

Universidade de Brasília - UnB
Faculdade UnB Gama - FGA
Engenharia Aeroespacial

Estudo dos efeitos do campo gravitacional na combustão sem pré-mistura de metano

Autor: Rafael Freitas de Farias da Silva
Orientador: Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha

Brasília, DF

2020



Rafael Freitas de Farias da Silva

**Estudo dos efeitos do campo gravitacional na combustão
sem pré-mistura de metano**

Monografia submetida ao curso de graduação
em Engenharia Aeroespacial da Universidade
de Brasília, como requisito parcial para ob-
tenção do Título de Bacharel em Engenharia
Aeroespacial.

Universidade de Brasília - UnB

Faculdade UnB Gama - FGA

Orientador: Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha

Brasília, DF

2020

Rafael Freitas de Farias da Silva

Estudo dos efeitos do campo gravitacional na combustão sem pré-mistura de metano/ Rafael Freitas de Farias da Silva. – Brasília, DF, 2020-

50 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha

Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade de Brasília - UnB
Faculdade UnB Gama - FGA , 2020.

1. folha de chama. 2. câmara de difusão. I. Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha.
II. Universidade de Brasília. III. Faculdade UnB Gama. IV. Estudo dos efeitos do campo gravitacional na combustão sem pré-mistura de metano

CDU 02:141:005.6

Rafael Freitas de Farias da Silva

Estudo dos efeitos do campo gravitacional na combustão sem pré-mistura de metano

Monografia submetida ao curso de graduação
em Engenharia Aeroespacialda Universidade
de Brasília, como requisito parcial para ob-
tenção do Título de Bacharel em Engenharia
Aeroespacial.

Trabalho aprovado. Brasília, DF, 04 de dezembro de 2020:

Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha
Orientador

Prof. Dr. Domenico Simone
Convidado 1

Prof. Dr. Carlos Alberto Gurgel Veras
Convidado 2

Brasília, DF
2020

Agradecimentos

Gostaria de agradecer primeiramente a minha família, que sempre esteve presente durante toda a minha graduação. Em especial, agradecer aos meus pais, Alba e Reginaldo, por todo apoio incondicional, e a Nanda, Nina e Ninão.

Aos amigos que fiz durante a graduação, em especial àqueles que fiz na Capital Rocket Team. Entrar na equipe e mexer na prática com foguetes me proporcionou experiências que eu não imaginaria ter na graduação.

E por fim, agradecer ao meu orientador, Professor Fábio Alfaia, por toda atenção, orientação e entusiasmo ao longo do trabalho.

Resumo

O presente trabalho tem como finalidade estruturar a metodologia para avaliar efeitos que o campo gravitacional tem sobre a chama laminar difusiva do metano com ar padrão simplificado. Neste trabalho, foi mostrado o desenvolvimento matemático aplicado para este tipo de chama, que é utilizado no software MATLAB para fazer simulações numéricas. O modelo de Folha de Chama é utilizado para descrever o tipo de combustão, assumindo reações químicas infinitamente rápidas e desprezando espécies intermediárias. É obtido a região do contorno da chama, onde ocorre a reação química da combustão, além do campo de temperaturas, e velocidade e fração molar das espécies químicas consideradas, em diferentes regiões da chama. Os resultados obtidos numericamente são então comparados com resultados coletados de uma chama experimental desenvolvida em um câmara de difusão, já disponível na literatura, e validam o modelo numérico utilizado. São então comparados resultados de chamas submetidas a diferentes níveis de gravidade, onde são observados efeitos da microgravidade na combustão do metano.

Palavras-chaves: folha de chama. câmara de difusão. microgravidade.

Abstract

The present work aims at structuring the methodology to evaluate effects that the gravitational field has over the diffusive laminar flame of methane with simplified standard air. In this work, it is presented the mathematical development applied to this type of flame, that is utilized in the MATLAB software to run numerical simulations. The Flamesheet model is used to describe the type of combustion, assuming infinitely fast chemical reactions and ignoring intermediate species. It is obtained the flame edge region, where the combustion chemical reaction happens, besides the temperature field, speed and molar fraction of the considered chemical species, in different regions of the flame. The results obtained numerically are then compared with results of an experimental flame developed on a diffusion flame chamber, already available on the literature, and validate the numerical model used. The results of flames under different levels of gravity are then compared, where are observed effects of the microgravity in the combustion of methane.

Key-words: flamesheet. diffusion chamber. microgravity.

Listas de ilustrações

Figura 1 – Frente de chama. Curva I - Chama subventilada, Curva II - Chama superventilada (BURKE; SCHUMANN, 1928).	25
Figura 2 – Largura de chama correlacionada com o número de Reynolds e o número de Froude. Adaptado de (SUNDERLAND et al., 1999)	28
Figura 3 – Fração de massa das espécies químicas (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).	32
Figura 4 – Esquemático da câmara de combustão. Adaptado de (MITCHELL; SAROFIM; CLOMBURG, 1980).	35
Figura 5 – Esquemático da câmara de combustão. Adaptado de (MITCHELL; SAROFIM; CLOMBURG, 1980).	36
Figura 6 – Temperatura no eixo de simetria	38
Figura 7 – Contornos da chama simulado e experimental	39
Figura 8 – Contornos de chama em gravidade nominal e microgravidade	39
Figura 9 – Perfis de temperatura	40
Figura 10 – Perfis de velocidade	40
Figura 11 – Fração molar de metano (CH_4)	41
Figura 12 – Fração molar de gás oxigênio (O_2)	41
Figura 13 – Fração molar de dióxido de carbono (CO_2)	42
Figura 14 – Fração molar de água (H_2O)	43
Figura 15 – Fração molar de gás nitrogênio (N_2)	44
Figura 16 – Campo de temperatura da chama em gravidade nominal	44
Figura 17 – Campo de temperatura da chama em microgravidade	45

Lista de abreviaturas e siglas

CFD Computational Fluid Dynamics

NASA National Aeronautics and Space Administration

Listas de símbolos

a_P	Coeficiente médio de absorção de Planck
C_f	Coeficiente experimental
C_P	Calor específico a pressão constante [J/kg.K]
CH_4	Fórmula química do metano
CO_2	Fórmula química do dióxido de carbono
d	Diâmetro da câmara de combustão [m]
D_k	Difusividade [m^2/s]
f	Razão mássica entre combustível e oxidante
f_s	Razão mássica estequiométrica
Fr	Número de Froude
g	Gravidade [m/s^2]
h	Entalpia total
H_2O	Fórmula química da água
L	Comprimento característico [m]
L_f	Altura da chama [m]
L_o	Distância da origem virtual [m]
M	Número de Mach
N_2	Fórmula química do gás nitrogênio
O_2	Fórmula química do gás oxigênio
P	Pressão [Pa]
Re	Número de Reynolds
Re_{crit}	Número de Reynolds crítico
R_{ext}	Raio externo da câmara de combustão

R_{int}	Raio interno da câmara de combustão
s	Taxa de consumo de oxigênio [kg/s]
Sc	Número de Schmidt
u	Componente Z da velocidade do escoamento [m/s]
u_o	Componente Z da velocidade do escoamento na entrada [m/s]
t	Tempo [s]
T_0	Temperatura na entrada do escoamento [K]
$T(z)$	Temperatura em função da altura [K]
Y_k	Fração mássica da espécie química
Y_{CH_4}	Fração mássica do metano
Y_{O_2}	Fração mássica do gás oxigênio
z	Altura em relação ao eixo Z [m]
Z_{st}	Fração estequiométrica da mistura
ΔH_0	Calor de combustão
Δq_{rad}	Perdas de calor por radiação
Γ_{CH_4}	Coeficiente de difusão do metano [kg/m.s]
Γ_{O_2}	Coeficiente de difusão do oxigênio [kg/m.s]
μ	Viscosidade dinâmica [kg/m.s]
ϕ	Razão de mistura
ρ	Densidade [kg/m^3]
σ	Constante de Stefan-Boltzmann
θ	Relação entre frações mássicas
$\dot{\omega}_k$	Taxa de consumo da espécie química
$\dot{\omega}_{CH_4}$	Taxa de consumo do metano
$\dot{\omega}_{O_2}$	Taxa de consumo do gás oxigênio
ξ	Fração de mistura
ζ	Parâmetro adimensional do modelo de Lin

Sumário

1	INTRODUÇÃO	19
1.1	Problemática	19
1.2	Contextualização	19
1.3	Objetivos	21
1.3.1	Objetivos Gerais	21
1.3.2	Objetivos Específicos	21
1.4	Abordagem metodológica	21
1.5	Estrutura do trabalho	21
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	23
2.1	Combustão	23
2.2	Chama pré-misturada e não pré-misturada	23
2.3	Chama laminar e turbulenta	24
2.4	Chama subventilada e superventilada	24
2.5	Modelos analíticos de formato de chama	24
2.5.1	Modelo de Spalding	25
2.5.2	Modelo de Lin	26
2.5.3	Modelo de Roper	27
2.6	Número de Froude	27
3	MODELAGEM DE CHAMA LAMINAR SEM PRÉ-MISTURA	29
3.1	Equações governantes	29
3.1.1	Equação da continuidade	29
3.1.2	Equação da conservação do momento	29
3.1.3	Equações de transporte das espécies químicas	29
3.2	Modelo de taxa química infinita	30
3.3	Sistema de reação química simples	30
3.3.1	Campo de Temperaturas	33
3.3.2	Temperatura da chama adiabática	33
3.4	Método dos Volumes Finitos	34
4	RESULTADOS	35
4.1	Arranjo do experimento	35
4.1.1	Câmara de chama difusiva	35
4.1.2	Considerações sobre o experimento	36
4.1.3	Condições inicial e de contorno	36

4.2	Resultados Numéricos	37
4.2.1	Comparação entre resultados numéricos e experimentais	37
5	CONCLUSÃO	47
5.1	Trabalhos Futuros	47
REFERÊNCIAS		49

1 Introdução

1.1 Problemática

A combustão é a forma mais comum de obtenção de energia atualmente, e continuará a ser no futuro previsível. Aplicações da combustão envolvem não apenas ambientes na Terra, onde está sujeita a gravidade nominal da superfície terrestre, mas também onde está sujeita a microgravidade, ou mesmo algum valor intermediário ([BAHADORI et al., 1990](#)).

Faz-se necessário compreender o comportamento da chama nesses diferentes ambientes. Isto pode ser realizado de forma computacional, através da modelagem numérica do fenômeno da combustão. Resultados também são atingidos por meios experimentais, ao se replicar a chama em diferentes ambientes de gravidade, ou analiticamente, de maneira limitada.

1.2 Contextualização

Testes experimentais com o objetivo de replicar condições da chama em diferentes níveis de gravidade são realizados com o auxílio de uma torre de queda. Por um curto período de tempo, que depende do tamanho da torre, o sistema contendo a chama experience gravidade reduzida ao entrar em queda. Contudo, neste tipo de experimento, é importante que a chama atinja o regime permanente no período de tempo em que está sujeita à microgravidade. Foram realizados diferentes experimentos na torre de testes do NASA Lewis Research Center, que possui um tempo de queda de 2,2 segundos. Pôde ser observado o comportamento do formato da chama ao longo deste tempo, onde está submetida a um ambiente de microgravidade ([BAHADORI; EDELMAN, 1992](#)).

