



Universidade de Brasília - UnB  
Faculdade Ciências e Tecnologia em Engenhariax - FCTE  
Engenharia Aeroespacial

## **Simulação computacional do efeito das pressões em uma chama de difusão laminar**

Autor: Hugo Pires Procopio  
Orientador: Dr. Fábio Alfaia da Cunha

Brasília, DF

2025





Hugo Pires Procopio

## **Simulação computacional do efeito das pressões em uma chama de difusão laminar**

Monografia submetida ao curso de graduação em (Engenharia Aeroespacial) da Universidade de Brasília, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em (Engenharia Aeroespacial).

Universidade de Brasília - UnB  
Faculdade Ciências e Tecnologia em Engenhariax - FCTE

Orientador: Dr. Fábio Alfaia da Cunha

Brasília, DF  
2025

---

Hugo Pires Procopio

Simulação computacional do efeito das pressões em uma chama de difusão laminar/ Hugo Pires Procopio. – Brasília, DF, 2025-

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

Orientador: Dr. Fábio Alfaia da Cunha

Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade de Brasília - UnB  
Faculdade Ciências e Tecnologia em Engenhariax - FCTE , 2025.

1. Palavra-chave01. 2. Palavra-chave02. I. Dr. Fábio Alfaia da Cunha. II.  
Universidade de Brasília. III. Faculdade UnB Gama. IV. Simulação computacional  
do efeito das pressões em uma chama de difusão laminar

Hugo Pires Procopio

## **Simulação computacional do efeito das pressões em uma chama de difusão laminar**

Monografia submetida ao curso de graduação em (Engenharia Aeroespacial) da Universidade de Brasília, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em (Engenharia Aeroespacial).

Trabalho aprovado. Brasília, DF, 17 de fevereiro de 2025:

---

**Dr. Fábio Alfaia da Cunha**  
Orientador

---

**Prof. Dr. Augusto César de Mendonça**  
**Brasil**  
Convidado 1

---

**Prof. Dr. Rafael Castilho Faria**  
**Mendes**  
Convidado 2

Brasília, DF  
2025



# Agradecimentos

Dedico este trabalho à minha mãe, ao meu pai e à minha avó, que sempre estiveram ao meu lado, oferecendo amor, apoio incondicional e incentivo nos momentos mais difíceis. A toda a minha família, que, direta ou indiretamente, contribuiu para que eu chegasse até aqui, meu mais profundo agradecimento.

Ao meu professor orientador, cuja orientação e paciência foram fundamentais para a realização deste trabalho, sou imensamente grato. Sua dedicação e conhecimento foram essenciais para o meu crescimento acadêmico e profissional.

Aos amigos que tornaram a jornada universitária mais leve e suportável, compartilhando desafios, conquistas e momentos inesquecíveis, minha eterna gratidão. Sem vocês, essa caminhada teria sido muito mais difícil.

A todos que, de alguma forma, contribuíram para essa conquista, deixo aqui meu sincero agradecimento.



*“A gente passa a vida pelejando com o dilema de existir ou desistir  
com o que é bom e o que é ruim, o certo e o errado, a morte e a vida  
Essas coisas não se param. (Carla Madeira)*



# Resumo

Este trabalho investiga o efeito das pressões subatmosféricas em chamas de difusão laminar por meio de simulações computacionais. Foram analisadas cinco pressões diferentes (0.22, 0.4, 0.6, 0.8 e 1.0 atm) e comparadas duas condições de contorno para a parede do tubo: parede adiabática e temperatura especificada. Os resultados mostram que a simulação reproduziu qualitativamente o formato da chama em função da pressão, mas apresentou limitações em baixas pressões, onde a variação na altura e largura da chama não foi capturada com precisão. A condição de parede adiabática subestimou a perda de calor, resultando em chamas mais altas do que o esperado, enquanto a temperatura especificada impôs uma perda excessiva, levando ao apagamento da chama em pressões muito baixas. As discrepâncias podem estar relacionadas ao uso do mecanismo de reação DRM22, à ausência de um modelo de fuligem e às limitações das condições de contorno. Sugere-se, para estudos futuros, a implementação do mecanismo GRI-Mech 3.0 e a inclusão de um modelo térmico mais realista para a parede do tubo.

**Palavras-chaves:** combustão. chamas de difusão laminar. pressão subatmosférica. simulação computacional.



# Abstract

This study investigates the effect of subatmospheric pressures on laminar diffusion flames through computational simulations. Five different pressures (0.22, 0.4, 0.6, 0.8, and 1.0 atm) were analyzed, comparing two boundary conditions for the tube wall: adiabatic wall and specified temperature. The results show that the simulation qualitatively reproduced the flame shape as a function of pressure but exhibited limitations at lower pressures, where variations in flame height and width were not accurately captured. The adiabatic wall condition underestimated heat loss, resulting in taller-than-expected flames, while the specified temperature condition imposed excessive heat loss, leading to flame extinction at very low pressures. These discrepancies may be related to the use of the DRM22 reaction mechanism, the absence of a soot model, and the limitations of the boundary conditions. Future studies are recommended to implement the GRI-Mech 3.0 mechanism and include a more realistic thermal model for the tube wall.

**Key-words:** combustion. laminar diffusion flames. subatmospheric pressure. computational simulation.



# Listas de ilustrações

Figura 1 – Determinação da temperatura de chama adiabática Fonte: (TURN, 2000) . . . . .	30
Figura 2 – Comparações de temperatura de chama adiabática considerando diferentes métodos Fonte: (MCALLISTER; CHEN; FERNANDEZ-PELLO, 2011) . . . . .	31
Figura 3 – Configuração para formação de chamas de difusão Fonte: (ROSS, 2001) . . . . .	32
Figura 4 – Chamas de etileno em pressões sub-atmosféricas Fonte: (PANEK, 2009) . . . . .	51
Figura 5 – Combustor de chama de difusão laminar Fonte: (THOMSON et al., 2005) . . . . .	52
Figura 6 – Esquemático da câmara de combustão Fonte: (THOMSON et al., 2005) . . . . .	53
Figura 7 – Esquemático do combustor experimental (dimensões em mm) e 2D axissimétrico . . . . .	54
Figura 8 – Malha 1 com 4180 nós. Fonte: Autor, 2025 . . . . .	55
Figura 9 – Malha 2 com 6283 nós. Fonte: Autor, 2025 . . . . .	56
Figura 10 – Malha 3 com 8734 nós. Fonte: Autor, 2025 . . . . .	56
Figura 11 – Perfil de fração mássica de CO ao longo do eixo z. Fonte: Autor, 2025 . . . . .	57
Figura 12 – Perfil de temperatura ao longo do eixo z. Fonte: Autor, 2025 . . . . .	57
Figura 13 – Perfil de velocidade axial ao longo do eixo z. Fonte: Autor, 2025 . . . . .	58
Figura 14 – Distribuição de temperatura da chama para pressões de 0.22 atm (esquerda) e 0.4 atm (direita). Fonte: Autor, 2025 . . . . .	60
Figura 15 – Distribuição de temperatura da chama para pressões de 0.6 atm (esquerda) e 0.8 atm (direita). Fonte: Autor, 2025 . . . . .	60
Figura 16 – Distribuição de temperatura da chama para pressão de 1.0 atm. Fonte: Autor, 2025 . . . . .	61
Figura 17 – Temperatura máxima da chama em função da pressão. Fonte: Autor, 2025 . . . . .	62
Figura 18 – Comparação dos contornos da chama para pressões de 0.22 atm (esquerda) e 0.4 atm (direita). Fonte: Autor, 2025 . . . . .	63
Figura 19 – Comparação dos contornos da chama para pressões de 0.6 atm (esquerda) e 0.8 atm (direita). Fonte: Autor, 2025 . . . . .	63
Figura 20 – Comparação dos contornos da chama para pressão de 1.0 atm. Fonte: Autor, 2025 . . . . .	64
Figura 21 – Altura da chama em função da pressão para ambas as condições de contorno. Fonte: Autor, 2025 . . . . .	64
Figura 22 – Distribuição do radical C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> para pressões de 0.22 atm (esquerda) e 0.4 atm (direita). Fonte: Autor, 2025 . . . . .	65

Figura 23 – Distribuição do radical C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> para pressões de 0.6 atm (esquerda) e 0.8 atm (direita). Fonte: Autor, 2025 . . . . .	66
Figura 24 – Distribuição do radical C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> para pressão de 1.0 atm. Fonte: Autor, 2025	66
Figura 25 – Distribuição do radical OH para pressões de 0.22 atm (esquerda) e 0.4 atm (direita). . . . .	67
Figura 26 – Distribuição do radical OH para pressões de 0.6 atm (esquerda) e 0.8 atm (direita). . . . .	68
Figura 27 – Distribuição do radical OH para pressão de 1.0 atm. . . . .	68

# **Lista de tabelas**

Tabela 1 – Formas particulares da Eq. 3.1 Fonte: Autor, 2024 . . . . .	45
Tabela 2 – Condições de contorno Fonte: Autor, 2024 . . . . .	54
Tabela 3 – Número de nós de cada configuração de malha. . . . .	55



# Listas de símbolos

$A/F$  - Razão ar-combustível

$\Phi$  - Razão de equivalência

$\rho$  - Densidade

$\sigma$  - Diâmetro característico da espécie química

$\epsilon_{AB}$  - Energia máxima de atração entre duas moléculas A e B

$T$  - Temperatura

$P$  - Pressão

$h$  - Entalpia

$u$  - Energia interna

$c_v$  - Calor específico a volume constante

$c_p$  - Calor específico a pressão constante

$\dot{m}$  - Taxa de produção de uma espécie

$D_{AB}$  - Coeficiente de difusão mássica

$\alpha$  - Difusividade térmica

$Le$  - Número de Lewis

$k_f$  - Coeficiente da taxa de reação direta

$k_r$  - Coeficiente da taxa de reação reversa

$G$  - Energia livre de Gibbs

$\Delta G$  - Variação da energia livre de Gibbs

$J_A$  - Fluxo de massa da espécie A

$\Omega$  - Integral de colisão para viscosidade

$\mu$  - Viscosidade

$k$  - Condutividade térmica

$Re$  - Número de Reynolds

$u_z$  - Velocidade do fluido na direção  $z$

$v_r$  - Velocidade do fluido na direção  $r$

$L$  - Comprimento característico

$\nabla$  - Operador nabla (gradiente)

$\mathbf{v}$  - Velocidade do fluido

$\partial$  - Derivada parcial

$\mathbf{F}$  - Vetor de forças de campo

$\tau$  - Tensor de tensões viscosas

$I$  - Tensor identidade

$Y_i$  - Fração molar da espécie  $i$

$j_i$  - Fluxo de difusão mássica  $i$

$\dot{\omega}_i$  - Taxa de geração da espécie  $i$

$D_i$  - Coeficiente de difusão mássica do componente  $i$

$c$  - Velocidade de reação química

$Le_i$  - Número de Lewis do componente  $i$

$\lambda$  - Condutividade térmica do fluido

$c_p$  - Capacidade térmica a pressão constante do fluido

$h_i$  - Entalpia específica da espécie  $i$

$h_{i,f}^0$  - Entalpia específica de formação

$T_{ref}$  - Temperatura de referência

$\phi$  - Escalar genérico

$\Gamma_\phi$  - Coeficiente de difusão

$S_\phi$  - Termo de fonte

$\Delta t$  - Passo de tempo

$\mathbf{M}$  - Matriz global

$\dot{q}$  - Taxa de transferência de calor por radiação

$\sigma$  - Constante de Stefan-Boltzmann

$T_b$  - Temperatura ambiente

$a_P$  - Coeficiente de absorção do corpo

$p_i$  - Pressão parcial da espécie  $i$

$k_i$  - Taxa de reação pré-exponencial da espécie  $i$

$C_i$  - Concentração molar da espécie

$M_i$  - Massa molar do componente  $i$

$p_0$  - Pressão de referência

$R_u$  - Constante universal dos gases perfeitos

$W$  - Massa molar

$n_s$  - Número de espécies químicas

$c_{p,i}$  - Calor específico a pressão constante a espécie química  $i$

$X_i$  - Fração molar da espécie química  $i$

$\sigma_i$  - Diâmetro de colisão de uma espécie  $i$



# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>23</b>
<b>1.1</b>	<b>Contextualização</b>	<b>23</b>
<b>1.2</b>	<b>Motivação</b>	<b>24</b>
<b>1.3</b>	<b>Objetivos</b>	<b>25</b>
1.3.1	Objetivo geral	25
1.3.2	Objetivos específicos	25
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>27</b>
<b>2.1</b>	<b>Combustão</b>	<b>27</b>
2.1.1	Estequiometria	28
2.1.2	Equação de estado calórica	28
2.1.3	Temperatura de chama adiabática	29
<b>2.2</b>	<b>Chamas de difusão</b>	<b>31</b>
<b>2.3</b>	<b>Fenômenos de transporte</b>	<b>33</b>
2.3.1	Propriedades de transporte	33
<b>2.4</b>	<b>Difusão em gases</b>	<b>34</b>
2.4.1	Primeira lei de Fick	34
2.4.2	Correlações para a estimativa do coeficiente de difusão	35
<b>2.5</b>	<b>Cinética química</b>	<b>35</b>
2.5.1	Taxas de reação para mecanismos com múltiplas etapas	36
2.5.2	Função de Gibbs	37
2.5.3	Relação entre $K_c$ e $K_p$	39
<b>2.6</b>	<b>Mecanismos de reação</b>	<b>40</b>
2.6.1	Mecanismo global	40
2.6.2	Mecanismo detalhado	40
2.6.3	Mecanismo reduzido	41
<b>2.7</b>	<b>Equações Governantes</b>	<b>41</b>
2.7.1	Equação da Conservação de Massa	41
2.7.2	Equação da Quantidade de Movimento	42
2.7.3	Equação de Conservação das Frações Mássicas	42
2.7.4	Equação da Energia	43
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA</b>	<b>45</b>
<b>3.1</b>	<b>Modelo numérico</b>	<b>45</b>
<b>3.2</b>	<b>Modelo para o cálculo das frações de massa</b>	<b>46</b>
<b>3.3</b>	<b>Cálculo das temperaturas</b>	<b>47</b>

<b>3.4</b>	<b>Cálculo das propriedades termofísicas</b>	<b>48</b>
<b>4</b>	<b>DESCRIÇÃO E SIMULAÇÃO DO CASO</b>	<b>51</b>
<b>4.1</b>	<b>Combustor de Thomson</b>	<b>52</b>
<b>4.2</b>	<b>Geometria e condições de contorno</b>	<b>53</b>
<b>4.3</b>	<b>Análise de Sensibilidade da Malha</b>	<b>55</b>
<b>5</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	<b>59</b>
<b>5.1</b>	<b>Campo de Temperaturas</b>	<b>59</b>
5.1.1	Comparação dos Contornos da Chama	62
<b>5.2</b>	<b>Distribuição do Radical C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></b>	<b>65</b>
5.2.1	Distribuição do Radical OH	67
<b>6</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>71</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>73</b>

# 1 Introdução

## 1.1 Contextualização

A combustão é crucial para a conversão de energia, sendo vital tanto para aplicações industriais quanto domésticas. Sua importância reside na capacidade de liberar grandes quantidades de energia armazenada nos combustíveis, permitindo seu uso em diversas tecnologias e processos. A combustão é essencial para a geração de eletricidade, aquecimento, transporte e muitas outras aplicações industriais, impactando diretamente a sustentabilidade e o desenvolvimento econômico de uma sociedade ([TANIGUCHI et al., 2005](#)).

