, razão de equivalência, preaquecimento dos reagentes, escoamento, e do diâmetro dos combustores em chamas difusivas laminares confinadas.

GORDON *et al.* (1994) apresentaram um estudo no qual são analisados as alturas de chamas produzidas em sistemas nos quais os perfis de entrada de combustível e oxidante apresentam-se plenamente desenvolvidos ou uniforme. Para tanto, foram

comparados os resultados experimentais obtidos nos experimentos de MITCHELL *et al.* (1980), SATIO *et al.* (1986) e SHUNG *et al.* (1980). Nesse trabalho foi mostrado, com base na comparação dos resultados experimentais, que a altura da chama é independente do perfil de entrada. Além disso, esse trabalho consolidou os resultados experimentais comparados como referência para trabalhos futuros.

KEYES e SMOOKE (1987) apresentaram a utilização do modelo de chama fina como estimativa inicial para dois problemas de chamas difusivas contracorrente — uma no arranjo de dois jatos e outra, no arranjo de TSUJI (1982) (Fig. 1.6) — nos quais se considerou um mecanismo de reação composto por 46 reações elementares. As equações de conservação de quantidade de movimento foram resolvidas utilizando-se a aproximação de camada-limite. Essa mesma metodologia foi empregada por SMOOKE *et al.* (1989) para a solução de uma chama co-corrente. O modelo de chama fina foi utilizado como estimativa inicial para a solução do escoamento reativo com taxa de reação finita e contemplou o mesmo mecanismo de reação utilizado por KEYES e SMOOKE (1987). As equações de conservação de quantidade de movimento foram abordadas através da substituição das variáveis primitivas pela vorticidade e função corrente e o sistema de equações algébricas, obtido pela discretização das equações de conservação por meio do método das diferenças finitas, resolvido utilizando-se o método de Newton em uma malha adaptativa. Resultados numéricos foram obtidos tanto para uma chama não confinada quanto para o caso de uma chama confinada. Os resultados para a chama confinada foram comparados com os resultados apresentados previamente por MITCHELL *et al.* (1980) e, tanto os resultados utilizando o modelo de chama-fina, quanto aqueles nos quais se considerou o mecanismo de reação com 46 reações elementares apresentaram resultados satisfatórios em comparação com os dados experimentais comparados.

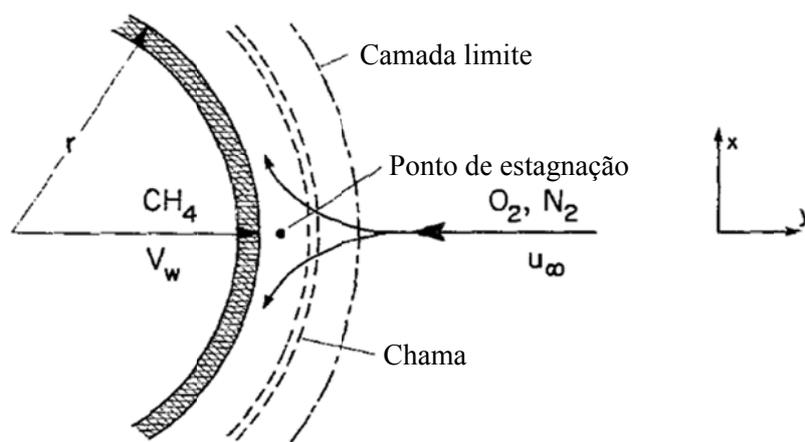


Figura 1.6: Queimador Tsuji. Adaptado de KEYES e SMOOKE (1987).

Um estudo subsequente apresentado por SMOOKE *et al.* (1990) apresentou novos resultados experimentais e utilizou um novo mecanismo de reação composto por 79 reações elementares e 26 espécies químicas. Os resultados do estudo incluíram a descrição detalhada da interação entre o escoamento e as reações químicas a ele associadas. Trabalhos equivalentes, utilizando a mesma metodologia e com pequenas variações no mecanismo de reação, foram apresentados analisando os resultados já obtidos com foco em diferentes compostos e seus efeitos na chama, como por exemplo, os apresentados por SMOOKE e GIOVANGIGLI (1992), SMOOKE *et al.* (1992) e NORTON *et al.* (1993).

Até o início da década de 1990, a abordagem utilizada na solução numérica das equações de conservação limitava-se ao uso da formulação por meio da substituição das mesmas pelas variáveis vorticidade e função corrente. Essa transformação das equações de conservação é utilizada com o intuito de eliminar a variável pressão da equação de conservação de quantidade de movimento. No entanto, além de acarretar em condições de contorno de mais difícil implementação — em função de as condições de contorno serem dadas, fisicamente, por meio de variáveis primitivas —, essa abordagem restringe a solução do problema ao caso bidimensional, devido a inexistência da formulação vorticidade e função-corrente para o caso tridimensional (PLETCHER *et al.*, 1997).

As restrições impostas pela formulação vorticidade e função corrente levaram XU e SMOOKE (1993) a apresentar 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.

As soluções numéricas das equações de conservação para a descrição dos escoamentos reativos de chamas difusivas laminares axissimétricas, como mencionado, eram obtidas por meio de abordagens de variáveis primitivas e vorticidade e função corrente. No entanto, para a obtenção das soluções por meio de variáveis primitivas, a discretização do domínio era realizada utilizando malhas denominadas segregadas

(ERN *et al.*, 1994). Essa abordagem, mostrada em detalhes por PATANKAR (1980), utiliza duas malhas para a solução do escoamento; uma para as velocidades, e outra, para a pressão e outros escalares. Como uma alternativa às duas metodologias, ERN *et al.* (1994) empregaram uma formulação relativamente nova à época denominada velocidade-vorticidade. Através dessa formulação a pressão é eliminada por meio da substituição da equação da continuidade e de conservação de quantidade de movimento por equações de segunda ordem utilizando a definição de vorticidade. As equações de conservação em regime permanente foram resolvidas utilizando o método de diferenças finitas por meio de computação paralela. Os coeficientes de transporte foram considerados através de modelos mais complexos e um mecanismo de reação contemplando 46 reações elementares e 16 espécies químicas. Os resultados numéricos obtidos foram comparados tanto com resultados numéricos quanto com resultados experimentais (SMOOKE *et al.*, 1990) e apresentaram boa aproximação. O desempenho do algoritmo utilizando código sequencial e paralelo foi comparado, apresentando, o código paralelizado, um ganho de tempo de cerca de 20 vezes, com relação ao código sequencial, utilizando seis processadores simultaneamente.

Partindo da hipótese de que nos escoamentos caracterizados por números de Peclet superiores a 50 os efeitos de difusão de calor e de espécies na direção axial podem ser desprezados, TAKAGI *et al.* (1994) apresentaram a solução numérica do escoamento reativo axissimétrico confinado baseado no experimento de ISHIZUKA e SAKAI (1986). Foi considerada difusão multicomponente e cinética química detalhada, esta última, por meio de 29 reações elementares. Mostrou-se que a difusão preferencial de calor e espécies causa uma considerável quantidade de excesso e déficit de entalpia, além de um aumento e redução da fração molar de H₂ na chama. Esses efeitos resultam em uma maior temperatura da chama que a temperatura máxima adiabática do

combustível na região a montante, e significativa redução de temperatura, próximo ao topo da chama.

A influência da difusão de energia na forma de calor na estrutura das chamas laminares pré-misturadas de metano e ar, e hidrogênio e ar, foi analisada numericamente por ERN e GIOVANGIGLI (1998) através da aplicação de um modelo detalhado para os coeficientes de transporte obtido por meio de algoritmos derivados da teoria cinética dos gases e de metodologia equivalente à utilizada anteriormente pelos autores (ERN *et al.*, 1994). Os resultados mostraram que a difusividade térmica apresenta maior influência nas chamas pré-misturadas do que em chamas controladas pela difusão.

A solução para o mesmo sistema apresentado por MITCHELL *et al.* (1980) foi obtida por meio do método dos volumes finitos em uma malha não-estruturada por RIEDEL (1998). A formulação combinava conceitos de compressibilidade artificial e semi-discretização. Os coeficientes de transporte foram considerados utilizando as propriedades médias da mistura. As equações, em variáveis primitivas foram discretizadas utilizando elementos triangulares e o regime transiente, por meio do esquema implícito. O mesmo mecanismo de reação considerado por SMOOKE *et al.* (1989) foi empregado, sendo apresentados, somente, os perfis de temperatura e concentração de hidrogênio; não tendo sido comparados, os mesmos, com os resultados experimentais.

WALSH *et al.* (1998) realizaram a análise de uma chama laminar confinada (SMOKE *et al.*, 1990) experimental e numericamente. A metodologia para a solução numérica foi a mesma adotada por ERN *et al.* (1994). O mecanismo de reação foi considerado por meio do GRI-Mech 2.11 (SERAUSKAS, 2000) e os resultados numéricos mostraram boa representatividade com relação aos experimentais para as espécies (*CH* e *OH*) em estado não excitado, diferentemente dos resultados numéricos

para as espécies quimicamente excitadas (CH^* e OH^*), cujo resultado não se mostrou adequado. As espécies em estado quimicamente excitado foram analisadas em outro trabalho, apresentado por LUQUE *et al.* (2000). No mesmo, a chama axissimétrica foi modelada por meio de um mecanismo detalhado, considerando, além disso, transferência de calor por radiação, e processos de transferência de energia colisionais de modo a produzir e remover as espécies em estado excitado. Os resultados se mostraram mais adequados que os anteriores, prevendo a concentração das espécies com erro entre duas a quatro vezes o valor experimental; menor que o fator de seis, encontrado no trabalho anterior (WALSH *et al.*, 1998).

BECKER *et al.* (1999) apresentaram a solução do escoamento reativo utilizando o método de elementos finitos em uma malha adaptativa incluindo controle de erros das quantidades físicas de interesse. O modelo de chama fina foi utilizado, visto que o objetivo principal do trabalho era o de apresentar a robustez do método empregado para a simulação de um escoamento reativo laminar confinado.

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

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.

UYGUR *et al.* (2006) estenderam a análise de TARHAN e SELÇUK (2003). Ao código paralelo desenvolvido inicialmente foi incorporada, além das hipóteses de propriedades termodinâmicas e coeficientes de transporte variáveis, obtidas através de relações mais sofisticadas, a consideração de transferência de calor por radiação. Em razão do uso desse mecanismo, que aumenta a complexidade do método de solução, foi utilizada uma reação em passo único. Os resultados numéricos apresentaram sensível melhora com relação aos resultados anteriores (TARHAN e SELÇUK, 2003), especialmente com relação ao campo de temperatura, obtido experimentalmente por MITCHELL *et al.* (1980).

DARBANDI e BANAEIZADEH (2006) utilizaram o método dos volumes finitos baseados em elementos — anteriormente denominado como elementos finitos baseados no volume de controle (MALISKA, 2004) — 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

consideradas variáveis primitivas em um 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.

Uma análise numérica e experimental detalhada da estrutura de uma chama axissimétrica forçada periodicamente (20 Hz) foi realizada por DWORKIN *et al.* (2007). Os resultados experimentais, obtidos por meio de diversas técnicas de medição, foram comparados com os resultados de uma simulação computacional do sistema no regime transiente. As equações de conservação foram abordadas por meio da formulação vorticidade-velocidade, e as reações químicas consideradas por meio de um mecanismo composto por 46 reações reversíveis elementares e 16 espécies químicas. Os efeitos Soret e Dufour foram desconsiderados; já a velocidade de difusão de espécies, os termos de dissipação viscosa e as propriedades de transporte e termodinâmicas, foram considerados por meio de modelos detalhados, além do fluxo de radiação térmica, que também foi considerado. Os resultados computacionais foram comparados qualitativamente com os resultados do experimento no regime permanente apresentando boa aproximação, assim como a estrutura da chama durante o regime transiente.

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 composto 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 foram 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.

1.2.4. Chamas Difusivas Laminares de Etanol

O mecanismo de reação envolvido na queima do metano é, talvez, o mais simples encontrado entre os hidrocarbonetos TURNES (2000). Com isso, o número de reações elementares necessárias para a representação computacional de uma chama de metano é relativamente pequena, uma vez que os compostos envolvidos nas reações, em geral, não compreendem hidrocarbonetos.

Em comparação com o metano os mecanismos de reação propostos para a queima do etanol apresentam maior complexidade — contendo até milhares de reações elementares (PETROVA e WILLIAMS, 2006) —, sendo, até mesmo o metano, um composto intermediário da combustão do etanol (SMITH e GORDON, 1956). Devido a esse fato, desde o trabalho de SMITH e GORDON (1956), no qual foram analisadas 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. Em função da limitação de capacidade dos computadores, é necessário o uso de mecanismos de reação que não sejam tão extensos, principalmente em simulações de combustão turbulenta, ou até mesmo em aplicações mais simples (PETROVA e WILLIAMS, 2006). Outro ponto negativo reside na incerteza associada aos valores de cada taxa de

reação, para as quais há um maior acúmulo de incertezas nas predições nos mecanismos maiores com relação aos mecanismos mais simples (PETROVA e WILLIAMS, 2006). Apesar disso, as vantagens associadas aos mecanismos que contemplam mais reações são evidentes — consideração de efeitos e espécies intermediárias, melhor representação da cinética química —, de modo que tanto mecanismos mais complexos quanto reduzidos têm sua importância nos sistemas reativos.

Poucos trabalhos que tratam de chamas difusivas de etanol são encontrados na literatura. Um trabalho experimental, no qual foram confrontados os resultados de um modelo de formação de carbono em chamas difusivas co-correntes de etanol com resultados de um experimento, foi apresentado por LIEB e ROBLEE (1970). No entanto, a análise também se restringiu ao modelo de formação de carvão, e ao mecanismo de reação sugerido.

LYU e CHEN (1991) utilizaram etanol como combustível na solução de uma chama difusiva não confinada obtida pela vaporização do combustível nas paredes de um cilindro e em uma placa plana; ambos verticais e capilares. A solução, obtida por meio de aproximação de camada limite, utilizou escalares conservados e a consideração de equilíbrio parcial para contemplar as reações químicas. As propriedades foram admitidas variáveis com a temperatura. No entanto, o uso de etanol justificou-se apenas em função da complexidade obtida pela consideração do combustível e oxidante originalmente empregados nesse tipo de sistema: lítio líquido (Li) e hexafluoreto de enxofre (SF₆), respectivamente.

SAXENA e WILLIAMS (2007) apresentaram um mecanismo de reação composto por 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

envolvendo três átomos de carbono. Foram comparados com a solução numérica os resultados experimentais de uma chama de etanol e ar em 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. Os resultados obtidos na simulação apresentaram boa aproximação com os resultados experimentais, justificados, principalmente, pelas medições da água com boa precisão.

Estudos experimentais e numéricos foram conduzidos por SEISER *et al.* (2007) para a avaliação da extinção e autoignição de chamas de etanol em escoamentos laminares não uniformes na configuração contracorrente. Os resultados numéricos foram obtidos com o uso do pacote comercial FlameMaster, utilizando um mecanismo de reação detalhado (SAXENA e WILLIAMS, 2007) nas condições equivalentes às do experimento. Os valores das condições críticas de extinção obtidos numericamente representaram com boa aproximação os resultados experimentais.

Uma chama difusiva de etanol co-corrente confinada em um microssistema de geração de energia foi analisada experimentalmente por GAN e YANG (2009). Estudo similar foi também realizado por CHEN *et al.* (2009). Características da chama, como altura e largura, foram analisadas. Foi observado que, em combustão em pequenas escalas a altura da chama é função do número de Reynolds. Já a largura da chama está relacionada com o número de Reynolds ou com o número de Froude, e que esse tipo de chama tem forte influência do empuxo. Além disso, tanto chamas difusivas de combustíveis líquidos quanto de combustíveis gasosos possuem mecanismos físicos similares para o regime permanente. No entanto, ambos os estudos se restringiram à análise puramente experimental, gerando conclusões, em geral, qualitativas. Outros

trabalhos que seguiram esse tipo de análise foram os de PARAG e RAGHAVAN (2009), YANG *et al.* (2008) e SEN *et al.* (2009).

DUBEY *et al.* (2011) utilizaram o pacote comercial FLUENT para simular uma chama em configuração contracorrente e verificar a validade de um modelo de cinética proposto que utilizava uma equação global. Foram utilizadas considerações 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.

Capítulo 2 - Modelo Matemático

Os escoamentos reativos em sistemas multicomponentes são governados por quatro leis de conservação: conservação de massa, conservação de espécies, conservação de quantidade de movimento e conservação de energia. Essas leis são representadas matematicamente através da equação da continuidade, equação de conservação de espécies, equação de conservação de quantidade de movimento e equação de conservação de energia. Adicionando a esse conjunto a equação de estado, o modelo matemático constitui-se de um número suficiente de equações para descrever o movimento do fluido em um sistema reativo multicomponente (KUO, 2005).

O sistema de equações de conservação é formulado utilizando as componentes do vetor velocidade, pressão, temperatura e frações mássicas das espécies envolvidas no sistema como incógnitas.

2.1. Equações de Conservação para Sistemas Multicomponentes

As equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e espécies para sistemas multicomponentes, dadas em BIRD *et al.* (2002) e WILLIAMS (1965), são descritas, respectivamente por,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla P - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \sum_{k=1}^N Y_k \mathbf{f}_k \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} e) = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k \mathbf{f}_k \cdot \mathbf{V}_k \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_k) = -\nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{V}_k) + \dot{\omega}_k \quad (2.4)$$

na forma vetorial. E uma equação de estado,

$$\rho = \frac{P\bar{W}}{RT} \quad (2.5)$$

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v) = 0 \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v u) = & -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \\ & + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{1}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \frac{\partial}{\partial r} (r v) \right] + \rho g \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v v) = & -\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \\ & + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\mu \frac{\partial}{\partial r} (r v) \right] - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \\ & - \frac{2 \mu v}{r^2} + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r v) + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r} \frac{\partial u}{\partial x} \end{aligned} \quad (2.8)$$

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

2.2. Formulação de Shvab-Zeldovich

SHVAB (1948) e ZELDOVICH (1949) desenvolveram uma abordagem para expressar as equações de conservação de energia e espécies químicas em uma forma

equivalente (WILLIAMS, 1965). Essa formulação permite remover os termos-fonte associados à reação química das equações de conservação considerando-se uma combinação linear das variáveis dependentes, em um procedimento denominado formulação de Shvab-Zeldovich (KUO, 2005). Na mesma considera-se que alguns efeitos presentes nas equações de conservação não são relevantes em alguns sistemas reativos, podendo, dessa forma, ser omitidos. Esses efeitos incluem:

- Forças de corpo;
- Efeito Soret e Dufour;
- Difusão do gradiente de pressão;
- Viscosidade volumétrica;
- Fluxo de calor devido à radiação.

Assim, a equação da energia reduz-se, então, a

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} h) = -\nabla \cdot \left(\lambda \nabla T + \rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k \mathbf{V}_k \right) \quad (2.9)$$

uma vez que o vetor fluxo de calor (\mathbf{q}), em um sistema multicomponente, é dado por (WILLIAMS, 1965)

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k \mathbf{V}_k + RT \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \left(\frac{X_l \alpha_k}{W_k D} \right) (\mathbf{V}_k - \mathbf{V}_l) + \mathbf{q}_{rad} \quad (2.10)$$

Considerando a transferência de massa regida pela Lei de Fick (WILLIAMS, 1965), a velocidade de difusão mássica pode ser escrita como

$$\mathbf{V}_k = -D \nabla \ln Y_k \quad (2.11)$$

a entalpia pode ser descrita por

$$h_k = h_{f_k}^0 + \int_{T_0}^T c_{p_k} dT \quad (2.12)$$

e a conservação de espécies por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \nabla \cdot [\rho Y_k (\mathbf{v} + \mathbf{V}_k)] = \dot{\omega}_k \quad (2.13)$$

Assim, equação de conservação de energia pode ser reescrita na forma,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \int_{T_0}^T c_p dT \right) + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{v} \int_{T_0}^T c_p dT \right) = \\ = \nabla \cdot \left[\rho \mathbf{D} \sum_{k=1}^N (\nabla Y_k) \int_{T_0}^T c_{p_k} dT + \rho \mathbf{D} \frac{\lambda}{\rho c_p \mathbf{D}} c_p \nabla T \right] - \sum_{k=1}^N h_{f_k}^0 \dot{\omega}_k \end{aligned} \quad (2.14)$$

Na Eq. (2.14) o termo

$$\frac{\lambda}{\rho c_p \mathbf{D}} = \text{Le} \quad (2.15)$$

é denominado número de Lewis, que relaciona a taxa de transporte de energia com a taxa de transporte de massa. Definindo $\text{Le} = 1$,

$$\text{Le} = \frac{\text{Sc}}{\text{Pr}} = \frac{\nu / \mathbf{D}}{\nu / \alpha} = 1 \quad (2.16)$$

ou seja, admitindo que a difusão de quantidade de movimento seja da mesma ordem de grandeza da difusão de espécies, e substituindo na Eq. (2.14), a relação

$$\nabla \int_{T_0}^T c_p dT = \sum_{k=1}^N (\nabla Y_k) \int_{T_0}^T c_{p_k} dT + c_p \nabla T \quad (2.17)$$

obtem-se a equação de Shvab-Zeldovich para a energia em regime transiente,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \int_{T_0}^T c_p dT \right) + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{v} \int_{T_0}^T c_p dT - \rho \mathbf{D} \nabla \int_{T_0}^T c_p dT \right) = - \sum_{k=1}^N h_{f_k}^0 \dot{\omega}_k \quad (2.18)$$

Já a equação de conservação de espécies transiente, assumindo a hipótese da Lei de Fick (2.11), é dada por,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_k - \rho \mathbf{D} \nabla Y_k) = \dot{\omega}_k \quad (2.19)$$

denominada equação de Shvab-Zeldovich para as espécies. As Eqs. (2.14) e (2.19) são escritas, respectivamente, em coordenadas cilíndricas axissimétricas como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \int_{T_0}^T c_p dT \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho r u \int_{T_0}^T c_p dT \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\rho r v \int_{T_0}^T c_p dT \right) = \\ = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial}{\partial x} \left(\int_{T_0}^T c_p dT \right) \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial}{\partial r} \left(\int_{T_0}^T c_p dT \right) \right] - \sum_{k=1}^N h_{f_k}^0 \dot{\omega}_k \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} (\rho r u Y_k) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r v Y_k) = \\ = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial}{\partial x} Y_k \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial}{\partial r} Y_k \right] + \dot{\omega}_k \end{aligned} \quad (2.21)$$

2.3. Modelo de Chama Fina

As reações químicas nos sistemas reativos podem ser representadas por meio de diferentes mecanismos. Ordenando as mesmas em ordem crescente de complexidade (KEE *et al.*, 2003), tem-se,

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

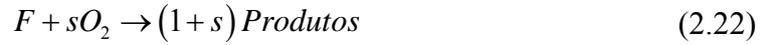
Os mecanismos apresentados podem ser divididos em dois grupos (KEE *et al.*, 2003). Ao primeiro grupo pertencem os modelos cujas reações são consideradas infinitamente rápidas (reações de química infinita) e o equilíbrio químico, hipóteses nas quais se admite que a taxa de mistura dos reagentes seja lenta em comparação com a taxa de reação química, e o sistema, denominado difusivo ou controlado pela mistura.

O segundo grupo é composto pelos processos controlados pela cinética, em que os processos físicos de mistura são rápidos se comparados ao tempo associado à reação química, nos quais há restrições devidas à taxa de reação química (hipóteses 3, 4 e 5). A hipótese de química infinita é válida se o sistema é controlado pela mistura (KEE *et al.*, 2003).

A proposta do modelo de chama fina foi idealizada por BURKE e SCHUMANN (1928) e utilizada posteriormente por diversos pesquisadores. Nesse modelo as reações químicas em uma chama difusiva laminar são descritas através de uma reação global irreversível de passo único, correspondendo a uma conversão infinitamente rápida dos reagentes em produtos estáveis. Essas reações entre combustível e oxidante ocorrem após a vaporização ou gasificação do combustível e mistura com o ar. Em geral, os reagentes estão separados ao entrar na câmara de combustão, e o tempo de reação é tão pequeno que os mesmos coexistem apenas em finas camadas de reação, ou chamas difusivas (LIÑÁN, 2002). Nessa região, a reação se processa em uma velocidade determinada pela taxa de geração de vapores de combustível — no caso de combustível na fase líquida ou sólida — e a taxa de mistura com o oxigênio do ar.