Experimentos posteriores foram realizados com o intuito de verificar efeitos em potencial do desenvolvimento transiente da chama submetida a torre de queda, usando agora, um tempo de queda de 5,2 segundos. Ao final do tempo do experimento, o formato da chama apresentava estar em regime permanente. Entretanto, os campos de temperatura e propriedades de emissão de radiação da chama ainda estavam sofrendo alterações ao final do tempo de queda livre do experimento. Tal condição significaria que os efeitos transitórios são relevantes ainda neste tempo disponível de microgravidade ([DAI et al., 2002](#)).

Experimentos com maiores durações de tempo foram realizados com o intuito de se ter uma chama em regime permanente sob microgravidade, a bordo de uma aeronave

KC-135. Melhores resultados, contudo, foram obtidos a bordo do Space Shuttle Columbia, onde se tinha menos variação das forças resultantes atuando sobre o sistema de combustão ([BAHADORI et al., 1990](#)).

Em experimentos de combustão, tipicamente, há a presença de forças de flutuabilidade. São causadas pela gravidade e a grande diferença de temperatura entre a chama e o gás ambiente, que é da ordem de 2000 K. Como resultado há um grande gradiente de densidade no sistema, que induz um forte campo de velocidade. Tal efeito é relevante em chamas cujo escoamento não está em alta velocidade. O campo de velocidade induzido faz o formato da chama apontar para cima. Há instabilidades resultantes no escoamento que fazem a chama cintilar. Os experimentos em microgravidade buscam eliminar ou reduzir estes efeitos da flutuabilidade ([BAHADORI et al., 1990](#)).

Também há abordagens para entender o comportamento de chama através de métodos analíticos. A primeira versão do modelo *Flamesheet*, proposto por ([BURKE; SCHUMANN, 1928](#)), modela uma chama de metano e ar laminar sem pré-mistura, em uma câmara cilíndrica. Considera que a combustão se dá somente em uma fina superfície, onde oxigênio e combustível se encontram e formam os produtos neutros de uma combustão completa. Esta superfície, frente de chama, é definida como a localidade dos pontos onde a taxa de difusão de combustível e a de oxigênio tem a razão requerida pela equação estequiométrica para a combustão completa do combustível.

Modelos analíticos posteriores, como os propostos por Spalding, ([LIN et al., 1999](#)) e ([ROPER, 1977](#)) também se utilizam da consideração da combustão se dá somente na região do *Flamesheet*, para alcançar equações que descrevem o formato de uma chama laminar. Entretanto, estes modelos assumem outras hipóteses que limitam as suas aplicações a condições em que as chamas em uma situação normal estariam submetidas, incluindo efeitos de flutuabilidade.

São também feitas simulações numéricas do escoamento para prever o comportamento da chama. ([DUARTE, 2015](#)) compara os resultados de duas simulações CFD distintas para a chama laminar sem pré-mistura de metano. Em ambas modelagens, tem-se o *Flamesheet* como hipótese assumida. O primeiro modelo também assume o modelo de taxa química infinita. No segundo modelo, é utilizado um mecanismo de 4 passos para descrever a reação de combustão. Utilizando a mesma malha nas duas simulações, o tempo de execução gasto com o modelo de mecanismo de 4 passos foi mais de 13 vezes superior ao tempo requerido pelo modelo de taxa química infinita.

Os mecanismos cinéticos detalhados são computacionalmente demandantes, e portanto, são avaliadas modelagens simplificadas de cinética química na simulação numérica de chamas 1D e 2D de metano. ([HOERLLE, 2015](#)) utiliza mecanismos globais de 1, 2 e 4 passos para simular chamas difusivas contra-corrente e compara os seus resultados com os do mecanismo detalhado GRI-Mech 3.0.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivos Gerais

Este trabalho tem como principal objetivo o estudo de como a gravidade afeta a combustão do metano.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Revisar fundamentos básicos que compõem a formulação matemática da combustão;
- Elencar modelos analíticos e experimentais aplicáveis a descrição da chama;
- Descrever o desenvolvimento matemático utilizado para modelar a chama sem pré-mistura do metano;
- Verificar efeito da variação da gravidade sobre o campo de temperatura, de velocidade e o formato da chama;
- Comparar resultados obtidos pelo modelo computacional com resultados experimentais disponíveis na literatura.

1.4 Abordagem metodológica

A metodologia deste trabalho consiste em fazer uma revisão bibliográfica a fim de conhecer os aspectos básicos do fenômeno da combustão, os métodos de modelagem da chama laminar difusiva assim como suas limitações, e estudos sobre efeitos da gravidade na combustão. Após a formação desta fundamentação teórica, será utilizado o código desenvolvido por ([CUNHA, 2010](#)) no software MATLAB para a simulação de uma chama laminar difusiva, sob às mesmas condições que a chama do experimento de ([MITCHELL, 1975](#)). A comparação dos resultados de temperatura e contorno de chama busca validar o algoritmo, que em seguida será utilizado para a simulação da chama submetida a diferentes níveis de gravidade, obtendo o campo de velocidade, temperatura, e concentração das espécies químicas.

1.5 Estrutura do trabalho

O capítulo 2 apresenta diferentes modelos analíticos desenvolvidos para prever o formato de chama, sob diferentes hipóteses. É dividido em seções, e cada seção aborda um modelo. Também introduz análises feitas com o auxílio do número de Froude. As referências bibliográficas utilizadas neste capítulo são ([TURNS, 2000](#)), ([LIN et al., 1999](#)), ([SUNDERLAND et al., 1999](#)), ([DAVIS et al., 1990](#)), ([KRISHNAN et al., 2008](#)).

O capítulo 3 apresenta a modelagem matemática considerada para a análise numérica feita neste trabalho. São mostradas as equações de conservação, e seguiu-se o desenvolvimento proposto em (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007) para o sistema de reação química simples.

O capítulo 4 descreve um experimento de chama laminar, desenvolvido por (MITCHELL, 1975), as hipóteses e condições de contorno levadas em conta para replicar o experimento na análise numérica, propostas em (TARHAN; SELçUK, 2003). São apresentados e discutidos os resultados obtidos com o modelo numérico desenvolvido por (CUNHA, 2010), e comparados com os da chama experimental de (MITCHELL, 1975).

O capítulo 5 inclui a conclusão deste trabalho, e também sugestões para trabalhos futuros.

2 Fundamentação Teórica

2.1 Combustão

De acordo com (TURNS, 2000), a combustão se refere a fenômenos nos quais ocorrem reações químicas de redução e oxidação acompanhadas por um efeito líquido de liberação de energia térmica. Ocorre nas máquinas térmicas a combustão interna ou externa, como em motores a combustão interna, turbinas a gás e propulsores de foguetes. Os processos de combustão envolvem a transformação de uma mistura reagente, formada por espécies químicas consideradas combustíveis ou oxidantes para uma mistura de produtos de combustão.

2.2 Chama pré-misturada e não pré-misturada

Uma chama é caracterizada como pré-misturada se os reagentes estão molecularmente misturados antes de atingirem a região de mistura. Este tipo de chama pode se desenvolver em dois tipos de regime, de deflagração ou de detonação. As chamas de deflagração, são associadas a velocidades aparentes baixas, com número de Mach $M \ll 1$, o que implica em uma pressão praticamente uniforme através da chama, e ser considerada isobárica. Já as chamas em regime de detonação são propagadas em alta velocidade aparente. É de sua natureza um grande aumento da pressão e temperatura da mistura queimada (TURNS, 2000).

Oxidante e combustível são originados de regiões diferentes do escoamento em chamas não pré-misturadas. A chama se estabelece na região onde a razão de equivalência é unitária, dividindo a região rica em combustível da região rica em oxidante. A razão de equivalência tem a seguinte definição:

$$\phi = \frac{f}{f_s} \quad (2.1)$$

onde $f = m_f/m_{ox}$ denota a razão entre massa de combustível e oxidante na reação, e f_s é a razão mássica para uma reação estequiométrica. Assim, uma reação estequiométrica tem $\phi = 1$. Enquanto $\phi > 1$ representa reação rica em combustível, e $\phi < 1$ reação rica em oxidante (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

A intensidade da combustão é dependente das taxas de difusão do oxidante e do combustível, e em geral, é significativamente menor do que a taxa de queima em uma chama pré-misturada (TURNS, 2000).

2.3 Chama laminar e turbulenta

A caracterização da chama em laminar ou turbulenta está relacionada com o comportamento do seu escoamento. O número de Reynolds, Re , é um número adimensional, definido como

$$Re = \rho u L / \mu \quad (2.2)$$

onde ρ é a densidade, u velocidade, L um comprimento característico, e μ a viscosidade dinâmica.

Uma interpretação para este número é a razão entre forças de inércia e forças viscosas atuando no escoamento. Neste sentido, Re é utilizado para qualificar o escoamento como laminar ou turbulento. A chama com número de Reynolds abaixo de um valor de Reynolds crítico, Re_{crit} , é tida como laminar. O escoamento é suave, e camadas adjacentes de fluido escoam de maneira ordenada entre si. Se as condições de contorno não mudam ao longo do tempo, o escoamento está em regime permanente. Já quando o escoamento está acima de Re_{crit} , este será turbulento, onde velocidade e outras propriedades do escoamento variam de maneira aleatória e caótica ([VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007](#)).

2.4 Chama subventilada e superventilada

Para fazer esta classificação, pode-se considerar uma chama não pré-misturada onde os reagentes são introduzidos em uma câmara de combustão cilíndrica por dois tubos concêntricos. O combustível é introduzido pelo tubo interno, e o oxidante pelo externo. Em uma chama superventilada, tem-se excesso de O_2 na mistura, e a superfície de chama termina no eixo axissimétrico da câmara, acima da região de entrada do combustível. Já uma chama subventilada tem excesso de CH_4 em relação ao O_2 , e superfície de chama terminaria na parede externa da câmara.

Ao se adicionar gás inerte no escoamento do combustível, produz-se um deslocamento da frente de chama, resultando em alturas de chamas subventiladas maiores ([BURKE; SCHUMANN, 1928](#)). A Figura 1 ilustra uma chama subventilada, e outra superventilada.

2.5 Modelos analíticos de formato de chama

Foram desenvolvidos diferentes modelos analíticos que prevem o formato de chamas laminares não pré-misturadas. São baseadas em diferentes hipóteses, que limitam a aplicabilidade destes modelos.

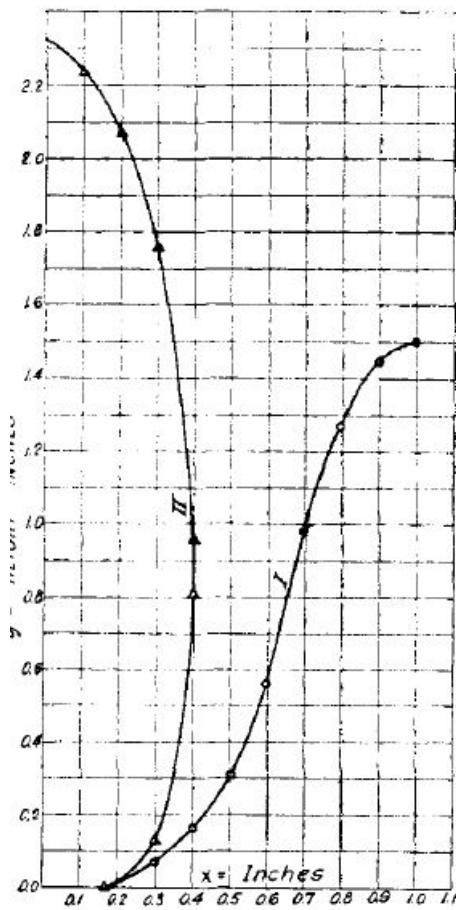


Figura 1 – Frente de chama. Curva I - Chama subventilada, Curva II - Chama superventilada ([BURKE; SCHUMANN, 1928](#)).