Exemplos incluem motores de combustão interna, turbinas a gás e usinas termoelétricas, onde a conversão eficiente da energia química em energia mecânica ou elétrica é fundamental para atender às demandas energéticas modernas. A eficiência desses processos é frequentemente aumentada pela otimização dos parâmetros de combustão, como a mistura de ar e combustível, a pressão e a temperatura de operação ([JONES, 1985](#)).

Além da geração de energia, a combustão desempenha um papel vital na redução de poluentes. O controle das condições de combustão pode minimizar a formação de subprodutos indesejáveis, como monóxido de carbono (CO), óxidos de nitrogênio (NOx) e hidrocarbonetos não queimados ([FLAGAN; SEINFELD, 1988](#)). A compreensão dos mecanismos de combustão e das reações químicas envolvidas permite o desenvolvimento de tecnologias mais limpas e eficientes, melhorando a qualidade do ar e reduzindo o impacto ambiental.

A simulação computacional tem se mostrado uma ferramenta poderosa no estudo da combustão. Ela permite a análise detalhada dos processos de combustão em diferentes escalas e condições, oferecendo insights sobre a dinâmica das chamas, a transferência de calor e massa, e as interações químicas. Com os avanços na capacidade de processamento computacional e nos algoritmos de simulação, é possível modelar sistemas de combustão complexos com alta precisão, auxiliando no desenvolvimento de tecnologias mais eficientes e seguras ([PELUCCHI; ABIÁN; COMMODO, 2022](#)).

Microgravidade refere-se a um ambiente onde os efeitos da gravidade terrestre são significativamente reduzidos. No contexto da pesquisa em combustão, a microgravidade possibilita a análise de fenômenos fundamentais, como a propagação de chamas, a formação de fuligem e a difusão de calor e massa, sem as perturbações induzidas pela gravidade ([GOKOGLU et al., 2015](#)). Esses estudos são úteis para a compreensão de chamas laminares e de difusão, fundamentais para o desenvolvimento de modelos de combustão

mais precisos e para a melhoria da segurança em ambientes de microgravidade, como nas missões espaciais ([KOHSE-HÖINGHAUS, 2020](#)).

Portanto, a combustão é uma área de estudo com profundas implicações práticas e econômicas. Aumentar a eficiência dos sistemas de combustão e controlar as emissões de poluentes são essenciais para o desenvolvimento sustentável e a preservação ambiental.

## 1.2 Motivação

A simulação computacional do efeito das pressões em uma chama de difusão laminar é um campo de estudo relevante para a engenharia de combustão. A motivação para investigar esse tema deriva da necessidade de compreender o comportamento das chamas sob diferentes condições de pressão e gravidade.

Primeiramente, entender as propriedades das chamas de difusão laminar em condições de pressão subatmosférica é crucial para simular ambientes de microgravidade. A pesquisa em microgravidade é essencial para o desenvolvimento de tecnologias seguras para missões espaciais e para a compreensão dos processos de combustão na Terra. Em microgravidade, as forças de empuxo são minimizadas, revelando comportamentos de chama não observáveis em gravidade normal ([PANEK, 2009; FROLOV et al., 2023](#)). Usar pressões subatmosféricas permite simular essas condições, realizando experimentos mais longos e com menor custo comparado a outras técnicas de simulação de microgravidade ([FROLOV et al., 2023](#)).

Além disso, estudar as chamas de difusão laminar sob diferentes pressões ajuda a entender os mecanismos de formação e oxidação de fuligem. A fuligem é um poluente significativo resultante da combustão de hidrocarbonetos, e sua formação é influenciada por fatores como pressão e gravidade ([PANEK, 2009](#)). Em pressões elevadas, há um aumento na concentração de fuligem, enquanto em pressões subatmosféricas, os tempos de residência mais longos podem resultar em maiores frações de volume de fuligem e tamanhos de partículas. Esse conhecimento é fundamental para desenvolver estratégias de controle da poluição e otimizar processos de combustão.

A simulação computacional oferece uma ferramenta poderosa para explorar esses fenômenos. Modelar e prever o comportamento das chamas sob diferentes condições permite analisar detalhadamente as interações entre os parâmetros de combustão, como temperatura, formação de fuligem e estabilidade da chama ([FROLOV et al., 2023](#)). Modelos numéricos avançados podem replicar condições de pressão e gravidade variáveis, proporcionando perspectivas valiosas para a pesquisa fundamental e o desenvolvimento de tecnologias práticas de combustão.

Em resumo, a investigação das chamas de difusão laminar em diferentes pressões,

utilizando simulações computacionais, é motivada pela necessidade de entender e controlar os processos de combustão em ambientes terrestres e espaciais. Essa pesquisa contribui para a ciência básica da combustão e tem implicações práticas significativas para a engenharia de sistemas de combustão mais eficientes e menos poluentes ([FROLOV et al., 2023](#)).

## 1.3 Objetivos

### 1.3.1 Objetivo geral

O objetivo deste trabalho é avaliar o efeito de pressões subatmosféricas em chamas de difusão laminar através de simulação computacional.

### 1.3.2 Objetivos específicos

Para alcançar o objetivo geral, os seguintes objetivos específicos foram estabelecidos:

- Avaliar a influência da condição de contorno na parede do tubo na simulação;
- Avaliar a variação da altura da chama em pressões diferentes;
- Avaliar a temperatura máxima da chama para diferentes pressões;
- Analisar a distribuição espacial e concentração dos radicais  $C_2H_3$  e OH em pressões diferentes.



## 2 Revisão Bibliográfica

### 2.1 Combustão

A combustão, segundo (LAW, 2010), é o estudo de fluxos quimicamente reativos com reações rápidas e altamente exotérmicas, e é naturalmente interdisciplinar, compreendendo termodinâmica, cinética química, mecânica dos fluidos e fenômenos de transporte, cada um dos quais desempenha os seguintes papéis:

- Termodinâmica

Nos processos de combustão, os reagentes são convertidos em produtos, liberando calor para utilização. A termodinâmica permite calcular quanta energia química é convertida em energia térmica e determinar as propriedades térmicas e de composição dos produtos em equilíbrio. Embora as leis da termodinâmica do equilíbrio sejam bem estabelecidas, as propriedades termodinâmicas de muitas espécies reativas ainda não são bem determinadas.

- Cinética Química

Enquanto a termodinâmica liga o estado inicial ao estado final de equilíbrio de uma mistura reativa, não nos diz através de qual caminho, nem quanto tempo essa transformação leva. A cinética química é necessária para descrever os caminhos e taxas das reações durante esses tempos. A complexidade da cinética química é evidente, pois, atualmente, apenas os mecanismos de oxidação de combustíveis simples como hidrogênio e metano são razoavelmente bem compreendidos.

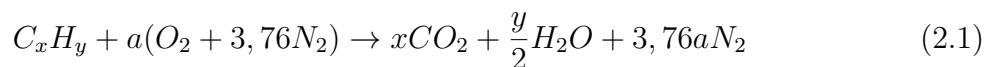
- Fenômenos de Transporte

Em um campo de fluxo de combustão, as reações químicas ocorrem frequentemente em regiões altamente localizadas de frentes de reação, caracterizadas por altas temperaturas e concentrações de produtos, e baixas concentrações de reagentes. Gradiêntes de temperatura e concentração causam a transferência de energia e massa das regiões de altos valores para regiões de baixos valores através da difusão molecular. A transferência de calor por radiação também pode ser importante. O transporte difusivo é crucial na manutenção de muitos tipos de chamas, pois permite o suprimento contínuo de reagentes frescos para a chama e a condução do calor gerado para aquecer e causar a ignição da mistura fria. Além disso, os sistemas de combustão frequentemente envolvem reações químicas ocorrendo em um meio fluido, tornando o conhecimento da mecânica dos fluidos essencial para a compreensão dos fenômenos de combustão.

### 2.1.1 Estequiométrica

A quantidade estequiométrica de oxidante é simplesmente a quantidade necessária para queimar completamente certa quantidade de combustível. Se uma quantidade de oxidante maior do que a estequiométrica é fornecida, diz-se que a mistura é pobre em combustível, ou, simplesmente, pobre; fornecer uma quantidade de oxidante menor que a estequiométrica resulta em uma mistura rica em combustível ou, simplesmente, rica. (TURNS, 2000)

Assumindo, por simplicidade, que a composição simplificada do ar corresponde a 21% de  $O_2$  e 79% de  $N_2$ , a relação estequiométrica ar-combustível pode ser expressa através da equação:



Onde:

$$a = x + \frac{y}{4} \quad (2.2)$$

Portanto, a razão estequiométrica ar-combustível pode ser dada por

$$(A/F)_{steq} = \left( \frac{m_a}{m_F} \right)_{steq} = \frac{4,76a}{1} \frac{MW_a}{MW_F} \quad (2.3)$$

onde  $MW_a$  e  $MW_F$  são, respectivamente, as massas molares do ar e do combustível.

A razão de equivalência,  $\Phi$ , é comumente utilizada para indicar quantitativamente quando uma mistura de oxidante e combustível é rica, pobre ou estequiométrica. Ela é definida pela equação 2.4. Para misturas estequiométricas,  $\Phi = 1$ . Para misturas ricas,  $\phi > 1$ , e para misturas pobres  $\Phi < 1$ .

$$\Phi = \frac{(A/F)_{steq}}{A/F} \quad (2.4)$$

### 2.1.2 Equação de estado calórica

Expressões relacionando a energia interna (ou a entalpia) com a pressão e a temperatura são denominadas equações de estado, ou seja,

$$u = u(T, v) \quad (2.5)$$

$$h = h(T, P) \quad (2.6)$$

Expressões gerais para variações infinitesimais em  $u$  ou  $h$  podem ser formuladas pela diferenciação das Equações 2.5 e 2.8:

$$du = \left( \frac{\partial u}{\partial T} \right)_v dT + \left( \frac{\partial u}{\partial v} \right)_T dv \quad (2.7)$$

$$dh = \left( \frac{\partial h}{\partial T} \right)_P dT + \left( \frac{\partial h}{\partial P} \right)_T dP \quad (2.8)$$

Nessas relações, reconhecemos que as derivadas parciais em relação a temperatura constituem-se nos calores específicos a volume constante e a pressão constante, respectivamente, ou seja,

$$c_v \equiv \left( \frac{\partial u}{\partial T} \right)_v \quad (2.9)$$

$$c_p \equiv \left( \frac{\partial h}{\partial T} \right)_P \quad (2.10)$$

Para um gás ideal, as derivadas parciais em relação ao volume específico,  $\left( \frac{\partial u}{\partial v} \right)_T$ , e a pressão,  $\left( \frac{\partial h}{\partial P} \right)_T$ , são zero. Usando esse conhecimento, integramos as Equações 2.9 e 2.10, substituímos em 2.7 e 2.8 no resultado, e obtemos a seguinte equação de estado calórica para um gás ideal:

$$u(T) - u_{ref} = \int_{T_{ref}}^T c_v dT \quad (2.11)$$

$$h(T) - h_{ref} = \int_{T_{ref}}^T c_p dT \quad (2.12)$$

Tanto para gases com comportamento ideal como para aqueles com comportamento real, os calores específicos  $c_v$  e  $c_p$  são em geral funções da temperatura. Isso é consequência de a energia interna de uma molécula consistir em três componentes (translacional, vibracional e rotacional) e de os modos rotacional e vibracional se tornarem progressivamente mais ativos à medida que a temperatura aumenta, conforme previsto pela mecânica quântica (TURNS, 2000).