A queima de hidrocarbonetos em ar envolve dezenas de espécies químicas e centenas de reações químicas elementares (LIÑÁN, 2002). Embora o uso do mecanismo químico detalhado seja necessário, por exemplo, para a avaliação de poluentes como monóxido de carbono e óxidos de nitrogênio, muitos aspectos da combustão podem ser compreendidos considerando-se a reação química através de um passo único global, na qual reagentes são convertidos diretamente em produtos finais (LIÑÁN, 2002). A modelagem de processos de combustão por meio dessa descrição é conhecida como hipótese *mixed is burned* (KEE *et al.*, 2003). O combustível, F , reage

com o oxigênio do ar, O_2 , para gerar os produtos de acordo com a reação global irreversível,



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

A taxa de reação para a Eq. (2.22) é dada por meio de uma lei heurística cuja forma é equivalente a da Lei Ação das Massas — por não se tratar de uma reação elementar —, na qual se considera a constante específica k de taxa de reação através da Lei de Arrhenius (KUO, 2005) e que reproduz aproximadamente a taxa de reação global em uma faixa limitada de condições operacionais (LIÑÁN, 2002). Essa taxa de reação é dependente das frações mássicas de combustível e oxidante Y_F e Y_{O_2} , e da temperatura T , na forma (KUO, 2005, LIÑÁN, 2002),

$$\frac{dF}{dt} = \dot{\omega}_F = \frac{\dot{\omega}_{O_2}}{s} = -\frac{\dot{\omega}_{Produtos}}{1-s} = -\rho A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) Y_F^{n_F} Y_{O_2}^{n_O} \quad (2.23)$$

na qual $\dot{\omega}_k$ representa a taxa de produção (consumo) da espécie k por unidade 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.

As equações de conservação definidas nas Sec. 2.1 e 2.2 podem ser reescritas na forma adimensional. As grandezas de características para definição dos parâmetros adimensionais são dados por

- comprimento: R_o (raio do tubo externo);
- velocidade: u_a ;
- pressão: p_a ;
- temperaturas: T_b e T_0 ;

- peso molecular: W_a ;
- massa específica: ρ_a ;
- calor específico: c_{pa} ;
- viscosidade: μ_a ;
- condutividade térmica: λ_a ;
- difusividade: D_a .

Nas quais o subscrito a refere-se às propriedades do ar e T_b e T_0 representam as temperaturas da mistura queimada (temperatura da chama) e não queimada (temperatura do ar na entrada), respectivamente. Denotando as variáveis dimensionais, com exceção das constantes de referência por meio de um asterisco, as variáveis adimensionais tomam a forma,

$$\begin{aligned}
 x &= \frac{x^*}{R_a}, & r &= \frac{r^*}{R_a}, & u &= \frac{u^*}{u_a}, & v &= \frac{v^*}{u_a}, & \rho &= \frac{\rho^*}{\rho_a}, \\
 P &= \frac{P^* - P_a}{\rho_a u_a^2}, & T &= \frac{T^* - T_0}{T_b - T_0}, & \mu &= \frac{\mu^*}{\mu_a}, & \lambda &= \frac{\lambda^*}{\lambda_a}, & c_p &= \frac{c_p^*}{c_{pa}}, \\
 D_k &= \frac{D_k^*}{D_a}, & h_{fk}^0 &= \frac{h_k^*}{c_{pa}(T_b - T_0)}, & \dot{\omega}_k &= \dot{\omega}_k^* \frac{R_a}{\rho_a u_a}, & k &= 1, 2, \dots, N \\
 Re &= \frac{\rho_a u_a R_0}{\mu_a}, & Pe &= \frac{\rho_a c_{pa} u_a R_0}{\lambda_a}, & Fr &= \frac{u_a^2}{g R_0}, & Le &= \frac{\lambda_a}{\rho_a c_{pa} D_a}
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

Admitindo-se adicionalmente o valor de c_p constante no intervalo de temperatura considerado nas integrais da equação de Shvab-Zeldovich para a energia (2.20), agrupando os parâmetros adimensionais e rearranjando as equações convenientemente, as equações de conservação na forma adimensional são obtidas.

Conservação de massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} (\rho r u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r v) = 0 \tag{2.25}$$

Conservação de quantidade de movimento axial:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v u) = \\
& = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] + \\
& + \frac{1}{\text{Re}} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{1}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \frac{\partial}{\partial r} (r v) \right] \right\} + \frac{1}{\text{Fr}} \rho
\end{aligned} \tag{2.26}$$

Conservação de quantidade de movimento radial:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v v) = \\
& = -\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{1}{\text{Re}} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) \right] + \\
& + \frac{1}{\text{Re}} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] + \\
& + \frac{1}{\text{Re}} \left\{ -\frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\mu \frac{\partial}{\partial r} (r v) \right] - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right] \right\} + \\
& + \frac{1}{\text{Re}} \left[-\frac{2 \mu v}{r^2} + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r v) + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r} \frac{\partial u}{\partial x} \right]
\end{aligned} \tag{2.27}$$

Conservação de energia:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u c_p T) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v c_p T) = \\
& = \frac{1}{\text{Pe}} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial}{\partial x} (c_p T) \right] + \frac{1}{\text{Pe}} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial}{\partial r} (c_p T) \right] - \sum_{k=1}^N h_{f_k}^0 \dot{\omega}_k
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Conservação de espécies,

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(\rho r u Y_k) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v Y_k) = \\
& = \frac{1}{\text{LePe}} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial}{\partial x} Y_k \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\rho r \mathbf{D} \frac{\partial}{\partial r} Y_k \right] \right\} + \dot{\omega}_k
\end{aligned} \tag{2.29}$$

É possível, após a adimensionalização das equações, uma breve análise do termo de geração (consumo) de massa adimensional. O mesmo é dado por,

$$\dot{\omega}_k = -\frac{\rho^*}{\rho_a} \frac{A \exp(-E_a / RT)}{u_a / R_a} Y_F^{n_F} Y_{O_2}^{n_{O_2}} = -\rho \text{Da} Y_F^{n_F} Y_{O_2}^{n_{O_2}} \tag{2.30}$$

na qual, conforme mencionado por KUO (2005), o fator pré-exponencial representa a frequência de colisões e o termo exponencial — o fator de Boltzmann — especifica a fração de colisões de nível de energia superior à energia de ativação E_a . Como consequência, o termo $A \exp(-E_a / RT)$ pode ser considerado um fator de frequência modificado (LIÑÁN, 2002) e a fração,

$$Da = \frac{A \exp(-E_a / RT)}{u_a / R_a} = \frac{\tau_m}{\tau_r} \quad (2.31)$$

definida como número de Damkohler. A avaliação do número de Damkohler é uma maneira de estimar a validade da hipótese de química infinita para o sistema. Esse número é um importante parâmetro adimensional que quantifica se um processo é controlado pela cinética química ou pela difusão. O mesmo relaciona o tempo característico de mistura no sistema (τ_m) com o tempo característico para a reação química (τ_r) (KEE *et al.*, 2003).

2.3.1. Frações de Mistura - Escalares Conservados

A forma de Shvab-Zeldovich das equações de conservação é útil quando se assume que as transformações químicas ocorrem através de uma reação direta em passo único na forma da Eq. (2.22), dada genericamente por,

$$\sum_{k=1}^N \nu'_k W_k \rightarrow \sum_{k=1}^N \nu''_k W_k \quad (2.32)$$

Definindo,

$$h_{RP} = -\sum_{k=1}^N h_{f_k}^0 \dot{\omega}_k = -\sum_{k=1}^N h_{f_k}^0 W_k (\nu'_k - \nu''_k) \quad (2.33)$$

pode-se reescrever as equações de conservação de Shvab-Zeldovich de energia e de espécies, respectivamente por

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho(c_p T)] + \nabla \cdot \left[\rho \mathbf{v}(c_p T) - \frac{1}{\text{Pe}} \rho \mathbf{D} \nabla (c_p T) \right] = h_{RP} \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho(Y_k)] + \nabla \cdot \left[\rho \mathbf{v}(Y_k) - \frac{1}{\text{LePe}} \rho r \mathbf{D} \nabla (Y_k) \right] = \dot{\omega}_k \quad (2.35)$$

Como definido na Eq. (2.16), $\text{Le} = 1$, com isso, as equações assumem a mesma forma, podendo ser representadas através do operador

$$\bar{L}[\beta] = \frac{\partial}{\partial t}[\rho(\beta)] + \nabla \cdot \left[\rho \mathbf{v}(\beta) - \frac{1}{\text{Pe}} \rho r \mathbf{D} \nabla (\beta) \right] \quad (2.36)$$

Utilizando a fração de mistura, definida como um escalar conservado (KUO, 2005), de modo a eliminar os termos fonte das equações de conservação de energia e espécies como,

$$Z = \frac{f_M - f_{A\infty}}{f_{F\infty} - f_{A\infty}} \quad (2.37)$$

na qual f , denominada função de acoplamento (KUO, 2005), representa qualquer propriedade conservada, definida através das relações,

$$f_{FO} = Y_F - \frac{Y_O}{s} \quad (2.38)$$

$$f_{FT} = Y_F - \frac{c_p T}{h_{RP}} \quad (2.39)$$

$$f_{OT} = \frac{Y_O}{s} - \frac{c_p T}{h_{RP}} \quad (2.40)$$

pode-se escrever a equação de conservação cuja solução fornece os campos de temperatura e espécie dependente apenas da função de acoplamento empregada, cuja característica principal é a ausência de termos fonte.

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho(Z_J)] + \nabla \cdot \left[\rho \mathbf{v}(Z_J) - \frac{1}{\text{Pe}} \rho r \mathbf{D} \nabla(Z_J) \right] = 0, \quad J = FO, FT, OT \quad (2.41)$$

Uma característica muito importante do modelo de chama fina é a possibilidade de recuperar os perfis de temperatura e espécies a partir da equação de conservação (2.41). Denotando as variáveis localizadas sobre a frente de chama por meio do subscrito f , pode-se mostrar que a posição da frente de chama r_f na coordenada axial x pode ser obtida utilizando a expressão,

$$Z_f = \frac{Y_{O_{A\infty}}}{sY_{F_{F\infty}} + Y_{O_{A\infty}}} \quad (2.42)$$

na qual os subscritos $F\infty$ e $A\infty$ representam os fluxos de combustível e ar na entrada, respectivamente.

Utilizando a Eq. (2.42) gera-se expressões para a temperatura e frações mássicas na região do combustível e oxidante da chama. Essas expressões para as variáveis de interesse são escritas, na região do combustível, como,

$$T = ZT_{F\infty} + \left(T_{A\infty} + Y_{O_{A\infty}} \frac{-h_{RP}}{c_p} \right) (1 - Z) \quad (2.43)$$

$$Y_F = ZY_{F\infty} + Y_{O_{A\infty}} \frac{W_F V_F}{W_O V_O} (Z - 1) \quad (2.44)$$

$$Y_O = 0 \quad (2.45)$$

$$Y_P = Y_{O_{A\infty}} \frac{W_P V_P}{W_O V_O} (1 - Z) \quad (2.46)$$

$$Y_N = Y_{N_{A\infty}} (1 - Z) + ZY_{N_{F\infty}} \quad (2.47)$$

e, na região do oxidante, como,

$$T = T_{A\infty} (1 - Z) + \left(T_{F\infty} + Y_{F_{F\infty}} \frac{-h_{RP}}{c_p} \right) Z \quad (2.48)$$

$$Y_F = 0 \quad (2.49)$$

$$Y_O = Y_{O_{A\infty}} (1-Z) - Y_{F_{F\infty}} \frac{W_O \nu_O}{W_F \nu_F} Z \quad (2.50)$$

$$Y_P = \frac{W_P \nu_P}{W_F \nu_F} Y_{F_{F\infty}} Z \quad (2.51)$$

$$Y_N = Y_{N_{A\infty}} (1-Z) + Z Y_{N_{F\infty}} \quad (2.52)$$

No caso de dois produtos, i. e.,

$$\nu_F F + \nu_O O_2 + \nu_N N_2 \rightarrow \nu_{P_1} P_1 + \nu_{P_2} P_2 + \nu_N N_2 \quad (2.53)$$

as frações mássicas de Y_{P_1} e Y_{P_2} podem ser encontradas através das relações,

$$Y_{P_1} = \left(\frac{W_{P_1} \nu_{P_1}}{W_{P_1} \nu_{P_1} + W_{P_2} \nu_{P_2}} \right) Y_P \quad (2.54)$$

$$Y_{P_2} = \left(\frac{W_{P_2} \nu_{P_2}}{W_{P_1} \nu_{P_1} + W_{P_2} \nu_{P_2}} \right) Y_P \quad (2.55)$$

Das Eqs. (2.25-2.27) e (2.41) obtém-se as componentes do vetor velocidade, pressão e escalar conservado. Para um perfil do escalar conservado, utilizam-se as Eqs. (2.42-2.55) para obter as expressões para T , Y_F , Y_O , Y_P , Y_N .

A variação de massa específica, da viscosidade e do coeficiente de difusão com a temperatura é considerada no presente trabalho. A dependência da massa específica é admitida por meio da aplicação da equação dos gases perfeitos. Considerando o processo de combustão aproximadamente adiabático,

$$\rho = \frac{\rho_0 T_0}{T} \quad (2.56)$$

Introduzindo o número de Prandtl,

$$\text{Pr} = \frac{\mu c_p}{\lambda} \quad (2.57)$$

e, em função do número de Lewis ser considerado unitário,

$$\rho D = \frac{\lambda}{c_p} = \frac{\mu}{Pr_{ref}} \quad (2.58)$$

na qual Pr_{ref} é um número de Prandtl de referência e λ é a condutividade térmica da mistura. No presente trabalho, é utilizado o valor de $Pr_{ref} = 0.75$, correspondente ao ar. Desse modo, a definição de ρD é reduzida a especificação de uma relação para a viscosidade para a qual é utilizada,

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^p \quad (2.59)$$

na qual $p = 0.7$, $T_0 = 298$ K, $\mu_0 = 1.85 \times 10^{-4}$ g/cm-s são os valores de referência para o ar (KANURY, 1982). O parâmetro de geração de calor $-h_{RP} / c_p$ pode ser determinado a partir de um valor estimado para a temperatura máxima da chama — por exemplo, experimentalmente — através da relação,

$$\frac{-h_{RP}}{c_p} = \frac{1}{Y_{F_{F\infty}}} \left[\frac{T_{\max} - T_{A\infty} (1 - Z_f)}{Z_f} - T_{F\infty} \right] \quad (2.60)$$

obtida da Eq. (2.48), na qual T_{\max} é o valor estimado para a temperatura máxima. Para a queima de metano em ar, o valor obtido experimental (NORTON *et al.*, 1993) e numericamente (LITTLE, 2007) para T_{\max} é 2080 K. Já para a combustão de etanol o valor de T_{\max} , obtido numericamente (LITTLE, 2007), é de 2078 K.

2.4. Condições de Contorno

As condições de contorno do sistema, baseados no experimento analisado por MITCHELL *et al.* (1980), são dadas por,

$$u = u_F, \quad v = 0, \quad T = T_F, \quad Y_k = Y_F, \quad x = 0, \quad 0 < r < R_F \quad (2.61)$$

$$u = u_O, \quad v = 0, \quad T = T_O, \quad Y_k = Y_O, \quad x = 0, \quad R_F < r < R_O \quad (2.62)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial Y_k}{\partial x} = 0, \quad P = P_a, \quad x = L, \quad 0 < r < R_O \quad (2.63)$$

$$\frac{\partial u}{\partial r} = v = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0, \quad 0 < x < L, \quad r = 0 \quad (2.64)$$

$$u = v = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial Y_k}{\partial r} = 0, \quad 0 < x < L, \quad r = R_O \quad (2.65)$$

A solução é determinada por meio de escalares conservados, que substituem a temperatura e a fração mássica nas condições de contorno (2.61-2.65), de modo que as mesmas são reescritas como,

$$u = u_F, \quad v = 0, \quad Z = 1, \quad x = 0, \quad 0 < r < R_F \quad (2.66)$$

$$u = u_O, \quad v = 0, \quad Z = 0, \quad x = 0, \quad R_F < r < R_O \quad (2.67)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial Z}{\partial x} = 0, \quad P = P_a, \quad x = L, \quad 0 < r < R_O \quad (2.68)$$

$$\frac{\partial u}{\partial r} = v = \frac{\partial Z}{\partial r} = 0, \quad 0 < x < L, \quad r = 0 \quad (2.69)$$

$$u = v = \frac{\partial Z}{\partial r} = 0, \quad 0 < x < L, \quad r = R_O \quad (2.70)$$

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

Capítulo 3 - Metodologia

Diversas técnicas numéricas foram propostas para a solução de equações diferenciais parciais (PDE, *Partial Differential Equations*) que governam os fenômenos de transporte. Dentre os mesmos podem ser destacados os Métodos de Diferenças Finitas (FDM, *Finite Volume Methods*), dos Volumes Finitos (FVM, *Finite Volume Methods*) e de Elementos Finitos (FEM, *Finite Elements Methods*), o Método das Linhas (MOL, *Methods of Lines*), Métodos Espectrais, entre outros.

O Método dos Volumes Finitos é a técnica escolhida para a solução numérica das equações diferenciais parciais envolvidas no presente estudo. MALISKA (2004) destaca que em escoamentos de fluidos, é muito importante satisfazer os princípios de conservação em nível discreto, característica deste método, pois, se o que se busca com um método numérico é a solução da equação diferencial, que é a representação da conservação da propriedade em ponto-a-ponto, parece lógico que as equações aproximadas representem a conservação em pequenos volumes finitos. A integração no volume de controle é a característica que diferencia essa técnica das demais (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

3.1. Transformação de Coordenadas

O sistema de coordenadas cilíndricas é limitado para a solução de problemas mais gerais, nos quais são abordadas geometrias irregulares. Por isso, a divisão do domínio é feita de 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 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,

$$\xi = \xi(x, r) \quad (3.1)$$

$$\eta = \eta(x, r) \quad (3.2)$$

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,

$$J = \xi_x \eta_r - \xi_r \eta_x \quad (3.3)$$

Considera-se a equação de conservação na forma

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{1}{r} \nabla \cdot (r\mathbf{F}) = S \quad (3.4)$$

na qual,

$$\mathbf{F} = E\mathbf{i} + F\mathbf{j} \quad (3.5)$$

$$Q = \rho r \phi \quad (3.6)$$

$$E = \rho u \phi - \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (3.7)$$

$$F = \rho v \phi - \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial r} \quad (3.8)$$

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

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),

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho\phi}{J} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \xi} (r\rho U\phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \eta} (r\rho V\phi) = \\ & = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(r\Gamma^\phi J\alpha_{11} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + r\Gamma^\phi J\alpha_{12} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(r\Gamma^\phi J\alpha_{21} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + r\Gamma^\phi J\alpha_{22} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) + \frac{S^\phi}{J} \end{aligned} \quad (3.9)$$

na qual,

$$\alpha_{11} = \frac{(\xi_x^2 + \xi_r^2)}{J^2} \quad (3.10)$$

$$\alpha_{22} = \frac{(\eta_x^2 + \eta_r^2)}{J^2} \quad (3.11)$$

$$\alpha_{12} = \alpha_{21} = \frac{(\xi_x \eta_x + \xi_r \eta_r)}{J^2} \quad (3.12)$$

$$U = u \frac{\xi_x}{J} + v \frac{\xi_r}{J} \quad (3.13)$$

$$V = u \frac{\eta_x}{J} + v \frac{\eta_r}{J} \quad (3.14)$$

Como para o método dos volumes finitos é imaterial a forma geométrica do volume de controle (MALISKA, 2004), estando o mesmo definido com algum tipo de construção, a etapa seguinte é a integração das equações de conservação sobre o volume

de controle e no tempo. Esse procedimento, apresentado em detalhes por VALLE (1995), resulta na equação,

$$\begin{aligned} & \frac{M_P \phi_P - M_P^0 \phi_P^0}{\Delta t} + \dot{M}_e \phi_e - \dot{M}_w \phi_w + \dot{M}_n \phi_n - \dot{M}_s \phi_s = \\ & = \left[D_{11} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + D_{12} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right]_w^e + \left[D_{21} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + D_{22} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right]_s^n + L \left[\frac{S^\phi}{J} \right]_P \Delta V \end{aligned} \quad (3.15)$$

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

$$M_P = \frac{\rho_P}{J_P} \Delta V \quad (3.16)$$

$$M_P^0 = \frac{\rho_P^0}{J_P} \Delta V \quad (3.17)$$

$$\dot{M}_e = (r\rho U)_e \Delta \eta \quad (3.18)$$

$$\dot{M}_w = (r\rho U)_w \Delta \eta \quad (3.19)$$

$$\dot{M}_n = (r\rho V)_n \Delta \xi \quad (3.20)$$

$$\dot{M}_s = (r\rho V)_s \Delta \xi \quad (3.21)$$

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

$$D_{11} = r\Gamma^\phi J\alpha_{11}\Delta\eta \quad (3.22)$$

$$D_{12} = r\Gamma^\phi J\alpha_{12}\Delta\eta \quad (3.23)$$

$$D_{21} = r\Gamma^\phi J\alpha_{21}\Delta\xi \quad (3.24)$$

$$D_{22} = r\Gamma^\phi J\alpha_{22}\Delta\xi \quad (3.25)$$

com o volume, no domínio transformado dado por,

$$\Delta V = r_p \Delta \xi \Delta \eta \quad (3.26)$$

Os subscritos (P , e , w , n , s) presentes nas expressões referenciam os pontos da malha, representada na Fig. 3.1, e o sobrescrito 0, o instante anterior.

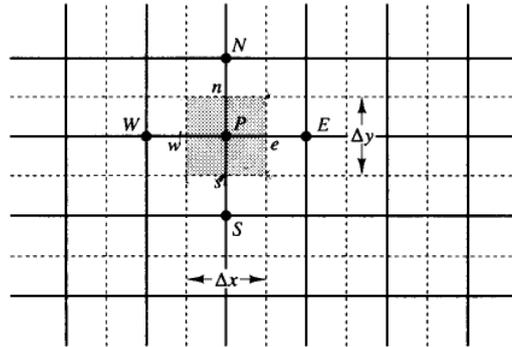


Figura 3.1: Volume elementar. (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995)

3.1.1. Transformação Algébrica

O refinamento das equações de conservação em regiões em que grandes gradientes se fazem presentes é necessário quando a utilização de malhas refinadas não é necessária em todo o domínio. É também importante nos casos em que se pretende analisar os detalhes da camada limite em regiões próximas às paredes.

A transformação algébrica de domínios pode ser utilizada nos problemas em que os mesmos não possuem geometrias irregulares. Nesses casos a transformação pode ser caracterizada por uma função que associa as coordenadas nos dois domínios, o físico e o transformado. Mais simples ainda são as situações em que as funções podem ser 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. Esse tipo de formulação, cujas funções são apresentadas por PLETCHER *et al.* (1997), são as utilizadas no tratamento do domínio do presente

trabalho, em função da simplicidade do mesmo e da necessidade de avaliar regiões onde são esperados maiores gradientes.

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

$$\xi_1(\xi_1) = \frac{\ln \left[\left(\beta + 1 - \frac{x_1}{L_{x_1}} \right) / \left(\beta - 1 + \frac{x_1}{L_{x_1}} \right) \right]}{\ln \left(\frac{\beta + 1}{\beta - 1} \right)}, \quad 1 < \beta < \infty \quad (3.27)$$

na qual L_{x_1} é o comprimento máximo na direção x_1 e β é um coeficiente arbitrário que aproxima os pontos na região próxima de $x_1 = 0$ à medida que β se aproxima de 1, conforme representado na Fig. 3.2.

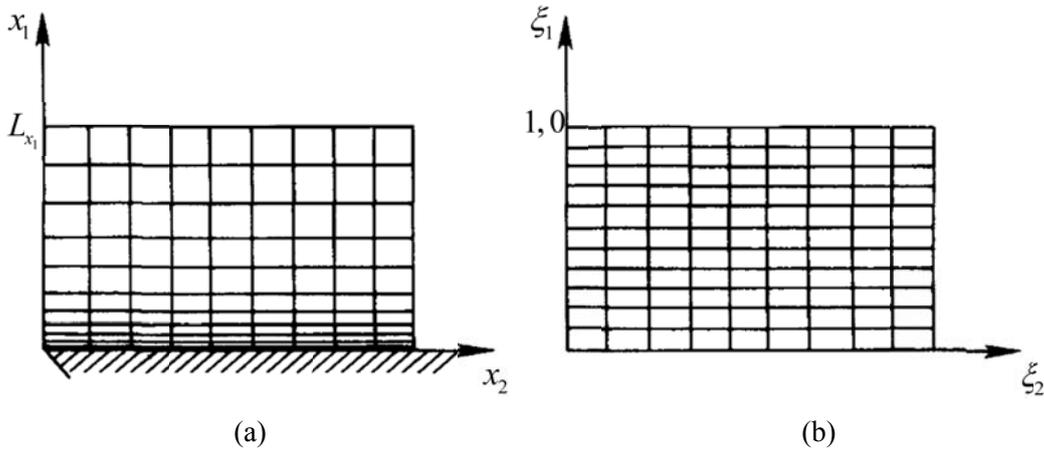


Figura 3.2: Refinamento próximo a $x_1 = 0$. (a) Domínio físico. (b) Domínio computacional.