2.5.1 Modelo de Spalding

([LIN et al., 1999](#)) listam as seguintes hipóteses assumidas para o desenvolvimento deste modelo analítico:

1. Chama laminar difusiva, estável, axissimétrica, a pressão constante;
2. Efeitos de flutuabilidade e mudanças de energia potencial gravitacional são desprezíveis;
3. Número de Mach muito baixo, ignorando-se efeitos de dissipação viscosa e mudanças de energia cinética;
4. Chama com alta razão de aspecto, de modo que a difusão de massa, momento e energia na direção do escoamento é pequena;
5. A elevada razão de aspecto permite a solução das equações governantes serem aproximadas por condições do ambiente;
6. As reações químicas ocorrem numa fina região, denominada *flamesheet*;
7. Difusividades de massa, momento e energia são iguais;

8. Propriedades de transporte e termofísicas são constantes através da chama;
9. Efeitos de radiação são negligíveis.

A altura e o diâmetro da chama são dados pelas seguintes expressões, respectivamente:

$$\frac{L_f}{d} = \frac{3Re}{32Z_{st}} \quad (2.3)$$

$$\frac{wZ_{st}}{d} = 3^{1/2} \left(\frac{z}{L_f} \right) \left[\left(\frac{L_f}{z} \right)^{1/2} - 1 \right]^{1/2} \quad (2.4)$$

onde L_f é a altura total da chama, d é o diâmetro da entrada do escoamento, Re é o número de Reynolds, Z_{st} é a fração de mistura estequiométrica, e w representa o diâmetro da chama em uma dada altura z .

2.5.2 Modelo de Lin

Este modelo é uma extensão do modelo proposto por Spalding. (LIN et al., 1999) fizeram as seguintes modificações:

1. Introduziu-se o número de Schmidt, $Sc = \mu/\rho D$ na equação 2.3, que alivia a hipótese que afirma as difusividades de massa, momento e energia serem iguais. μ representa a viscosidade dinâmica, ρ a densidade, e D a difusividade.
2. Introduziu-se uma origem virtual a uma distância de L_o da saída, de modo que o modelo abrangesse também chamas de baixa razão de aspecto.
3. Foi introduzido o coeficiente experimental C_f , para um melhor adequamento da equação para o comprimento da chama.

A altura da chama e o seu diâmetro são dados pelas seguintes expressões, respectivamente:

$$\frac{L_f - L_o}{d} = \left(\frac{3C_f}{32} \right) \frac{ReSc}{Z_{st}} \quad (2.5)$$

$$\frac{wZ_{st}}{d} = 3^{1/2} \zeta (\zeta^{-1/2} - 1)^{1/2} \quad (2.6)$$

O parâmetro adimensional ζ é definido como

$$\zeta = \frac{z - L_o}{L_f - L_o} \quad (2.7)$$

2.5.3 Modelo de Roper

(ROPER, 1977) lista as hipóteses utilizadas para o desenvolvimento deste modelo:

1. Temperatura e velocidade axial variam no eixo Z, mas são constantes para cada valor de Z;
2. A combustão não causa mudança no número de moléculas;
3. Difusão axial não é considerada;
4. As difusividades de momento, massa e térmica são as mesmas;
5. Efeitos de radiação não são considerados.

A primeira hipótese, permite que efeitos de flutuabilidade sejam captados por este modelo. O modelo requer que sejam especificados a velocidade axial e a temperatura em função da coordenada do eixo Z. O formato da chama então, seria descrita pelas equações:

$$L = \frac{u_0 d^2}{4D_0} \left(\frac{T_0}{T(z)} \right)^{0,67} \quad (2.8)$$

$$w = \frac{d}{2} \left(\frac{u_0}{u(z)} \frac{T(z)}{T_0} \right)^{1/2} \quad (2.9)$$

2.6 Número de Froude

Os modelos anteriormente mostrados negligenciam a ação da gravidade sobre o formato da chama. O modelo de Roper é sensível a efeitos de flutuabilidade, mas isto se dá através da modelagem da temperatura e velocidade axial ao longo do comprimento da chama, e não pela força gravitacional diretamente (KRISHNAN et al., 2008).

Sendo definido como $Fr = u^2/gd$, o número adimensional de Froude pode ser interpretado como a razão entre as forças de inércia do escoamento, e a força gravitacional agindo sobre ele. d é um comprimento característico, e neste contexto é utilizado o diâmetro da câmara de combustão.

Fr é utilizado em diferentes estudos experimentais de chamas, que buscam relacionar matematicamente a gravidade ao formato das mesmas. O número de Froude é o parâmetro apropriado para acompanhar variações gravitacionais em chamas difusivas laminares (DAVIS et al., 1990). Quando muito menor que 1, significa que a gravidade tem um papel importante no comportamento do escoamento. Quando muito maior que 1, a gravidade não é muito relevante.

Chamas com valores de Fr entre 0.001 e 86,000 foram desenvolvidas com o uso de diferentes hidrocarbonetos por (SUNDERLAND et al., 1999). São feitos gráficos que

relacionam o comprimento e a largura de chama em função de Fr , ou do número de Reynolds Re . Para o comprimento de chama, tem-se a seguinte correlação empírica:

$$L/d = Re^{0.93} Fr^{0.05} \quad (2.10)$$

A largura da chama em função de Re apresenta uma alta dispersão dos dados, enquanto quando em função de Froude indicam seguir um padrão mais uniforme, conforme mostrado na Figura 2. Para a chama de CH_4 , foi verificada uma correlação da largura somente com Fr , com o seguinte formato:

$$w/d = 2.17 Fr^{0.154} \quad (2.11)$$

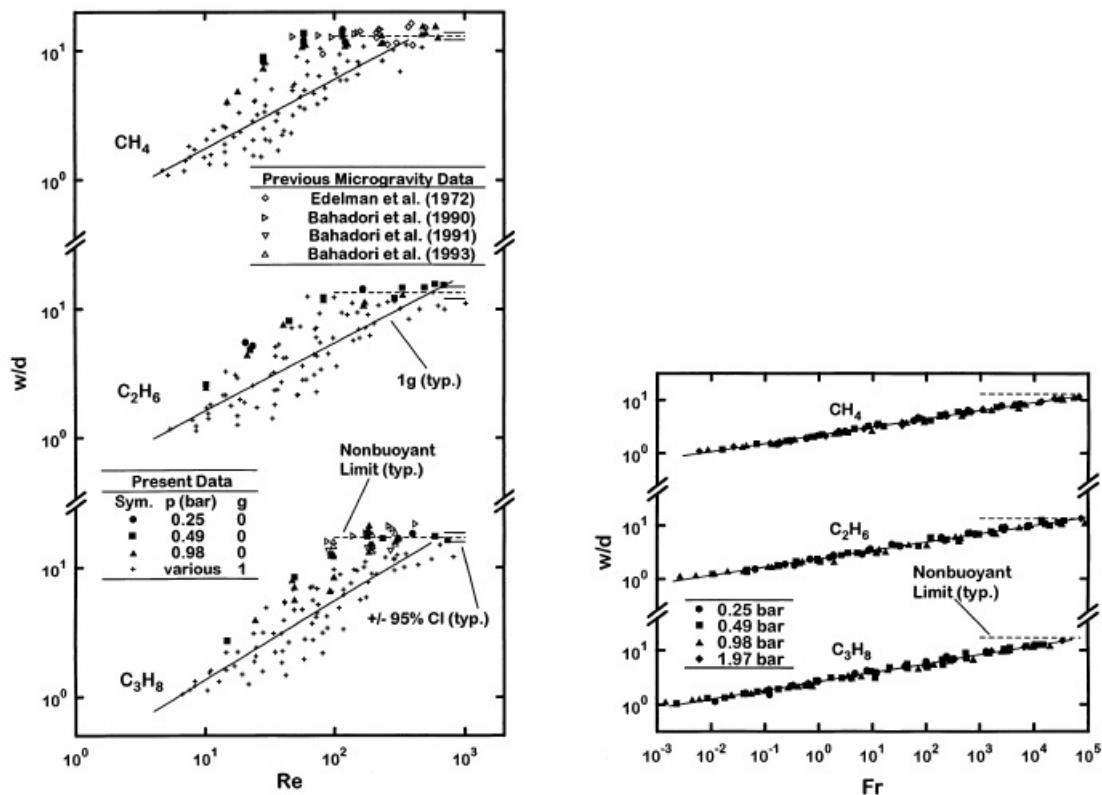


Figura 2 – Largura de chama correlacionada com o número de Reynolds e o número de Froude. Adaptado de ([SUNDERLAND et al., 1999](#))

A diferença de comprimento da chama quando submetida à microgravidade ou à gravidade nominal, diminui quando Re aumenta. Segundo ([SUNDERLAND et al., 1999](#)), isto ocorre devido ao fato de que Fr geralmente aumenta a medida que Re é incrementado. É sugerido que para um Fr suficientemente alto, o comportamento da chama laminar difusiva sob gravidade nominal aproxima-se do de uma chama em microgravidade ([DAVIS et al., 1990](#)).

3 Modelagem de chama laminar sem pré-mistura

3.1 Equações governantes

As equações descritas nesta seção modelam o escoamento laminar, seguindo o desenvolvimento demonstrado em ([VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007](#)).

3.1.1 Equação da continuidade

A equação da continuidade representa a conservação de massa do sistema, expressa como

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

onde ρ é a densidade da mistura e u a velocidade do escoamento.

3.1.2 Equação da conservação do momento

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + \rho g \quad (3.2)$$

onde P é a pressão local, μ é a viscosidade dinâmica, e g a gravidade local.

3.1.3 Equações de transporte das espécies químicas

A equação [3.3](#) relaciona a taxa de mudança da massa e a taxa líquida de redução de massa da espécie química devido à convecção, com taxa líquida do aumento de massa devido à difusão e a taxa líquida de aumento de massa devido a fontes da mesma espécie química.

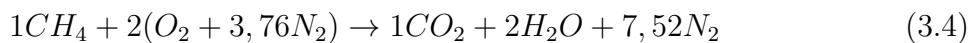
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) = \nabla \cdot (\rho D_k \nabla Y_k) + \dot{\omega}_k \quad (3.3)$$

D_k é coeficiente de difusão da espécie química, $\dot{\omega}_k$ é a taxa de geração ou consumo da espécie devido a reações químicas, Y_k é a fração mássica da espécie química.

3.2 Modelo de taxa química infinita

O modelo da taxa química infinita assume que a combustão se dá em uma única reação química global, de somente um passo, e que ocorre infinitamente rápida. A combustão ocorre na região onde combustível e oxidante se misturam em proporções estequiométricas para a formação de produtos. Este modelo é adequado quando se há interesse somente na natureza global do processo de combustão e na concentração final das espécies químicas majoritárias (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

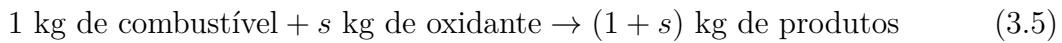
A combustão estequiométrica do metano com ar segue a relação:



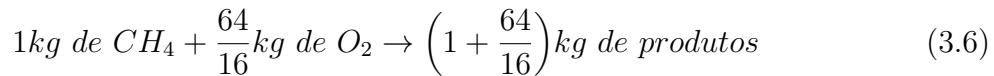
A cinética química da combustão é regida pelas equações que descrevem a oxidação do combustível. A solução da equação de transporte de cada espécie química é impactada pela quantidade de etapas e componentes considerados na reação. Durante a combustão do metano, ocorrem centenas de reações químicas elementares, porém, não necessariamente é de interesse a análise de todas. Mecanismos cinéticos mais detalhados, em geral, demandam mais tempo computacional (HOERLLE, 2015).