### 2.1.3 Temperatura de chama adiabática

Durante as reações de combustão, ocorrem trocas entre energia química e térmica. A sequência de reações, que no total são exotérmicas, liberam energia química (LAW, 2010). Se a mistura combustível - oxidante queima adiabaticamente a pressão constante, a entalpia padrão dos reagentes no estado inicial é igual à entalpia padrão dos produtos no estado final (TURNS, 2000). Ou seja:

$$H_{reag}(T_i, P) = H_{prod}(T_{ad}, P) \quad (2.13)$$

Que também pode ser dado em uma base por massa de mistura:

$$h_{reag}(T_i, P) = h_{prod}(T_{ad}, P) \quad (2.14)$$

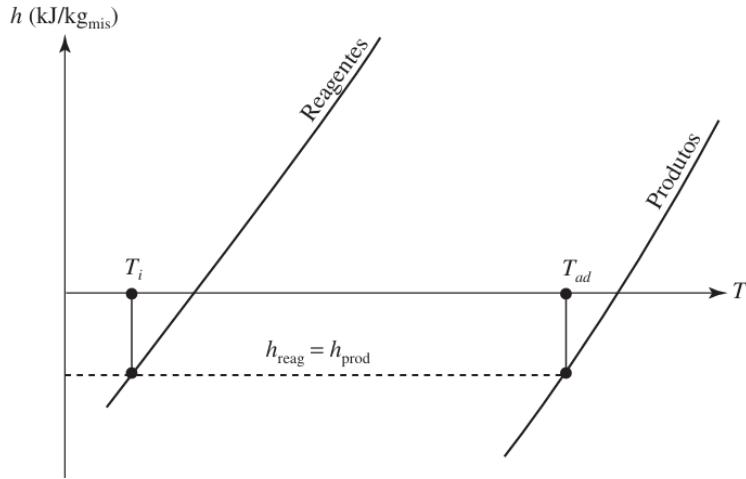


Figura 1 – Determinação da temperatura de chama adiabática  
Fonte: ([TURNS, 2000](#))

Tendo definido  $\bar{h}_i^0(T^\circ)$  e  $\bar{h}_i^s(T; T^\circ)$ , é possível afirmar que, para um processo de pressão constante em um sistema fechado, o conteúdo total de entalpia por mol de uma espécie  $i$  na temperatura  $T$ ,  $\bar{h}_i(T; T^\circ)$ , é a soma do seu calor de formação em  $T^\circ$ ,  $\bar{h}_i^0(T^\circ)$ , e do calor sensível em  $T$  relativo a  $T^\circ$ ,  $\bar{h}_i^s(T; T^\circ)$ . Ou seja,

$$\bar{h}_i(T; T^\circ) = \bar{h}_i^0(T^\circ) + \bar{h}_i^s(T; T^\circ). \quad (2.15)$$

Portanto, a conservação de energia para uma mistura de gases antes e depois de uma reação química, respectivamente designadas por  $T_1$  e  $T_{ad}$ , é

$$\sum_{i=1}^N N_{i,1} \bar{h}_i(T_1; T^\circ) = \sum_{i=1}^N N_{i,2} \bar{h}_i(T_{ad}; T^\circ). \quad (2.16)$$

Substituindo a Equação 2.15 na Equação 2.16, temos

$$\sum_{i=1}^N N_{i,1} \bar{h}_i^0(T^\circ) - \sum_{i=1}^N N_{i,2} \bar{h}_i^0(T^\circ) = \sum_{i=1}^N N_{i,2} \bar{h}_i^s(T_{ad}; T^\circ) - \sum_{i=1}^N N_{i,1} \bar{h}_i^s(T_{ad}; T^\circ). \quad (2.17)$$

O lado esquerdo da Equação 2.17 é a liberação de calor químico no estado padrão, e o lado direito representa a diferença entre os estados 1 e 2 no calor sensível total relativo a  $T^\circ$ . Assim, para uma composição inicial  $N_{i,1}$  e temperatura inicial  $T_1$ , as incógnitas na Equação 2.17 são a composição final  $N_{i,2}$  e a temperatura  $T_{ad}$ .

Para encontrar a temperatura dos produtos dado a entalpia dos reagentes, três métodos diferentes podem ser usados ([MCALLISTER; CHEN; FERNANDEZ-PELLO, 2011](#)):

1. Usando um valor médio de  $c_p$ ,
2. Um balanço de entalpia iterativo,
3. Encontrar o estado de equilíbrio usando programa de computador (como Cantera).

Os dois primeiros métodos podem ser realizados manualmente se a combustão completa for considerada e fornecem apenas estimativas rápidas. Um solucionador de estado de equilíbrio leva em conta a dissociação dos produtos em altas temperaturas, tornando-o mais preciso do que os dois primeiros métodos.

As temperaturas adiabáticas de chama previstas para uma mistura de metano/ar à pressão ambiente usando esses métodos são comparadas na Figura 2 para uma gama de razões de equivalência. Também são incluídos os resultados de um cálculo de chama usando um modelo de chama detalhado e não-equilíbrio. No lado pobre, os resultados concordam razoavelmente bem entre todos os métodos, pois os principais produtos são CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, O<sub>2</sub> não queimado e N<sub>2</sub>. Desvios visíveis surgem perto das condições estequiométricas e se tornam maiores em misturas mais ricas. Uma razão para o desvio são as suposições feitas sobre as espécies de produtos em misturas ricas. Para misturas ricas no estado de equilíbrio, o CO é preferido ao CO<sub>2</sub> devido à deficiência de O<sub>2</sub>.

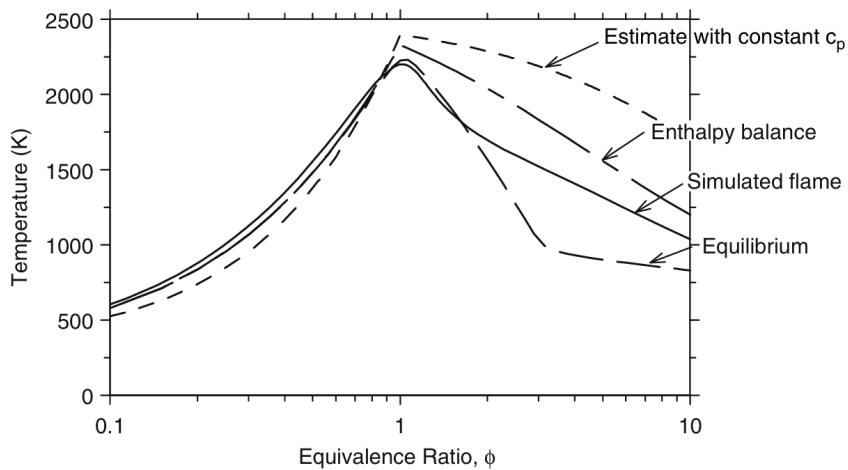


Figura 2 – Comparações de temperatura de chama adiabática considerando diferentes métodos

Fonte: ([MCALLISTER; CHEN; FERNANDEZ-PELLO, 2011](#))

## 2.2 Chamas de difusão

Chamas de difusão são um tipo distinto de chama formada quando um gás combustível e um oxidante, como o ar, se encontram e entram em combustão sem pré-mistura. Ao contrário das chamas de Bunsen, onde o gás e o ar são misturados antes da ignição, as chamas de difusão ocorrem devido à interação desses gases no ponto de contato. O

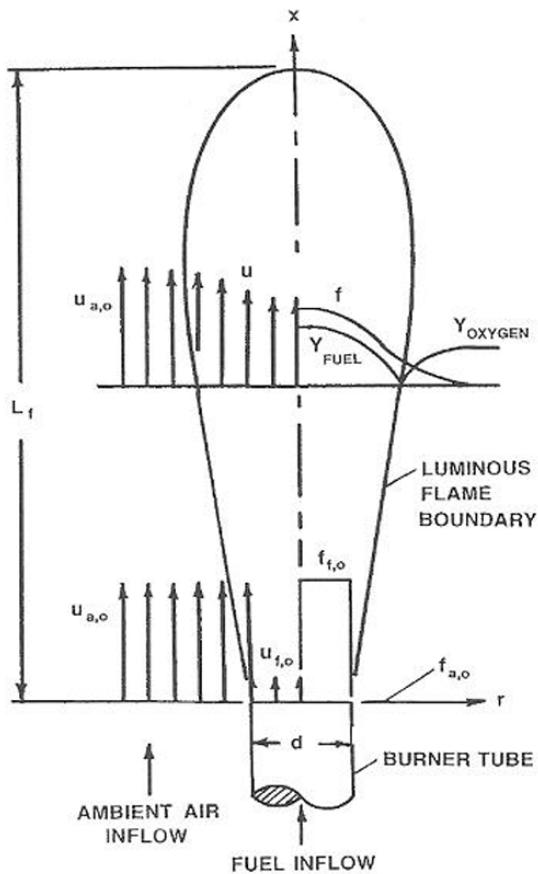


Figura 3 – Configuração para formação de chamas de difusão  
Fonte: ([ROSS, 2001](#))

conceito foi amplamente estudado por S.P. Burke e T.E.W. Schumann ([BURKE; SCHUMANN, 1928](#)), que forneceram tanto um arcabouço teórico quanto validação experimental para essas chamas. Seus trabalhos elucidam a estrutura e o comportamento da chama sob várias condições, contribuindo significativamente para a compreensão dos processos de combustão.

As características físicas das chamas de difusão incluem uma frente de chama distinta, onde a combustão é primariamente confinada a uma superfície fina e bem definida. Esta superfície se forma devido à inter-difusão dos gases combustível e oxidante, que se encontram em proporções estequiométricas necessárias para a combustão. A forma e o tamanho da chama são influenciados por fatores como as taxas de fluxo dos gases e a disposição geométrica dos fluxos de gás. Os estudos de Burke e Schumann usaram tubos concêntricos para criar chamas cilíndricas, demonstrando como alterações em parâmetros como o diâmetro do tubo afetam as dimensões e a estabilidade da chama.

A análise de Burke e Schumann destaca a importância do coeficiente de difusão, que afeta a taxa na qual os gases se misturam e, portanto, as características da chama. Seus experimentos envolveram análises químicas detalhadas dos gases em vários pontos

dentro da chama para determinar os coeficientes de difusão sob condições de chama. Essa abordagem permitiu prever com precisão a forma e o tamanho da chama, fornecendo um modelo teórico robusto apoiado por dados empíricos. A compreensão das chamas de difusão é crucial para várias aplicações, incluindo combustores industriais e avaliações de segurança em cenários onde vazamentos de gás poderiam levar a combustões descontroladas.

## 2.3 Fenômenos de transporte

Os processos de transporte molecular, como difusão, condução de calor e viscosidade, compartilham a característica de que suas respectivas propriedades físicas são transportadas pelo movimento das moléculas no gás. A difusão refere-se ao transporte de massa impulsionado por gradientes de concentração, enquanto a viscosidade está associada ao transporte de momento devido a gradientes de velocidade, e a condução de calor representa o transporte de energia causado por gradientes de temperatura. Além desses mecanismos, também ocorrem fenômenos como a difusão térmica (efeito Soret), em que gradientes de temperatura induzem o transporte de massa, e o efeito Dufour, no qual gradientes de concentração resultam no transporte de energia. No entanto, a influência deste último é geralmente insignificante e frequentemente desconsiderada em simulações de processos de combustão (WARNATZ; MAAS; DIBBLE, 2001).

### 2.3.1 Propriedades de transporte

Para descrever melhor a dependência da temperatura de  $\mu$ , é necessário substituir o modelo de esfera rígida por um que retrate as forças atrativas e repulsivas com mais precisão. Também é necessário utilizar a equação de Boltzmann para obter a distribuição de velocidade molecular em sistemas fora de equilíbrio com mais precisão.

A viscosidade  $\mu$  e condutividade térmica  $k$  são calculadas pela teoria cinética como integrais múltiplas complicadas que envolvem as forças intermoleculares que descrevem colisões binárias na mistura gasosa. Uma vez escolhida uma expressão para a lei de força intermolecular, essas integrais podem ser avaliadas numericamente (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2002). Utilizando o potencial de Lennard-Jones como modelo, a viscosidade e condutividade térmica de uma espécie química pode ser dada por:

$$\mu_k = 2,6693 \times 10^{-6} \frac{(W_k T)^{0.5}}{\sigma_k^2 \Omega_{\mu,k}} \quad (2.18)$$

$$k_k = \left( c_{p,k} + \frac{5}{4} \frac{R_u}{W_k} \right) \mu_k \quad (2.19)$$

A quantidade adimensional  $\Omega$  é uma função lentamente variável da temperatura adimensional  $\frac{KT}{\epsilon}$ , da ordem de grandeza da unidade. É chamada de "integral de colisão para viscosidade", pois considera os detalhes dos caminhos que as moléculas percorrem durante uma colisão binária. Se o gás fosse composto por esferas rígidas de diâmetro  $a$  (em vez de moléculas reais com forças atrativas e repulsivas), então  $\Omega$  seria exatamente unidade. Portanto, a função  $\Omega$  pode ser interpretada como descrevendo o desvio do comportamento de esfera rígida.

Para calcular a viscosidade e condutividade térmica de uma mistura de gases, pode-se usar as seguinte fórmulas semi-empíricas (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2002):

$$\mu_{mix} = \sum_{k=1}^n \frac{X_k \mu_k}{\sum_{j=1}^n X_j \Theta_{kj}} \quad (2.20)$$

$$k_{mix} = \sum_{k=1}^n \frac{X_k k_k}{\sum_{j=1}^n X_j \Theta_{kj}} \quad (2.21)$$

## 2.4 Difusão em gases

### 2.4.1 Primeira lei de Fick

Para o transporte de massa causado por gradientes de concentração, a primeira lei de Fick estabelece que o fluxo de massa  $j_m$  é proporcional ao gradiente de concentração (WARNATZ; MAAS; DIBBLE, 2001). A difusão de um soluto gasoso A em um meio também gasoso B é dada por:

$$J_{A,z} = -\rho D_{AB} \frac{dY_A}{dz} \quad (2.22)$$

O sinal negativo indica decréscimo da concentração da espécie A com o sentido do fluxo;  $J_{A,z}$  - indica o fluxo difusivo da espécie química A na direção z;  $D_{AB}$  é o coeficiente de difusividade mássica, indica a difusão do soluto A no meio B. Esse coeficiente é reconhecido, para o caso de meio gasoso, como o coeficiente de difusão mútua: A difunde no meio B, bem como B difunde no meio A. (CREMASCO, 2015)

Se escrevermos a equação 2.22 em todas as direções, temos a forma vetorial da primeira lei de Fick (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2002).

$$\mathbf{J}_A = -\rho D_{AB} \nabla Y_A \quad (2.23)$$

A difusividade mássica  $D_{AB}$  e a difusividade térmica  $\alpha$  possuem dimensão de  $(distância)^2/tempo$ , e, portanto, a razão entre elas é um número adimensional. Esse número é denominado número de Lewis, que desempenham um papel proeminente em equa-

ções adimensionais para sistemas nos quais ocorrem processos de transporte concorrentes (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2002).

$$Le = \frac{\alpha}{D_{AB}} \quad (2.24)$$

Para muitas espécies químicas de interesse em combustão, os números de Lewis são da ordem da unidade, e portanto, a hipótese de Le unitário é frequentemente invocada na análise de problemas de combustão e permite grande simplificação do modelo difusivo (TURNS, 2000).