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

$$\xi_1(x_1) = \alpha + (1 - \alpha) \frac{\ln \left\{ \left[\beta + \frac{x_1(2\alpha + 1)}{L_{x_1}} - 2\alpha \right] / \left[\beta - \frac{x_1(2\alpha + 1)}{L_{x_1}} - 2\alpha \right] \right\}}{\ln \left(\frac{\beta + 1}{\beta - 1} \right)} \quad (3.28)$$

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 próxima a $x_1 = 0$ e $x_1 = L_{x_1}$. Essa última representada na Fig. 3.3.

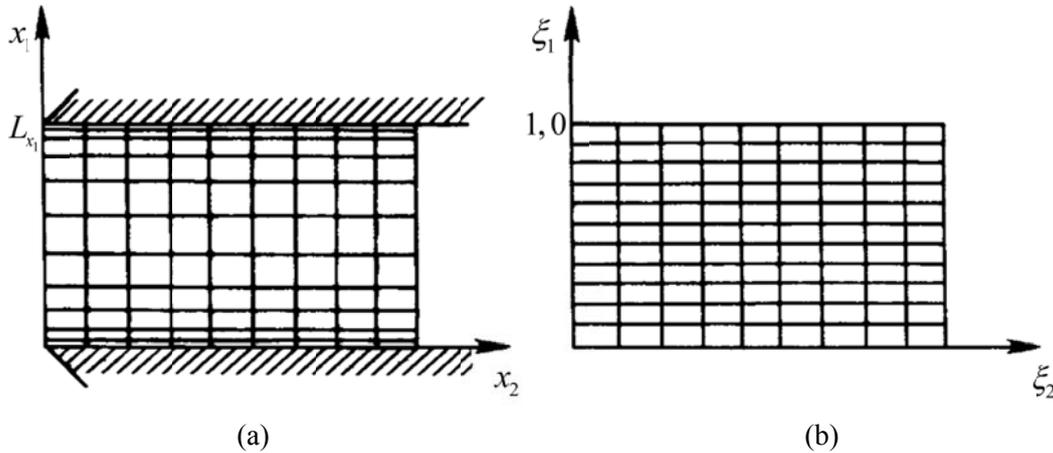


Figura 3.3: Refinamento próximo as paredes. (a) Domínio físico. (b) Domínio computacional.

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

$$\xi_1(x_1) = B_\eta + \frac{1}{\tau} \sinh^{-1} \left[\left(\frac{x_1}{x_{1c}} - 1 \right) \sinh(\tau B_\eta) \right] \quad (3.29)$$

para,

$$B_\eta = \frac{1}{2\tau} \ln \left[\frac{1 + (e^\tau - 1)(x_{1c} / L_{x_1})}{1 + (e^{-\tau} - 1)(x_{1c} / L_{x_1})} \right], \quad 0 < \tau < \infty \quad (3.30)$$

na qual τ 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.

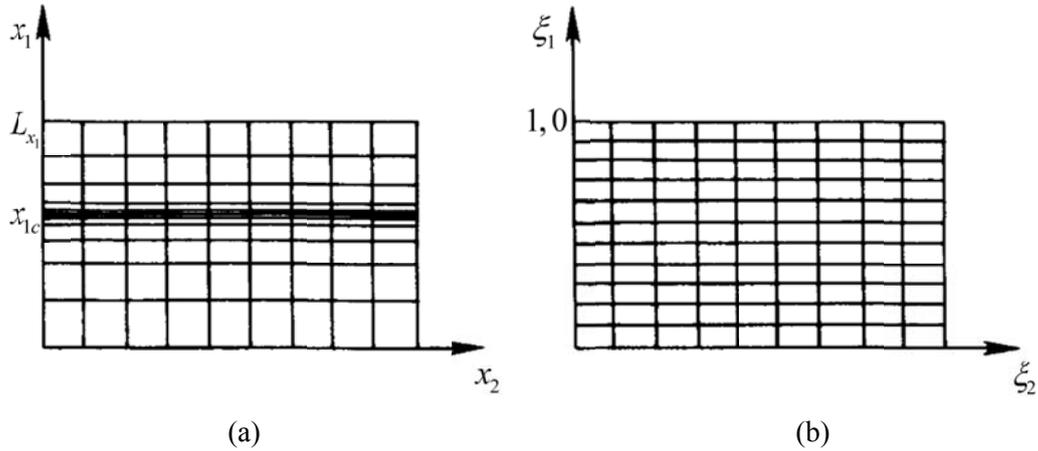


Figura 3.4: Refinamento próximo a $x_{1c} = 0$. (a) Domínio físico. (b) Domínio computacional.

3.2. Função de Interpolação

Observando a Eq. (3.15) constata-se que é necessária a avaliação de ϕ e de suas derivadas nas interfaces dos volumes elementares (representadas pelos subscritos em letras minúsculas). Logo, uma função de interpolação deve ser empregada.

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 (MALISKA, 2004). O método de interpolação utilizado é o denominado WUDS (*Weighted Upstream Differencing Scheme*) (RAITHBY e TORRANCE, 1974).

Nesse esquema, a função de interpolação exata é associada a dois coeficientes α e β que dependem do número de Peclet de malha e servem como pesos entre a advecção e a difusão. Os valores de ϕ e de sua derivada na interface são escritos, tomando a face leste como exemplo, por,

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_e\right)\phi_P + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e\right)\phi_E \quad (3.31)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_e = \bar{\beta}_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x_e} \right) \quad (3.32)$$

Para $\bar{\alpha} = 0$ e $\bar{\beta} = 1$ o esquema de Diferenças Centrais (*Central Difference Scheme* ou CDS) (PATANKAR, 1980) é recuperado, ao passo que para $\bar{\alpha} = 0,5$ e $\bar{\alpha} = -0,5$, com $\bar{\beta} = 0$ para ambos, recupera-se o esquema *Upwind* (*Upwind Difference Scheme* ou UDS) (PATANKAR, 1980) para velocidades positivas e negativas, respectivamente. Seus valores, propostos por RAITHBY e TORRANCE (1974), são dados por,

$$\bar{\alpha} = \frac{r_i^2}{10 + 2r_i^2} \quad (3.33)$$

$$\bar{\beta} = \frac{1 + 0,005r_i^2}{1 + 0,05r_i^2} \quad (3.34)$$

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

$$r_e = \frac{\dot{M}_e}{D_{11e}} \quad (3.35)$$

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.

Subtraindo a equação de conservação de quantidade de movimento da equação da continuidade, obtida utilizando $\phi = 1$ na equação de conservação geral (3.15),

$$\frac{M_P - M_P^0}{\Delta t} + \dot{M}_e - \dot{M}_w + \dot{M}_n - \dot{M}_s = 0 \quad (3.36)$$

obtem-se a equação algébrica representativa da equação de conservação para a variável ϕ , discretizada para o volume elementar com centro em P

$$A_p \phi_p + A_e \phi_e + A_w \phi_w + A_n \phi_n + A_s \phi_s + A_{ne} \phi_{NE} + A_{nw} \phi_{NW} + A_{se} \phi_{SE} + A_{sw} \phi_{SW} = B \quad (3.37)$$

em que os coeficientes são dados por

$$A_p = -\sum (A_{nb}) + \frac{M_p^0}{\Delta t} \quad (3.38)$$

$$A_e = \dot{M}_e \frac{1}{2} - |\dot{M}_e| \bar{\alpha}_e - \frac{D_{11e} \bar{\beta}_e}{\Delta \xi} + \frac{D_{21s} - D_{21n}}{4\Delta \xi} \quad (3.39)$$

$$A_w = -\dot{M}_w \frac{1}{2} - |\dot{M}_w| \bar{\alpha}_w - \frac{D_{11w} \bar{\beta}_w}{\Delta \xi} + \frac{D_{21n} - D_{21s}}{4\Delta \xi} \quad (3.40)$$

$$A_n = \dot{M}_n \frac{1}{2} - |\dot{M}_n| \bar{\alpha}_n - \frac{D_{22n} \bar{\beta}_n}{\Delta \eta} + \frac{D_{12w} - D_{12e}}{4\Delta \eta} \quad (3.41)$$

$$A_s = -\dot{M}_s \frac{1}{2} - |\dot{M}_s| \bar{\alpha}_s - \frac{D_{22s} \bar{\beta}_s}{\Delta \eta} + \frac{D_{12e} - D_{12w}}{4\Delta \eta} \quad (3.42)$$

$$A_{ne} = -\frac{D_{12e}}{4\Delta \eta} - \frac{D_{21n}}{4\Delta \xi} \quad (3.43)$$

$$A_{nw} = \frac{D_{12w}}{4\Delta \eta} + \frac{D_{21n}}{4\Delta \xi} \quad (3.44)$$

$$A_{se} = \frac{D_{12e}}{4\Delta \eta} + \frac{D_{21s}}{4\Delta \xi} \quad (3.45)$$

$$A_{sw} = -\frac{D_{12w}}{4\Delta \eta} - \frac{D_{21s}}{4\Delta \xi} \quad (3.46)$$

$$B = L \left[\frac{S^\phi}{J} \right]_p \Delta V + \frac{M_p^0 \phi_p^0}{\Delta t} \quad (3.47)$$

Os valores absolutos nas Eqs. (3.39-3.42) são explicados por uma particularidade do esquema de interpolação WUDS. Como no esquema *Upwind* $\bar{\alpha}$ deve possuir o mesmo sinal das vazões mássicas nas equações de conservação, e considerando-se que o sinal da velocidade é carregado para dentro de $\bar{\alpha}$ por r_i , que está elevado ao quadrado, deve-se então compensar esta perda do sinal para manter a coerência na avaliação.

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, i.e., afastado dos contornos,

$$L \left[\frac{P^u}{J} \right]_P = \frac{P_E - P_W}{2\Delta\xi} \left(\frac{\xi}{J} \right)_P + \frac{P_N - P_S}{2\Delta\eta} \left(\frac{\eta_x}{J} \right)_P \quad (3.48)$$

$$L \left[\frac{P^v}{J} \right]_P = \frac{P_E - P_W}{2\Delta\xi} \left(\frac{\xi_r}{J} \right)_P + \frac{P_N - P_S}{2\Delta\eta} \left(\frac{\eta_r}{J} \right)_P \quad (3.49)$$

3.3. Acoplamento Pressão-Velocidade

No caso analisado, a massa específica não varia significativamente com a pressão, mas tem variação considerável com a temperatura; caso em que o problema pode ainda ser definido, rigorosamente, como compressível (MALISKA, 2004). Entretanto, a equação de estado $P = P(\rho, T)$ não pode mais ser usada como equação para a determinação de P , porque pequenos erros cometidos no cálculo de ρ , via equação de conservação de massa, poderão produzir grandes erros em P , calculados através da relação $P = P(\rho, T)$ (MALISKA, 2004). Se esse campo de pressões for introduzido nas equações do movimento e as velocidades resultantes substituídas na equação da continuidade, para cálculo de ρ para o próximo intervalo de tempo, sérias instabilidades ocorrerão na solução numérica do sistema de equações (MALISKA, 2004).

Como a massa específica não depende de P , a equação de estado utilizada para o cálculo de ρ 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 ρ , e a pressão passa a não possuir uma equação evolutiva, sendo sua influência apenas através do seu gradiente nas equações de movimento. Isolar a pressão de alguma das equações do movimento não é uma possibilidade, pois os gradientes em todas as direções tem que ser combinados para a determinação da pressão. O objetivo é, então, encontrar um valor para P nas equações de movimento de forma que as velocidades obtidas satisfaçam a conservação da massa. A equação de conservação da massa passa a ser uma restrição que deve ser obedecida pelo campo de velocidades, e não mais uma equação evolutiva para qualquer variável

O fato de ρ não variar com P introduz uma grande dificuldade para tratar o acoplamento entre a pressão e a velocidade, causando problemas para a solução do sistema de equações. Essa formulação é chamada “incompressível” e o caso em que ρ não é função de P e nem de T é um caso particular (MALISKA, 2004).

Uma equação, entretanto, pode ser obtida a partir da equação da continuidade, e, para tanto, faz-se uso de uma variante do chamado método SIMPLE (acrônimo para *Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*). Esse método, desenvolvido por PATANKAR e SPALDING (1972), assim como os dele derivados, figura entre os mais utilizados em CFD há alguns anos (DATE, 2005).

No método SIMPLE, as equações das velocidades são obtidas a partir das equações do movimento. Se um campo de pressões estimado P^* for introduzido na Eq. (3.37), obtém-se, para o caso em que a mesma representa a equação de Navier-Stokes,

$$A_P \phi_P^* + \sum A_{nb} \phi_{NB}^* = -L \left[\frac{P^{\phi^*}}{J} \right] \Delta V + B^\phi \quad (3.50)$$

em que,

$$\sum A_{nb} \phi_{NB}^* = A_e \phi_E^* + A_w \phi_W^* + A_n \phi_N^* + A_s \phi_S^* + A_{ne} \phi_{NE}^* + A_{nw} \phi_{NW}^* + A_{se} \phi_{SE}^* + A_{sw} \phi_{SW}^* \quad (3.51)$$

Subtraindo-se a equação com o campo correto de pressões da equação com os valores estimados (3.50), obtém-se,

$$A_P \phi'_P = -\sum A_{nb} \phi'_{NB} - L \left[\frac{P^{\phi'}}{J} \right] \Delta V \quad (3.52)$$

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.

$$\phi' = \phi - \phi^* \quad (3.53)$$

Para a análise da Eq. (3.52) 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 e é uma escolha natural pela simplicidade de controle dos índices das variáveis na construção do código computacional (MALISKA, 2004). 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 determinação dos fluxos das diferentes propriedades é o mesmo, facilitando a construção e a implementação computacional do algoritmo.

No entanto, as equações do movimento para as direções x e r não envolvem a pressão no volume P_p , acarretando na avaliação do gradiente de pressão em uma malha menos refinada. Ou seja, pressão passa a ser avaliada com uma ordem de precisão mais baixa (MALISKA, 2004). Ademais, surge a possibilidade de ocorrência de campos de pressão oscilatórios que não são detectados pelo gradiente de pressão e que podem ser estar desacoplados, justamente pelo fato de o cálculo do gradiente não envolver a pressão no volume no qual se faz o balanço de conservação de quantidade de movimento.

Para o tratamento do acoplamento pressão-velocidade no arranjo co-localizado é realizado o mesmo procedimento utilizado em uma malha defasada, admitindo-se que as

velocidades são determinadas nas fronteiras dos volumes de controle. Com isso, obtém-se uma equação de correção de pressão a partir das equações de conservação de quantidade de movimento e da continuidade.

Em razão da dificuldade em se analisar o termo $\sum A_{nb}\phi'_{NB}$, é necessária uma abordagem para o tratamento do mesmo. PATANKAR e SPALDING (1972) sugeriram abandonar esse termo e adotar uma relaxação ao longo do processo iterativo a fim de “zerar” as correções. Esse procedimento é muito instável e depende fortemente do coeficiente de relaxação utilizado, além de não ter uma fundamentação física que o suporte (FERZIGER e PERIC, 2002). Já VAN DOORMAL e RAITHBY (1984) sugeriram uma abordagem menos invasiva. A mesma é denominada SIMPLEC em alusão a correção proposta pelo método SIMPLE, com a diferença da letra “C”, representativa de *Consistent*. Esta abordagem consiste na consideração de que ϕ'_p pode ser aproximado por uma média dos termos de sua vizinhança (FERZIGER e PERIC, 2002), de modo que,

$$\phi'_p \approx \frac{\sum A_{nb}\phi'_{NB}}{\sum A_{nb}} \quad (3.54)$$

Resultando, para uma aproximação para a pressão tal qual a utilizada nas Eqs. (3.48) e (3.49) em equações para as velocidades da forma

$$u_p = u_p^* - \bar{d}_p^u \left[\frac{P_E - P_W}{2\Delta\xi} \left(\frac{\xi_x}{J} \right)_p + \frac{P_N - P_S}{2\Delta\eta} \left(\frac{\eta_x}{J} \right)_p \right] \Delta V \quad (3.55)$$

$$v_p = v_p^* - \bar{d}_p^v \left[\frac{P_E - P_W}{2\Delta\xi} \left(\frac{\xi_r}{J} \right)_p + \frac{P_N - P_S}{2\Delta\eta} \left(\frac{\eta_r}{J} \right)_p \right] \Delta V \quad (3.56)$$

nas quais,

$$\bar{d}_p^\phi = \bar{d}_p = \frac{\Delta t}{(M_p^0)_p} \quad (3.57)$$

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

$$\dot{M}_e - \dot{M}_w + \dot{M}_n - \dot{M}_s = 0 \quad (3.58)$$

ou melhor,

$$(r\rho U)_e \Delta\eta - (r\rho U)_w \Delta\eta + (r\rho V)_n \Delta\xi - (r\rho V)_s \Delta\xi = 0 \quad (3.59)$$

De acordo com a Eq. (3.59), as velocidades envolvidas são as velocidades contravariantes. Construindo as mesmas nas faces dos volumes a partir das equações das velocidades corrigidas (3.55) e (3.56), considerando-se: a contribuição da pressão apenas na mesma direção coordenada, a aproximação dos coeficientes \bar{d}_i^ϕ nas interfaces pela média dos valores nos centros (com i representando 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,

$$A_p P'_p + A_e P'_e + A_w P'_w + A_n P'_n + A_s P'_s = B \quad (3.60)$$

na qual

$$A_p = -\sum A_{nb} \quad (3.61)$$

$$A_e = r_e \alpha_{11e} \bar{d}_e \Delta\eta^2 \quad (3.62)$$

$$A_w = r_w \alpha_{11w} \bar{d}_w \Delta\eta^2 \quad (3.63)$$

$$A_n = r_n \alpha_{22n} \bar{d}_n \Delta\xi^2 \quad (3.64)$$

$$A_s = r_s \alpha_{22s} \bar{d}_s \Delta\xi^2 \quad (3.65)$$

$$B = (r_e U_e^* - r_w U_w^*) \Delta\eta + (r_n V_n^* - r_s V_s^*) \Delta\xi \quad (3.66)$$

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

pseudo-equação, de modo que os pontos vizinhos possam ser usados (MARCHI e MALISKA, 1994). Utilizando a equação para a pressão estimada (3.50) para cada um dos pontos E , W , N e S , obtém-se uma equação para as velocidades estimadas na fronteira. Por exemplo, para a face leste,

$$(A_P)_e \phi_e^* = -\sum (A_{nb} \phi_{NB}^*)_e - L \left[\frac{P^{\phi^*}}{J} \right]_e \Delta V + L \left[\frac{S^{\phi^*}}{J} \right]_e \Delta V + \frac{M_e^0 \phi_e^0}{\Delta t} \quad (3.67)$$

obtida por meio da interpolação linear das equações

$$(A_P)_P \phi_P^* = -\sum (A_{nb} \phi_{NB}^*)_P - L \left[\frac{P^{\phi^*}}{J} \right]_P \Delta V + L \left[\frac{S^{\phi^*}}{J} \right]_P \Delta V + \frac{M_P^0 \phi_P^0}{\Delta t} \quad (3.68)$$

$$(A_P)_E \phi_E^* = -\sum (A_{nb} \phi_{NB}^*)_E - L \left[\frac{P^{\phi^*}}{J} \right]_E \Delta V + L \left[\frac{S^{\phi^*}}{J} \right]_E \Delta V + \frac{M_E^0 \phi_E^0}{\Delta t} \quad (3.69)$$

forneendo,

$$\phi_e^* = \frac{(A_P)_e}{(A_P)_P + (A_P)_E} \quad (3.70)$$

tal que

$$\begin{aligned} (A_P)_e = & -\sum (A_{nb} \phi_{NB}^*)_P - \sum (A_{nb} \phi_{NB}^*)_E - 2L \left[\frac{P^{\phi^*}}{J} \right]_e \Delta V + \\ & + L \left[\frac{S^{\phi^*}}{J} \right]_P \Delta V + L \left[\frac{S^{\phi^*}}{J} \right]_E \Delta V + \frac{(M_P^0 + M_E^0) \phi_e^0}{\Delta t} \end{aligned} \quad (3.71)$$

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

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

O algoritmo para a solução do escoamento é composto pelas seguintes etapas:

1. Como o problema é transiente, todas as variáveis e propriedades são conhecidas no instante inicial;

2. Estima-se o campo de velocidades e pressão;
3. Calculam-se os coeficientes das equações do movimento para u e v ;
4. Resolvem-se as equações do movimento, usando P^* , obtendo-se u^* e v^* ;
5. Obtém-se a correção de pressão P' , resolvendo seu sistema;
6. Corrige-se u^* e v^* obtendo o novo campo de velocidade estimado;
7. Corrige-se P obtendo o novo campo de pressão estimado;
8. Resolvem-se as equações para outras variáveis, como função de acoplamento, temperatura, para a equação de conservação de energia, etc.;
9. Atualizam-se as propriedades que variam com a temperatura e retorna-se ao passo 3 até a convergência;
10. Passa-se ao próximo instante de tempo, retornando ao passo 2.

3.4. Condições de Contorno

Para o tratamento das condições de contorno são utilizados volumes fictícios. Essa abordagem no tratamento desses pontos é feita desse modo em virtude da facilidade que esse método oferece na aplicação e na substituição de condições de diferentes tipos. Essa abordagem é mais bem detalhada por MALISKA (2004).

3.4.1. Condições de Contorno para a Pressão

O tratamento das condições de contorno para a pressão é simples, bastando substituir em cada um dos contornos o valor prescrito da velocidade na Eq. (3.59) de modo que para a Eq. (3.60) a parcela do termo fonte relacionado à fronteira avaliada é

sempre zero. Isso se deve em função de as condições de contorno do problema serem todas dadas e função das velocidades.

É importante ressaltar que, em função de os pontos no contorno não possuírem informação de pressão no lado de fora do domínio, são utilizadas interpolações de mais baixa ordem para a pressão na obtenção dos termos de pressão na Eq. (3.71) para os mesmos.

3.4.2. Condições de Contorno para a Velocidade e Outras Variáveis

O tratamento das condições de contorno para a velocidade e outras variáveis (como por exemplo, temperatura), como mencionado anteriormente, é realizado utilizando-se volumes fictícios. As possibilidades consideradas para as condições de contorno são: fronteira com ϕ prescrito, fronteira com fluxo de ϕ prescrito, condição localmente parabólica e condição de simetria.

Para o caso de fronteira com ϕ prescrito, como os valores do mesmo localizam-se no centro dos volumes e a condição é estabelecida para a face, faz-se uma média entre dois volumes adjacentes. Por exemplo, para o ponto fictício adjacente à fronteira leste do domínio,

$$\phi_w = \frac{\phi_P + \phi_W}{2} \quad (3.72)$$

Para o caso de fronteira com o fluxo de ϕ prescrito, basta utilizar a equação de difusão da propriedade ϕ . Por exemplo, para o ponto fictício adjacente à face norte do domínio,

$$q_s'' = D_{12s} \left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_s + D_{22s} \left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_s \quad (3.73)$$

entanto, quando estão presentes na equação os termos de derivadas cruzadas, essa abordagem não é mais possível, uma vez que a matriz de coeficientes apresenta nove diagonais.

Para a solução do SAE que representa a equação de conservação genérica, que deve ser resolvido, por exemplo, para a obtenção da solução da equação de conservação de quantidade de movimento, o método de solução utilizado é o SOR (*Successive Overrelaxation*), no qual um coeficiente de relaxação é utilizado na atualização do vetor de variáveis no método iterativo de Gauss-Seidel (CONTE e DE BOOR, 1980).

A convergência do método ADI é mais acelerada que o método Gauss-Seidel (DATE, 2005), no entanto, velocidade necessária para a solução de sistemas com um número de linhas muito grande necessita de métodos de solução mais eficientes. Uma das alternativas é a utilização da técnica da correção por blocos (*Block Correction*) apresentada em (PRAKASH e PATANKAR, 1981), baseada nos conceitos do método desenvolvido por (SETTARI e AZIZ, 1973). Essa técnica, descrita em detalhes por PRAKASH e PATANKAR (1981) e DATE (2005) é utilizada para aumentar a taxa de convergência do método ADI.

O método ADI com correção por blocos é utilizado para a solução do sistema cuja variável é a correção da pressão. Conforme proposto por SETTARI e AZIZ (1973), a correção por blocos é um procedimento realizado ao final de cada iteração completa do método ADI; uma correção, aplicada a cada uma das linhas (ou colunas) do domínio. Entretanto, em problemas em geometria cilíndrica, a correção realizada na direção radial não apresenta influência suficiente na taxa de convergência (PRAKASH e PATANKAR, 1981). Portanto, a correção para a solução do sistema mencionado é realizada apenas “por linhas”.