3.3 Sistema de reação química simples

De forma genérica, a reação química para o modelo de taxa química infinita se apresenta da seguinte forma:



Onde s é definido como a razão estequiométrica entre a massa de combustível e oxidante. Para a combustão do metano:



Nesta reação, a razão s é $64/16 = 4$. Ao mesmo tempo, a taxa de consumo de CH_4 é $1/s$ taxa de consumo de O_2 , durante a combustão estequiométrica.

$$\dot{\omega}_{CH_4} = \frac{1}{4}\dot{\omega}_{O_2} \quad (3.7)$$

Neste modelo, as reações são assumidas como infinitamente rápidas. Isto faz com que as reações intermediárias sejam ignoradas. As equações de transporte de espécies quí-

micas são desenvolvidas como mostrado nas equações 3.8 e 3.9, para o metano e oxigênio, respectivamente.

$$\frac{\partial(\rho Y_{CH_4})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_{CH_4} \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\Gamma_{CH_4} \nabla Y_{CH_4}) + \dot{\omega}_{CH_4} \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_{O_2})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_{O_2} \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\Gamma_{O_2} \nabla Y_{O_2}) + \dot{\omega}_{O_2} \quad (3.9)$$

Onde as difusividades do metano e oxigênio são $\Gamma_{CH_4} = \rho D_{CH_4}$ e $\Gamma_{O_2} = \rho D_{O_2}$

O fluxo de ar padrão simplificado conta com a presença de gás nitrogênio, N_2 junto com o oxigênio, N_2 , além do oxigênio. Entretanto, a fração mássica das espécies inertes (Y_{in}) permanece a mesma antes e depois da combustão, quando não se considera a formação de NO nas reações intermediárias. (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007)

Introduz-se a variável θ , conforme mostrado na equação 3.10. Esta permite relacionar as duas frações mássicas, de oxidante e combustível.

$$\theta = sY_c - Y_{ox} \quad (3.10)$$

Ao se assumir a hipótese de coeficiente de difusão único, $\Gamma_{CH_4} = \Gamma_{O_2} = \rho D = \Gamma_\theta$, pode-se manipular as equações 3.8 e 3.9, de modo a combiná-las em uma única equação de transporte para θ :

$$\frac{\partial(\rho\theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\theta \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\Gamma_\theta \nabla \theta) + (s\dot{\omega}_{CH_4} - \dot{\omega}_{O_2}) \quad (3.11)$$

Da hipótese de reação de passo único, explicitada na equação 3.7, tem-se $(s\dot{\omega}_{CH_4} - \dot{\omega}_{O_2}) = 0$, podendo simplificar a equação de transporte para o seguinte formato:

$$\frac{\partial(\rho\theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\theta \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\Gamma_\theta \nabla \theta) \quad (3.12)$$

É definida uma nova variável ξ , conforme a equação 3.13. Representa a fração de mistura em função de θ .

$$\xi = \frac{\theta - \theta_0}{\theta_1 - \theta_0} = \frac{(sY_{CH_4} - Y_{O_2}) - (sY_{CH_4} - Y_{O_2})_0}{(sY_{CH_4} - Y_{O_2})_1 - (sY_{CH_4} - Y_{O_2})_0} \quad (3.13)$$

Onde os sufixos 0 e 1 se referem ao escoamento de oxidante e combustível respectivamente. Em condições estequiométricas, a equação 3.14 assume o formato:

$$\xi_{st} = \frac{(Y_{O_2})_0}{(sY_{CH_4})_1 + (Y_{O_2})_0} \quad (3.14)$$

A cinética química rápida implica em uma região onde a mistura tem excesso de oxidante, e nenhum combustível nos produtos da reação. Então, $Y_{CH_4} = 0$ e $Y_{O_2} > 0$. Assim como uma região rica em combustível, com nenhum oxidante presente nos reagentes. Neste caso, $Y_{O_2} = 0$ e $Y_{CH_4} > 0$ (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

Estas relações mostram que a fração molar de combustível e oxidante são linearmente dependentes da fração de mistura ξ , conforme mostrado na figura 3.

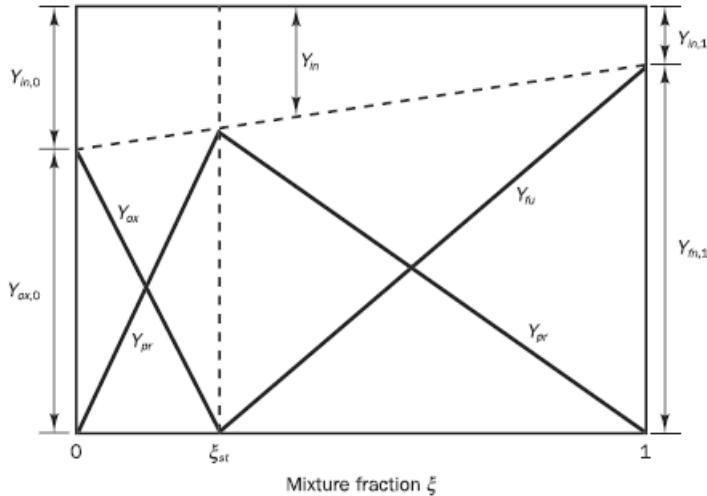


Figura 3 – Fração de massa das espécies químicas (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

Contudo, ξ também é sujeito à equação de transporte:

$$\frac{\partial(\rho\xi)}{\partial t} + \nabla(\rho\xi u) = \nabla(\Gamma_\xi \nabla \xi) \quad (3.15)$$

Aplica-se as condições de contorno do escoamento para obter a distribuição de ξ . São rearranjadas as equações para darem os valores das frações mássicas de oxigênio e metano depois da combustão:

$$\xi_{st} < \xi < 1 : \quad Y_{O_2} = 0 \quad Y_{CH_4} = \frac{\xi - \xi_{st}}{1 - \xi_{st}} Y_{CH_4,1} \quad (3.16)$$

$$0 < \xi < \xi_{st} : \quad Y_{CH_4} = 0 \quad Y_{O_2} = \frac{\xi_{st} - \xi}{\xi_{st}} Y_{O_2,0} \quad (3.17)$$

As espécies inertes como o N_2 e os produtos da reação química tem as suas frações mássicas dadas pelas expressões:

$$Y_{in} = Y_{in,0}(1 - \xi) + Y_{in,1}\xi \quad (3.18)$$

$$Y_{pr} = 1 - (Y_{CH_4} + Y_{O_2} + Y_{in}) \quad (3.19)$$

3.3.1 Campo de Temperaturas

É necessária a solução adicional de uma equação de conservação de energia para que se possa contabilizar as perdas de calor por radiação no cálculo do campo de temperaturas. Com as mesmas hipóteses assumidas para o transporte de espécies químicas, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (p\mathbf{u}h) = \nabla \cdot (\Gamma^h \nabla h) + \nabla q_{rad} \quad (3.20)$$

Em que h representa a entalpia total, ∇q_{rad} contabiliza as perdas de calor por radiação e $\Gamma^h = k/C_p$.

O campo de temperaturas é determinado a partir de h e Y_k a cada passo de tempo com o método de Newton-Raphson explorando a dependência das entalpias das espécies individuais h_k com a temperatura.

O termo de fonte associado a radiação é calculado supondo que o meio gasoso é opticamente fino, em que os efeitos da absorção podem ser negligenciados, e somente a emissão radiativa é considerada. O fluxo líquido de radiação pode ser descrito como feito por (BARLOW et al., 2001):

$$\nabla q_{rad} = -4\sigma a_P(T^4 - T_{ref}^4) \quad (3.21)$$

$$a_p = P_{H_2O}a_{P,H_2O} + P_{CO_2}a_{P,CO_2} + P_{CH_4}a_{P,CH_4} \quad (3.22)$$

Em que σ é a constante de Stefan-Boltzmann, T_{ref} é uma temperatura de referência, e os P_k são pressões parciais de cada espécie k . O termo a_P é o coeficiente médio de absorção de Planck e os $a_{P,k}$ são os coeficientes de espécies individuais calculados com expressões obtidas em (BARLOW et al., 2001).

3.3.2 Temperatura da chama adiabática

Ao se considerar que houve a queima completa de uma mistura entre combustível e ar, e não houver trocas de calor ou transferência de trabalho, então toda a energia liberada pela reação química aquece os produtos da combustão. Este processo alcança a temperatura de chama adiabática, que é a maior temperatura possível de ser alcançada (TURNS, 2000).

Para o cálculo desta temperatura, aplica-se a primeira lei da termodinâmica à reação química da equação 3.4. Ao se assumir um processo adiabático de pressão constante, e que os reagentes já estão à temperatura e pressão padrões, obtem-se a relação:

$$\sum_k^{todosprodutos} m_k C_{pk} (T_2 - T_0) = -(H_{P0} - H_{R0}) \quad (3.23)$$

onde m_k é a massa da espécie, C_P é o calor específico a pressão constante, T_2 a temperatura final, e $H_{P0} - H_{R0} = \Delta H_0$ o calor de combustão do CH_4 .

A mudança de temperatura faz C_P alterar o seu valor significativamente, fazendo o processo do cálculo da temperatura da chama adiabática ser iterativo. Nestas condições, a combustão do metano com ar padrão simplificado atinge 2288 K ([VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007](#)).

3.4 Método dos Volumes Finitos

O método de volumes de controle baseado nos elementos finitos é a metodologia numérica utilizada para a resolução das equações diferenciais. Consiste em transformar as equações diferenciais de cada volume em equações algébricas para a resolução das mesmas([TAYLOR, 2002](#)).

As equações resultantes dos métodos de discretização são resolvidas por método de solução direta disponível no MATLAB. As equações de conservação de massa e conservação de quantidade de movimento são analisadas e resolvidas de forma separada pelo algoritmo. Também é utilizado precisão dupla no método de resolução das equações algébricas, conforme o código computacional desenvolvido em ([CUNHA, 2010](#)).

4 Resultados

4.1 Arranjo do experimento

4.1.1 Câmara de chama difusiva

Em um experimento, foi desenvolvido por (MITCHELL; SAROFIM; CLOMBURG, 1980) um queimador cilíndrico vertical com o propósito de criar chamas de difusão . O aparato consiste em dois tubos concêntricos, conectados a um disco perfurado, por onde são introduzidos à câmara de difusão combustível e ar. A Figura 4 mostra o esquemático da entrada de ar e combustível na câmara. A barreira entre o sistema e o ambiente externo é um cilindro de vidro Pyrex. As vazões mássicas de combustível e ar são selecionadas de modo a produzir uma chama de difusão laminar. A Figura 5 demonstra um esquemático da chama neste tipo de câmara.