#### 2.4.2 Correlações para a estimativa do coeficiente de difusão

No início do século XX, de maneira independente, Chapman na Inglaterra e Enskog na Suécia desenvolveram uma teoria cinética rigorosa para gases. Dessa teoria, foram derivados coeficientes de transporte utilizando a energia potencial (CREMASCO, 2015). Um de seus resultados é o coeficiente de difusão binário, que é dado pela equação 2.25

$$D_{AB} = b \times 10^{-3} \frac{T^{3/2}}{P\sigma_{AB}^2 \Omega_D} \left( \frac{1}{M_a} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2} \quad (2.25)$$

Nessa equação, o coeficiente  $b$  é constante e igual à 1,858. Em 1955, Wilk e Lee, através de análises empíricas, propuseram uma expressão para o cálculo da constante  $b$ , dado pela equação 2.26.

$$b_{AB} = 2,17 - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{M_a} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2} \quad (2.26)$$

Essa fórmula resulta na seguinte correlação para o coeficiente de difusão:

$$D_{AB} = \left[ 2,17 - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{M_a} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2} \right] \times 10^{-3} \frac{T^{3/2}}{P\sigma_{AB}^2 \Omega_D} \left( \frac{1}{M_a} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2} \quad (2.27)$$

## 2.5 Cinética química

A cinética química desempenha um papel fundamental em diversos processos de combustão, influenciando tanto a velocidade do processo de queima quanto a formação e destruição de poluentes. Além disso, os fenômenos de ignição e extinção das chamas estão intrinsecamente ligados aos aspectos químicos envolvidos. O estudo das reações elementares e suas taxas, conhecido como cinética química, constitui um campo especializado dentro da físico-química. Nas últimas décadas, avanços significativos têm sido alcançados na área da combustão, permitindo aos químicos definir com precisão os caminhos que levam dos reagentes aos produtos, além de medir ou calcular as taxas de reação envolvidas.

A partir desses avanços, engenheiros e cientistas da combustão têm desenvolvido modelos computacionais capazes de simular sistemas reativos com grande eficácia. (TURNS, 2000)

Para descrever mecanismos com diversas etapas elementares e muitas espécies químicas, é usual usar uma notação compacta para representar tanto o mecanismo quanto as taxas de produção químicas. Para representar o mecanismo nessa notação

$$\sum_{j=1}^N v'_{i,j} X_j = \sum_{j=1}^N v''_{i,j} X_j \quad (2.28)$$

Onde  $v'_{i,j}$  e  $v''_{i,j}$  são os coeficientes estequiométricos para a j-ésima espécie química na i-ésima equação.

### 2.5.1 Taxas de reação para mecanismos com múltiplas etapas

Para um mecanismo com múltiplas etapas, é possível expressar matematicamente as taxas de reação de maneira compacta. Vamos supor o mecanismo de reação para o sistema  $H_2 - O_2$  expresso pelas equações 2.29 a 2.32.



Em que  $k_f$  e  $k_r$  são os coeficientes das taxas de reações diretas e reversas respectivamente. Sendo que as taxas de produção de  $O_2$  e  $H_2$  podem ser descritas como:

$$\begin{aligned} \frac{d[O_2]}{dt} &= k_{r1}[H_2][O_2] + k_{r2}[OH][O] + k_{r4}[HO_2][M] + \dots \\ &\quad - k_{f1}[H_2][O_2] - k_{f2}[H][O_2] - k_{f4}[H][O_2][M] - \dots \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} \frac{d[H_2]}{dt} &= k_{f1}[HO_2][H] + k_{r2}[OH][O] + k_{f3}[OH][H_2] + k_{r4}[HO_2][M] + \dots \\ &\quad - k_{r1}[HO_2][H] - k_{f2}[H][O_2] - k_{r3}[H_2O][H] - k_{f4}[H][O_2][M] - \dots \end{aligned} \quad (2.34)$$

Ou seja, para cada espécie  $M_i$ , a taxa de produção é descrita pela seguinte equação:

$$\frac{d[M_i](t)}{dt} = f_i([M_1](t), [M_2](t), \dots, [M_n](t)) \quad (2.35)$$

Logo: taxa de produção  $\dot{\omega}_i$  pode ser descrita como:

$$\dot{\omega}_i = \sum_{j=1}^{N_j} v_{ij} q_j \text{ para } i = 1, 2, 3, \dots, N_i \quad (2.36)$$

Onde os termos  $v_{ij}$  e  $q_j$  são expressos pelas equações 2.37 e 2.38

$$v_{ij} = (v_{ij}^P - v_{ij}^R) \quad (2.37)$$

$$q_j = k_{fj} \prod_{i=1}^{N_i} [X_i]^{v_{ij}^R} - k_{rj} \prod_{i=1}^{N_i} [X_i]^{v_{ij}^P} \quad (2.38)$$

## 2.5.2 Função de Gibbs

Em problemas onde há necessidade de calcular a composição de uma mistura dada temperatura, pressão e estequiométria, é utilizada a energia livre de Gibbs (TURNS, 2000). Ela é definida a partir da seguinte equação:

$$G \equiv H - TS \quad (2.39)$$

A segunda lei da termodinâmica em termos da energia livre de Gibbs é dada pela equação 2.40 quando o sistema sofre uma variação espontânea isotérmica e isobárica.

$$(dG)_{T,P,m} \leq 0 \quad (2.40)$$

Para uma mistura de gases ideais, a função de Gibbs de uma espécie química  $i$  é dada por:

$$\bar{g}_{i,T} = \bar{g}_{i,T}^o + R_u T \ln(P/P^o) \quad (2.41)$$

Onde  $\bar{g}_{i,T}^o$  é a função de Gibbs da espécie química pura na pressão do estado padrão de referência ( $P_i = P^o$ ).

A função de Gibbs de uma mistura de gases ideais pode ser expressa como

$$G_{mis} = \sum N_i \bar{g}_{i,T} = \sum N_i [\bar{g}_{i,T}^o + R_u T \ln(P/P^o)] \quad (2.42)$$

Onde  $N_i$  é o número de mols da espécie química  $i$ .

Para temperaturas e pressões fixas, a condição de equilíbrio se dá pelas equações:

$$dG = 0 \quad (2.43)$$

$$\sum dN_i[\bar{g}_{i,T}^o + R_u T \ln(P/P^o)] + \sum N_i d[\bar{g}_{i,T}^o + R_u T \ln(P/P^o)] = 0 \quad (2.44)$$

Como a pressão é constante, é fácil perceber que o segundo termo será nulo. Dessa forma:

$$\sum dN_i[\bar{g}_{i,T}^o + R_u T \ln(P_o/P^o)] = 0 \quad (2.45)$$

Para uma reação geral na forma



$$dNa = -\kappa a, \quad (2.47)$$

$$dNb = -\kappa b, \quad (2.48)$$

$$dNe = \kappa e, \quad (2.49)$$

$$dNf = \kappa f \quad (2.50)$$

Substituindo na equação 2.45 e rearranjando, temos:

$$-(\bar{g}_{E,T}^o + \bar{g}_{F,T}^o + \dots - \bar{g}_{A,T}^o - \bar{g}_{B,T}^o - \dots) = R_u T \ln \frac{(P_E/P^o)(P_F/P^o).etc}{(P_A/P^o)(P_B/P^o).etc} \quad (2.51)$$

O termo à esquerda é denominado variação da função de Gibbs no estado padrão de referência,  $\Delta G_T^o$ . E o termo no logaritmo é definido como constante de equilíbrio  $K_p$

$$K_p = \frac{(P_E/P^o)(P_F/P^o).etc}{(P_A/P^o)(P_B/P^o).etc} \quad (2.52)$$

ou

$$K_p = \exp(-\Delta G_T^o/R_u T) \quad (2.53)$$

A partir disso é possível uma indicação qualitativa de quando uma dada reação química no equilíbrio favorece os produtos ou os reagentes. Se  $K_p$  for positivo, o equilíbrio desloca-se na direção dos reagentes. Contrariamente, se for negativo, o equilíbrio desloca-se na direção dos produtos.

### 2.5.3 Relação entre $K_c$ e $K_p$

Em reações químicas gasosas, é comum expressar a constante de equilíbrio tanto em termos de concentrações molares ( $K_c$ ) quanto em termos de pressões parciais ( $K_p$ ). Para converter entre essas duas constantes de equilíbrio, precisamos considerar a relação entre a concentração molar de um gás e sua pressão parcial (TURNS, 2000).

Para uma reação geral:



A constante de equilíbrio em termos de pressões parciais ( $K_p$ ) é dada por:

$$K_p = \frac{(P_C)^c(P_D)^d}{(P_A)^a(P_B)^b}$$

A constante de equilíbrio em termos de concentrações molares ( $K_c$ ) é dada por:

$$K_c = \frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b}$$

Para relacionar  $K_p$  e  $K_c$ , usamos a equação dos gases ideais:

$$P_i = [i]RT$$

onde  $P_i$  é a pressão parcial da espécie  $i$ ,  $[i]$  é a concentração molar da espécie  $i$ ,  $R$  é a constante universal dos gases e  $T$  é a temperatura absoluta. Substituindo  $P_i = [i]RT$  nas expressões para  $K_p$ , temos:

$$K_p = \frac{([C]RT)^c([D]RT)^d}{([A]RT)^a([B]RT)^b}$$

Simplificando, obtemos:

$$K_p = K_c(RT)^{\Delta n}$$

onde  $\Delta n$  é a mudança no número de mols de gás, calculada como:

$$\Delta n = (c + d) - (a + b)$$

Portanto, a relação entre  $K_c$  e  $K_p$  é:

$$K_c = \frac{K_p}{(RT)^{\Delta n}}$$

Esta relação é particularmente útil ao converter constantes de equilíbrio medidas em diferentes condições, permitindo a comparação e a utilização adequada dos valores em cálculos termodinâmicos e cinéticos.

## 2.6 Mecanismos de reação

Um mecanismo de reação é um conjunto de reações elementares que descrevem as etapas para uma reação química. Estes mecanismos podem envolver poucas ou muitas etapa, de acordo com a complexidade do problema (TURNS, 2000).

### 2.6.1 Mecanismo global

Os mecanismos globais são simplificações ajustadas para estimar com precisão a liberação de calor, a propagação de chamas laminares, a decomposição do combustível e a produção das principais espécies, dentro de um intervalo limitado de condições. No entanto, esses mecanismos não capturam os efeitos da cinética química que governam os processos de re-ignição e extinção (ZETTERVALL; FUREBY; NILSSON, 2021).

### 2.6.2 Mecanismo detalhado

Mecanismos detalhados de cinética química são modelos complexos que descrevem as reações químicas e suas taxas em processos de combustão. Eles são fundamentais para entender como diferentes substâncias reagem sob diversas condições de temperatura e pressão, e são amplamente utilizados em simulações de Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) para otimizar combustores e motores industriais. Esses mecanismos incluem uma grande quantidade de reações elementares e espécies químicas, e são construídos com base em dados experimentais e cálculos teóricos para serem o mais precisos possível.

Os mecanismos detalhados para a combustão de metano são essenciais para entender e modelar processos de combustão em diversas condições. Aramco Mech 2.0 é um mecanismo abrangente, validado para uma ampla gama de dados experimentais, incluindo velocidade de chama laminar e tempo de atraso de ignição. GRI-Mech 3.0, USC Mech II e San Diego são mecanismos detalhados desenvolvidos para a combustão de gás natural, incluindo metano, etano e propano. Esses mecanismos são comparados e avaliados com base em dados experimentais e são conhecidos por sua precisão em prever características de combustão em uma variedade de condições, embora ainda existam incertezas em condições extremas de baixa temperatura e/ou alta pressão. A escolha do mecanismo para simulações CFD é limitada pela necessidade de curto tempo de computação e demandas variáveis em relação aos parâmetros de saída, dependendo da tarefa em questão.

Entre os mecanismos detalhados mais utilizados, o GRI-Mech 3.0 é um dos mais conhecidos e serve como referência para a combustão de metano e gás natural. Desenvolvido pelo Gas Research Institute, o GRI-Mech 3.0 é validado contra uma ampla gama de dados experimentais, incluindo velocidade de chama laminar e tempo de atraso de ignição. Ele contém 53 espécies e 325 reações reversíveis e irreversíveis, e é capaz de prever características de combustão em uma ampla gama de condições. Embora existam incer-

tezas em condições extremas de baixa temperatura e/ou alta pressão, o GRI-Mech 3.0 é considerado um mecanismo abrangente e detalhado, adequado para a modelagem de sistemas de combustão complexos.

### 2.6.3 Mecanismo reduzido

Em modelos computacionais de sistemas complexos, a resolução simultânea das equações de conservação transientes e tridimensionais para os campos de velocidade, pressão, temperatura e concentrações de diversas espécies químicas é uma tarefa, pode ser necessário vários dias de tempo computacional para concluir uma única simulação. Para reduzir o esforço computacional nessas simulações, pesquisadores e profissionais frequentemente utilizam mecanismos de cinética química reduzidos. Esses mecanismos são projetados para captar os principais aspectos do processo de combustão em análise, sem incluir os detalhes desnecessários presentes nos mecanismos complexos gerais ([TURNS, 2000](#)).

O DRM22 é um mecanismo esquelético derivado do GRI-Mech 1.2 e consiste em 22 espécies e 104 reações reversíveis. Ele foi desenvolvido usando uma metodologia de redução descrita por Wang e Frenklach e é capaz de prever tempos de atraso de ignição em altas temperaturas até 10 atm e propriedades de chama laminar até 20 atm. O DRM22 é conhecido por ter uma boa concordância com o mecanismo detalhado original, especialmente em condições de pressão mais baixa e para misturas estequiométricas e pobres, mas pode apresentar desvios maiores em condições ricas e altas pressões. Este mecanismo é frequentemente utilizado em simulações de CFD devido à sua capacidade de capturar características importantes da combustão com um custo computacional reduzido. ([ZETTERVALL; FUREBY; NILSSON, 2021](#))

## 2.7 Equações Governantes

As principais equações que governam o fenômeno da combustão são: a equação de conservação de massa, a equação da quantidade de movimento, a equação de conservação das frações mássicas das espécies químicas e a equação da energia. Estas equações são apresentadas a seguir.

### 2.7.1 Equação da Conservação de Massa

A equação da conservação de massa para um fluido incompressível é expressa como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.54)$$

onde:

- $\rho$  é a densidade do fluido, que pode variar com a temperatura e a composição do fluido.
- $\mathbf{u}$  é o vetor de velocidade do fluido.

A equação da conservação de massa, também conhecida como equação de continuidade, assegura que a massa é conservada dentro do sistema. O primeiro termo,  $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ , representa a taxa de variação temporal da densidade. O segundo termo,  $\nabla \cdot (\rho \mathbf{u})$ , representa o fluxo de massa entrando ou saindo de um volume de controle.