3.6. Critérios de Convergência

São três os critérios utilizados para interromper a execução do programa — regime permanente — ou para selecionar o vetor solução do sistema de equações algébricas.

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

$$\left| \frac{\phi_P^{t+1} - \phi_P^t}{\phi_{máx} - \phi_{mín}} \right| \leq \delta \quad (3.74)$$

em que t representa o instante de tempo quando o critério utilizado para se avaliar se o regime permanente foi alcançado; o número de iterações, no interior dos métodos iterativos de solução dos SAE; e o número de correções das componentes da velocidade e da pressão no processo iterativo de correção utilizado pelo método SIMPLEC.

Para a consideração do regime permanente, é utilizada, também a avaliação da diferença entre o máximo e mínimo valor do campo ponderada pelo valor do passo no tempo, ou seja,

$$\frac{|\phi_P^{t+1} - \phi_P^t|}{\Delta t} \leq \delta \quad (3.75)$$

O terceiro, e último critério, utilizado em conjunto com o critério da Eq. (3.74) para a saída do algoritmo de correção pressão-velocidade, é o da norma do resíduo. Essa é considerada por meio da denominada norma L_2 (CONTE e DE BOOR, 1980).

$$L_2 = \left[\sum_{i=1}^N |\text{resíduo}_i|^2 \right]^{1/2} \quad (3.76)$$

Capítulo 4 - Verificação

A metodologia descrita no Cap. 3 foi utilizada na construção de um programa computacional escrito em linguagem FORTRAN para a solução do escoamento reativo. Esse programa tem a finalidade de resolver o escoamento acoplado com as equações de conservação de energia e espécies, conforme descrito no Cap. 2.

Para avaliar a capacidade de solução do programa são utilizados alguns problemas simples, que possuem solução analítica ou numérica disponíveis na literatura. Os resultados obtidos por meio do código computacional são comparados com essas soluções clássicas. Com isso, garante-se que as soluções obtidas para todos os casos analisados sejam suficientemente precisas, de modo a representar (ou prever) adequadamente — apesar das simplificações do modelo —, o comportamento do sistema físico.

4.1. Entrada Hidrodinâmica

A região desde a entrada de um tubo circular ao ponto para o qual a camada limite converge é denominada região de entrada hidrodinâmica, e o comprimento da mesma, comprimento de entrada hidrodinâmica L_h (ÇENGEL, 2003). O escoamento na região de entrada é denominado em desenvolvimento hidrodinâmico, visto que é o local onde o perfil de velocidade se desenvolve. A região localizada após região a de entrada, na qual o perfil de velocidade é totalmente desenvolvido e mantém-se

invariável é denominada região hidrodinamicamente desenvolvida. O perfil de velocidade nesse local é parabólico para o escoamento laminar (ÇENGEL, 2003).

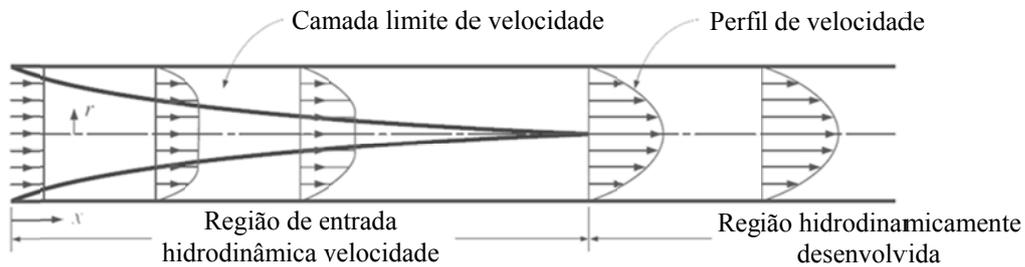


Figura 4.1: Desenvolvimento de camada limite hidrodinâmica laminar em um tubo circular. Adaptado de (ÇENGEL, 2003)

O perfil de velocidade obtido numericamente é comparado com soluções clássicas nas próximas seções.

4.1.1. Região Hidrodinamicamente Desenvolvida

Para o escoamento hidrodinamicamente desenvolvido a solução analítica do perfil de velocidade é dada por (INCROPERA *et al.*, 2008),

$$\frac{u}{u_m} = 2 \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (4.1)$$

A queda de pressão é dada por,

$$\frac{dP}{dx} = -u_m \frac{8\mu}{R^2} \quad (4.2)$$

Para cada número de Reynolds utilizado na comparação entre as soluções numérica e analítica é necessário considerar diferentes comprimentos de entrada. Os mesmos podem ser obtidos a partir da expressão (INCROPERA *et al.*, 2008),

$$\frac{L_{ent}}{2R} \approx 0.05Re \quad (4.3)$$

Considerando um duto de diâmetro interno igual a 0,1 m, definem-se os comprimentos para o cálculo em cada um dos casos analisados, conforme mostrado na Tab. 4.1.

Tabela 4.1: Comprimentos de entrada hidrodinâmica analisados.

Re	L_{ent} (m)	Comprimento Analisado (m)
100	0,5	1,0
500	2,5	5,0
1000	5,0	10,0
1500	7,5	15,0
2000	10,0	20,0

As equações de conservação apresentadas nos capítulos anteriores foram escritas considerando-se regime transiente. Conseqüentemente, para a comparação dos resultados numéricos em regime permanente é necessária a utilização de um critério avaliando se a solução numérica não apresenta evolução temporal.

Para a seleção de Δt é utilizada a condição CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) (ISAACSON e KELLER, 1994). O valor utilizado para este número é dado por,

$$CFL = \frac{\text{MAX}(u)\Delta t}{\text{MIN}(\Delta x)} \quad (4.4)$$

Como uma formulação totalmente implícita foi utilizada na integração das equações de conservação no tempo, por definição, o sistema de equações algébricas é incondicionalmente estável, ou seja, o intervalo de tempo é limitado por precisão (MALISKA, 2004). Entretanto, usar a formulação totalmente implícita não significa ser possível a utilização de qualquer valor de intervalo de tempo, pois, ao resolver mais de uma equação, o problema do acoplamento pode limitar severamente o valor de Δt

(MALISKA, 2004). Portanto, para todos os casos-teste analisados, foi utilizada, como valor inicial para o intervalo de tempo, a seguinte relação,

$$\Delta t = 0,04 \frac{\text{MIN}(\Delta x)}{\text{MAX}(u)} \quad (4.5)$$

na qual o fator 0,04 (obtido por meio de testes) é adotado de modo a permitir a solução dos sistemas de equações para todas as malhas avaliadas nos testes sem a ocorrência de instabilidades.

A tolerância na solução iterativa do sistema de equações algébricas para as velocidades e para a correção da pressão foi arbitrada em 10^{-7} e 10^{-2} , respectivamente. O procedimento iterativo que trata o acoplamento pressão-velocidade é considerado convergido quando variações inferiores a 5×10^{-6} forem obtidas ou a norma L_2 do resíduo seja inferior a 10^{-10} . A tolerância para o teste de regime permanente para as velocidades é de 10^{-5} .

As malhas utilizadas na verificação foram selecionadas para que a comparação entre as mesmas seja feita considerando o incremento de pontos em ambas as direções coordenadas. As malhas contempladas no presente estudo estão organizadas na Tab. 4.2, na qual M representa o número total de pontos na direção x e N , o número total de pontos na direção r . É importante ressaltar que as malhas utilizadas não são uniformes, sendo sempre utilizada a concentração de pontos nas regiões de maiores gradientes (paredes e próximo à entrada) por meio das transformações algébricas apresentadas na Sec. 3.1.1.

Tabela 4.2: Malhas utilizadas nos testes para a avaliação da velocidade.

M	N	Total ($M \times N$)	Total com Pontos Fictícios
50	50	2.500	2.704
60	50	3.000	3.224
70	50	3.500	3.744
80	80	6.400	6.724
90	80	7.200	7.544
100	80	8.000	8.364
110	100	11.000	11.424
120	100	12.000	12.444
130	100	13.000	13.464

Foi utilizada a média dos desvios relativos máximos dos perfis de velocidade desenvolvidos, tendo como parâmetro a solução analítica (4.1). Dessa forma o erro máximo relativo de cada um dos números de Reynolds considerados compõe um termo de uma média aritmética realizada para cada configuração de malha. Esses valores estão apresentados na Fig. 4.2. As barras de erro correspondem ao desvio padrão dessa média, para cada uma das malhas analisadas.

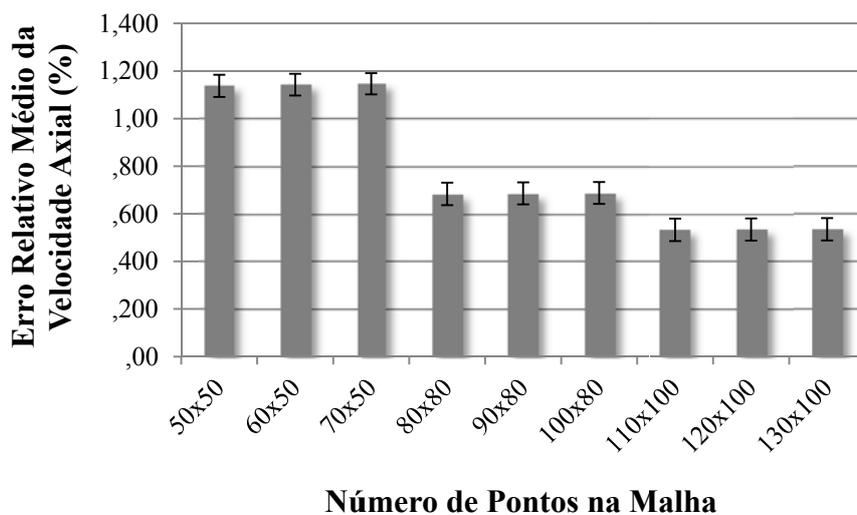


Figura 4.2: Erros relativos médios das velocidades axiais para os números de Reynolds avaliados.

A mesma compilação dos dados foi realizada para a pressão. Os valores estão apresentados na Fig. 4.3.

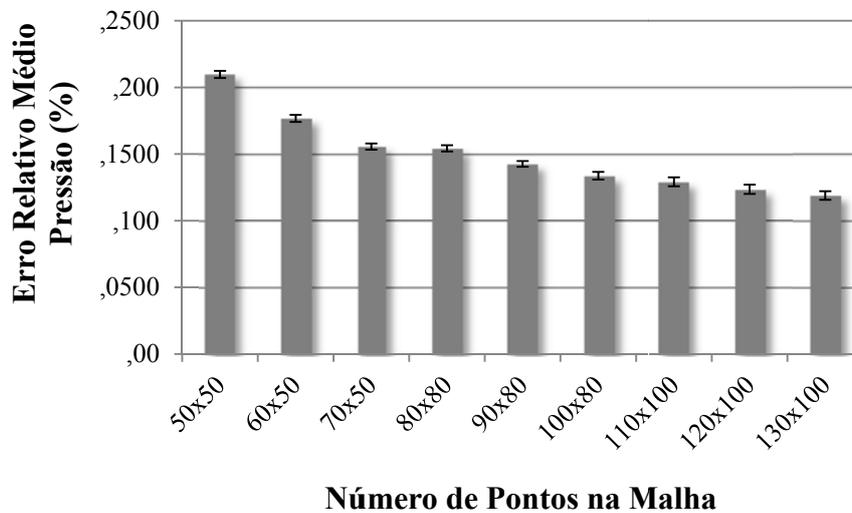


Figura 4.3: Erros relativos médios das pressões para os números de Reynolds avaliados.

Observa-se que em função do aumento do número de pontos na malha a discrepância entre os erros máximos tanto da velocidade quanto da pressão são reduzidos. Esse é o comportamento esperado, uma vez que, à medida que o número de pontos é aumentado, mais o domínio discretizado aproxima-se de um domínio contínuo.

Os perfis dos desvios relativos de velocidade ao longo da direção radial podem ser observados na Fig. 4.4 para o escoamento hidrodinamicamente desenvolvido com Reynolds igual a 100 e 2000. Observa-se que, embora tenham sido considerados os valores máximos apresentados na Fig. 4.2, esses valores correspondem apenas ao ponto mais próximo à parede e, na média, os erros são inferiores a 0,25%.

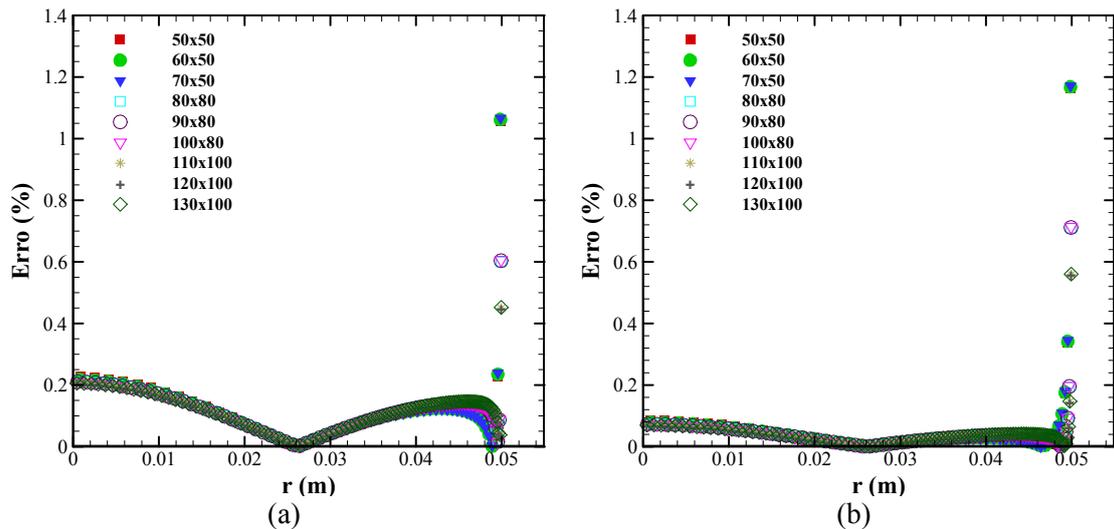


Figura 4.4: Perfil do erro relativo da velocidade axial para o escoamento hidrodinamicamente desenvolvido de Reynolds igual a (a) 100 e (b) 2000.

4.1.2. Região em Desenvolvimento Hidrodinâmico

O escoamento em desenvolvimento hidrodinâmico não possui solução analítica. No entanto, ROHSENOW *et al.* (1998) apresentam os resultados de HORNBECK (1964) para tal escoamento. Esses resultados foram obtidos para $Re = 2000$ (NASCIMENTO *et al.*, 2006), sendo então uma comparação qualitativa realizada somente para este caso. Os perfis de velocidade para três malhas com diferentes números de pontos estão apresentados na Fig. 4.5 juntamente com os resultados da literatura (HORNBECK, 1964). Nota-se que mesmo para o caso de pior resolução o resultado numérico apresenta concordância boa com relação ao resultado de HORNBECK (1964).

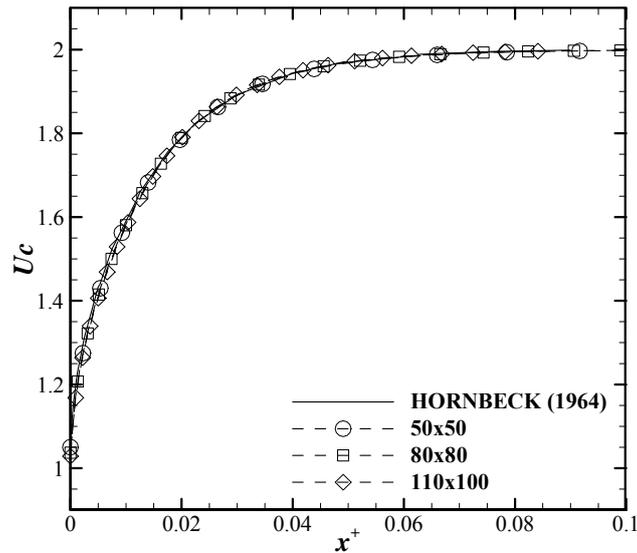


Figura 4.5: Perfil de velocidade em desenvolvimento ao longo do eixo de simetria ($r = 0$).

Os eixos da Fig. 4.5 são dados em função dos números adimensionais,

$$U_c = \frac{u}{u_0} \quad (4.6)$$

$$x^+ = \frac{x}{x_0 \text{Re}} \quad (4.7)$$

A partir das análises realizadas nas Secs. 4.1.1 e 4.1.2, conclui-se o código computacional é adequado que para a obtenção dos campos de velocidade e pressão em escoamentos não reativos.

4.2. Entrada Térmica

A região no qual a camada limite térmica se desenvolve e se encontra no centro do tubo é denominada região de entrada térmica, e o comprimento da mesma é denominado comprimento de entrada térmica L_T (ÇENGEL, 2003). O escoamento nessa região é denominado escoamento em desenvolvimento térmico, visto que essa é a região na qual o perfil de temperatura se desenvolve. A região posterior a essa, na qual

o perfil adimensional de temperatura, $(T_s - T)/(T_s - T_m)$, permanece inalterado é chamada de região termicamente desenvolvida. A região na qual o escoamento é tanto hidrodinâmico quanto termicamente desenvolvido, de modo que os perfis de velocidade e temperatura adimensional permanecem inalterados é denominada região de escoamento plenamente desenvolvido, ou região plenamente desenvolvida.

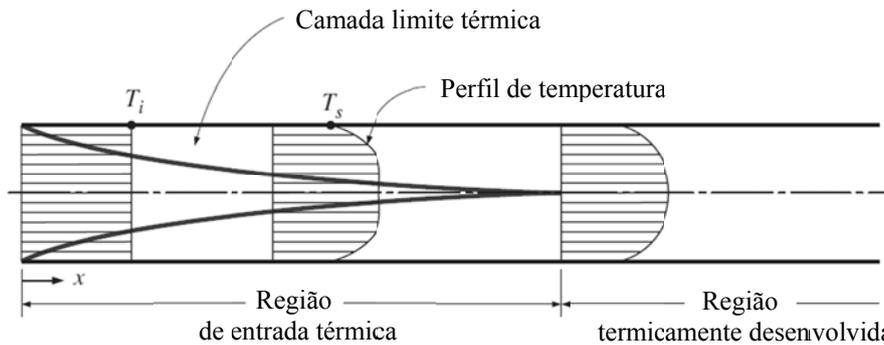


Figura 4.6: Desenvolvimento da camada-limite térmica em um tubo circular resfriado. Adaptado de (ÇENGEL, 2003)

O perfil de temperatura obtido através da solução numérica é comparado com soluções clássicas para o escoamento exposto a dois tipos distintos de condição de contorno na parede: temperatura prescrita na parede (condição de contorno de primeiro tipo ou de Dirichlet) e fluxo prescrito na parede (condição de contorno de segundo tipo, ou de Neumann). As soluções são obtidas utilizando-se as malhas da Tab. 4.3.

A verificação da solução numérica para as velocidades foi realizada utilizando a média dos erros entre todos os números de Reynolds para cada uma das malhas. Como pode ser notado na Fig. 4.2 e na Fig. 4.3 os desvios padrão obtidos nessa média possuem valores baixos, o que significa que o erro praticamente não varia com o número de Reynolds considerado. Esse mesmo comportamento ocorre com a solução da equação da energia, ou seja, para os perfis de temperatura. Portanto, serão apresentados, nas Sec. 4.2.1 e 4.2.2, apenas os resultados obtidos para o caso em que o

número de Reynolds é igual a 100, sendo os resultados para os outros casos, análogos, a menos de um pequeno desvio, da ordem de 0,05%.

Tabela 4.3: Malhas utilizadas nos testes para avaliação da temperatura.

M	N	Total ($M \times N$)	Total com Pontos Fictícios
60	60	3.600	3.844
70	60	4.200	4.464
80	60	4.800	5.084
80	80	6.400	6.724
90	80	7.200	7.544
100	80	8.000	8.364
100	100	10.000	10.404
110	100	11.000	11.424
120	100	12.000	12.444

O comprimento na direção axial considerado na verificação é o mesmo utilizado por COTTA e ÖZİŞİK (1986a), assim como a definição do número de Nusselt, que são dados por,

$$X = \frac{\alpha x}{u_m (2R)^2} \quad (4.8)$$

$$\text{Nu} = \frac{h(x) 2R}{k} \quad (4.9)$$

Nas quais u_m é a velocidade média na seção e $h(x)$ é o coeficiente local de transferência de calor.

4.2.1. Temperatura Prescrita na Parede

A solução utilizada como referência para a verificação dos resultados numéricos considera um escoamento hidrodinamicamente desenvolvido e em desenvolvimento térmico. Os resultados, obtidos por COTTA e ÖZİŞİK (1986a), servem como referência e permitem a análise da região mais próxima ao ponto inicial de aplicação da condição de contorno. A comparação entre os resultados numéricos e os clássicos (COTTA e ÖZİŞİK, 1986a) é realizada tanto para o número de Nusselt local quanto para a temperatura média na seção do duto.

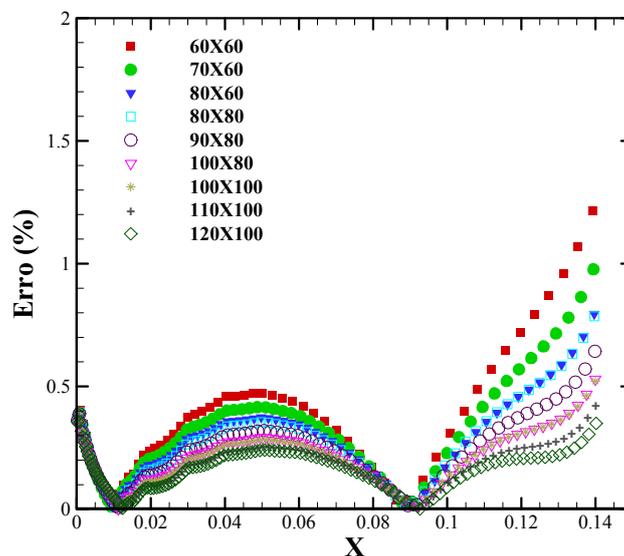


Figura 4.7: Erro percentual da temperatura média ao longo do tubo.

Os perfis de temperatura média na seção mostram boa aproximação com relação à solução analítica. À medida que o número de pontos na malha aumenta, a solução numérica se aproxima mais da solução exata; comportamento esperado. Os erros nas malhas a partir de 80 pontos na direção radial são inferiores a 1%, mostrando serem essas melhores escolhas para a solução do problema.

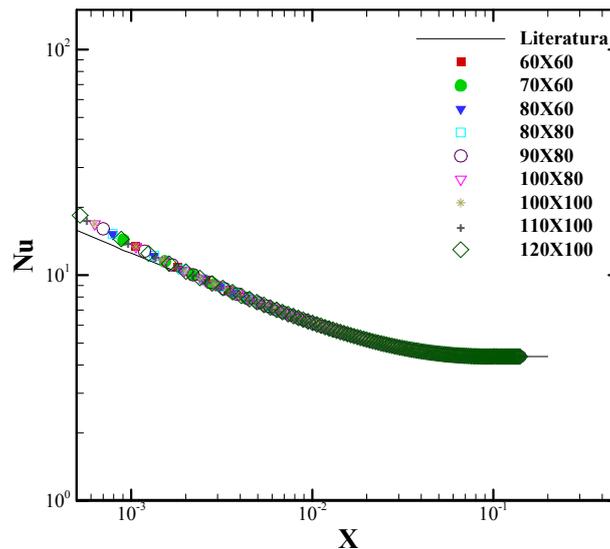


Figura 4.8: Número de Nusselt local: temperatura prescrita na parede.

Já para o número de Nusselt a solução numérica apresenta um desvio na região em desenvolvimento térmico. O erro máximo nessa região é da ordem de 5%. No entanto, na região desenvolvida, os erros são inferiores a 1%. O aumento de pontos na região de entrada não reduz o erro. COTTA e ÖZİŞİK (1986a) mencionam que erros na região de entrada são esperados ao utilizar métodos como o de volumes finitos, uma vez que os mesmos não conseguem descrever com muita precisão regiões muito próximas à entrada.

4.2.2. Fluxo de Calor Prescrito na Parede

COTTA e ÖZİŞİK (1986b) apresentaram a solução para um escoamento hidrodinamicamente desenvolvido sujeito a condição de contorno de segundo tipo na parede, i.e., fluxo prescrito. Nesse caso, a comparação é somente realizada para o número de Nusselt local, uma vez que os valores das temperaturas médias não estão disponíveis no trabalho.