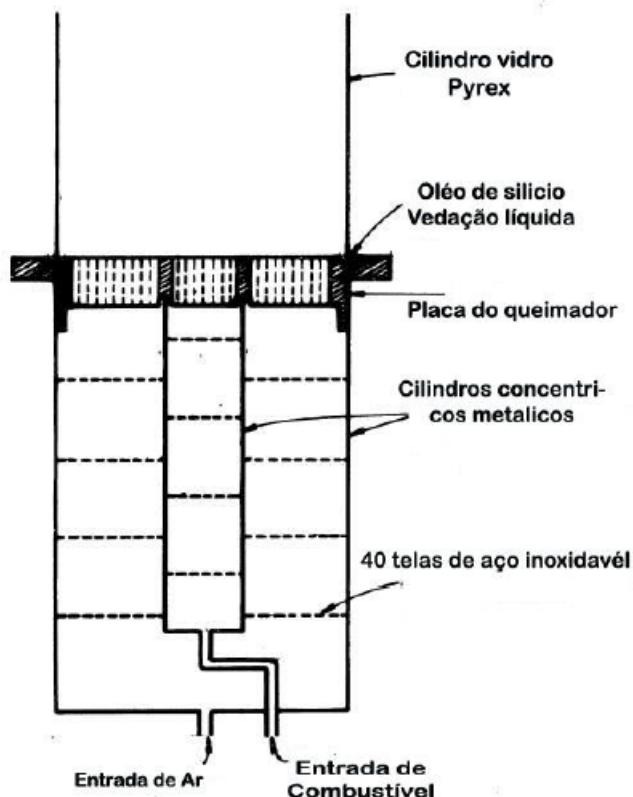


Figura 4 – Esquemático da câmara de combustão. Adaptado de (MITCHELL; SAROFIM; CLOMBURG, 1980).

A geometria da câmara foi descrita na malha de volumes finitos. O raio interno é $R_{int} = 0.635$ cm, o raio externo é $R_{ext} = 2.54$ cm , e a altura da câmara de combustão é $Z = 30$ cm.

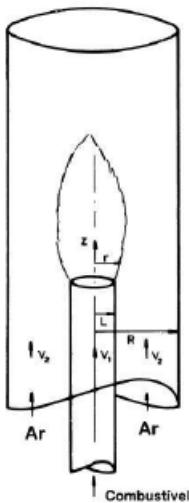


Figura 5 – Esquemático da câmara de combustão. Adaptado de ([MITCHELL; SAROFIM; CLOMBURG, 1980](#)).

4.1.2 Considerações sobre o experimento

Foi utilizada uma sonda para a coleta de amostras do gás em diferentes pontos da chama, em alturas de 1,2, 2,4 e 5,0 cm. Análises de concentração de espécies químicas foram feitas para: CO, CO₂, CH₄, H₂, N₂ e O₂ com Ar. São realizadas três diferentes medições em cada ponto, que apresentaram diferenças de até 5 por cento no valor da propriedade avaliada.

4.1.3 Condições inicial e de contorno

As condições inicial e de contorno aplicadas à modelagem numérica tem como objetivo replicar a chama na câmara de difusão. Representam como propriedades do escoamento estarão dispostas no sistema, em sua fase inicial somente, ou permanentemente. Estas são as mesmas utilizadas por ([TARHAN; SELÇUK, 2003](#)), e são mostradas na Tabela 1.

A única condição inicial utilizada representa o sistema em situação de nenhuma interação, onde combustível e oxidante ainda não possuem velocidades. A condição de contorno 1 representa a condição axissimétrica da câmara de difusão, de modo que não haja gradientes de qualquer propriedade no eixo. A segunda condição de contorno diz respeito às propriedades na parede, que tem como única função limitar a área de ocorrência do escoamento. A condição de contorno 3 especifica as condições de entrada do escoamento, mais exploradas na Tabela 2. E por fim, a quarta condição afirma que os gradientes na saída da câmara são nulos, assegurando que o comprimento Z da câmara é suficientemente grande para não afetar a chama.

Tabela 1 - Condições inicial e de contorno

CI	$t = 0$	$u = 0$	$v = 0$	$f = 0$
CC 1	Eixo	$\frac{\partial u}{\partial r} = 0$	$v = 0$	$\frac{\partial f}{\partial r} = 0$
CC 2	Parede	$u = 0$	$v = 0$	$f = 0$
CC 3	Entrada	$u = u_e$	$v = 0$	$f = f_e$
CC 4	Saída	$\frac{\partial u}{\partial Z} = 0$	$v = 0$	$\frac{\partial f}{\partial Z} = 0$

Os seguintes valores de velocidade foram escolhidos com a finalidade de obter chamas laminares na câmara de difusão. Outras propriedades como temperatura e pressão, são as condições padrões ao nível do mar ([MITCHELL; SAROFIM; CLOMBURG, 1980](#)).

Tabela 2 - Condições de entrada do escoamento

	u (cm/s)	v (cm/s)	T (K)
CH_4	4,5	0,0	298
$O_2 + N_2$	9,88	0,0	298

4.2 Resultados Numéricos

4.2.1 Comparação entre resultados numéricos e experimentais

A figura 6 apresenta a curva obtida pela simulação numérica para a temperatura apresentada no eixo de simetria da câmara de combustão. Os pontos quadrados representam os dados obtidos experimentalmente por ([MITCHELL, 1975](#)). Observa-se uma boa correlação entre os as duas medidas quando sobrepostas. Há incertezas na correção de radiação a ser aplicada no termopar, utilizado para as medições de temperatura, quando partículas de carbono se acumularam na sonda. Isto ocorre principalmente nas regiões de elevadas concentrações de fuligem, próximas ao topo da chama.

O campo de temperaturas obtido a partir da simulação numérica tem como temperatura máxima 1917 K, na altura de 6,99 cm. É esperado que os pontos de temperatura mais elevada sejam a região onde a combustão ocorre. Esta altura é onde se tem o *Flamesheet* no eixo de simetria, previsto pelo gráfico do contorno de chama (Figura 7).

Para as espécies químicas consideradas, a temperatura de chama adiabática é 2282 K. Estar abaixo deste limite máximo é o esperado para a simulação da combustão, quando não há nenhuma outra fonte de energia para o sistema, e há perdas para o ambiente, como as de radiação. Há coerência entre os dados de temperatura simulados para o eixo de simetria, e os obtidos experimentalmente.

Os pontos obtidos experimentalmente para o contorno luminoso da chama são apresentados na Figura 7. A altura da chama luminosa foi medida em 5,8 cm, o que não é coerente com o gráfico de temperatura no eixo de simetria. Porém, ([MITCHELL; SAROFIM; CLOMBURG, 1980](#)) nota a concentração de CO em 6,6 cm como 0,001 e em

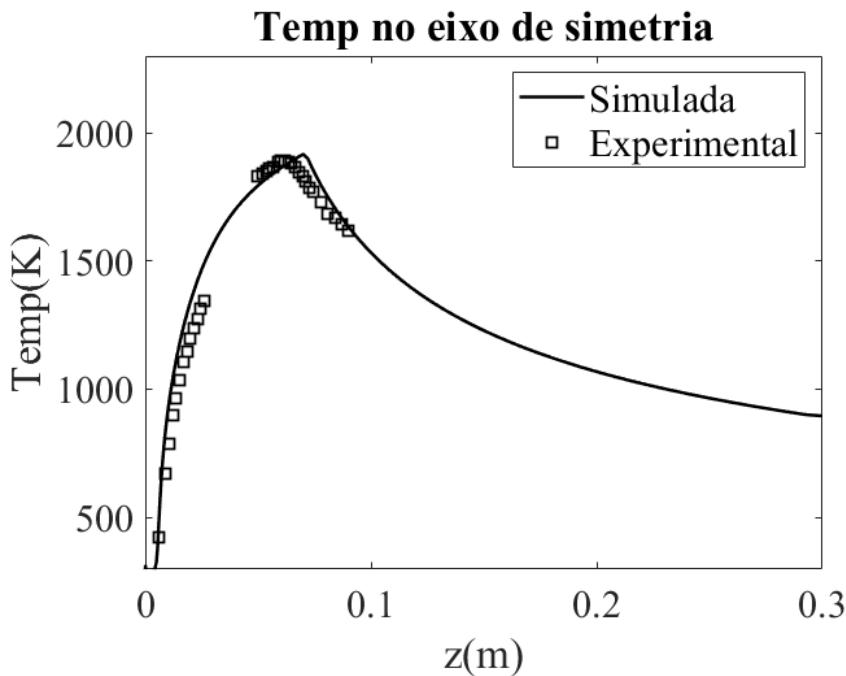


Figura 6 – Temperatura no eixo de simetria

7,0 como sendo 0,0. Isto significa que a altura da chama estaria nesta região, apesar de não ser visível, concordando com o contorno da simulação em azul.

Há uma zona azul ao redor da chama, associada com a queima de monóxido de carbono (verificado pelas concentrações de CO medidas experimentalmente). A camada exterior dessa zona de reação, portanto, define uma superfície na qual uma quantidade de oxigênio em proporção estequiométrica ao combustível é difundida ([MITCHELL; SAROFIM; CLOMBURG, 1980](#)). Essa região azul fica mais fina a medida que se distancia da base da chama, e a partir de uma altura de aproximadamente 3,75 cm, fica indistinguível do restante da chama.

A linha em azul apresenta o resultado simulado para a região do *Flamesheet*, onde metano e oxigênio se encontram em proporções estequiométricas e acontece a combustão. A altura máxima da curva é situada em $z = 7,09$ cm, compatível com o pico do gráfico da temperatura no eixo de simetria.

A Figura 8 mostra uma comparação entre contornos de chamas simuladas. A primeira está submetida às mesmas condições da chama do experimento, e a segunda também, porém está sujeita à microgravidade. Essas chamas possuem 0,0325 e 318,897 como seus números de Froude, respectivamente.

As simulações numéricas prevém que a altura da chama é levemente maior quando está sobre microgravidade. A largura da chama em microgravidade também é prevista como sendo um pouco maior do que a chama em gravidade nominal, tendo um formato mais arredondado. Estas características são compatíveis com as equações empíricas [2.10](#)

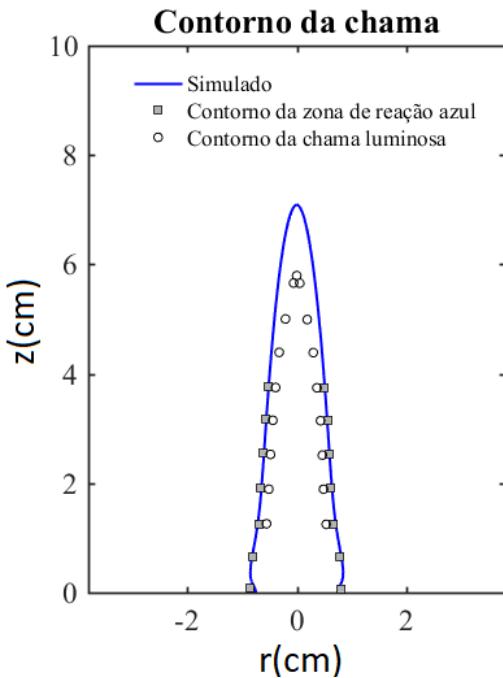


Figura 7 – Contornos da chama simulado e experimental

e 2.11.