### 2.7.2 Equação da Quantidade de Movimento

A equação da quantidade de movimento, também conhecida como equação de Navier-Stokes, é dada por:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + (\rho - \rho_\infty) \mathbf{g} \quad (2.55)$$

onde:

- $\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t}$  é a taxa de variação temporal da quantidade de movimento.
- $\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u})$  é o termo advectivo, que representa o transporte de quantidade de movimento devido ao movimento do fluido.
- $-\nabla p$  é o gradiente de pressão, que atua como força impulsionadora do fluxo.
- $\nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u})$  é o termo difusivo viscoso, que representa a difusão da quantidade de movimento devido à viscosidade do fluido.
- $(\rho - \rho_\infty) \mathbf{g}$  representa as forças de flutuabilidade devido ao campo gravitacional.

### 2.7.3 Equação de Conservação das Frações Mássicas

A equação de conservação das frações mássicas das espécies químicas é expressa como:

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u}) = -\nabla \cdot (\rho D_{km} \nabla Y_k) + R_k + \frac{D_{k,T}}{T} \nabla T \quad (2.56)$$

onde:

- $Y_k$  é a fração mássica da espécie  $k$ .
- $\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t}$  é a taxa de variação temporal da fração mássica da espécie  $k$ .

- $\nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u})$  é o termo advectivo, que representa o transporte de frações mássicas devido ao movimento do fluido.
- $-\nabla \cdot \mathbf{J}_k$  é o termo difusivo devido aos gradientes de concentração.
- $R_k$  é a taxa de produção ou consumo da espécie  $k$  devido a reações químicas.
- $\frac{D_{k,T}}{T} \nabla T$  é o termo difusivo, que representa a difusão de espécies químicas devido ao gradiente de temperaturas (efeito Soret).

#### 2.7.4 Equação da Energia

A equação da energia, escrita em termos de entalpia absoluta, é dada por:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left( \frac{k}{cp} \nabla T \right) + \sum_k h_k \nabla \cdot \mathbf{J}_k + q_{\text{rad}} \quad (2.57)$$

onde:

- $h$  é a entalpia absoluta, que inclui a energia associada às ligações químicas e a energia térmica.
- $\frac{\partial(\rho h)}{\partial t}$  é a taxa de variação temporal da entalpia.
- $\nabla \cdot (\rho h \mathbf{u})$  é o termo advectivo, que representa o transporte de entalpia devido ao movimento do fluido.
- $\nabla \cdot (k \nabla T)$  é o termo difusivo, que representa a condução de calor devido aos gradientes de temperatura, onde  $k$  é a condutividade térmica.
- $\sum_k h_k \nabla \cdot \mathbf{J}_k$  representa o transporte de entalpia devido à difusão das espécies químicas.
- $q_{\text{rad}}$  é a taxa de transferência de calor por radiação.

A equação da energia garante que a energia é conservada dentro do sistema, considerando o transporte convectivo, a condução térmica, a difusão das espécies e a transferência de calor por radiação.

Estas equações formam a base para a modelagem numérica dos processos de combustão em CFD, permitindo a simulação detalhada de fenômenos como mistura turbulenta, reações químicas e transferência de calor (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).



# 3 Metodologia

Neste trabalho, é proposta a resolução numérica em MATLAB/Octave de um conjunto de equações diferenciais de conservação de um escoamento laminar, reagente, em regime transitório e domínio espacial axissimétrico. Para simplificação do modelo, o domínio será representado em sistema de coordenada cilíndrica  $(z, r, \theta)$ , onde os gradientes na direção  $\theta$  serão desconsiderados. Essa simplificação é necessária para reduzir o tempo da simulação computacional.

## 3.1 Modelo numérico

O código computacional desenvolvido por ([CUNHA, 2010](#)) e ([CUNHA; VERAS, 2021](#)) foi adaptado para realizar as simulações computacionais. O código resolve a equação de conservação para um escalar genérico  $\phi$ , já que todas as equações de conservação de combustão gasosa podem ser expressas nesse formato.

A equação geral para conservação de um escalar  $\phi$  em coordenadas cilíndricas, é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u\phi) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho v\phi) = \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial r}{\partial z}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial r}\right) + S_\phi \quad (3.1)$$

Onde  $\rho$  é a massa específica,  $\Gamma_\phi$  é o coeficiente difusivo de  $\phi$  e  $S_\phi$  é o termo de fonte de  $\phi$ .

Equação	$\phi$	$\Gamma_\phi$	$S_\phi$
Conservação de massa	1	0	0
Conservação de quantidade de movimento em z	u	$\mu$	$\frac{\partial p}{\partial z} + (\rho - \rho_\infty)g$
Conservação de quantidade de movimento em r	u	$\mu$	$\frac{\partial p}{\partial r}$
Conservação de energia	h	$k/c_p$	$\nabla q_{rad} - \nabla \cdot \sum_{k=1}^n J_k h_k$
Conservação da fração de massa	$Y_k$	$\rho D_{km}$	$R_k + (D_{k,T}/T)\nabla T$

Tabela 1 – Formas particulares da Eq. 3.1

Fonte: Autor, 2024

A tabela 1 traz as formas particulares para cada equação.

As equações governantes foram discretizadas usando o *Control Volume Finite Element Method*(CVFEM), que utiliza uma malha não estruturada de elementos triangulares para construir uma malha de volumes pelo método das medianas. Esse método consiste

na definição de subvolumes de controles internos ao elemento, através da ligação de pontos localizados no baricentro dos elementos aos pontos médios das faces. Os volumes de controle são então definidos pela união de vários subvolumes de controle que compartilham um mesmo nó. Por se tratar de um método de volumes finitos, os princípios de conservação em termos de volumes elementares são garantidos.

Foi utilizado um esquema de interpolação linear para discretizar o termo difusivo e um esquema de interpolação orientado pelo escoamento foi utilizado para a discretização do termo de advecção. Para o termo transiente foi utilizado o método de Euler explícito, utilizando um passo  $\Delta t$  para avançar a solução de  $\phi^0$  para  $\phi$ . O termo de fonte foi aproximado por integração de ponto único, centrado nos volumes de controle.

Essa discretização em um sistema de equação algébricas na forma  $M\phi = B$ .  $M$  é a matriz global obtida pelo procedimento de montagem a partir das matrizes locais, e  $B$  é o vetor que armazena os termos oriundos de fontes e condições de contorno. Os sistemas de equação algébrica foram resolvidos por métodos diretos disponíveis nos softwares MATLAB/Octave, por meio de funções incorporadas.

## 3.2 Modelo para o cálculo das frações de massa

A fração mássica das espécies químicas foi calculada através da equação 3.2, que é a forma particular da equação 2.4 para conservação da fração mássica. No entanto, a fração mássica do nitrogênio foi calculada pela restrição expressa pela equação 3.3.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho u Y_k) = \nabla \cdot (\rho D_{km} \nabla Y_k) + R_k + (D_{k,T}/T) \nabla T \quad (3.2)$$

$$\sum_{i=1}^n Y_k = 1 \quad (3.3)$$

A escala de tempo que caracteriza a reação química é bem menor que a escala de tempo que caracteriza a difusão e a convecção. Portanto, o termo de fonte  $R_k$  devido às reações químicas é calculado através de uma série de sub-passos  $\Delta t_r$ , caracterizado por  $\Delta t/n$ , onde  $n$  é um número inteiro maior que a unidade. O sub-passo  $\Delta t_r$  deve ser suficientemente pequeno para garantir estabilidade e precisão da solução numérica.

O cálculo das concentrações molares para cada espécie calculado através da equação 3.4, baseada no mecanismo de reação DRM22.

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^{n_r} \left[ C_{m,j} (v_{i,j}'' - v_{i,j}') \left( k_{f,j} \prod_{i=1}^n C_i^{v_{i,j}'} - k_{r,j} \prod_{i=1}^n C_i^{v_{i,j}''} \right) \right] \quad (3.4)$$

A partir do resultado da equação 3.4, a concentração molar final de cada passo pode ser calculada pelo método de Euler explícito com passo de tempo  $\Delta t_r$  e concentração inicial  $C_0$ .

Depois de  $n$  passos de reação, a produção líquida da  $i$ -ésima espécie é calculada conforme a equação

$$R_i = W_i \frac{(C_i^* - C_i^0)}{\Delta t} \quad (3.5)$$

### 3.3 Cálculo das temperaturas

A equação de conservação de energia foi escrita em termos da entalpia total, para evitar um termo de fonte devido às reações químicas. A entalpia total é soma da entalpia associada a energia das ligações químicas e entalpia associada somente à temperatura (CENGEL; GHAJAR, 2011).

A equação de conservação de energia

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho u h) = \nabla \cdot \left( \frac{k_m}{c_p} \nabla h \right) + \nabla q_{rad} - \nabla \cdot \sum_{k=1}^n J_k h_k \quad (3.6)$$

A radiação da chama foi modelada usando a suposição de transferência ópticamente fina, que é expresso segundo a equação 3.7 (BARLOW et al., 2001)

$$q_{rad} = 4\sigma(T^4 - T_b^4) \sum_i (p_i a_i) \quad (3.7)$$

Onde  $\sigma$  é a constante de Stefan-Boltzmann,  $5,668 \times 10^{-8} W/m^2 K^4$ ,  $p_i$  é a pressão parcial da espécie  $i$ , e  $a_i$  é o coeficiente de absorção médio de Planck para a espécie  $i$ .

A entalpia total  $h$  calculada é função das frações mássicas  $Y_i$  e entalpia  $h_i$  de cada espécie, expressa pela equação 3.8. A entalpia de cada espécie, por sua vez, é função da temperatura, e pode ser aproximada por meio de polinômios conforme a equação 3.9, onde os coeficientes para cada espécie são conhecidos (MCBRIDE; GORDON; RENO, 1993).

$$h = \sum_i Y_i h_i \quad (3.8)$$

$$\frac{h_i}{R_u} = a_{1,i} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 + a_{6,i}T^5 + a_{7,i}T^6 \quad (3.9)$$

Isso resulta em uma equação em que a temperatura é a única variável desconhecida, e é utilizado o método de Newton-Raphson para determinar a temperatura em cada nó do domínio.

### 3.4 Cálculo das propriedades termofísicas

A massa específica da mistura foi calculada pela equação de estado de gás ideal como função da pressão, temperatura T e peso molecular W

$$\rho = \frac{p_0 W_{mix}}{R_u T} \quad (3.10)$$

$$W_{mix} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n (Y_i/W_i)} \quad (3.11)$$

A entalpia  $h_i$  e calor específico  $c_{p,i}$  de cada espécie química foi calculado através das temperaturas pelos polinômios conforme as equações 3.12 e 3.12, onde os coeficientes são dados em (MCBRIDE; GORDON; RENO, 1993).

$$\frac{h_i}{R_u} = a_{1,i} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 + a_{6,i}T^5 + a_{7,i}T^6 \quad (3.12)$$

$$\frac{c_{p,i}}{R_u} = a_{1,i} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 + a_{6,i}T^5 + a_{7,i}T^6 \quad (3.13)$$

A viscosidade  $\mu$  e condutividade térmica  $k$  de cada espécie foram calculados pelas equações 3.14 e 3.15. A viscosidade e condutividade térmica da mistura foram calculadas a partir das equações 3.16 e 3.17.

$$\mu_k = 2,6693 \times 10^{-6} \frac{(W_k T)^{0.5}}{\sigma_k^2 \Omega_{\mu,k}} \quad (3.14)$$

$$k_k = \left( c_{p,k} + \frac{5}{4} \frac{R_u}{W_k} \right) \mu_k \quad (3.15)$$

$$\mu_{mix} = \sum_{k=1}^n \frac{X_k \mu_k}{\sum_{j=1}^n X_j \Theta_{kj}} \quad (3.16)$$

$$k_{mix} = \sum_{k=1}^n \frac{X_k k_k}{\sum_{j=1}^n X_j \Theta_{kj}} \quad (3.17)$$

Onde  $\Theta_{kj}$  é calculado à partir da equação 3.18.

$$\Theta_{kj} = 8^{-\frac{1}{2}} \left( 1 + \frac{W_k}{W_j} \right)^{-\frac{1}{2}} \left[ 1 + \left( \frac{\mu_k}{\mu_j} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{W_k^{\frac{1}{4x}}}{W_j} \right) \right]^2 \quad (3.18)$$

O coeficiente de difusão binário foi calculado utilizando a teoria de Chapman-Enskog, à partir da relação apresentada na equação 3.19. O coeficiente de difusão efetivo foi calculado pela equação 3.20

$$D_{k,j} = 1.8583 \times 10^{-7} \frac{T^{\frac{3}{2}}}{p_{atm} \sigma_{kj}^2 \Omega_{D,kj}} \left( \frac{1}{W_k} + \frac{1}{W_j} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.19)$$

$$D_{km} = \frac{1 - X_k}{\sum_{j \neq k}^n X_j / D_{k,j}} \quad (3.20)$$

O coeficiente de difusão térmica  $D_{k,T}$  foi calculado à partir da equação 3.21 apresentada em (KUO, 2005).

$$D_{k,T} = -2,59 \times 10^{-7} T^{0,659} \left( \frac{\sum_{k=1}^n W_k^{0,511} X_k}{\sum_{k=1}^n W_k^{0,489} X_k} \right) \left( \frac{W_k^{0,511} X_k}{\sum_{k=1}^n W_k^{0,511} X_k} - Y_k \right) \quad (3.21)$$



## 4 Descrição e simulação do caso

Nos trabalhos (PANEK, 2009) e (PANEK; CHAREST; GÜLDER, 2012), foi estudado experimentalmente o efeito da variação da pressão nas chamas laminares de etileno. No resultado apresentado na figura 4 é possível ver variações na largura e no comprimento da chama com variação da pressão. À medida que a câmara foi evacuada para 0,2 atm, a chama se tornou esférica com pouca ou nenhuma produção de fuligem. Isso é evidente porque a chama não apresentava mais uma zona luminosa amarela e se tornou completamente azul, como mostrado na extrema esquerda da Figura 4.