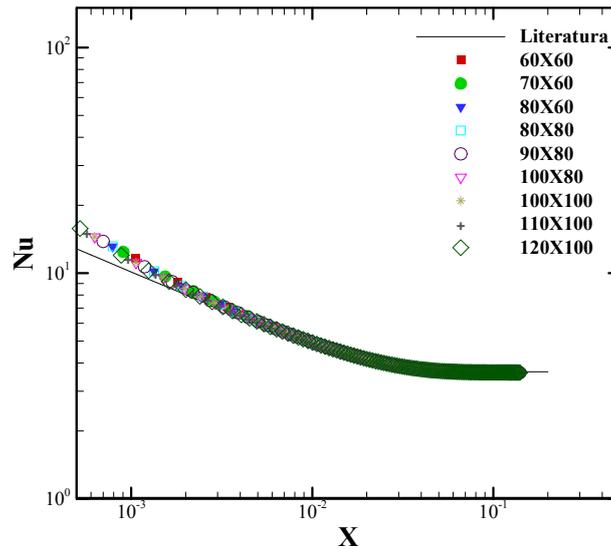


Figura 4.9: Número de Nusselt local: fluxo de calor prescrito nas paredes.

O mesmo comportamento para o caso de temperatura prescrita nas paredes ocorre para o caso de fluxo prescrito. Os desvios na região desenvolvida, como no caso citado, são inferiores a 1%.

Conclui-se que a solução numérica fornecida pelo código desenvolvido no presente trabalho produz resultados adequados para a solução de campos escalares, como a temperatura, independentemente da condição de contorno aplica. Os resultados ficam mais precisos em posições axiais mais elevadas, devido a pequenas imprecisões em regiões muito próximas à entrada, da ordem de 0,1% do comprimento total analisado.

Capítulo 5 - Resultados

O presente trabalho analisa um sistema equivalente ao estudado numérica e experimentalmente por MITCHELL *et al.* (1980). A Fig. 5.1 apresenta um esquema do queimador e do domínio computacional analisado. Os parâmetros para o modelo numérico são apresentados a seguir.

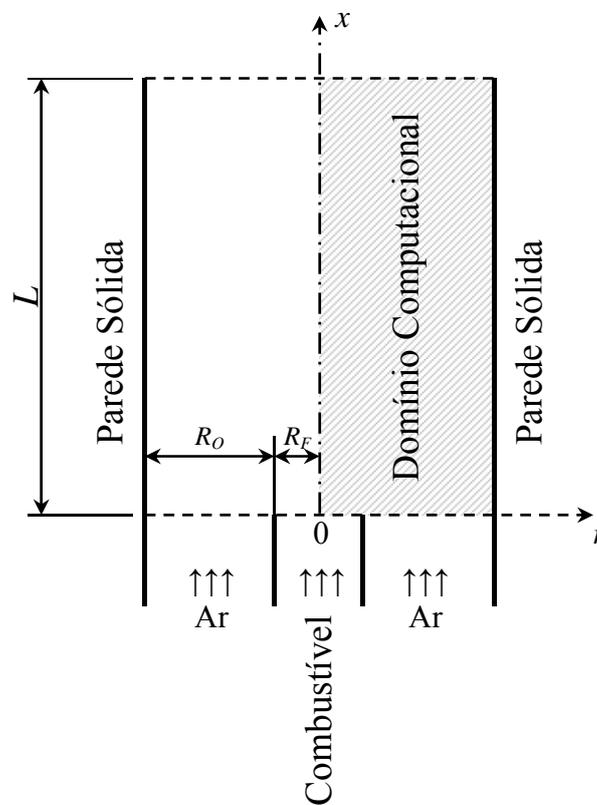


Figura 5.1: Esquema do sistema analisado.

Parâmetros geométricos

$$R_o = 2,54 \text{ cm}$$

$$R_f = 0,635 \text{ cm}$$

$$L = 30 \text{ cm}$$

Condições de operação

Pressão na saída do combustor: $P_a = 1 \text{ atm}$

Temperatura na entrada: $T = 298 \text{ K}$

Linha de combustível

Velocidade axial: $u_F = 4,5 \text{ cm/s}$

Velocidade radial: $v_F = 0 \text{ cm/s}$

Temperatura: $T_F = 298 \text{ K}$

Composição: $Y_F = 1,0$

Linha do Oxidante

Velocidade axial: $u_O = 9,88 \text{ cm/s}$

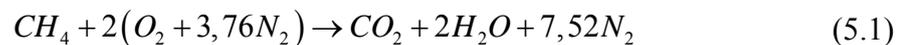
Velocidade radial: $v_O = 0 \text{ cm/s}$

Temperatura: $T_O = 298 \text{ K}$

Composição: $Y_{O_2} = 0,232$; $Y_{N_2} = 0,768$

5.1. Chama Difusiva de Metano

Os resultados para a chama de metano são obtidos considerando a reação global



A estrutura da malha não uniforme, com 80×80 pontos, utilizada para a solução numérica do problema é apresentada na Fig. 5.2.

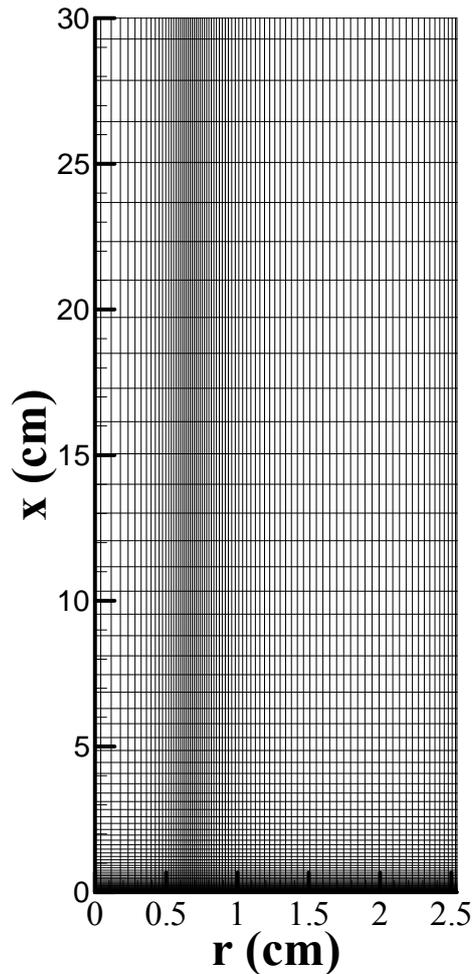
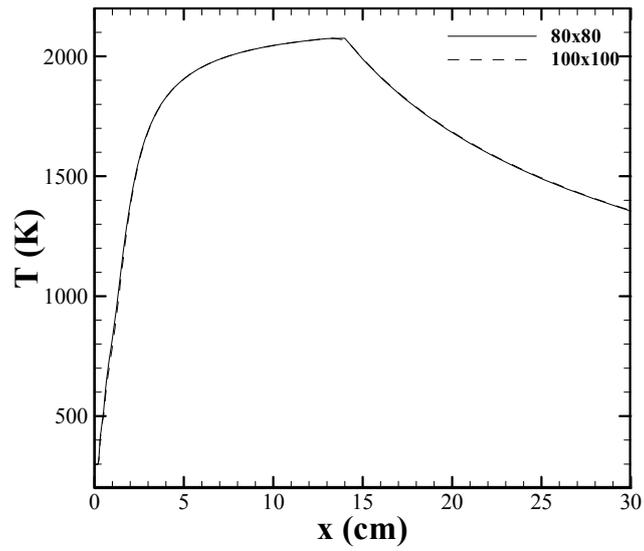
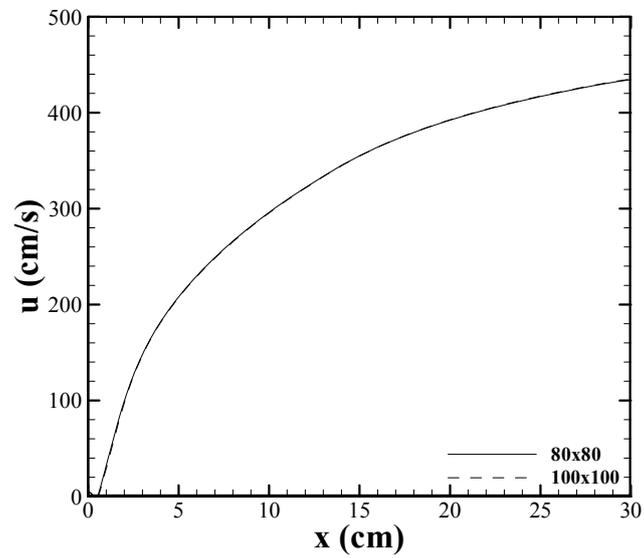


Figura 5.2: Distribuição dos pontos na malha 80×80.

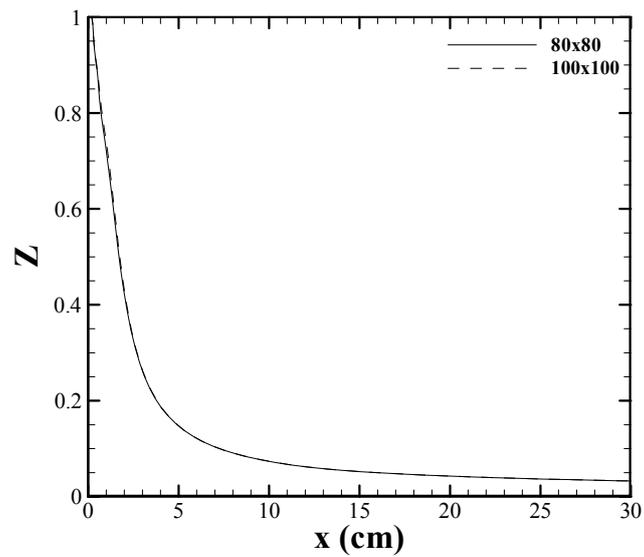
Foram analisadas duas malhas diante dos resultados obtidos no Cap. 4, uma com 80×80 pontos e outra com 100×100 pontos. Os perfis de temperatura, velocidade axial, frações molares e do escalar conservado ao longo do eixo de simetria, obtidos para as duas malhas são apresentados na Fig. 5.3. A diferença relativa entre as soluções para as duas malhas é da ordem de 10^{-9} ; o suficiente para garantir que os resultados obtidos em ambos os casos sejam semelhantes. Portanto, é utilizada a malha contendo 80×80 visto que a obtenção dos resultados na mesma demanda tempo computacional — cerca de duas horas e meia — quase de duas vezes e meia menor que na malha mais refinada. A malha utilizada na análise é apresentada na Fig. 5.2.



(a)



(b)

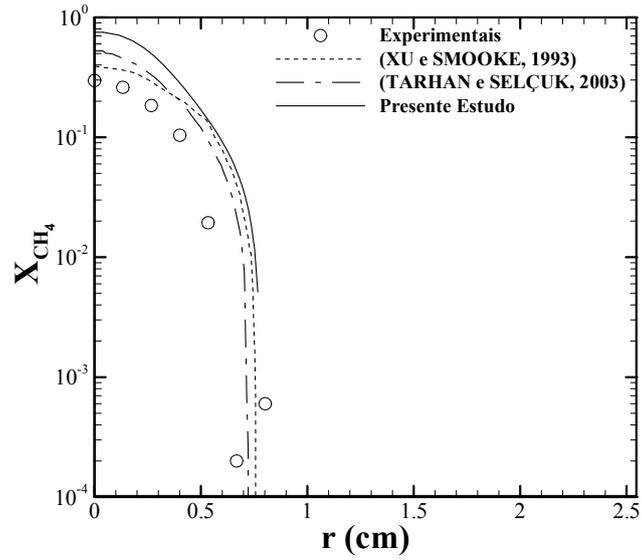


(c)

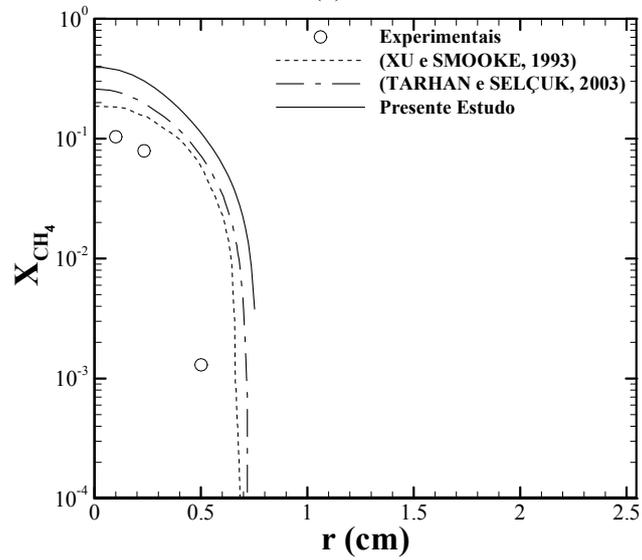
Figura 5.3: Comparação dos perfis de (a) Temperatura, (b) Velocidade Axial, (c) Fração de Mistura ao longo do eixo de simetria obtidas utilizando malhas de 80×80 e 100×100 pontos.

Para as posições axiais nas quais foram realizadas medições dos perfis de temperatura e frações molares por MITCHELL *et al.* (1980) (1,2 cm, 2,4 cm e 5,0 cm) são também apresentados os resultados numéricos obtidos no presente estudo por meio do código computacional para fins de comparação. Esse procedimento foi realizado por XU e SMOOKE (1993) e por TARHAN e SELÇUK (2003), que analisaram a mesma configuração utilizando modelo de chama fina. Algumas considerações realizadas no presente estudo diferem das utilizadas por XU e SMOOKE (1993) e TARHAN e SELÇUK (2003), como por exemplo, o método numérico e o modo como são consideradas as propriedades termodinâmicas da mistura. A comparação dos resultados obtidos no presente estudo com as soluções numéricas de XU e SMOOKE (1993) e TARHAN e SELÇUK (2003) e a solução experimental de MITCHELL *et al.* (1980) é importante para a avaliação da concordância dos resultados com os disponíveis na literatura.

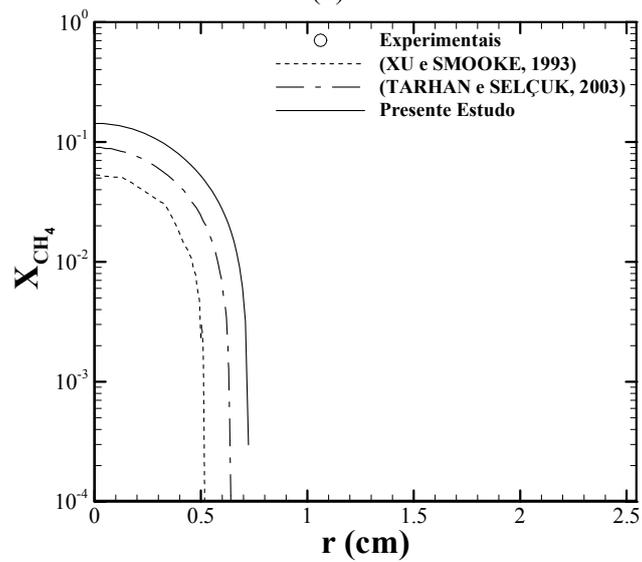
Os resultados mostrados na Fig. 5.4 indicam a capacidade do modelo utilizado no presente trabalho em capturar a tendência dos resultados experimentais. A solução fornece valores das frações molares de CH_4 com discrepância superior a 100% em todas as posições consideradas. Essa divergência se dá em função de o modelo utilizado considerar o número de Lewis para todos os componentes da mistura igual a um. Essa consideração, como mostram os resultados, não é uma boa aproximação. Outra característica relevante notada nos resultados numéricos de XU e SMOOKE (1993), de TARHAN e SELÇUK (2003) e do presente estudo é o fato de que todos superestimam a altura da chama. Como consequência, frações mássicas não nulas de CH_4 são encontradas na posição axial 5,0, na qual, segundo os resultados experimentais, já não existe mais tal componente presente na mistura (Fig. 5.4c).



(a)



(b)



(c)

Figura 5.4: Comparativo dos perfis de fração mássica de CH_4 nas posições axiais (a) 1,2 cm; (b) 2,4 cm; (c) 5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL *et al.*, 1980).

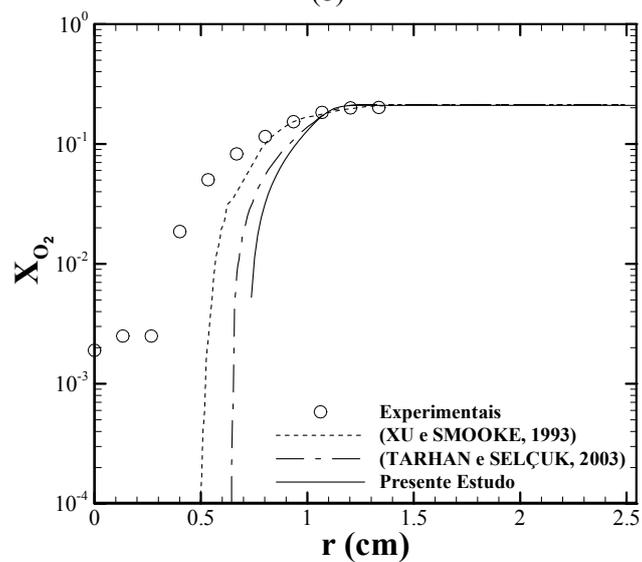
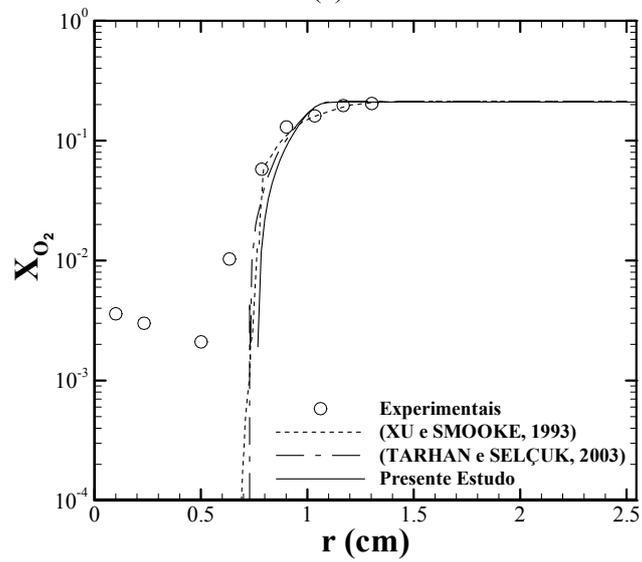
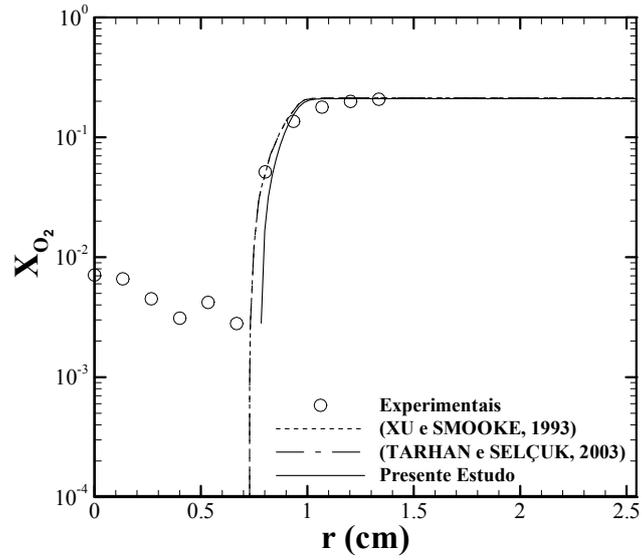
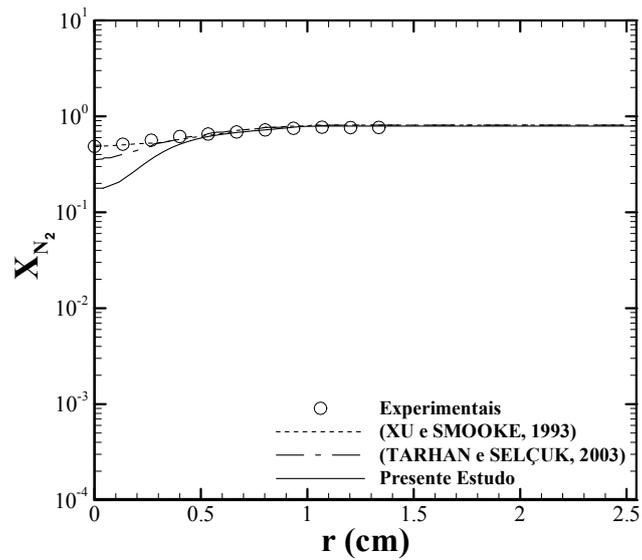
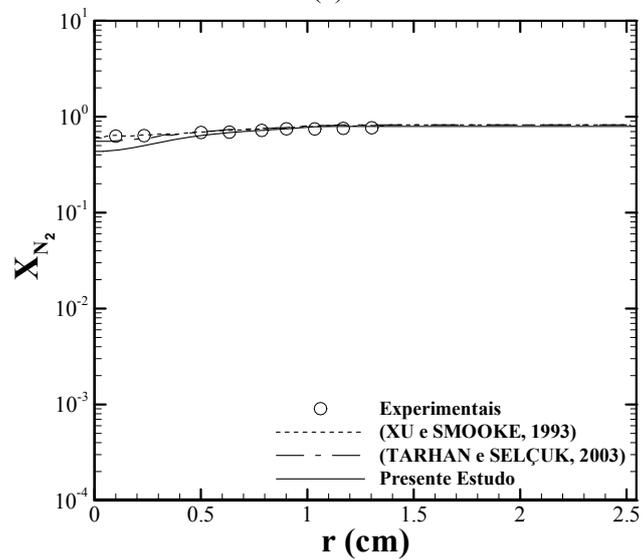


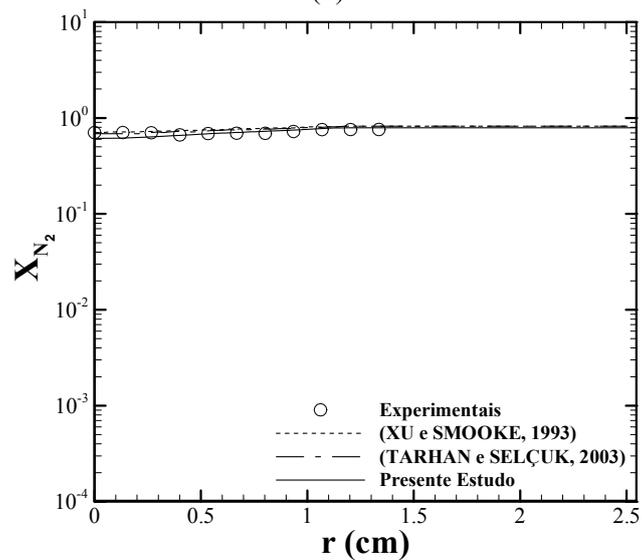
Figura 5.5: Comparativo dos perfis de fração mássica de O_2 nas posições axiais (a) 1,2 cm; (b) 2,4 cm; (c) 5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL *et al.*, 1980)



(a)

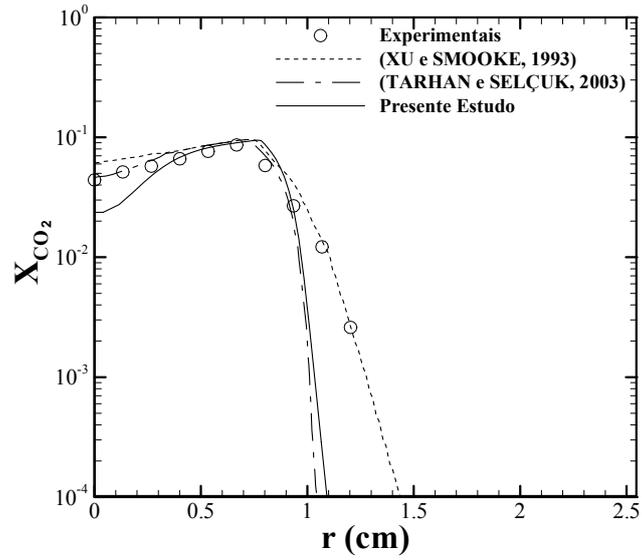


(b)

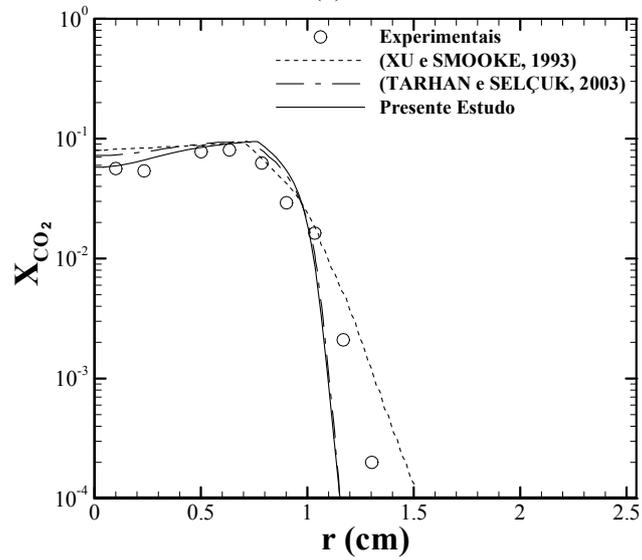


(c)