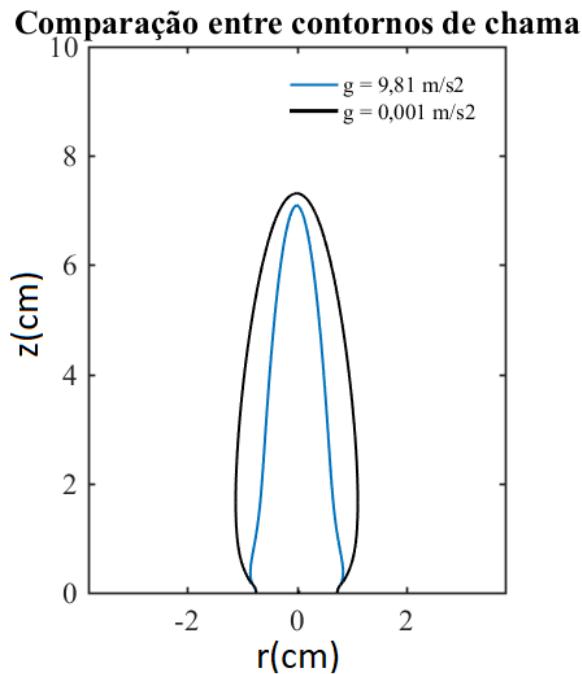


Figura 8 – Contornos de chama em gravidade nominal e microgravidade

Na figura 9 são mostrados os perfis de temperatura em 1,2cm e 5,0cm de altura do cilindro. É possível observar coerência entre os dados experimentais e os simulados para a gravidade nominal. Para o caso simulado em microgravidade, na figura 9a, a temperatura máxima apresentada é similar à gravidade nominal. Nota-se o pico de temperatura ocorrerem à diferentes distâncias do eixo de simetria do cilindro. Este pico se dá na região

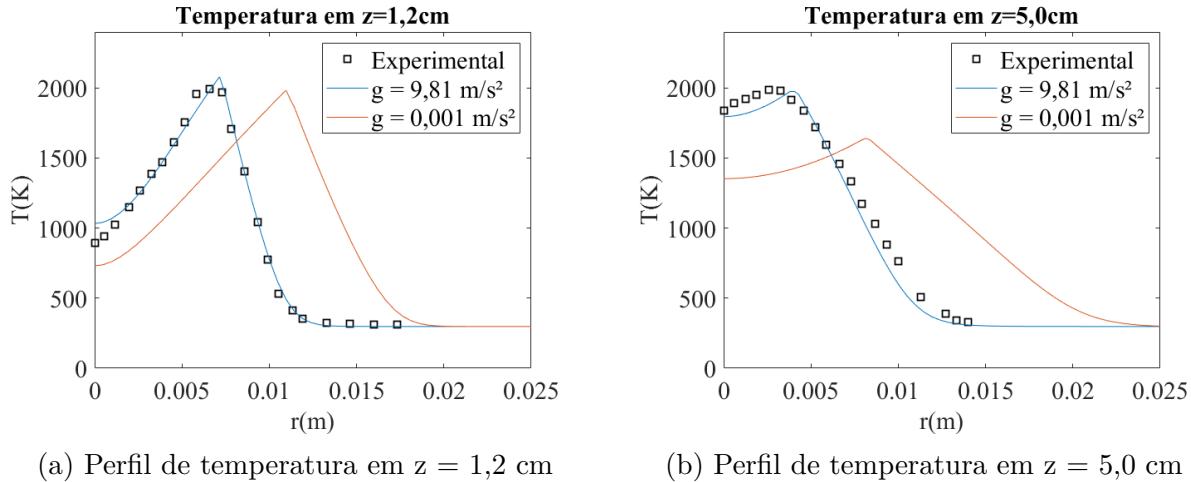


Figura 9 – Perfis de temperatura

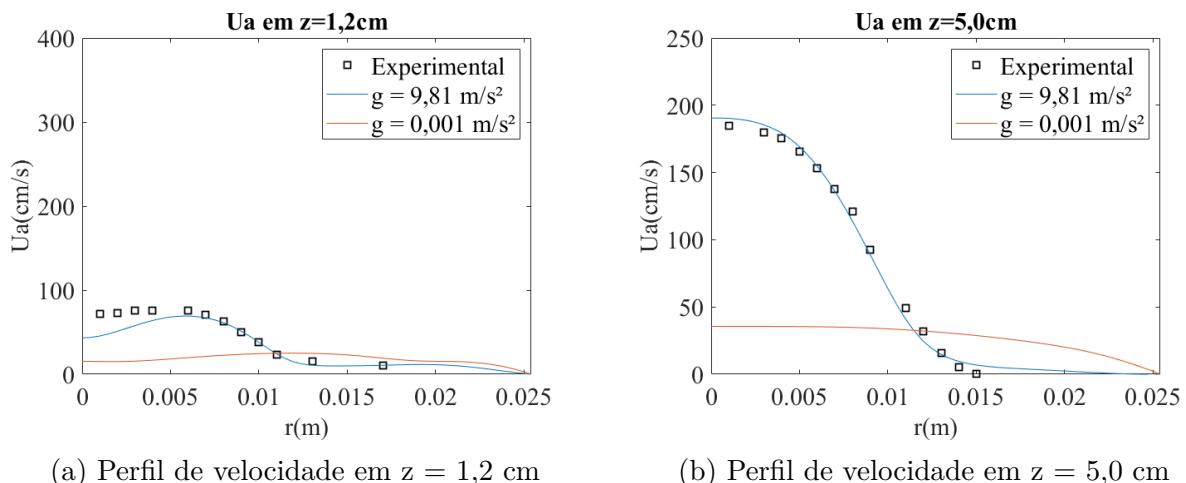
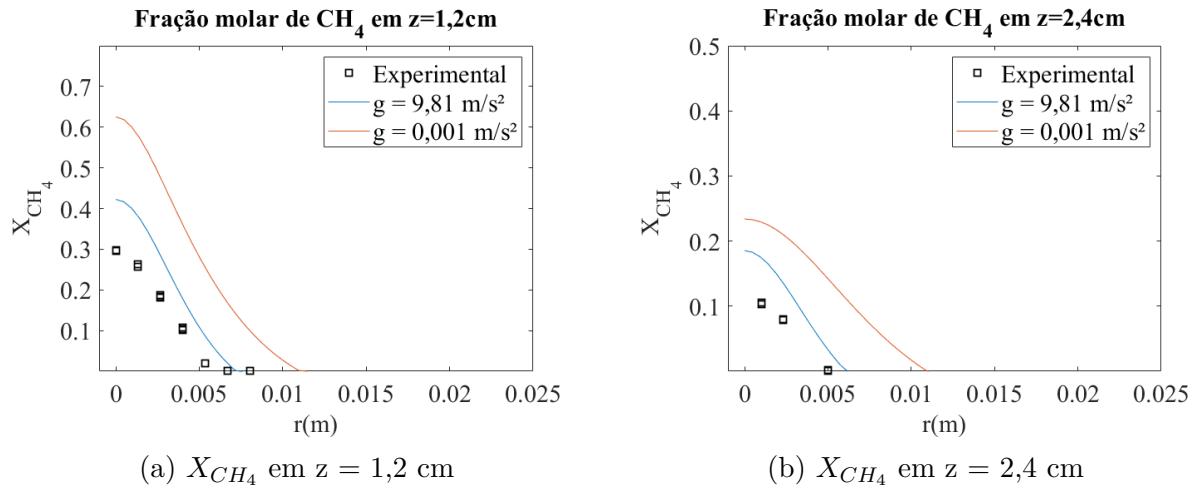
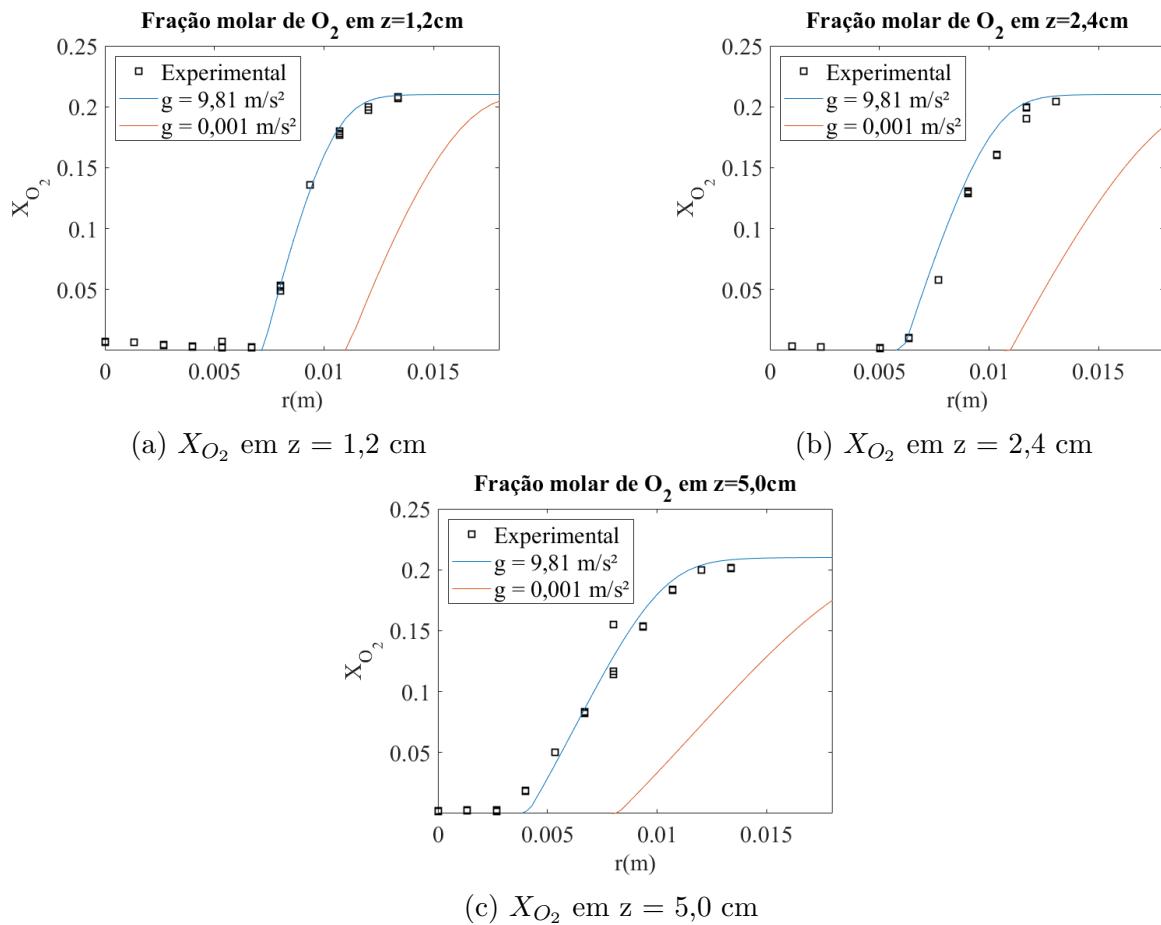


Figura 10 – Perfis de velocidade

do Flamesheet, onde ocorre a combustão, e cada chama tem o seu contorno distinto. Já na Figura 9b, é notável uma diferença na temperatura máxima entre os dois casos. Tal divergência pode ser explicada pela maior perda de calor por radiação, causada pelo maior tempo de residência de produtos da combustão na chama em microgravidade (ZHANG; LI, 2019).