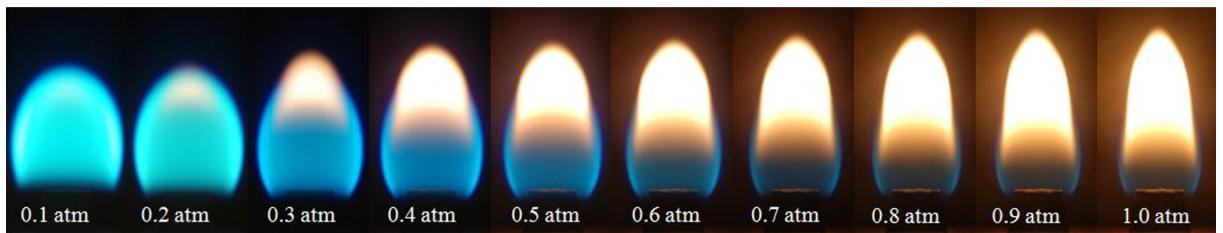


Figura 4 – Chamas de etileno em pressões sub-atmosféricas

Fonte: (PANEK, 2009)

A Figura 4 também mostra que, embora a altura total da chama luminosa tenha diminuído, a parte inferior da zona luminosa da chama (região amarela) subiu lentamente em direção à ponta da chama até que a chama ficasse completamente azul. Além disso, pode-se observar que o ponto de fixação da chama ao combustor avançou mais para baixo nas bordas externas do combustor até 0,2 atm, momento em que a chama se desprendeu e se estabilizou acima do combustor.

É possível que, à medida que a pressão diminuiu, a região azul sem fuligem tenha permanecido completamente ancorada ao combustor porque a perda de calor para o combustor (transferência de calor da chama quente para o combustor mais frio) fornece o principal mecanismo de estabilização. Esses resultados são consistentes com os resultados em microgravidade, onde, na ausência de forças de flutuabilidade, a difusão em todas as direções cria uma chama esférica com os pontos de fixação progredindo para cima e para fora do combustor. A superfície mais fria do combustor extingue a chama, mantendo-a ancorada. Pode-se especular que, próximo a um vácuo completo, as velocidades de convecção na chama são muito pequenas. Seria impossível para essas pequenas velocidades corresponderem à velocidade da chama laminar necessária para mantê-la ancorada, resultando no desprendimento. Em pressões tão baixas, onde há formação negligível de fuligem, as temperaturas podem ser muito altas para que a radiação da chama seja extinta por interações com o combustor, reduzindo esse mecanismo de fixação em pressões tão baixas.

## 4.1 Combustor de Thomson

No trabalho de (PANEK, 2009) e (THOMSON et al., 2005), foi utilizado um combustor de tubos cilíndricos concêntricos, no qual o combustível entra na câmara de combustão pelo tubo interno, e o ar oxidante entra na câmara pela região entre o cilindro interno e externo. A geometria do combustor inclui um bocal de combustível com diâmetro de saída de 3,06 mm e uma carenagem de ar com diâmetro de 25 mm. Elementos de espuma de metal sinterizado, com 80 poros por polegada, são incorporados nos bocais de combustível e de ar para endireitar e estabilizar o fluxo, criando um perfil de velocidade de saída uniforme e reduzindo instabilidades.

O combustor também possui uma chaminé especialmente projetada, substituindo o cilindro de quartzo tradicional, para melhorar a estabilização da chama. Essa chaminé é equipada com três janelas planas que estão alinhadas com os portos de visualização na câmara de combustão. Essa configuração permite um acesso óptico mais eficiente para as medições espectrais e de atenuação da linha de visão. A chama é ignitada usando uma vela incandescente incorporada na chaminé, localizada acima da chama

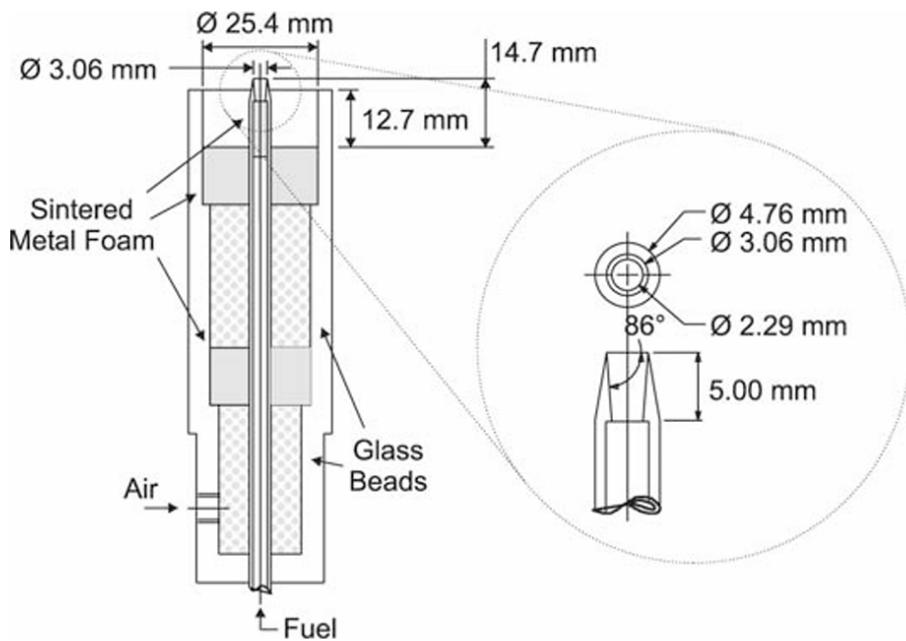


Figura 5 – Combustor de chama de difusão laminar

Fonte: (THOMSON et al., 2005)

A câmara de combustão é projetada para suportar pressões de trabalho de até 10 MPa, com uma altura interna de 600 mm e um diâmetro interno de 240 mm. A câmara possui acesso físico através de flanges superiores e inferiores, e acesso óptico através de três portos de visualização dispostos de forma a permitir medições de linha de visão e dispersão a 90 graus. A câmara é montada em um sistema de translação externa de três eixos, facilitando o posicionamento preciso durante os experimentos.

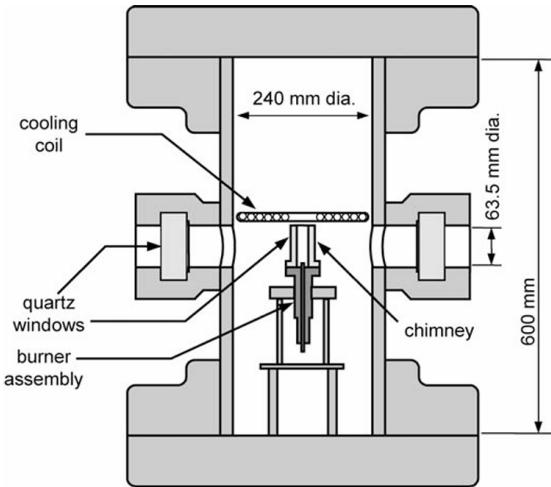


Figura 6 – Esquemático da câmara de combustão  
Fonte: ([THOMSON et al., 2005](#))

Para filtrar as gotas de água formadas no escape da chama e evitar a condensação de água nas janelas da câmara, uma serpentina de resfriamento é instalada na câmara, ao nível do topo da chaminé e preenchendo a área entre o diâmetro externo da chaminé e o diâmetro interno da câmara. Todo o fluido que se move da parte superior para a inferior da câmara passa pela superfície da serpentina de resfriamento. A água se condensa a partir do gás nas serpentinas e, assim, é filtrada do fluido ambiente. Jatos de nitrogênio também são instalados nos visores para soprar gás de purga seco nas faces das janelas. Em operação em estado estacionário, a chama aquece suficientemente as janelas da chaminé para evitar a condensação.

## 4.2 Geometria e condições de contorno

A geometria do combustor é simplificada para um domínio bidimensional axissimétrico. Dessa forma, o domínio do problema 2D axissimétrico é representado na figura 7.

As velocidades de entrada de combustível e oxidante foram calculadas pelas vazões mássicas , dadas por  $\dot{m}_{comb} = 1,16 \text{ mg/s}$  e  $\dot{m}_{ar} = 0,11 \text{ g/s}$ . O cálculo foi feito pelas suas respectivas áreas de entrada e massas específicas, calculadas pela equação 3.10.

$$u_{comb} = \frac{\dot{m}_{comb}}{A_{comb}\rho_{comb}} \quad (4.1)$$

$$u_{ar} = \frac{\dot{m}_{ar}}{A_{ar}\rho_{ar}} \quad (4.2)$$

A entalpia do combustível e do ar à 298K,  $h_{comb@298K}$  e  $h_{ar@298K}$  foram especificadas em suas respectivas entradas. Para manter a o contorno da parede à 298K, a entalpia

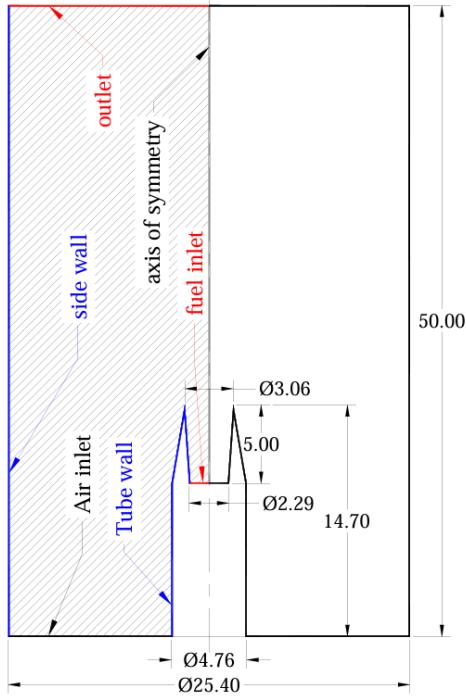


Figura 7 – Esquemático do combustor experimental (dimensões em mm) e 2D axissimétrico

da mistura foi calculada em cada iteração como  $h_{mix} = \sum_{i=1}^n Y_i h_i @ 298K$ . Foi admitido que a câmara é preenchida de ar ao início da simulação, e sua composição inicial é de:  $Y_{O_2} = 0,2315$ ,  $Y_{N_2} = 0,7556$ .

Na parede do tubo foram analisadas duas condições de contornos diferentes: parede adiabática, considerando que a chama não perde calor para o tubo, e temperatura especificada, considerando que temperatura da parede é mantida constante durante a simulação. As demais condições de contorno estão especificadas na tabela 2.

A simulação foi realizada para as pressões de 0,22, 0,4, 0,6, 0,8 e 1 atm. Foi estabelecido regime permanente quando  $Residual(\phi) < 10^{-6}$ , onde  $Residual(\phi) = [\sum_{i=1}^{Imax} (\phi_i - \phi_i^0)^2]^{0.5}$ , onde i é um nó da malha e Imax é o número de nós da malha.

Contorno	u	v	Y	h	P
Eixo de simetria	$\partial u / \partial n = 0$	$v = 0$	$\partial Y_k / \partial n = 0$	$\partial h / \partial n = 0$	—
Parede lateral	$u = 0$	$v = 0$	$\partial Y_k / \partial n = 0$	$h = h_m$	—
Parede do tubo	$u = 0$	$v = 0$	$\partial Y_k / \partial n = 0$	$\partial h / \partial n = 0 \mid h = h_{mix@298K}$	—
Entrada de combustível	$u = u_{comb}$	$v = 0$	$Y_{comb} = 1$	$h = h_{comb@298K}$	—
Entrada de ar	$u = u_{ar}$	$v = 0$	$Y_k = Y_{k,oxid}$	$h = h_{ar@298K}$	—
Saída	$\partial u / \partial n$	$\partial v / \partial n$	$\partial Y_k / \partial n$	$\partial h / \partial n$	$p = p_0$

Tabela 2 – Condições de contorno  
Fonte: Autor, 2024

### 4.3 Análise de Sensibilidade da Malha

Foram geradas três malhas com diferentes graus de refinamento, para comparar a variação dos resultados e garantir que são independentes da malha.

Foram analisados os perfis de fração mássica de CO, temperatura e velocidade axial, escolhidos com base em sua representatividade nas principais equações governantes do problema:

- Fração mássica de CO: Relaciona-se com a equação de conservação das frações mássicas.
- Temperatura: Relaciona-se com a equação da energia.
- Velocidade axial: Está associada à equação de conservação da quantidade de movimento.

Tabela 3 – Número de nós de cada configuração de malha.