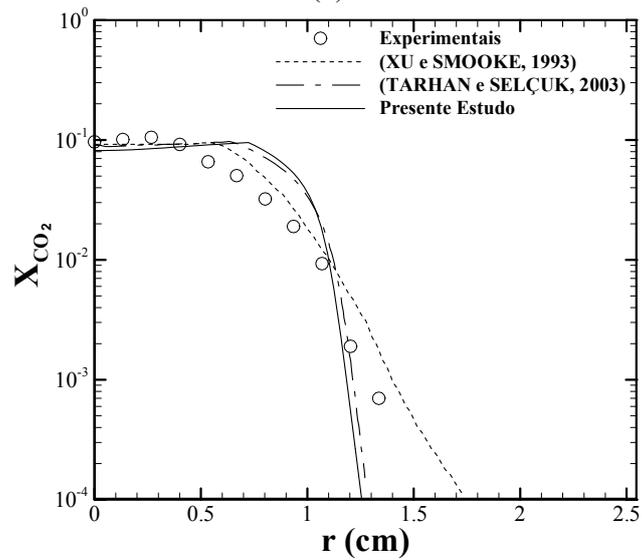
Figura 5.6: Comparativo dos perfis de fração mássica de N_2 nas posições axiais (a) 1,2 cm; (b) 2,4 cm; (c) 5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL *et al.*, 1980)



(a)

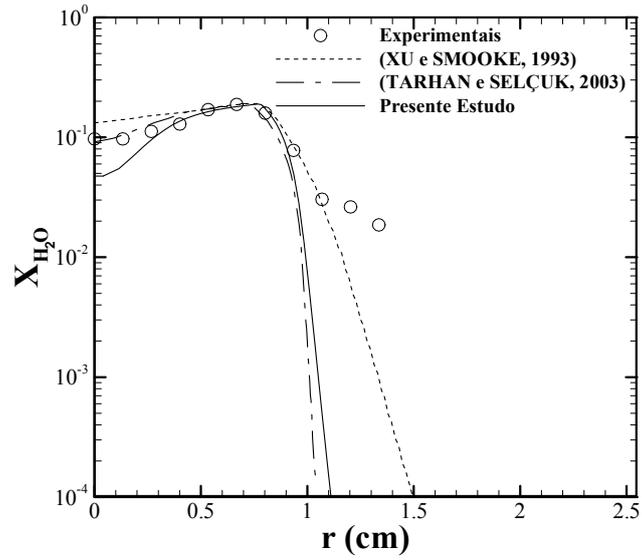


(b)

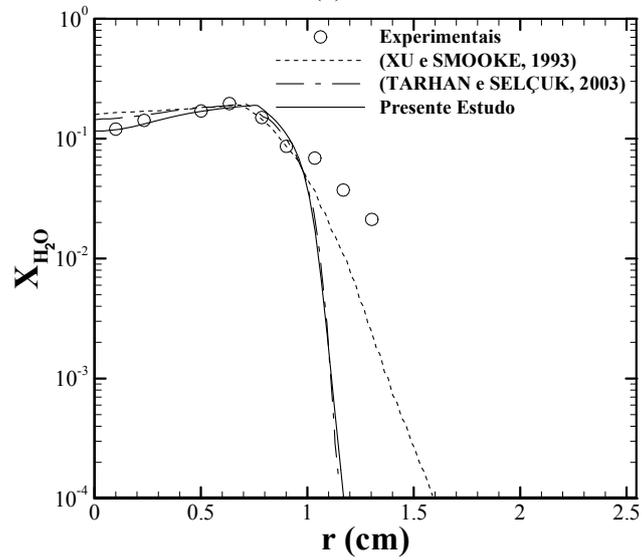


(c)

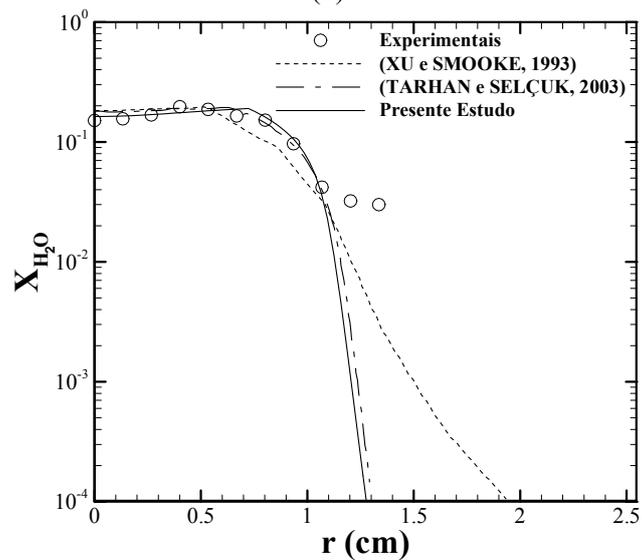
Figura 5.7: Comparativo dos perfis de fração mássica de CO_2 nas posições axiais (a) 1,2 cm; (b) 2,4 cm; (c) 5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL *et al.*, 1980)



(a)



(b)



(c)

Figura 5.8: Comparativo dos perfis de fração mássica de H_2O nas posições axiais (a) 1,2 cm; (b) 2,4 cm; (c) 5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL *et al.*, 1980)

A diferença no comprimento das linhas representativas em todos os resultados numéricos da literatura com relação às do presente estudo residem no fato de XU e SMOOKE (1993) e TARHAN e SELÇUK (2003) terem utilizado malhas adaptativas para a obtenção da solução para o sistema.

Os resultados apresentados na Fig. 5.5 mostram que o modelo utilizado no presente trabalho captura qualitativamente a tendência dos resultados experimentais. As soluções obtidas nos três estudos numéricos estimam com razoável precisão os perfis de O_2 na região do oxidante. O mesmo não ocorre na região do combustível, uma vez que o modelo de chama fina não prevê a existência de oxidante nessa região. Na posição axial $x = 5,0$ cm as estimativas são menos precisas, uma vez que a altura chama é superestimada pelos resultados numéricos. Como consequência, nessa posição axial, a solução numérica estima uma chama mais larga que a obtida experimentalmente, característica representada pelos perfis de O_2 .

Os resultados obtidos para as frações molares de N_2 representam com melhor aproximação as medidas experimentais, como mostrado na Fig. 5.6, com diferença relativa inferior a 1%. O perfil obtido numericamente no presente estudo apresenta na região próxima à entrada uma discrepância um pouco maior, em torno de 35 %.

Os perfis de CO_2 obtidos numericamente possuem boa concordância com os resultados experimentais na região do combustível; em geral, com erros menores que 5%. Na região próxima a entrada, os resultados obtidos pelos outros trabalhos numéricos têm melhor aproximação, onde o presente estudo apresenta discrepância de até 50% para a posição axial $x = 1,2$ cm. No entanto, na posição axial $x = 2,4$ cm, a melhor estimativa é obtida pelo presente estudo. A discrepância na região do oxidante é explicada pela formação vórtices na região próxima a saída, o que gera a penetração de umidade no sistema.

O mesmo comportamento observado para os perfis de CO_2 é encontrado para as frações molares de H_2O . Assim como no caso citado, na região do combustível, as estimativas melhor representam os dados experimentais na região do combustível. Da mesma forma, a umidade incorporada ao escoamento pelas recirculações próximo a saída faz com que os resultados sejam menos precisos na região do oxidante.

A altura da chama pode ser definida como a posição axial na qual se localiza a maior temperatura ao longo do eixo de simetria, em virtude de ser possível obter essa medida experimentalmente. A altura da chama obtida experimentalmente tem valor aproximado de 5,8 cm. O presente estudo superestima esse valor, considerando a altura da mesma em 14 cm. XU e SMOOKE (1993) e TARHAN e SELÇUK (2003) avaliaram a altura da chama em 7,6 cm e 12 cm, respectivamente, utilizando o mesmo critério. Esse comportamento é característico do modelo de chama fina e é justificado pelo uso de taxa de reação infinita. O perfil de temperatura ao longo do eixo de simetria é apresentado na Fig. 5.9.

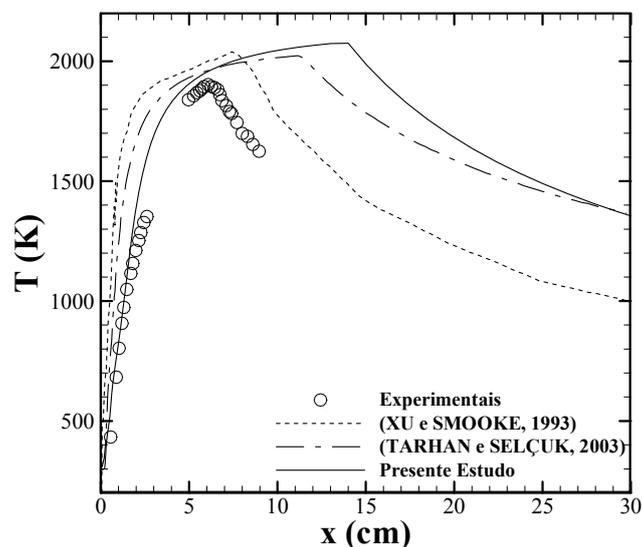
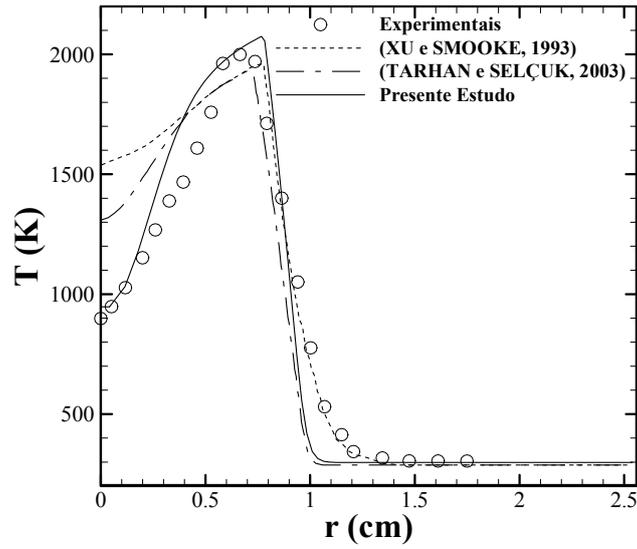
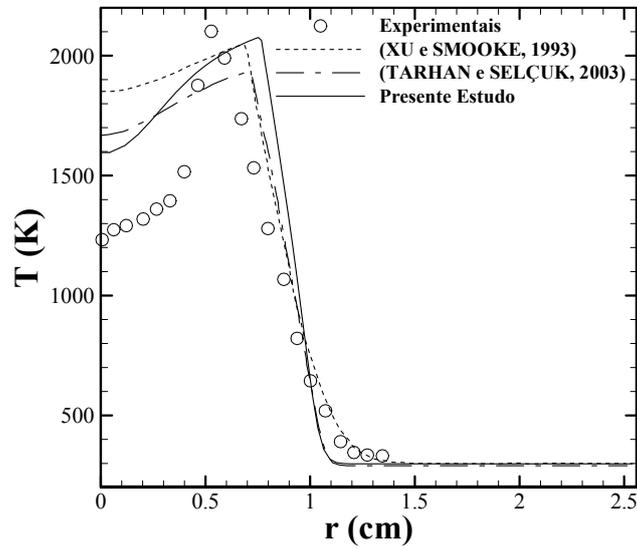


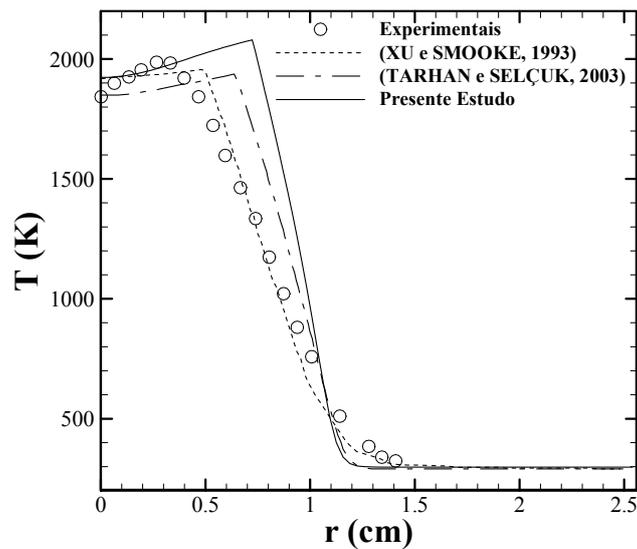
Figura 5.9: Comparativo dos perfis de temperatura ao longo do eixo de simetria. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL *et al.*, 1980)



(a)



(b)



(c)

Figura 5.10: Comparativo dos perfis de temperatura nas posições axiais (a) 1,2 cm; (b) 2,4 cm; (c) 5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL *et al.*, 1980)

Observa-se na Fig. 5.10 que os perfis obtidos numericamente reproduzem com boa precisão os dados experimentais na região do oxidante (desvios menores que 5%); entretanto são capazes somente de capturar a tendência dos resultados experimentais na região do combustível. Como a chama localiza-se mais próxima à região central do duto — região do combustível —, melhores estimativas são obtidas próximo à parede — região do oxidante. Esse comportamento é justificado pelo modelo de chama fina, que superestima as temperaturas em regiões mais próximas à chama.

Os perfis de velocidade na direção radial em três posições axiais são apresentados na Fig. 5.11. Nota-se que os resultados numéricos capturam a tendência dos resultados experimentais, mas superestimam os valores obtidos experimentalmente. Esse comportamento é justificado pelas maiores temperaturas alcançadas pela chama com taxa de reação infinita que influencia diretamente na massa específica, aumentando a influência da força de corpo relativamente ao experimento. Nota-se que na região do oxidante, a velocidade calculada decai mais rapidamente que a obtida experimentalmente.

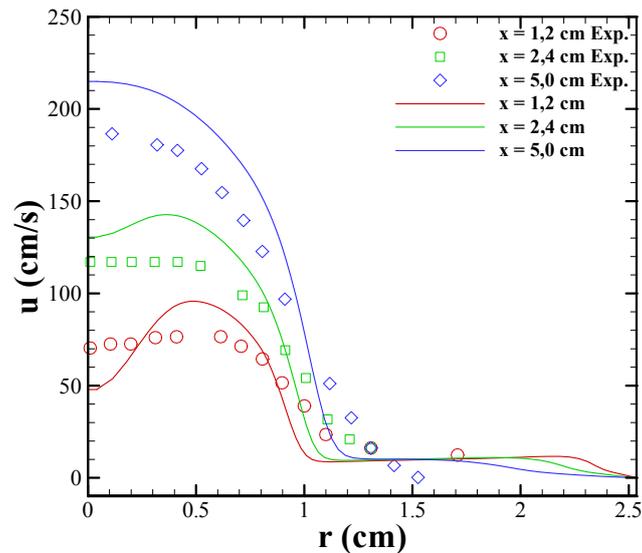


Figura 5.11: Comparativo dos perfis de velocidade axial nas posições axiais (a) 1,2 cm, (b) 2,4 cm, (c) 5,0 cm. Símbolos: resultados experimentais (MITCHELL *et al.*, 1980).

A estrutura geral dos campos dos campos de velocidade, frações mássicas, temperatura e fração de mistura da chama difusiva de metano obtida numericamente é apresentada na Fig. 5.12. As características observadas nas posições axiais $x = 1,2$ cm, $x = 2,4$ cm e $x = 5,0$ cm são visualizadas em toda a estrutura da chama. É possível notar na Fig. 5.12 os perfis de frações molares mais alongados que os encontrados no experimento (MITCHELL *et al.*, 1980). A impossibilidade de penetração de combustível na região do oxidante e vice-versa também é evidenciada. A Fig. 5.12 apresenta também a velocidade axial no domínio. A mesma, ao longo da linha de centro, é maior em razão da maior temperatura nessa região e dos efeitos de convecção natural. Uma velocidade máxima em torno de 4,0 m/s é alcançada na saída do queimador. Também pode ser observado pelas linhas de corrente que tanto combustível quanto o ar entrante no sistema escoam no sentido do eixo de simetria. Os efeitos da fora 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 causa o estreitamento e maior extensão da chama no sistema confinado. Gradientes de temperatura elevados iniciam-se próximo à entrada. A temperatura eleva-se em uma distância muito pequena desde o valor da mesma nos reagentes, 298 K, até aproximadamente 2050 K. É também apresentado o perfil da fração de mistura e a posição da chama, obtida através da Eq. (2.42).

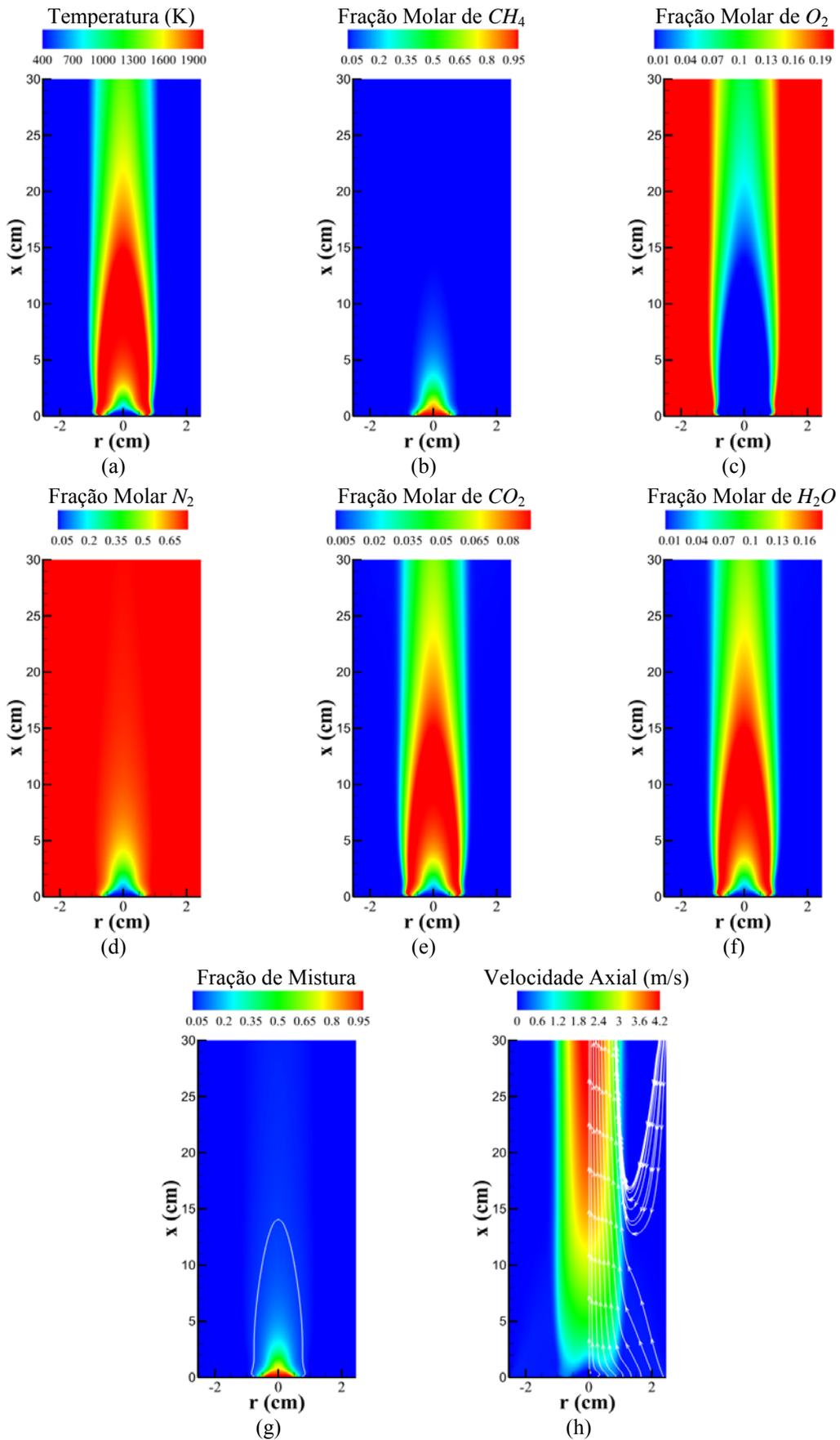


Figura 5.12: Perfis na chama de metano de: (a) Temperatura; (b) Fração molar de CH_4 ; (c) Fração molar de O_2 ; (d) Fração molar de N_2 ; (e) Fração molar de CO_2 ; (f) Fração molar de H_2O ; (g) Fração de mistura (posição da chama); (h) Velocidade axial (linhas de corrente).

É importante salientar que as recirculações obtidas numericamente também foram observadas nos trabalhos numéricos de TARHAN e SELÇUK (2003) e de XU e SMOOKE (1993). MITCHELL *et al.* (1980) também observaram a presença de recirculações em seu experimento. Observa-se na Fig. 5.13 que os vórtices não são originados numericamente, pois, com a variação do comprimento axial do duto, não há modificação na estrutura das recirculações; apenas o ajuste das mesmas ao comprimento do duto.

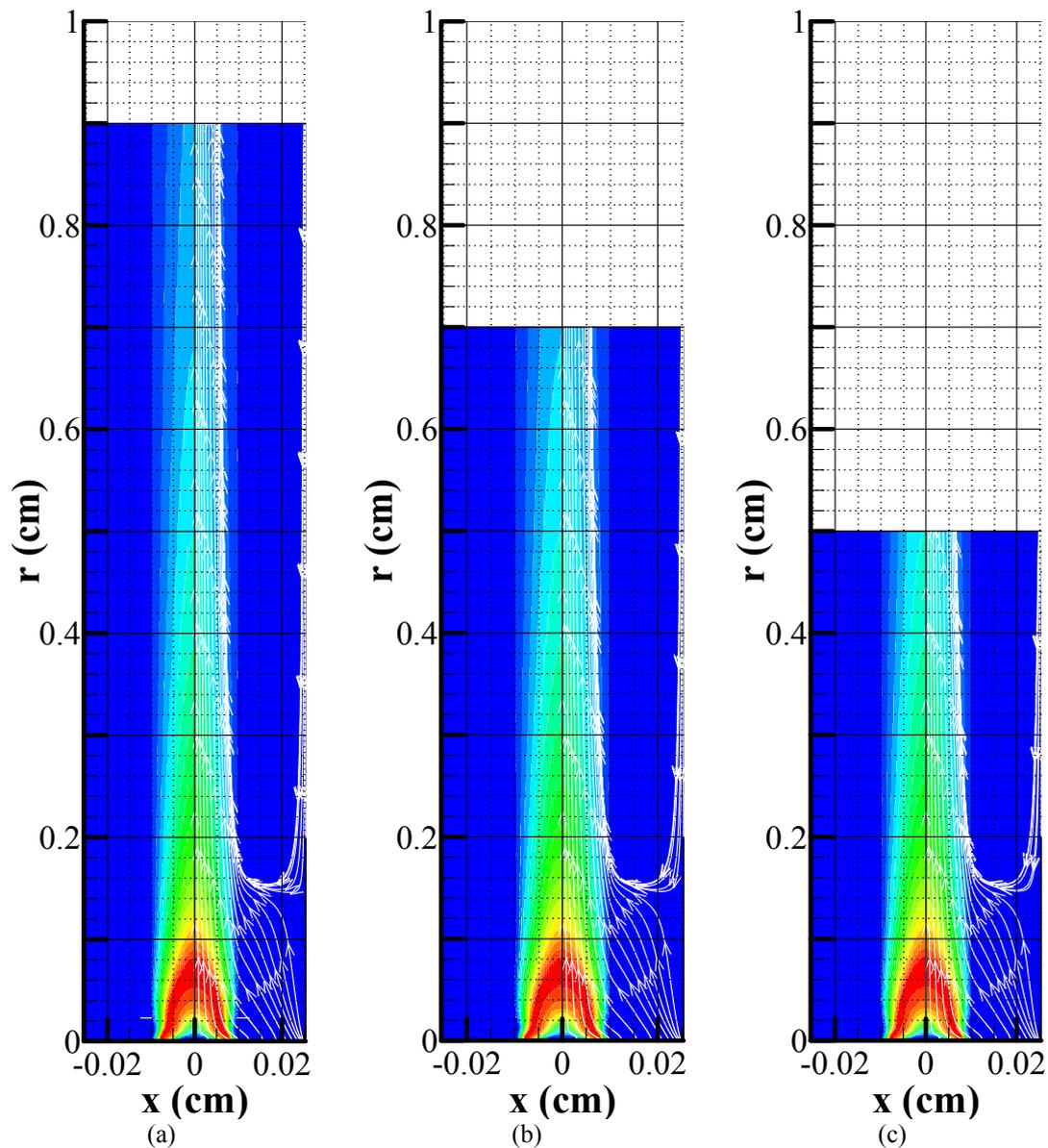


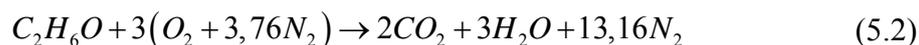
Figura 5.13: Perfis na chama de etanol de velocidade axial (linhas de corrente). Dutos de altura (a) 0,9 cm; (b) 0,7 cm; (c) 0,5 cm.