Os perfis de velocidade mostrados na figura 10 também mostram ótima concordância entre os dados experimentais e os simulados. É possível notar ainda neste caso que há um aumento expressivo da velocidade do escoamento do fluido quando se comparam os dois gráficos, para ambos os casos. Esta aceleração do escoamento, entretanto, é mais evidente no caso de gravidade nominal pelo efeito da flutuabilidade no escoamento. Há uma elevada diferença de temperatura no sistema, causada pela combustão, alterando a densidade do fluido, e impactando o empuxo. Já em microgravidade a velocidade é bem menor em ambos os casos, por causa da dependência da gravidade por parte do componente da flutuabilidade no escoamento, evidenciado na Equação 3.2 (BHOWAL; MANDAL, 2016).

Figura 11 – Fração molar de metano (CH_4)Figura 12 – Fração molar de gás oxigênio (O_2)

As figuras 11 e 12 mostram os perfis de fração molar dos reagentes da combustão, CH_4 e O_2 . A formulação do Flamesheet assume que todo o CH_4 é consumido ao entrar em contato com o O_2 , impedindo qualquer concentração de metano depois do Flamesheet. O mesmo sendo válido para o gás oxigênio. Há divergências significativas em ambos os casos da fração molar de metano. A injeção dos gases através de placa injetora no experi-

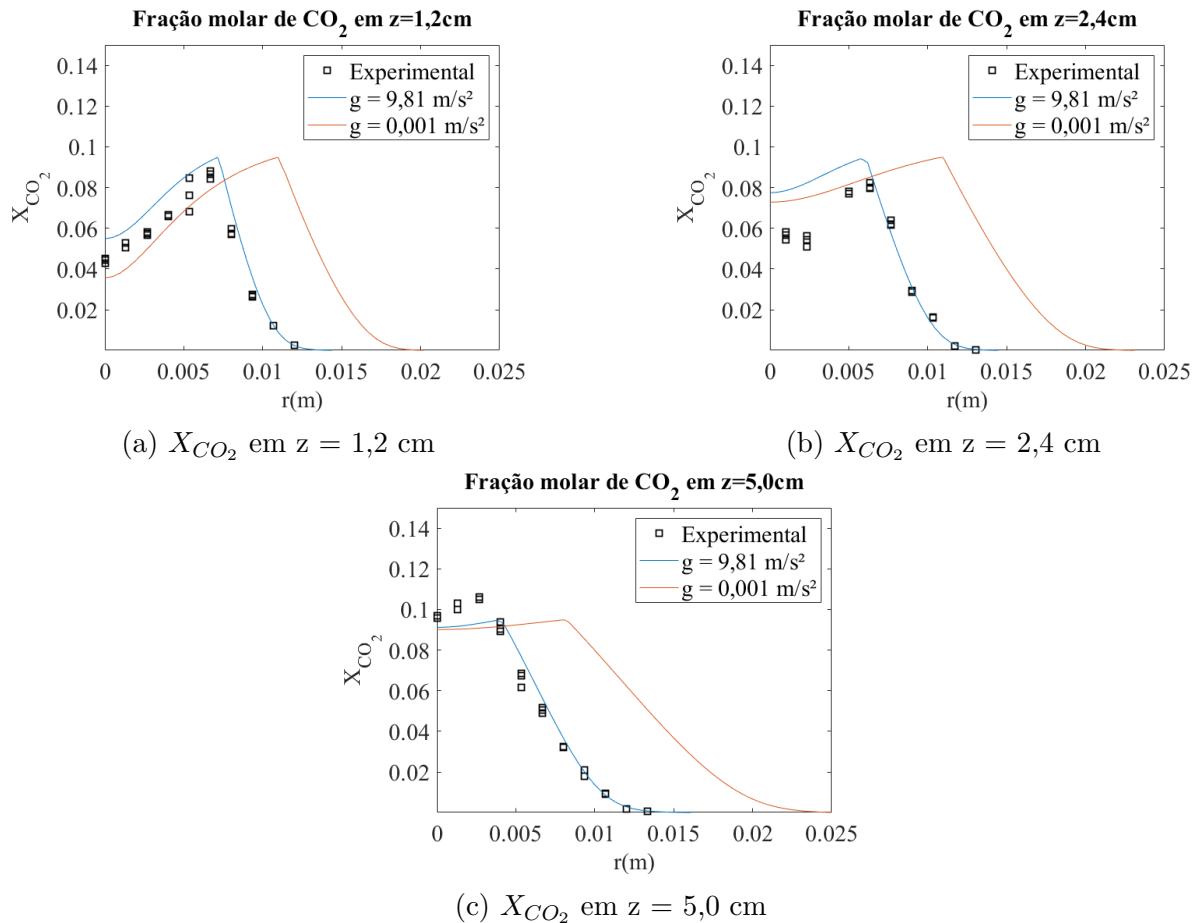


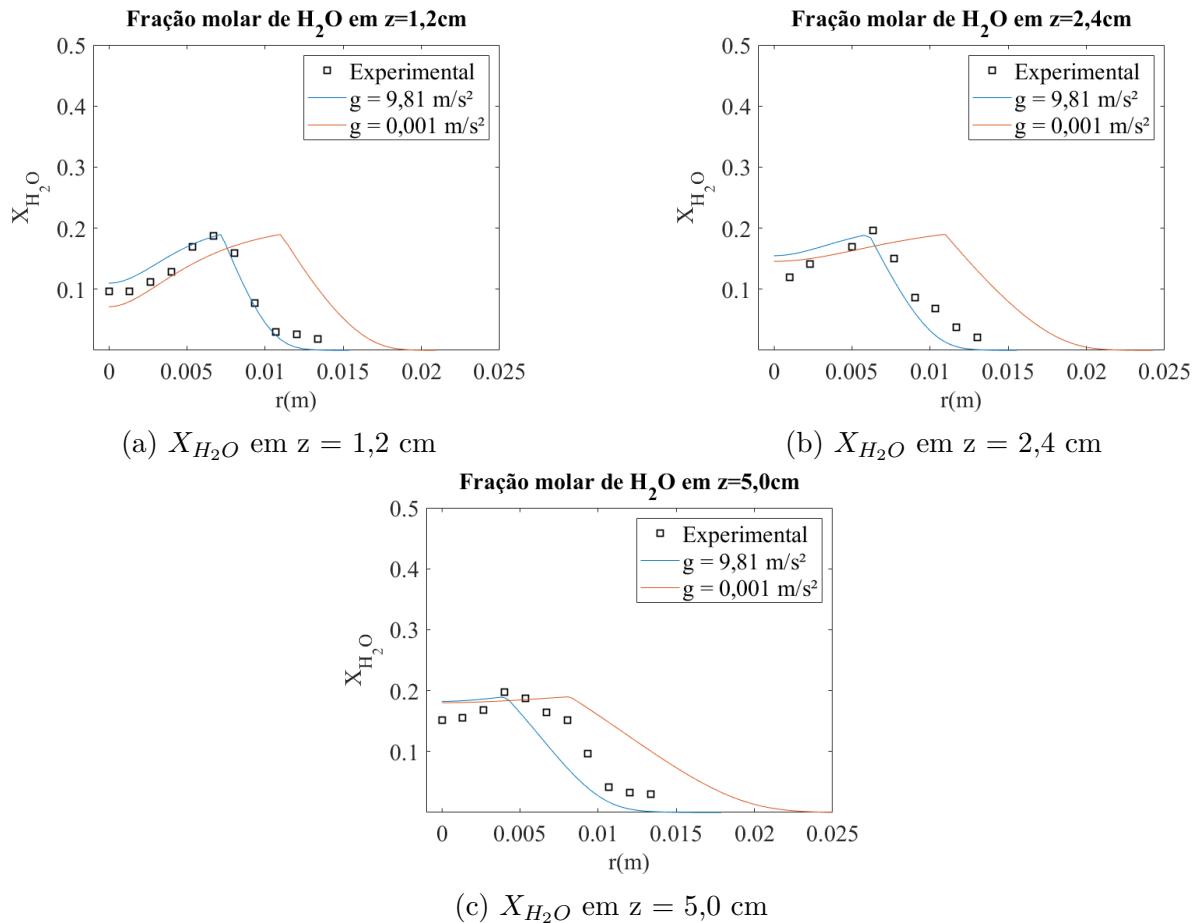
Figura 13 – Fração molar de dióxido de carbono (CO_2)

mento, consistindo de múltiplos jatos, pode ser a responsável por esta diferença, conforme apontado em (DUARTE, 2015).

As figuras 13 e 14 mostram os dados referentes aos produtos da combustão. A simulação numérica apresenta uma leve divergência em relação aos dados experimentais. Isto pode ser explicado pela formulação do modelo de Folha de Chama não levar em consideração a formação de espécies químicas intermediárias durante a combustão, prevendo maior fração destes produtos (BHOWAL; MANDAL, 2016). Já em relação ao ambiente de microgravidade nota-se maior concentração de ambas espécies químicas ao longo do raio da chama. Novamente isto é explicado pela ausência da flutuabilidade no ambiente, que retarda o movimento destas substâncias quando comparado à chama de gravidade nominal.

O N_2 é o único gás inerte introduzido no sistema, junto do O_2 . Há uma ótima concordância entre os dados simulados e experimentais. Também não há grande diferença entre os resultados das simulações em diferentes níveis de gravidade.

As figuras 16 e 17 mostram os campos de temperatura obtidos para as chamas, ambas já em situação de regime permanente. Os contornos de Flamesheet são as regiões

Figura 14 – Fração molar de água (H_2O)

de temperatura mais elevada, por serem justamente onde a combustão ocorre de fato. A temperatura máxima no gráfico da gravidade nominal é de 2090 K, e em microgravidade é 2011 K. Também é possível ver que próximo às paredes e ao final do cilindro, os gradientes de temperatura são baixíssimos, o que valida as hipóteses de que o sistema é largo e comprido o suficiente para não interferir significativamente no escoamento.