Configuração da Malha	Número de Nós
Malha 1	4180
Malha 2	6283
Malha 3	8734

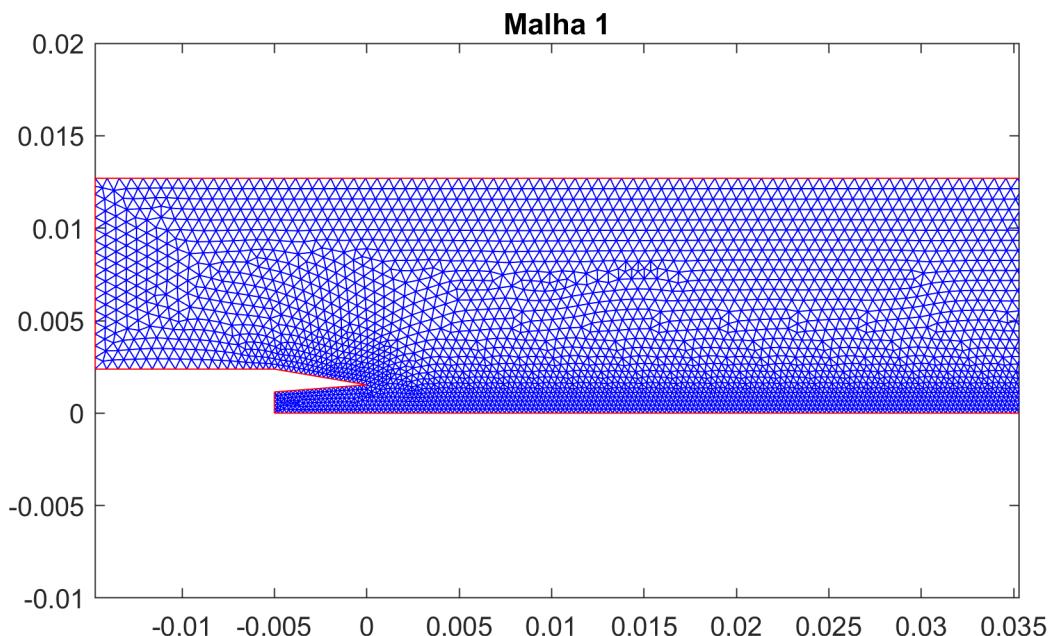


Figura 8 – Malha 1 com 4180 nós.  
Fonte: Autor, 2025

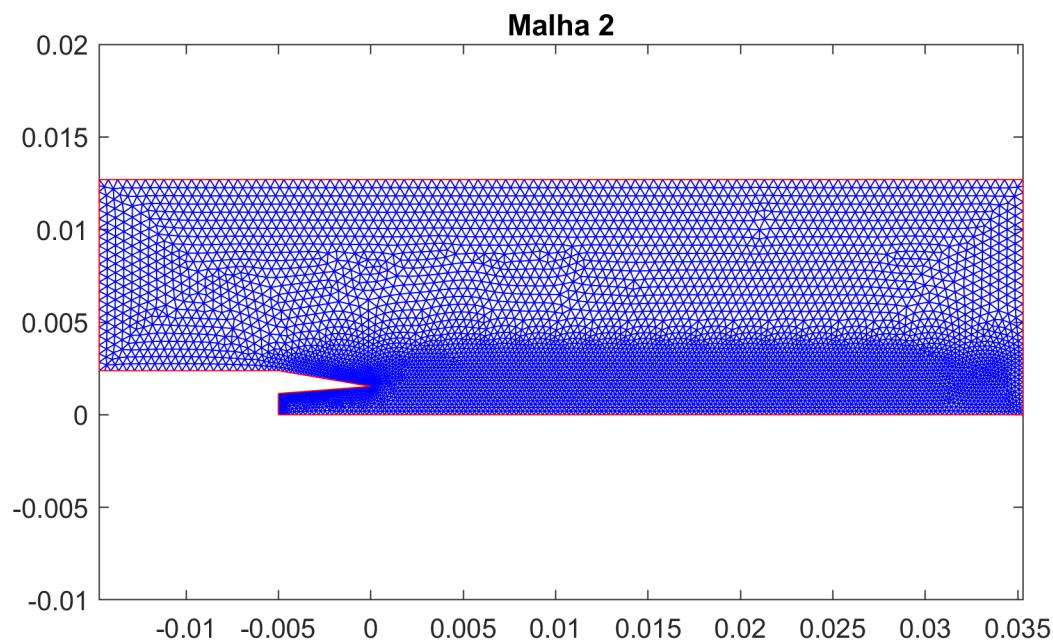


Figura 9 – Malha 2 com 6283 nós.

Fonte: Autor, 2025

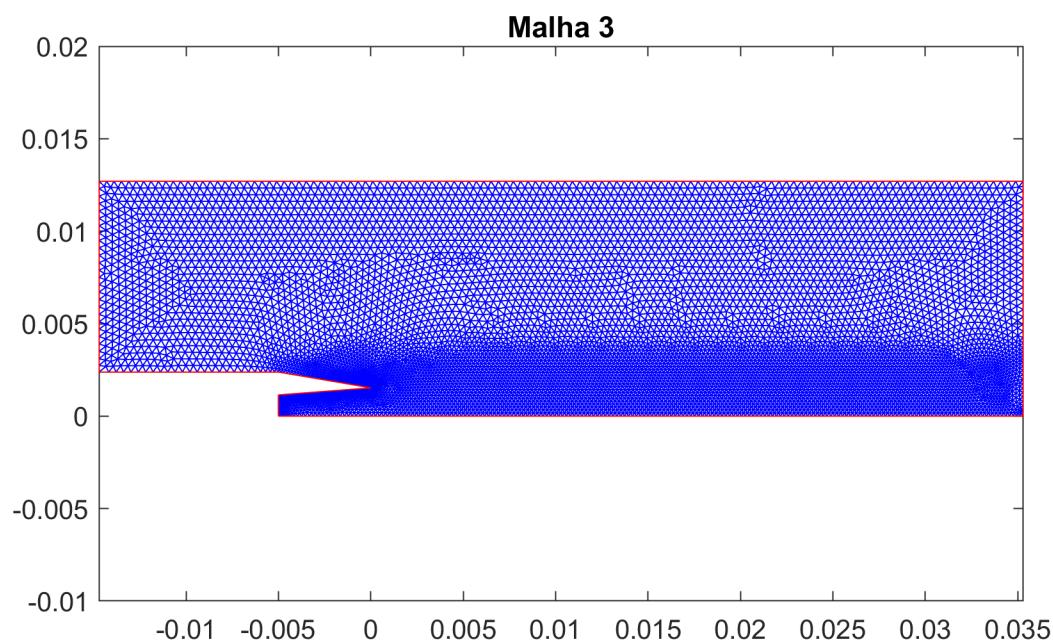
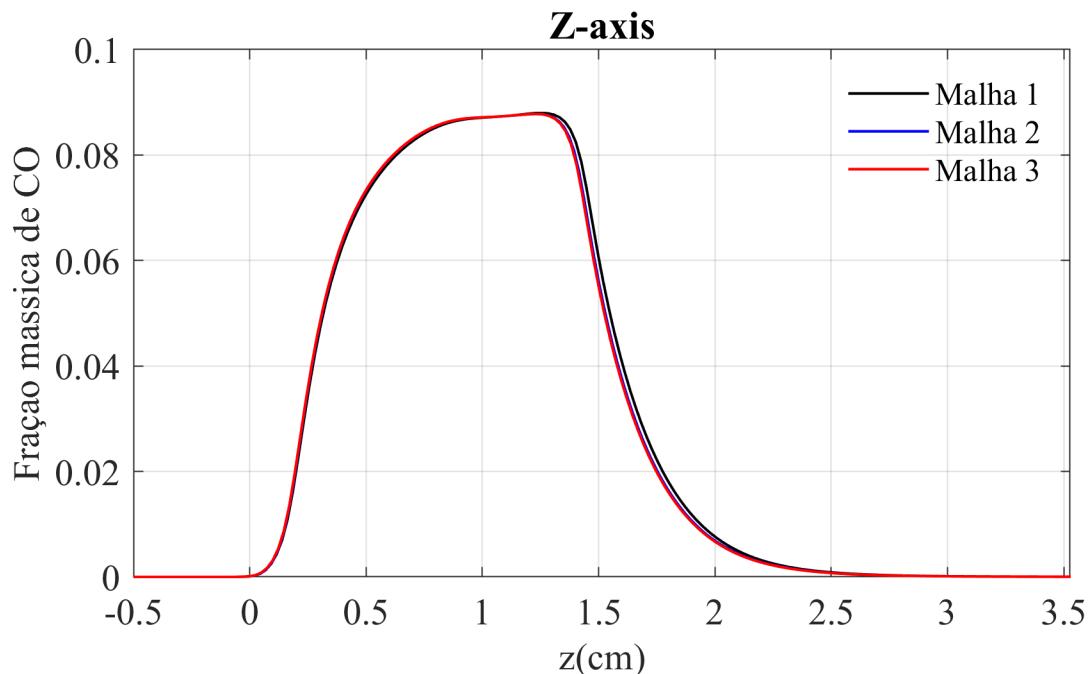


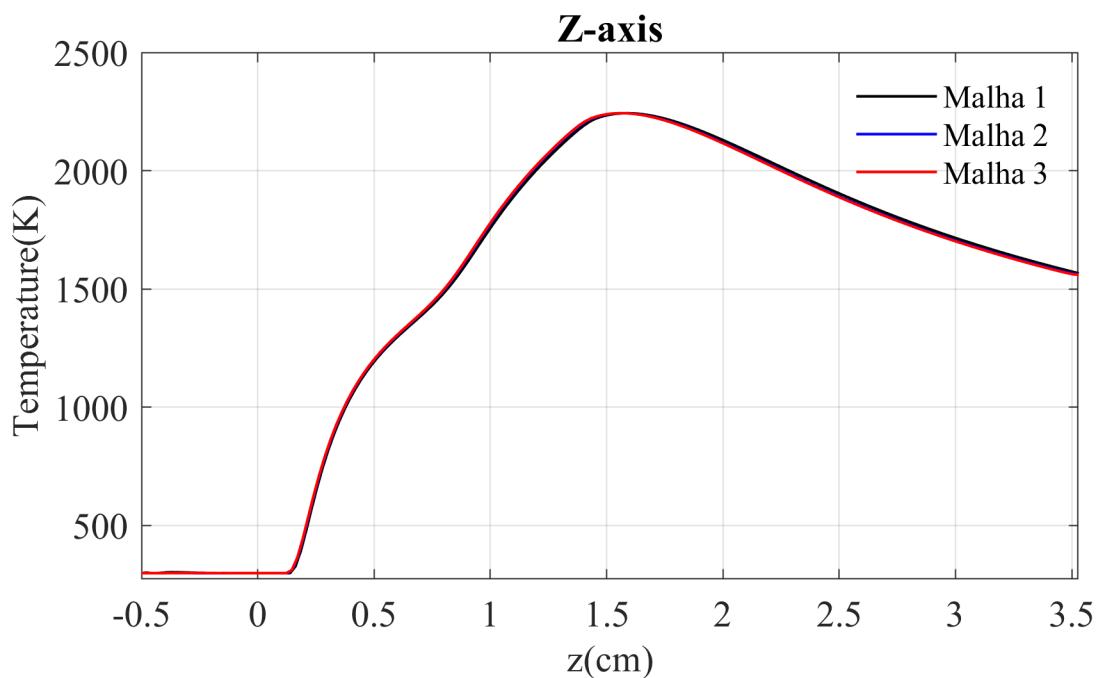
Figura 10 – Malha 3 com 8734 nós.

Fonte: Autor, 2025

Os resultados obtidos para os perfis das variáveis analisadas ao longo do eixo do combustor estão apresentados nas Figuras 11, 12 e 13

Figura 11 – Perfil de fração mássica de CO ao longo do eixo  $z$ .

Fonte: Autor, 2025

Figura 12 – Perfil de temperatura ao longo do eixo  $z$ .

Fonte: Autor, 2025

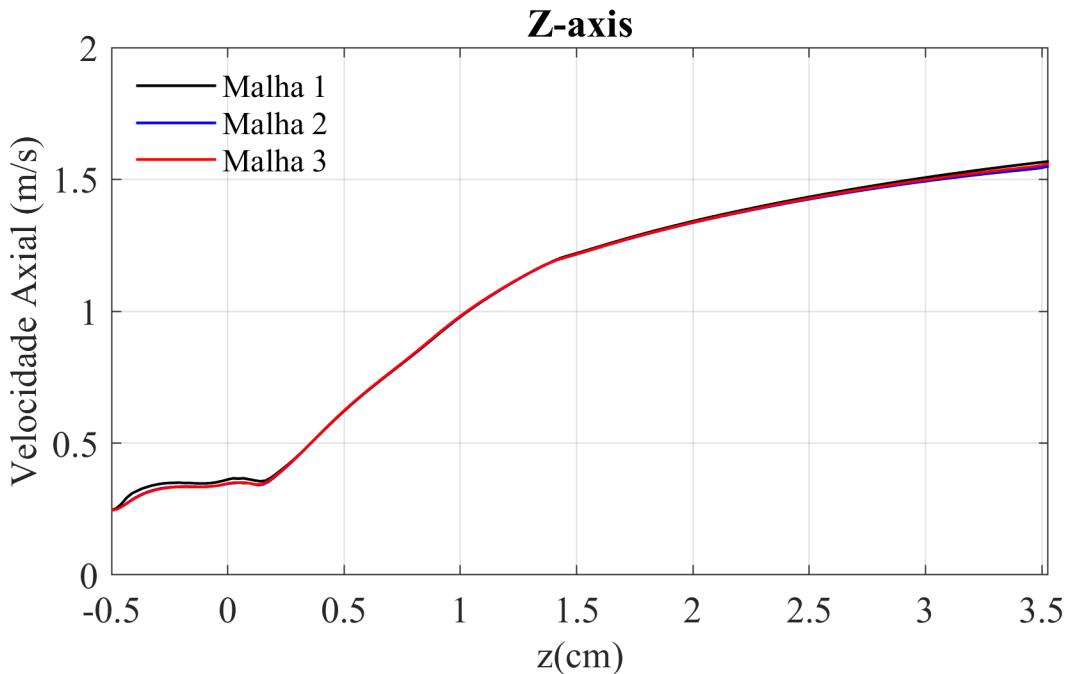


Figura 13 – Perfil de velocidade axial ao longo do eixo  $z$ .

Fonte: Autor, 2025

A Malha 1 apresentou resultados bons e condizentes com o comportamento esperado. Contudo, ao refinar para a Malha 2, observou-se um ganho em precisão nos resultados, sobretudo na fração mássica de CO. As Malhas 2 e 3 mostraram resultados praticamente idênticos para todas as variáveis, indicando convergência numérica. A diferença de precisão entre essas duas malhas é muito baixa. Portanto, para a realização da simulação foi escolhida a malha 2.

# 5 Resultados e discussão

Nesta seção, são apresentados e discutidos os resultados das simulações realizadas para a análise da chama de difusão laminar sob diferentes condições de contorno e pressões subatmosféricas. O objetivo desta análise é compreender como a parede do tubo, sob condições de Parede Adiabática e Temperatura Especificada, influencia o comportamento da chama, incluindo sua estrutura térmica, distribuição de espécies químicas e características geométricas.

Foram analisadas cinco pressões distintas: 0.22, 0.4, 0.6, 0.8 e 1 atm. As principais grandezas avaliadas incluem:

- Campo de temperaturas da chama, evidenciando diferenças no perfil de temperatura entre as condições de contorno;
- Temperatura máxima e altura da chama, comparada com resultados experimentais da literatura ([PANEK, 2009](#)).
- Distribuição dos radicais  $C_2H_3$  e OH
- Contorno da chama, permitindo a comparação da estrutura da chama em função da pressão;

## 5.1 Campo de Temperaturas

O campo de temperaturas da chama foi analisado para cinco pressões distintas: 0.22, 0.4, 0.6, 0.8 e 1.0 atm. As Figuras [14](#) a [16](#) mostram a distribuição de temperatura para diferentes pressões. As imagens apresentam à esquerda a condição de Temperatura Especificada e à direita a condição de Parede Adiabática. Isso permite uma comparação direta do impacto das condições térmicas na estrutura da chama.

Observa-se que, à medida que a pressão diminui, a temperatura máxima da chama tende a reduzir, e a chama diminui, o que é coerente com o comportamento esperado para chamas de difusão em baixas pressões ([PANEK, 2009](#)). É possível ver que na condição de Temperatura Especificada, a chama passa à se destacar do tubo, e essa separação se destaca conforme a pressão abaixa.