Todos os resultados numéricos encontrados no presente trabalho aproximam-se mais dos obtidos por TARHAN e SELÇUK (2003) do que dos obtidos por XU e SMOOKE (1993). Ressalta-se que XU e SMOOKE (1993) utilizaram uma malha mais grosseira e uma metodologia semelhante à empregada para o desenvolvimento do código computacional utilizado no presente estudo.

A combustão de metano no mesmo queimador serve como referência para os resultados obtidos na combustão do etanol. Os perfis de temperatura, frações molares e velocidade axial podem ser comparados de modo a avaliar se o comportamento esperado para a queima desse combustível é obtido na solução numérica.

5.2. Chama Difusiva de Etanol

Considerando a mesma configuração do sistema utilizado para a queima de metano (Sec. 5.1), obtêm-se os perfis das quantidades de interesse para a queima de etanol. A reação global para a queima de etanol é dada por



O etanol é um combustível oxigenado e essa característica é determinante tanto para os perfis de composição molar, quanto para a distribuição de temperatura na chama. Apesar disso, a temperatura máxima atingida pela chama tem valor aproximadamente igual à obtida na queima de metano (LITTLE, 2007). Dessa maneira, a diferença esperada para a chama de etanol, se comparada com a chama obtida na queima de metano, é a posição da mesma, e não variações substanciais na forma.

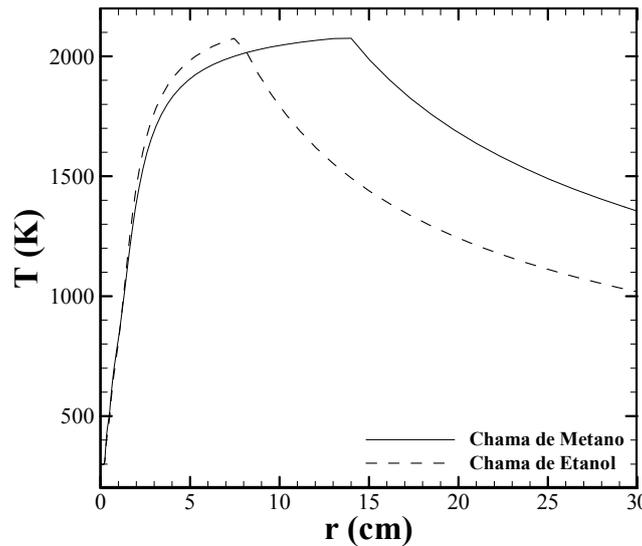


Figura 5.14: Comparativos dos perfis de temperatura das chamas de metano e etanol ao longo do eixo de simetria.

Como definido anteriormente, a altura da chama é considerada a posição axial sobre o eixo de simetria na encontra-se a temperatura máxima. Observa-se na Fig. 5.14 que a altura máxima calculada para a chama de etanol é menor que a calculada para a chama de metano. O valor obtido é de 7,5 cm. Considerando que o modelo de chama fina superestima a altura da chama, como comprovado na comparação do resultado numérico com o experimental para a chama de metano, espera-se que esse valor também esteja superestimado.

Os perfis de frações molares e temperatura ao longo do eixo radial para a posição axial $x = 1,2$ cm estão apresentados na Fig. 5.15 para chamas de metano e etanol. Nota-se, a partir da observação dos perfis de fração molar de combustível e oxigênio (O_2), que a chama gerada pela queima de etanol é mais estreita que a de metano. Essa característica também é evidenciada pela forma da curva representativa da temperatura. O fato de o etanol ser um combustível oxigenado pressupõe tal característica para a chama. No entanto, o modelo não contempla tal detalhamento do processo de combustão.

A justificativa para uma chama de menor tamanho reside no fato de o coeficiente estequiométrico mássico (s), apresentado na Eq. (2.22), da reação de combustão do etanol ter valor 2,087, enquanto que o valor desse mesmo termo para a reação de metano é igual a 4,0. Como consequência, além de uma chama menor, observam-se maiores concentrações molares de H_2O e CO_2 na chama de etanol. A maior concentração de N_2 na região do combustível na chama de etanol, com relação à 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 mássica de N_2 tende para o valor característico da fração molar de nitrogênio no ar.

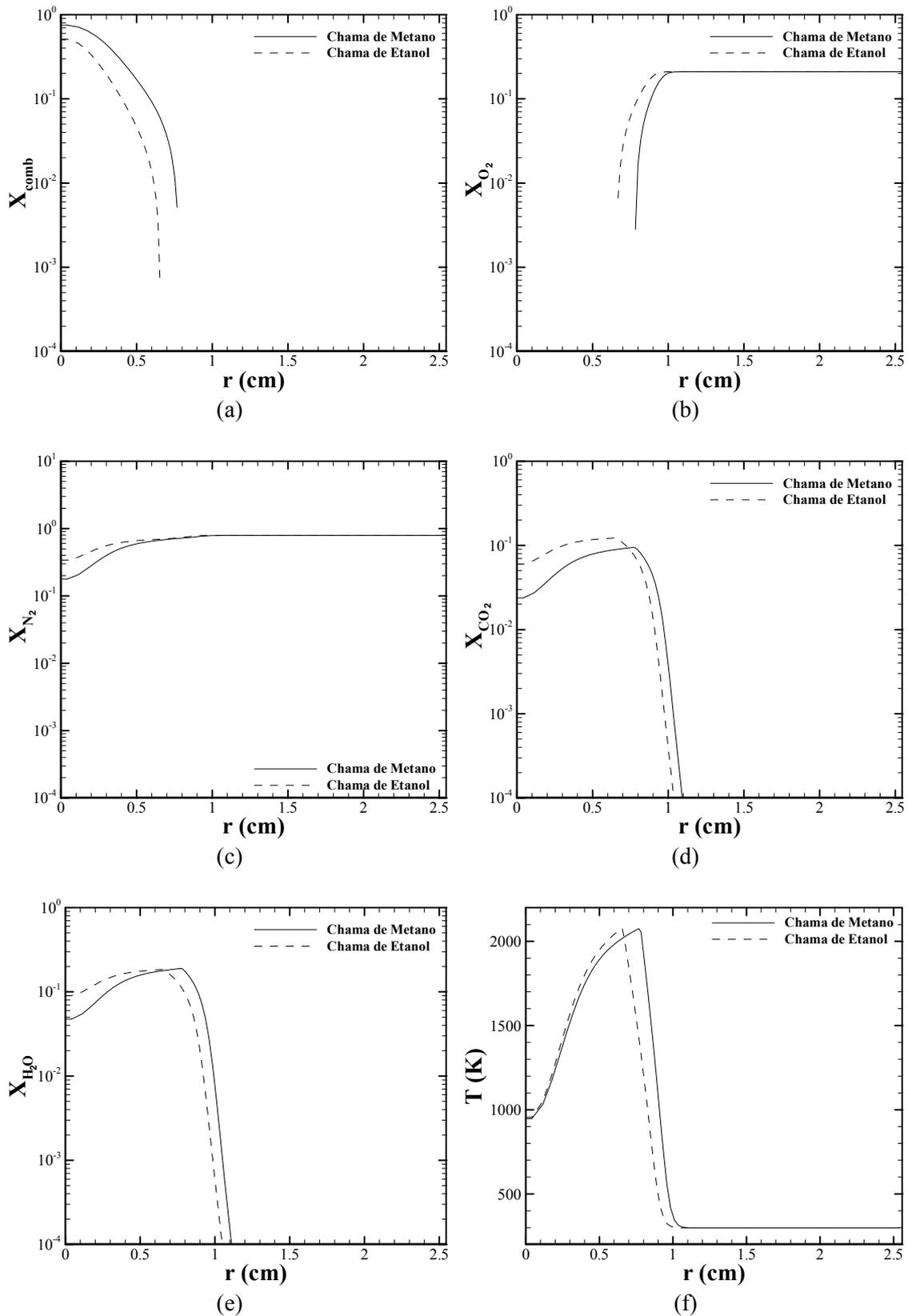


Figura 5.15: Comparativo dos perfis das chamas de metano e etanol na posição axial $x = 1,2$ cm ao longo da direção radial. (a) Fração molar de combustível; (b) Fração molar de O_2 ; (c) Fração molar de N_2 ; (d) Fração molar de CO_2 ; (e) Fração molar de H_2O ; (f) Temperatura.

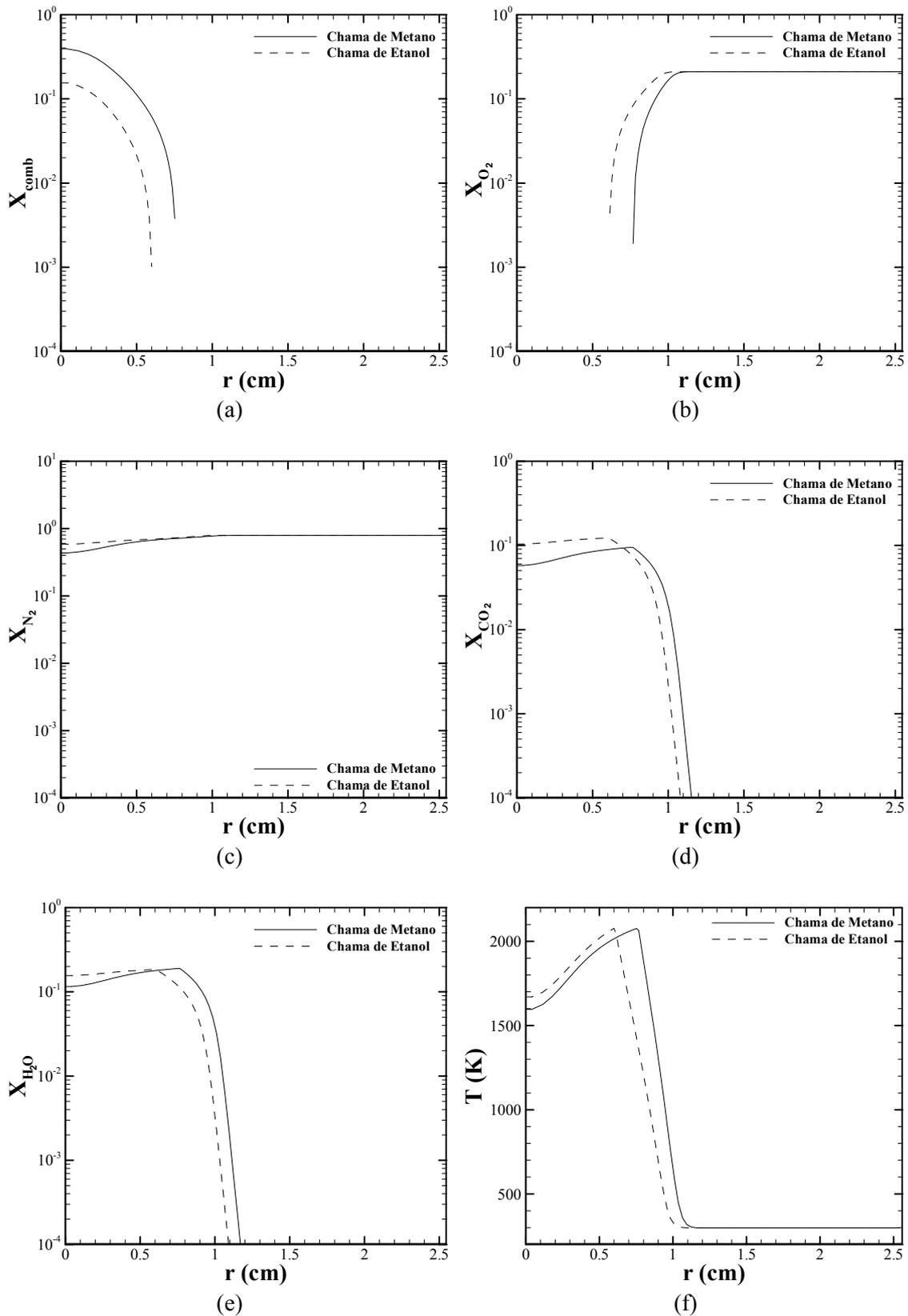


Figura 5.16: Comparativo dos perfis das chamas de metano e etanol na posição axial $x = 2,4$ cm ao longo da direção radial. (a) Fração molar de combustível; (b) Fração molar de O_2 ; (c) Fração molar de N_2 ; (d) Fração molar de CO_2 ; (e) Fração molar de H_2O ; (f) Temperatura.

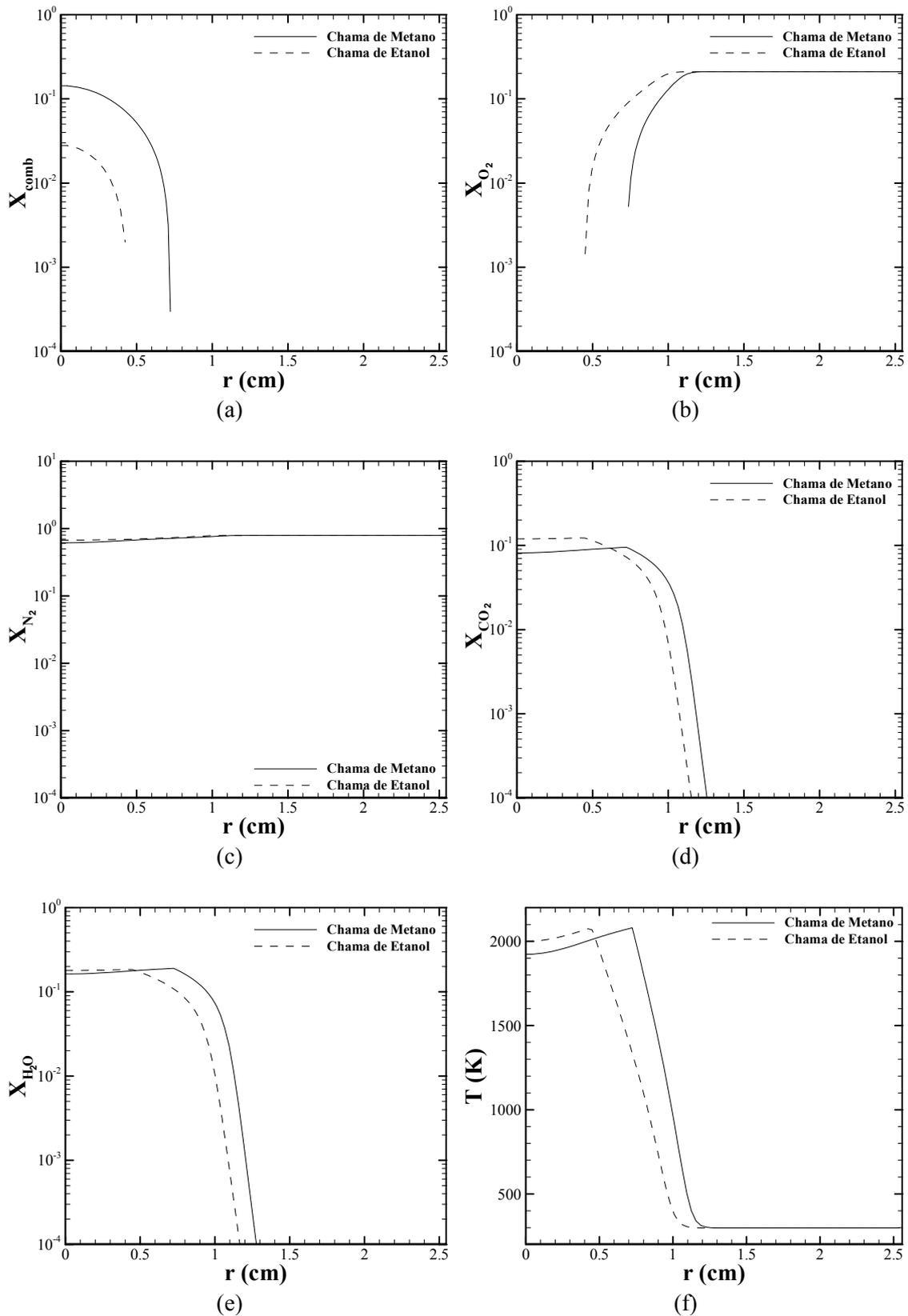


Figura 5.17: Comparativo dos perfis das chamas de metano e etanol na posição axial $x = 5,0$ cm ao longo da direção radial. (a) Fração molar de combustível; (b) Fração molar de O_2 ; (c) Fração molar de N_2 ; (d) Fração molar de CO_2 ; (e) Fração molar de H_2O ; (f) Temperatura.

A Fig. 5.16 e a Fig. 5.17 apresentam os mesmos perfis para as posições axiais 2,4 cm e 5,0 cm, respectivamente. O comportamento observado na posição axial $x = 1,2$ cm para os perfis de concentrações molares e temperatura é análogo ao observado nesses dois casos. Como previsto pela estequiometria da reação de queima de etanol a formação de H_2O é preferencial relativamente à formação de CO_2 . Isso é observado, principalmente na posição axial $x = 5,0$ cm, onde a concentração de H_2O na região da chama de etanol atinge valor muito próximo ao obtido na chama de metano, enquanto que a concentração de CO_2 na chama de metano mantém-se inferior à da chama de etanol.

A estrutura geral dos campos dos campos de velocidade, frações mássicas, temperatura e fração de mistura da chama difusiva de etanol obtida numericamente é apresentada na Fig. 5.18. É possível observar que a chama obtida na queima desse combustível é menos alongada que a de metano. Da mesma forma que os perfis de metano da Fig. 5.12, observa-se a impenetrabilidade do combustível na região do oxidante e vice-versa. Nota-se também a chama mais estreita, justificada, como mencionado, pela presença de átomos de oxigênio na estrutura do combustível. É também apresentado o perfil da fração de mistura e a posição da chama, obtida através da Eq. (2.42).

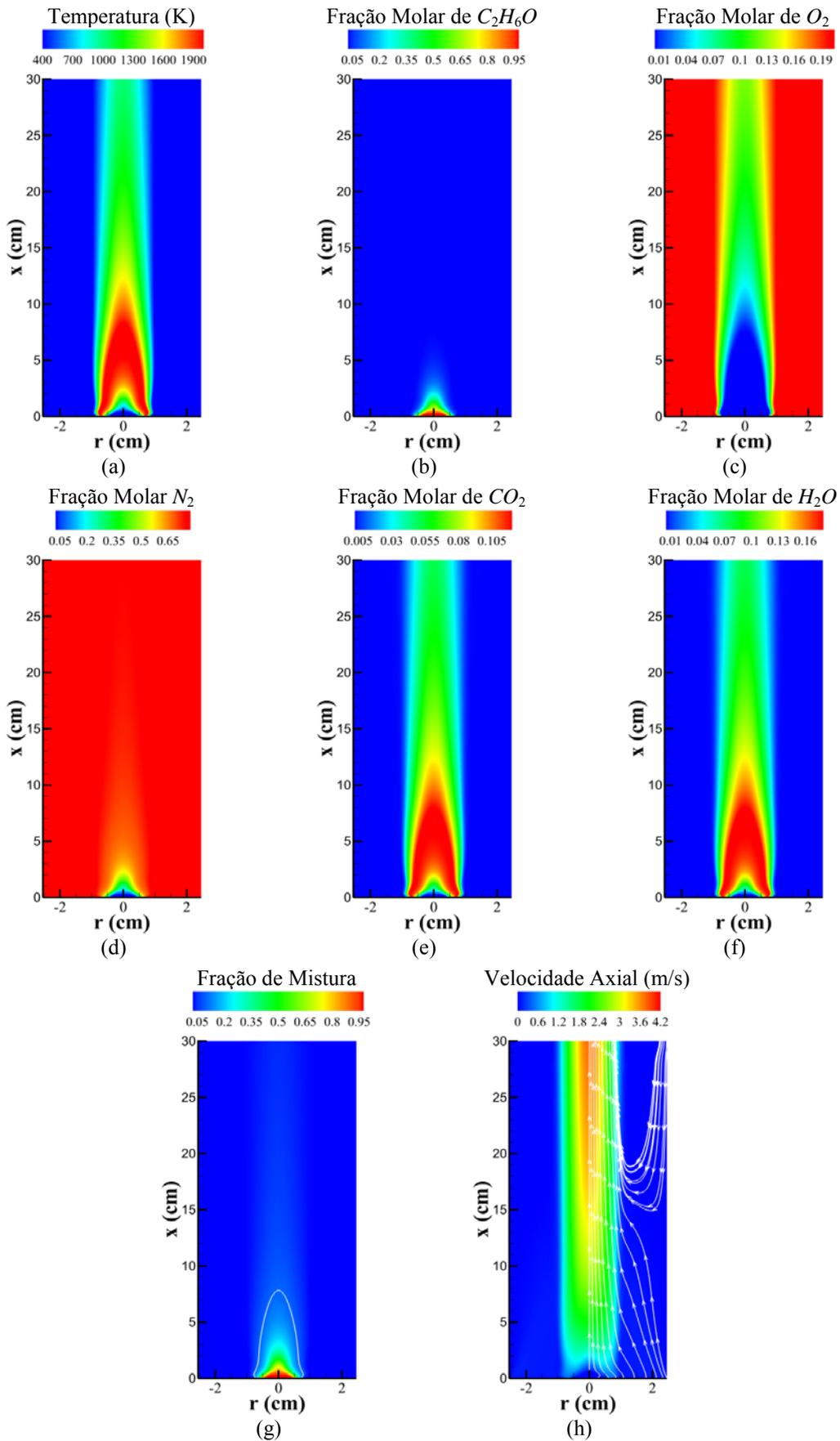


Figura 5.18: Perfis na chama de etanol de: (a) Temperatura; (b) Fração molar de CH_4 ; (c) Fração molar de O_2 ; (d) Fração molar de N_2 ; (e) Fração molar de CO_2 ; (f) Fração molar de H_2O ; (g) Fração de Mistura (posição da chama); (h) Velocidade axial (linhas de corrente).

5.3. Variações nas Condições de Entrada

Os resultados obtidos nas Sec. 5.2 apresentaram os perfis das espécies químicas e de temperatura em um sistema que utiliza etanol como combustível em condições de operação equivalentes às utilizadas por MITCHELL *et al.* (1980) para o metano. São realizadas, então, sutis alterações nas condições de entrada de modo a avaliar as respostas dos perfis das frações molares das espécies químicas e da temperatura às mesmas.

5.3.1. Variação da Velocidade de Entrada

São testados três casos nos quais se variam as velocidades na entrada. Para a comparação desses casos, por brevidade, são apresentados os perfis ao longo do eixo de simetria para o aumento da velocidade na admissão de combustível em 10%, aumento da velocidade na admissão de ar em 10%, aumento da velocidade na admissão de ambos os reagentes em 10%. Na Fig. 5.19 são apresentados os perfis de frações mássicas e temperatura ao longo do eixo de simetria para os três casos considerados.

A variação da velocidade da corrente de combustível tem efeito no tamanho da chama. A mesma apresenta um pequeno aumento em seu comprimento, como pode ser observado nas Fig. 5.19a-b pelo deslocamento do valor máximo de temperatura, da curva de fração molar de oxidante e de combustível para uma posição axial de maior valor. Como consequência a temperatura de saída é um pouco mais elevada ao se aumentar a velocidade do combustível na entrada. Já o aumento na velocidade do oxidante não produz efeitos nos perfis de frações molares ou no tamanho da chama.