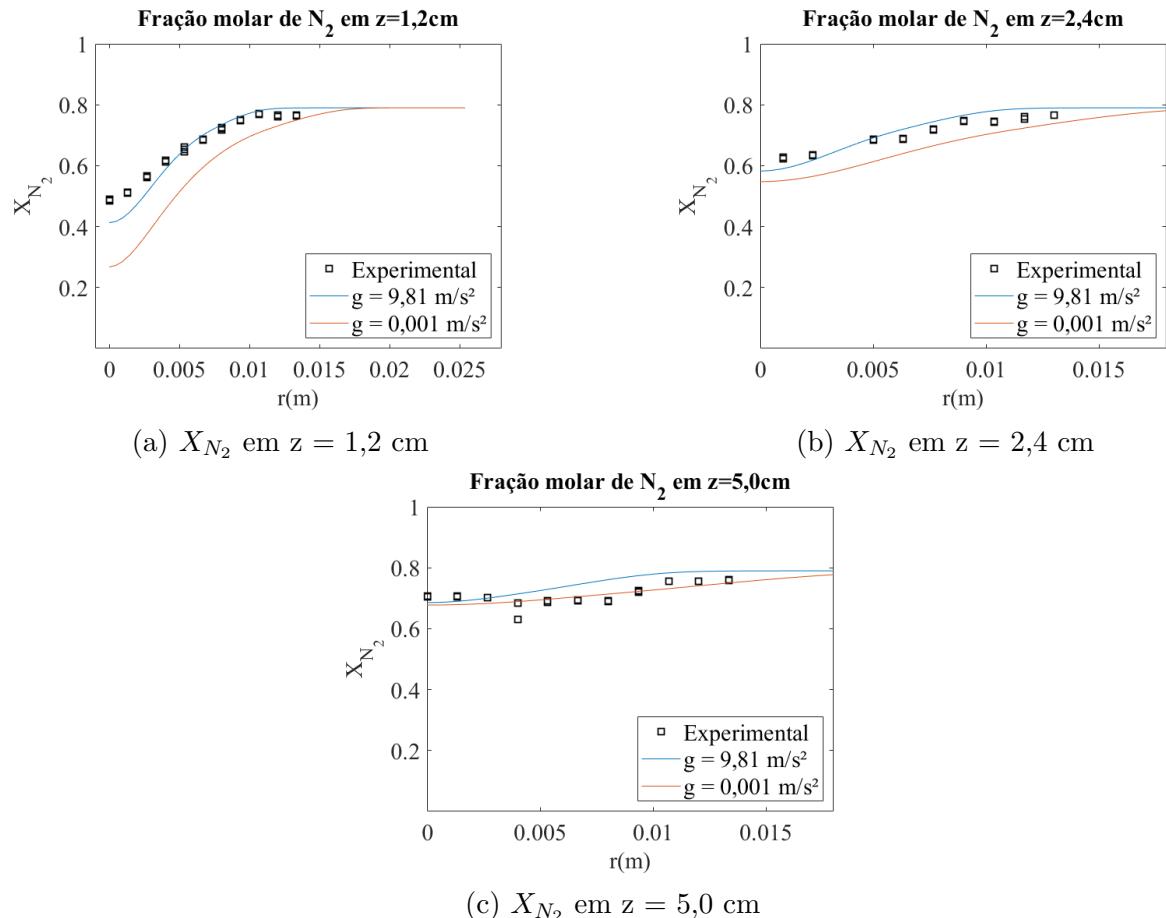


Figura 15 – Fração molar de gás nitrogênio (N_2)

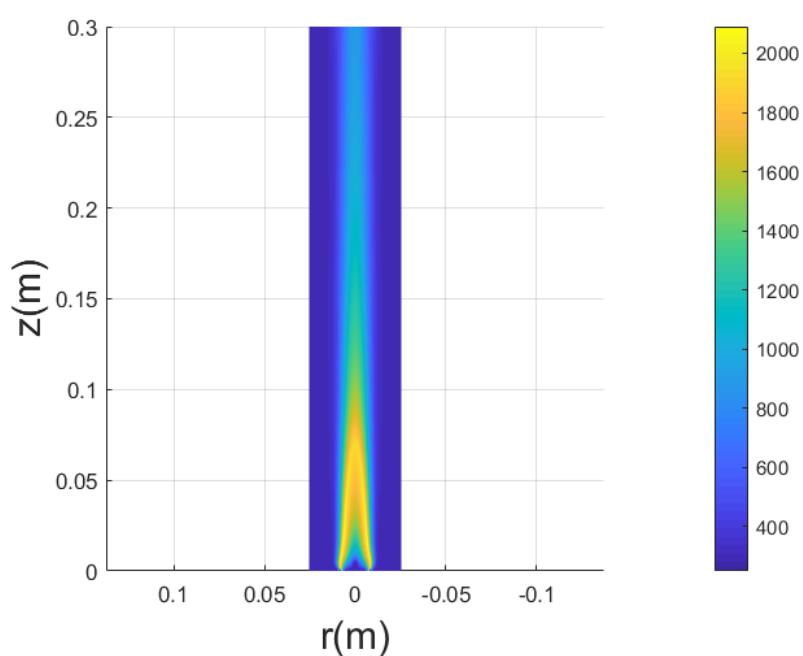


Figura 16 – Campo de temperatura da chama em gravidade nominal

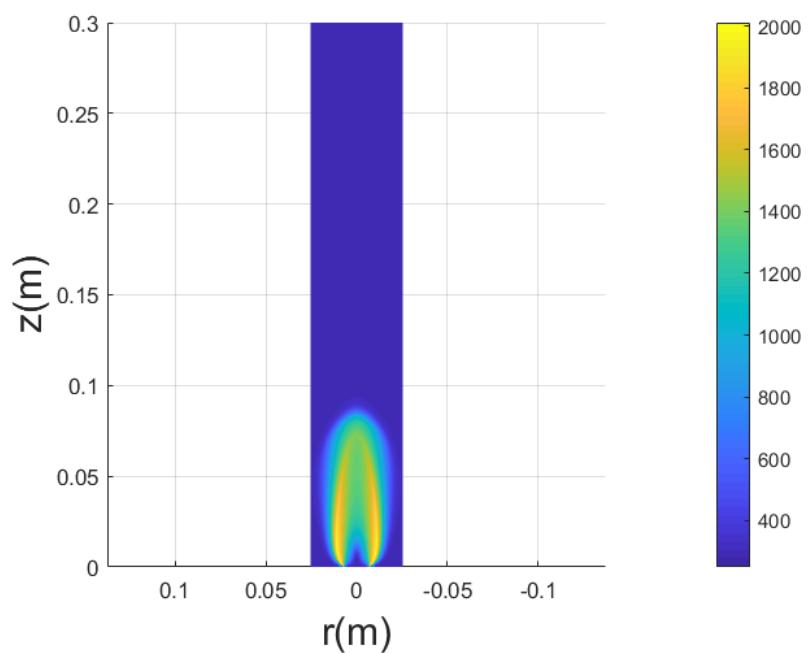


Figura 17 – Campo de temperatura da chama em microgravidade

5 Conclusão

O objetivo principal desse trabalho é o estudo de efeitos do campo gravitacional sobre a combustão do metano. Para isto, foi feito uma revisão bibliográfica de conteúdos relevantes para esta análise, comparação entre resultados obtidos de um experimento já disponível na literatura e os de uma simulação numérica em condições nominais de gravidade, e posteriormente uma em microgravidade.

A simulação numérica foi a de uma chama laminar sem pré-mistura em um câmara de difusão. A formulação matemática por trás do Sistema de reação química simples assume hipóteses como reação de único passo entre combustível e oxidante; combustão dada somente na região denominada *Flamesheet*; coeficiente de difusão único para todas as espécies. As condições de contorno foram impostas para reproduzir as condições as quais a chama experimental foi submetida.

A comparação entre os dados de temperatura, velocidade e fração molar de espécies químicas mostrou haver concordância entre o modelo simulado, e a chama experimental analisada. Apesar de haver pequenas divergências em algumas das espécies químicas, as hipóteses assumidas envolvendo o modelo de Folha de Chama mostraram ser razoáveis para este tipo de chama.

Comparou-se também o modelo simulado para a chama em gravidade nominal, e a chama em microgravidade. Podem ser observadas diferenças nos contornos das mesmas, influenciados pela diferença na flutuabilidade. A altura e largura das chamas lâminares de difusão mostram correlação com o número de Froude.

Além do formato em si, também houve divergências nos campos de temperatura, velocidade e fração molar das chamas analisadas. Estas diferenças são fundadas na diferença de flutuabilidade entre os dois sistemas. Houve maior acúmulo dos produtos da reação na chama de microgravidade, causando maiores perdas de calor para estas substâncias.

5.1 Trabalhos Futuros

Para sugestão de trabalhos futuros, pode-se trabalhar outros hidrocarbonetos como combustível, como o etano e propano, e verificar se o Modelo de taxa química infinita também apresenta bons resultados para estes. Sugere-se também avaliar chamas em diferentes configurações, como a introdução de combustível e ar em sentidos contrários.

Referências

- BAHADORI, M. Y.; EDELMAN, R. B. Combustion of gaseous fuels under reduced gravity conditions. *2nd Conference on Lunar Bases and Space Activities*, 1992. Citado na página 19.
- BAHADORI, M. Y. et al. Ignition and behavior of laminar gas-jet diffusion flames in microgravity. *AIAA Journal* 28, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.
- BARLOW, R. S. et al. Scalar profiles and no formation in laminar opposed-flow partially premixed methane/air flames,. *Combust. Flame* 127, p. 2101 – 2118, 2001. Citado na página 33.
- BHOWAL, A. J.; MANDAL, B. K. A computational study of soot formation in methane air co-flow diffusion flame under microgravity conditions. *Microgravity Sci. Technol.*, p. 395–412, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 42.
- BURKE, S. P.; SCHUMANN, T. E. Diffusion flames. *Industrial Engineering Chemistry*, p. 998–1004, 1928. Citado 4 vezes nas páginas 11, 20, 24 e 25.
- CUNHA, F. A. Modelo matemático para estudo de processos reativos de partículas de carvão e biomassa. 2010. Citado 3 vezes nas páginas 21, 22 e 34.
- DAI, Z. et al. Flow/soot formation interactions in nonbuoyant laminar diffusion flames. p. 774–798, 2002. Citado na página 19.
- DAVIS, R. W. et al. Isolation of buoyancy effects in jet diffusion flame experiments. *Combustion Science and Technology*, p. 625–635, 1990. Citado 3 vezes nas páginas 21, 27 e 28.
- DUARTE, D. G. Modelagem e simulação numérica da combustão gasosa laminar sem pré-mistura. 2015. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 42.
- HOERLLE, C. A. Estudo numérico de chamas difusivas de ch4 diluído com co2 empregando mecanismos cinéticos globais e a técnica flamelet-generated manifold. Rio Grande do Sul, Brasil, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 30.
- KRISHNAN, S. S. et al. Analytical predictions of shapes of laminar diffusion flames in microgravity and earth gravity. *Combustion Theory and Modelling*, p. 605–620, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 27.
- LIN, K. C. et al. Shapes of nonbuoyant round luminous hydrocarbon/air laminar jet diffusion flames. *The Combustion Institute*, p. 415–431, 1999. Citado 4 vezes nas páginas 20, 21, 25 e 26.
- MITCHELL, R. E. Nitrogen oxide formation in laminar methane-air diffusion flames. *Massachusetts Institute of Technology*, 1975. Citado 3 vezes nas páginas 21, 22 e 37.
- MITCHELL, R. E.; SAROFIM, A. F.; CLOMBURG, L. A. Experimental and numerical investigation of confined laminar diffusion flames. *Combustion and Flame V.37*, p. 227–244, 1980. Citado 5 vezes nas páginas 11, 35, 36, 37 e 38.

ROPER, F. G. The prediction of laminar jet diffusion flame sizes: Part i. theoretical model. *Combustion and Flame*, Vol. 29, p. 219–226, 1977. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 27.

SUNDERLAND, P. B. et al. Shapes of buoyant and nonbuoyant laminar jet diffusion flames. *The Combustion Institute*, p. 376–386, 1999. Citado 4 vezes nas páginas 11, 21, 27 e 28.

TARHAN, T.; SELÇUK, N. Numerical simulation of a confined methane/air laminar diffusion flame by the method of lines. *Turkish J. Eng. Env. Sci.*, p. 275–290, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 36.

TAYLOR, R. L. The finite element method. v. 5, 2002. Citado na página 34.

TURNS, S. An introduction to combustion: Concepts and applications. Nova York, EUA, 2000. Citado 3 vezes nas páginas 21, 23 e 33.

VERSTEEG, H.; MALALASEKERA, W. An introduction to computational fluid dynamics. São Paulo, Brasil, p. 87–101, 2007. Citado 9 vezes nas páginas 11, 22, 23, 24, 29, 30, 31, 32 e 34.

ZHANG, D.; LI, S. Imaging and radiation of laminar jet diffusion flames with low coflow air velocity in microgravity. *Wiley Periodicals, Inc.*, 2019. Citado na página 40.