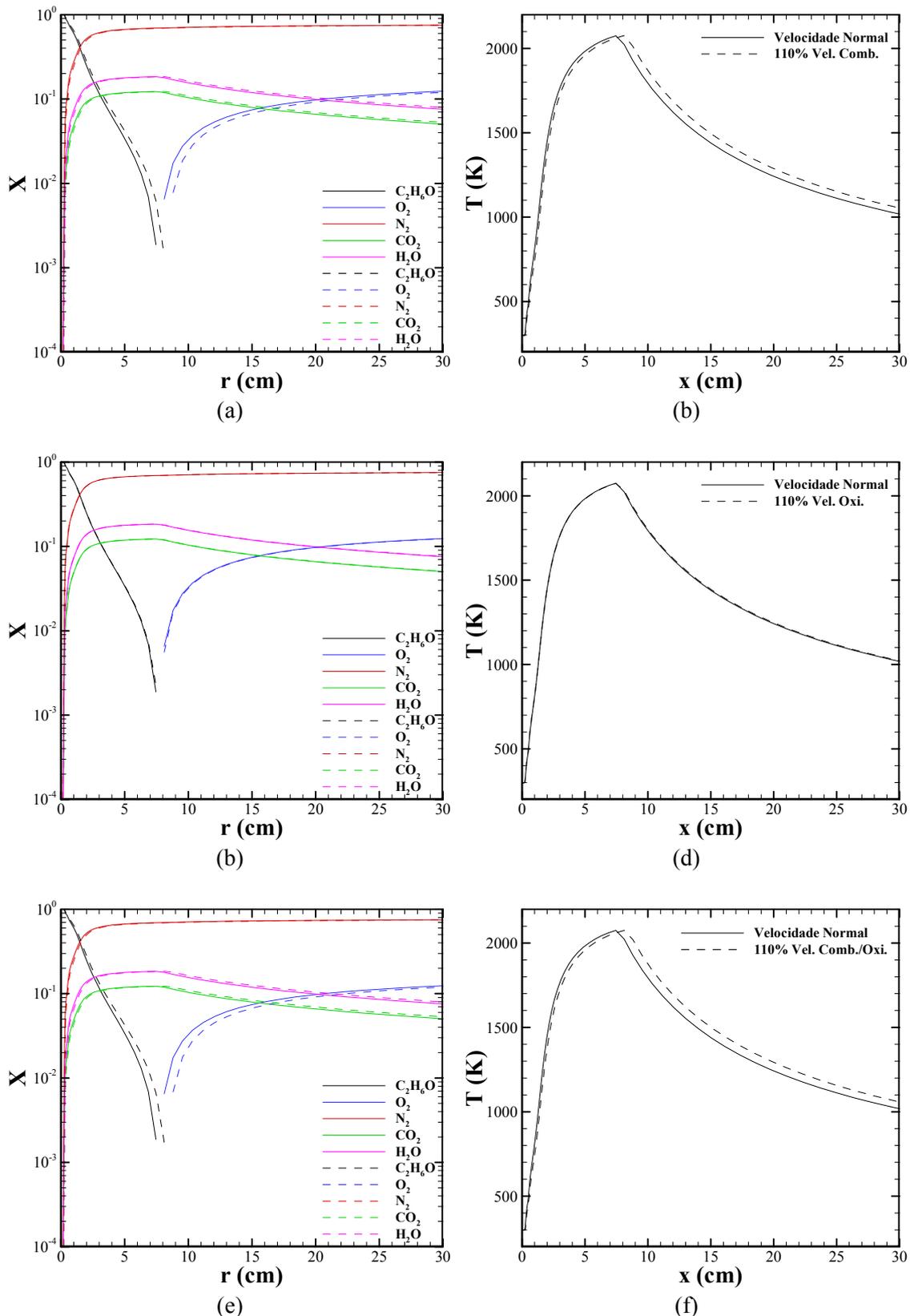


Figura 5.19: Comparativo entre o escoamento regular de etanol e com variações ao longo do eixo axial. (a) Frações molares e (b) Temperatura com aumento de velocidade do combustível; (c) Frações molares e (d) Temperatura com aumento de velocidade do oxidante; (e) Frações molares e (f) Temperatura com aumento de velocidade das duas correntes.

O aumento na velocidade de ambas as correntes produz o mesmo efeito do aumento apenas do combustível. Conclui-se que o aumento do comprimento da chama é devido ao aumento da velocidade do fluxo de combustível. Esse comportamento é explicado pelo excesso de ar utilizado no sistema em todos os casos. Em razão do mesmo, o aumento na velocidade do fluxo de combustível representa também o aumento de combustível disponível, levando os mesmos a reagirem até uma posição mais adiantada na direção axial.

5.3.2. Variação na Temperatura de Entrada

São sugeridas para a avaliação da variação de temperatura dos fluxos de combustível e oxidante na entrada três possibilidades. Os perfis obtidos para as frações mássicas e temperatura ao longo do eixo de simetria para o aumento da temperatura na admissão de combustível em 100 K, aumento da velocidade na admissão de ar em 100 K e aumento da velocidade na admissão de ambos os reagentes em 100 K são apresentados na Fig. 5.20.

O aumento da temperatura na entrada do combustível causa a redução no comprimento da chama, assim como o aumento da temperatura na entrada de oxidante. A elevação da temperatura do combustível faz com que os efeitos viscosos sejam intensificados, freando o escoamento com uma maior intensidade que a causada pelo aumento somente na temperatura do fluxo de oxidante. Como a chama localiza-se em posições radiais mais próximas ao eixo de simetria, ou seja, na região onde escoam o combustível, o efeito difusivo é mais intensificado nessa região.

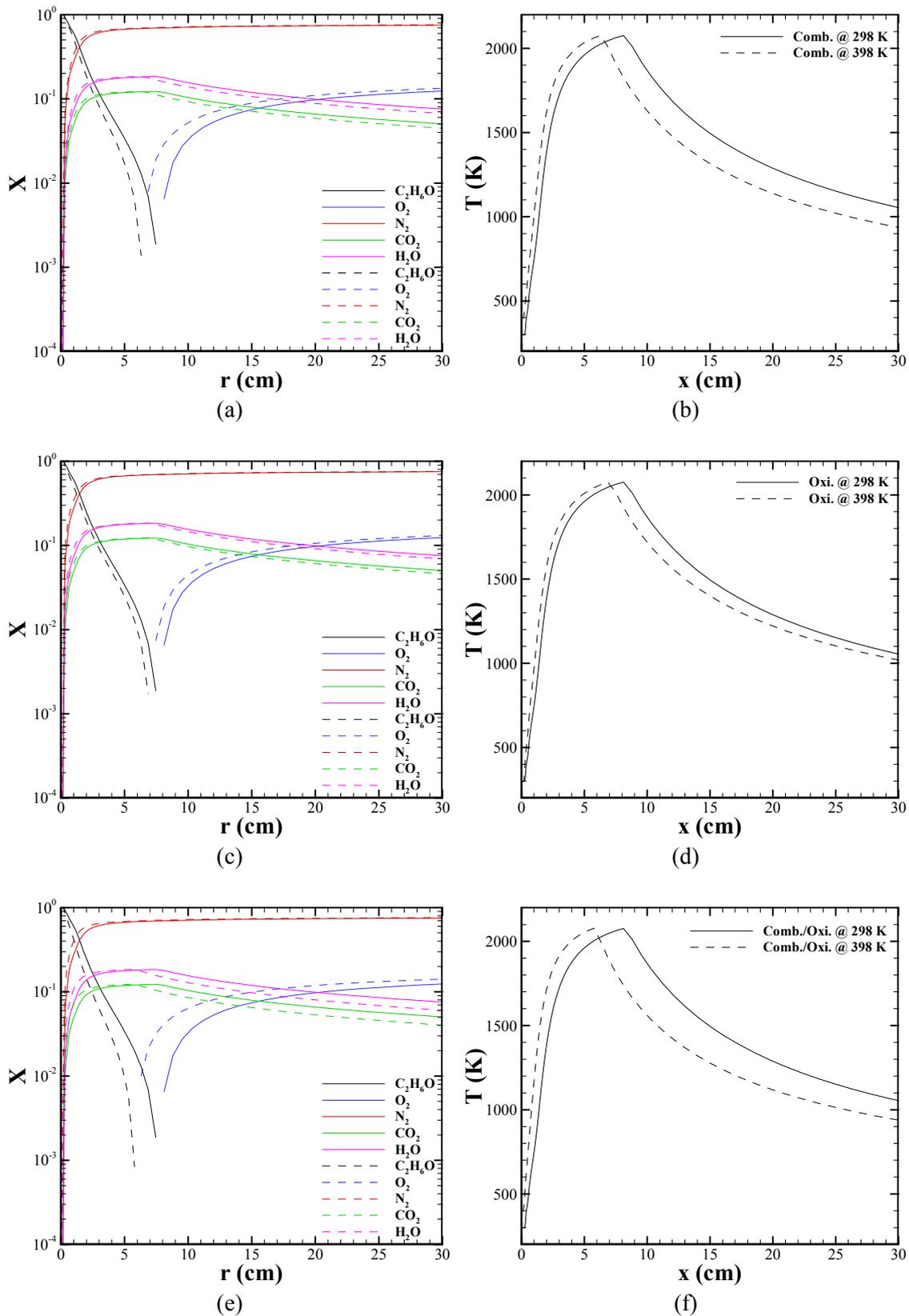


Figura 5.20: Comparativo entre o escoamento regular de etanol e com variações ao longo do eixo axial. (a) Frações molares e (b) Temperatura com aumento da temperatura de admissão do combustível; (c) Frações molares e (d) Temperatura com da temperatura de admissão do oxidante; (e) Frações molares e (f) Temperatura com aumento da temperatura de admissão das duas correntes

A consequência do aumento de temperatura no fluxo de oxidante é o mesmo do aumento apenas no combustível. No entanto, o encurtamento da chama devido ao aumento de temperatura do oxidante está relacionado com o aumento do efeito dos vórtices da região de saída, que se estendem até uma região mais próxima a chama, intensificando a mistura nessa região.

O aumento da influência das forças viscosas no sistema é justificado pela redução do número de Reynolds do escoamento com o aumento da temperatura.

Capítulo 6 - Conclusão

No presente estudo o foi realizada a análise de um escoamento reativo axissimétrico confinado em um duto cilíndrico. Foram utilizados como combustível para a combustão metano e etanol, e como oxidante, ar. Para tanto foi obtida a solução numérica do escoamento utilizando o método dos volumes finitos. O acoplamento entre a pressão e a velocidade foi tratado por meio do algoritmo SIMPLEC. As reações químicas foram consideradas por meio do modelo de chama fina, no qual é utilizada apenas uma reação global, irreversível, de passo único e de taxa infinita. Foi admitida a variação das propriedades termodinâmicas e de transporte com a temperatura por meio de relações matemáticas simples. Os campos de frações molares (mássicas) e de temperatura foram obtidos utilizando funções de acoplamento e frações de mistura; escalares conservados obtidos através da forma de Shvab-Zeldovich das equações de conservação de espécies e de energia. Consideração que impede a penetração de oxidante na região de combustível e vice-versa.

As soluções numéricas dos escoamentos reativos de metano e etanol foram avaliadas. Os resultados obtidos para a chama de metano foram comparados com medições experimentais realizadas em um sistema físico equivalente, assim como com resultados anteriores presentes na literatura. Os resultados obtidos para a chama de etanol foram comparados com a solução do sistema utilizando metano como combustível e pequenas variações nas condições de entrada foram realizadas de modo a avaliar a resposta da chama às mesmas.

O escoamento reativo no qual se considerou a combustão de metano com o ar apresentou resultados satisfatórios, em vista das simplificações impostas pelo modelo de

chama fina. A comparação dos resultados numéricos obtidos no presente estudo com resultados da literatura apresentaram, também, boa aproximação; sendo, algumas vezes, a solução obtida no presente estudo mais próxima aos valores obtidos experimentalmente do que os presentes na literatura. A principal divergência com relação a esses e ao resultado experimental, está relacionado à altura da chama — em geral, superestimada pelo modelo de chama fina — e ao perfil de fração molar de combustível — em função de todos os componentes da mistura terem sido considerados por meio das propriedades do ar.

Os resultados do escoamento reativo cujo combustível utilizado foi o etanol foram comparados com a solução numérica da chama de metano. A principal diferença entre os dois combustíveis — o coeficiente estequiométrico mássico (s) — refletiu na estrutura da chama obtida. Em função dessa característica, a chama de etanol apresentou menor altura que a obtida na queima de metano.

A chama de etanol também foi exposta a algumas alterações nas condições de entrada, de modo a avaliar a resposta do sistema a tais variações. Foram consideradas as variações na temperatura de entrada de cada um dos reagentes, além da variação na velocidade de entrada dos mesmos. Foi observado que, em função do excesso de ar empregado, somente variações na velocidade do fluxo de combustível afetam os perfis de frações molares e temperatura do sistema. Com a variação da velocidade na entrada da linha de combustível, obteve-se uma chama mais alongada, em função da maior quantidade de combustível disponível para a queima. Já as variações na temperatura tiveram como consequência, nos três casos tratados, o aumento do comprimento da chama na direção axial. A variação das propriedades termofísicas com a temperatura foi a responsável por tal comportamento.

6.1. 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 da utilização de um único componente no sistema. O relaxamento do uso do número de Lewis igual a um para todos os componentes da mistura é outra possibilidade. A utilização da formulação proposta por LIÑÁN (2002) utilizando frações de mistura e excesso de entalpia é uma sugestão para remover essa hipótese para o número de Lewis. 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 reduz sua atratividade em aplicações que necessitam de menor tempo para a obtenção dos resultados. No entanto, são absolutamente imprescindíveis na avaliação da formação de compostos intermediários e poluentes, como *NOx* e *CO*. A existência de difusão reversa na região de entrada e suas consequências no escoamento reativo podem ser avaliadas por meio da extensão do domínio de modo a se considerar parte das linhas nas quais são fornecidos oxidante e combustível.

Outras possibilidade mais gerais consistem na consideração de escoamentos turbulentos, supercríticos, na estimativa de propriedades ou escalares por meio de problemas inversos, e no uso de ferramentas para a otimização das propriedades do sistema.

Capítulo 7 - Referências

BARR, J., Flames of Fuel Jets. **Fourth Symposium (International) on Combustion**, 4, n. 3, pp. 765-771, 1953.

BECKER, R., BRAACK, M., RANNACHER, R., Numerical Simulation of Laminar Flames at Low Mach Number by Adaptive Finite Elements. **Combustion Theory and Modelling**, 3, n. 3, pp. 503-534, 1999.

BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N., **Transport Phenomena**. 2^a. ed. Nova Iorque: John Wiley & Sons, 2002.

BROWNE, W. G. e POWELL, H. N., A Principle of Mixing Similarity and Its Application to Inhomogeneous Combustion. **Sixth Symposium (International) on Combustion**, 6, n. 1, pp. 37-60, 1957.

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

ÇENGEL, Y. A., **Heat Transfer: A Practical Approach**. 2^a. ed. Nova Iorque: McGraw-Hill, 2003.

CHEN, J., PENG, X. F., YANG, Z. L. *et al.*, Characteristics of Liquid Ethanol Diffusion Flames From Mini Tube Nozzles. **Combustion and Flame**, 156, pp. 460-466, 2009.

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

CLARKE, J. F., The Laminar Diffusion Flame in Oseen Flow: The Stoichiometric Burke-Schumann FLame and Frozen Flow. **Proceedings of The Royal Society, A**, 296, pp. 519-545, 1967.

CONTE, S. D. e DE BOOR, C., **Elementary Numerical Analisis: An Algorithmic Approach**. 3^a. ed. Nova Iorque: McGraw Hill, 1980.

COTTA, R. M. e ÖZİŞİK, M. N., Laminar Forced Convection of Power-Law Non-Newtonian Fluids Inside Ducts. **Heat and Mass Transfer**, 20, n. 3, pp. 211-218, 1986a.

COTTA, R. M. e ÖZİŞİK, M. N., Laminar Forced Convection to Non-Newtonian Fluids in Ducts with Prescribed Wall Heat Flux. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, 13, n. 3, pp. 325-334, 1986b.

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.

DATE, A. W., **Introduction to Computational Fluid Dynamics**. Nova Iorque: Cambridge University Press, 2005.

DOUGLAS, C. C., ERN, A., SMOOKE, M. D., Multigrid Solution of Flame Sheet Problems on Serial and Parallel Computers. **Parallel Algorithms and Applications**, 10, n. 3-4, pp. 225-236, 1997.

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

DWORKIN, S. B., CONNELLY, B. C., SCHAFFER, A. M. *et al.*, Computational and Experimental Study of a Forced, Time-Dependent, Methane-Air Coflow Diffusion Flame. **Proceeding of the Combustion Institute**, 31, pp. 971-978, 2007.

ECLIPSE, Eclipse Burners, 2012, Disponivel em: <<http://www.eclipsenet.com>>, Acesso em: 30 Março 2012.

ERN, A. e GIOVANGIGLI, V., Thermal Diffusion Effects in Hydrogen-Air and Methane-Air Flames. **Combustion Theory and Modelling**, 2, n. 4, pp. 349-372, 1998.

ERN, A., DOUGLAS, C. C., SMOOKE, M. D., Detailed Chemistry Modeling of Laminar Diffusion Flames on Parallel Computers. **The International Journal of Supercomputer Applications and High Performance Computing**, 9, pp. 167-186, 1994.

FERZIGER, J. H. e PERIC, M., **Computational Methods for Fluid Dynamics**. 3^a. ed. Berlin: Springer, 2002.

GAN, Y. e YANG, Z., Characteristics of Small Diffusion Flames in a 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**. 4^a. ed. San Diego: Elsevier, 2008.

GOLDBURG, A. e CHENG, S., A Review of the Fluid Dynamic Problem Posed by the Laminar Jet Diffusion Flame. **Combustion and Flame**, 9, n. 3, pp. 259-272, 1965.

GORDON, A. S., LI, S. C., LIBBY, P. A. *et al.*, Influence of Initial Velocity Distributions on the Height 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.

HORNBECK, R. W., Laminar Flow in the Entrance Region of a Pipe. **Applied Scientific Research**, 13, n. 1, pp. 224-232, 1964.

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.

INCROPERA, F. P., DEWITT, D. P., BERGMAN, T. L. *et al.*, **Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa**. 6ª. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2008.

ISAACSON, E. e KELLER, H. B., **Analysis of numerical methods**. Mineola: Dover, 1994.

ISHIZUKA, S. e SAKAI, Y., Structure and Tip-Opening of Laminar Diffusion Flames. **Twenty-first Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute**, pp. 1821-1828, 1986.

KANURY, A. M., **Combustion Phenomena**. Nova Iorque: Gordon and Breach, 1982.

KEE, R. J., COLTRIN, M. E., GLARBORG, P., **Chemically Reacting Flow: Theory and Practice**. Nova Jersey: John Wiley & Sons, 2003.

KEYES, D. E. e SMOOKE, M. D., Problems, Flame Sheet Starting Estimates for Counterflow Diffusion Flame. **Journal of Computational Physics**, 73, pp. 267-288, 1987.

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

LAW, C. K., **Combustion Physics**. Nova Iorque: Cambridge University Press, 2006.

LIEB, D. F. e ROBLEE, L. H. S., A Radioisotopic Tracer Study of Carbon Formation in Ethanol-Air Diffusion Flames. **Combustion and Flame**, 14, pp. 285-296, 1970.

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

LITTLE, A. T., **Analisy of Alternative Fuel Combustion in a Perfectly Stirred Reactor**. The Ohio State University. Ohio, 2007.

LUQUE, J., JEFFRIES, J. B., SMITH, G. P. *et al.*, CH(A-X) and OH(A-X) Optical Emission in an Axisymmetric Laminar Diffusion Flame. **Combustion and Flame**, 122, pp. 172-175, 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^a. 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.

MITCHELL, R. E., **Nitrogen Oxide Formation in Laminar Methane-Air Diffusion Flames**. MIT. Cambridge, 1975.

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

NASCIMENTO, S. C. C., MACÊDO, E. N., QUARESMA, J. N. N., Generalized Integral Transform Solution for Hydrodynamically Developing Non-Newtonian Flows in Circular Tubes. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, XXVIII, n. 1, pp. 125-130, 2006.

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.

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.

PARAG, S. e RAGHAVAN, V., Experimental Investigation of Burning Rates of Pure Ethanol and Ethanol Blended Fuels. **Combustion and Flame**, 156, pp. 997-1005, 2009.

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

PATANKAR, S. V. e SPALDING, D. B., A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, 15, pp. 1787-1806, 1972.

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^a. ed. Fililadélfia: Edwards, 2005.

POWELL, H. N. e BROWNE, W. G., Some Fluid Dynamic Aspects of Laminar Diffusion Flames. **Sixth Symposium (International) on Combustion**, 6, n. 1, pp. 918-922, 1957.

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.

RIEDEL, U., A Finite Volume Scheme on Unstructured Grids for Stiff Chemically Reacting Flows. **Combustion Science and Technology**, 135, n. 1-6, pp. 99-116, 1998.

ROHSENOW, W. M., HARTNETT, J. P., CHO, Y. I., **Handbook of Heat Transfer**.
3^a. ed. Nova Iorque: McGraw-Hill, 1998.

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

SATIO, K., WILLIAMS, F. A., GORDON, A. S., Structure of Laminar Coflow
Methane-Air Diffusion Flames. **Journal of Heat Transfer**, 108, pp. 640-648, 1986.

SAXENA, P., **Numerical and Experimental Studies of Ethanol Flames and
Autoignition Theory for Higher Alkanes**. University of California, San Diego. San
Diego, 2007.

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, 2002.

SEN, A., RAGHAVAN, V., SHET, U. S. P., Experimental Investigation of
Characteristics of a Diffusion Flame Stablished Over Liquid Ethanol Surface Under
Opposed Air Flow. **Experimental Thermal and Fluid Science**, 33, pp. 538-541, 2009.

SERAUSKAS, B., GRI-Mech. **GRI-Mech Home Page**, 2000, Disponivel em: <<http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/>>, Acesso em: 30 Março 2012.

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

SHUNG, K. P., MANNHEIMMER-TIMNAT, Y. *et al.*, Sooting Behavior of Gaseous Hydrocarbons. **Combustion Science and Technology**, 22, pp. 235-250, 1980.

SHVAB, V. A., Svyaz' mezhdru temperaturnymi i skorostnymi polyami gazovogo. **Issledovanie Protssosov Goreniya Natural'nogo Topliva**, 1948.

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.

SMOOKE, M. D. e GIOVANGIGLI, V., Numerical Modeling of Axisymmetric Laminar Diffusion Flames. **Impact of Computing in Science and Engineering**, 4, pp. 46-79, 1992.

SMOOKE, M. D., LIN, P., LAM, J. K. *et al.*, Computational and Experimental Study of a Laminar Axisymmetric Methane-Air Diffusion Flame. **Twenty-Third Symposium (International) on Combustion**, pp. 575-582, 1990.

SMOOKE, M. D., MITCHELL, R. E., KEYES, D. E., Numerical Solution of Two-Dimensional Axisymmetric Laminar Diffusion Flames. **Combustion Science and Technology**, 67, n. 4-6, pp. 85-122, 1989.

SMOOKE, M. D., XU, Y., ZURN, R. M. *et al.*, Computational and Experimental Study of OH and CH Radicals in Axisymmetric Laminar Diffusion Flames. **Twenty-Fourth Symposium (International)/ The Combustion Institute**, pp. 813-821, 1992.

TAKAGI, T., XU, Z., KOMIYAMA, M., Numerical Analysis of Laminar Diffusion Flames - Effects of Preferential Diffusion of Heat and Species. **Combustion and Flame**, 96, pp. 50-59, 1994.

TARHAN, T. e SELÇUK, N., Numerical Simulation of a Confined Methane/ Air Laminar Diffusion Flame by the Method of Lines. **Turkish Journal of Engineering and Environmental Science**, 27, pp. 275-290, 2003.

TARHAN, T. e SELÇUK, N., A Novel CFD Code Based on Method of Lines for Reacting Flows: Verification on Methane/ Air Diffusion Flame. **Combustion Science and Technology**, 179, pp. 39-60, 2007.

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

URNS, S., **Introduction to Combustion: Concepts and Applications**. 2^a. ed. Singapura: Mcgraw Hill, 2000.

U.S. DEPARTMENT OF ENERGY., **Ethanol: Separating Fact from Fiction**. National Renewable Energy Laboratory. [S.l.], p. 4, (DOE/GO-10099-736), 1999.

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.

UYGUR, A. B., TARHAN, T., SELÇUK, N., Transiente Simulation of Reacting Radiating Flows. **International Journal of Thermal Sciences**, 45, pp. 969-976, 2006.

VALLE, R. M., **Escoamento Laminar em Placas de Orifício - Análise Teórica e Experimental em Regime Permanente e Transiente**. UFSC. Florianópolis, 1995.

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

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

WALSH, K. T., LONG, M. B., TANOFF, M. A. *et al.*, Experimental and Computational Study of CH, CH*, and OH* in an Axisymmetric Laminar Diffusion Flame. **Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute**, pp. 615-623, 1998.

WALTHER, D. C. e AHN, J., Advances and Challenges in the Development of Power-Generation Systems at Small Scales. **Progress in Energy and Combustion Science**, 37, pp. 422-465, 2006.

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.

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.

YANG, Z., XU, T., GAN, Y., Experimental Study on the Diffusion Flame Using Liquid Ethanol as Fuel in Mini-Scale. **Proceedings of Micro/ Nanoscale Heat Transfer International Conference**, pp. 1-5, 2008.

ZELDOVICH, Y. B., K Teorii Gorenia Neperemeshannykh Gasov. **Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki**, 19, n. 10, pp. 1199-1210, 1949.

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.