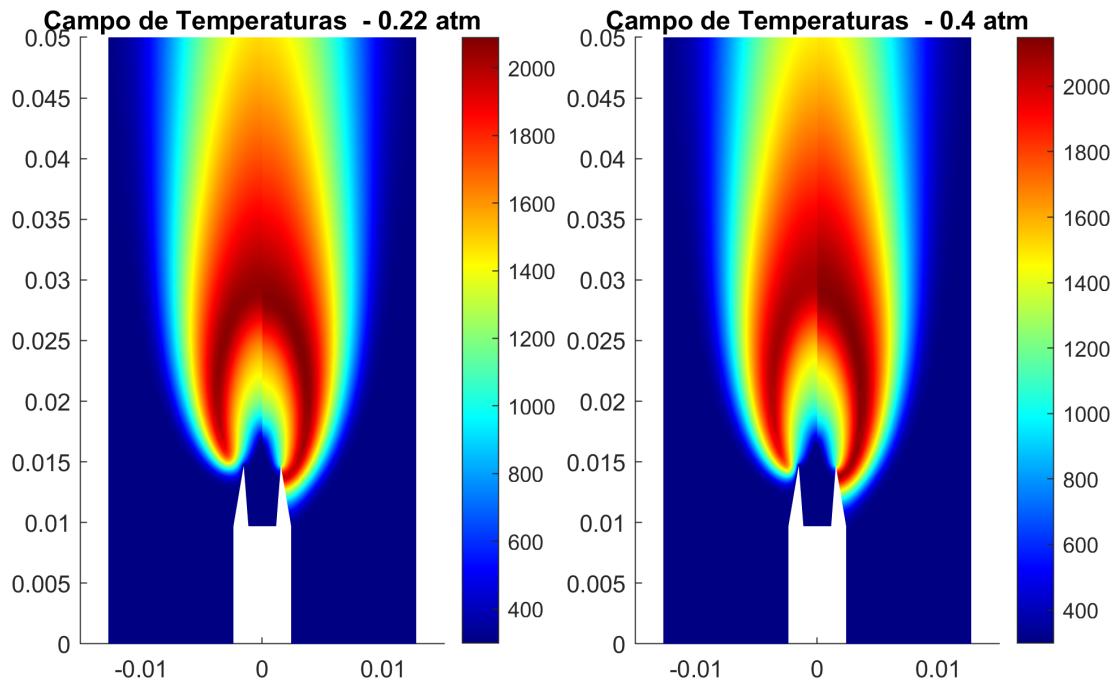


Figura 14 – Distribuição de temperatura da chama para pressões de 0.22 atm (esquerda) e 0.4 atm (direita).

Fonte: Autor, 2025

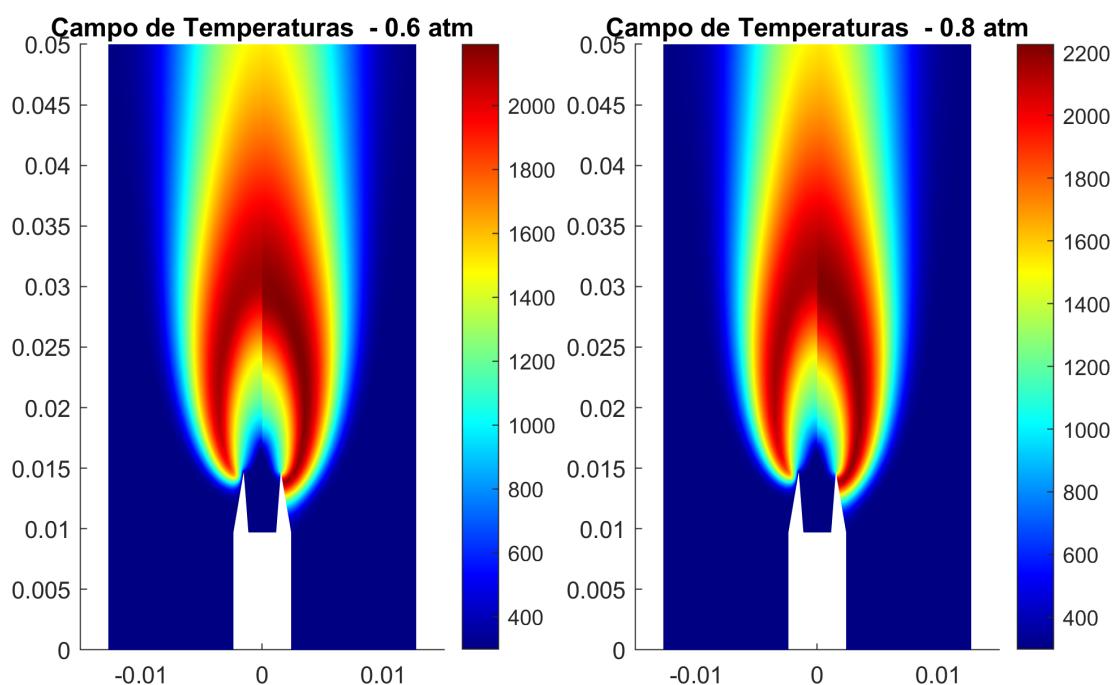


Figura 15 – Distribuição de temperatura da chama para pressões de 0.6 atm (esquerda) e 0.8 atm (direita).

Fonte: Autor, 2025

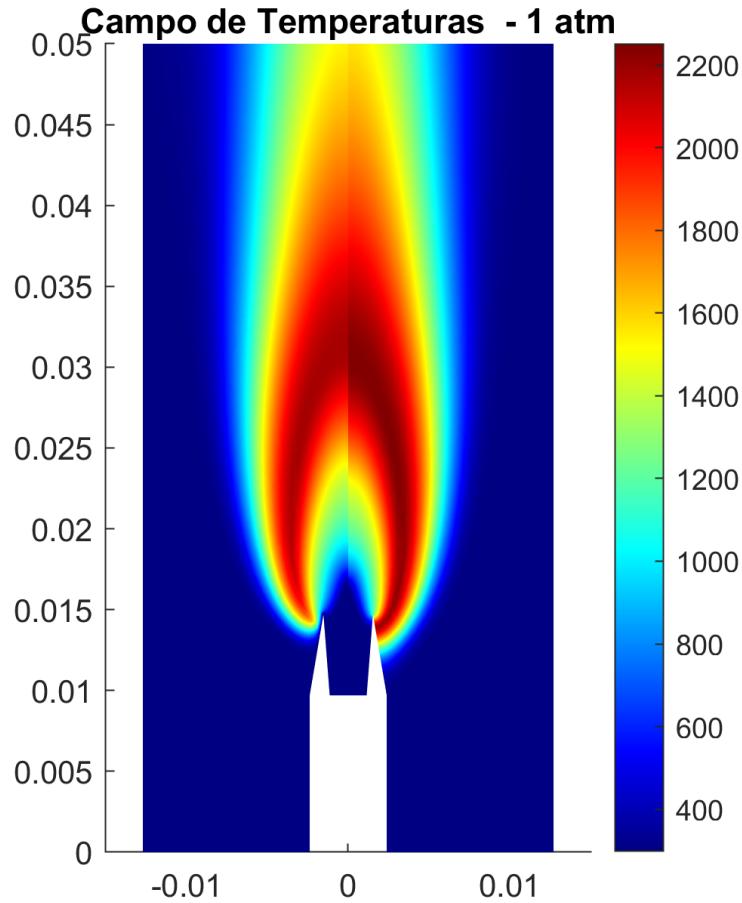


Figura 16 – Distribuição de temperatura da chama para pressão de 1.0 atm.

Fonte: Autor, 2025

A Figura 17 apresenta a variação da temperatura máxima da chama em função da pressão, destacando a redução da temperatura com a diminuição da pressão. A condição de contorno de parede adiabática apresenta valores maiores para a temperatura máxima em cada pressão. Esse comportamento é esperado, já que nessa condição não há perda de calor da chama para a parede do tubo.

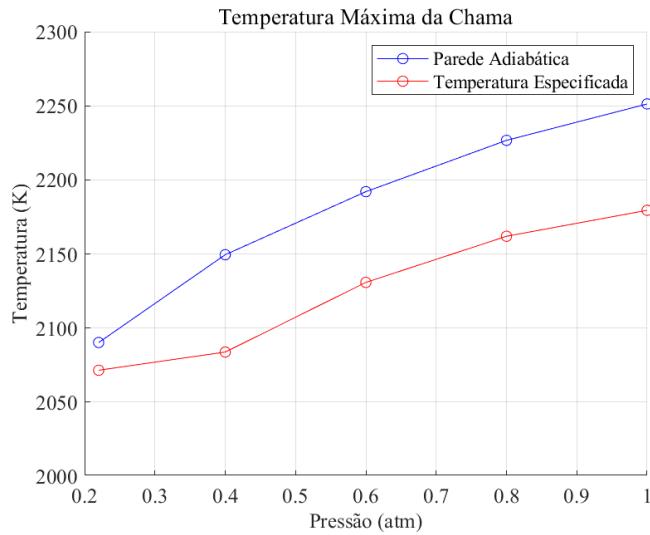


Figura 17 – Temperatura máxima da chama em função da pressão.

Fonte: Autor, 2025

### 5.1.1 Comparação dos Contornos da Chama

O contorno da chama foi analisado para as diferentes pressões sob as duas condições de contorno: Parede Adiabática e Temperatura Especificada. As Figuras 18 a 20 apresentam os perfis da chama para cada pressão, comparando ambas as condições.

Os resultados indicam que a condição de Temperatura Especificada resulta em uma chama ligeiramente mais alta e larga em comparação com a condição de Parede Adiabática. Esse efeito pode ser atribuído ao fato de que, na condição de temperatura especificada, a troca térmica com a parede influencia a distribuição de calor, permitindo que a chama se expanda mais.

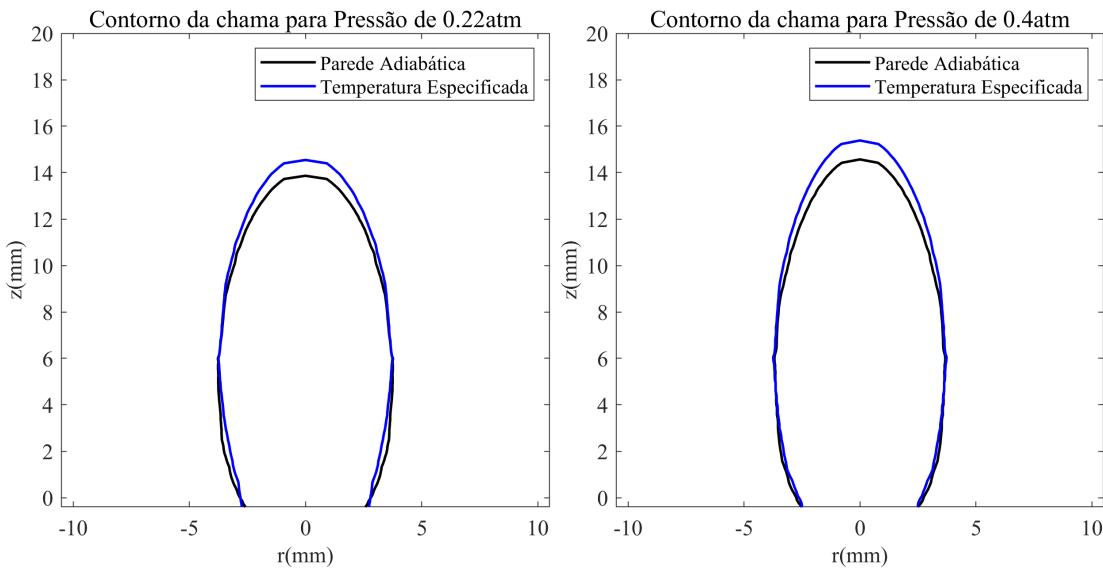


Figura 18 – Comparação dos contornos da chama para pressões de 0.22 atm (esquerda) e 0.4 atm (direita).

Fonte: Autor, 2025

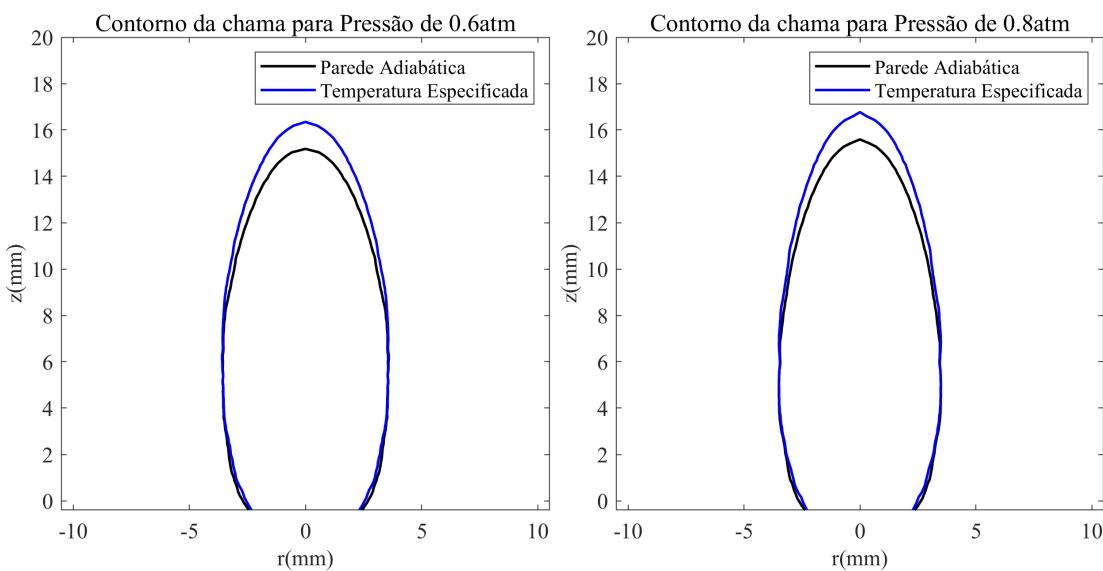


Figura 19 – Comparação dos contornos da chama para pressões de 0.6 atm (esquerda) e 0.8 atm (direita).

Fonte: Autor, 2025

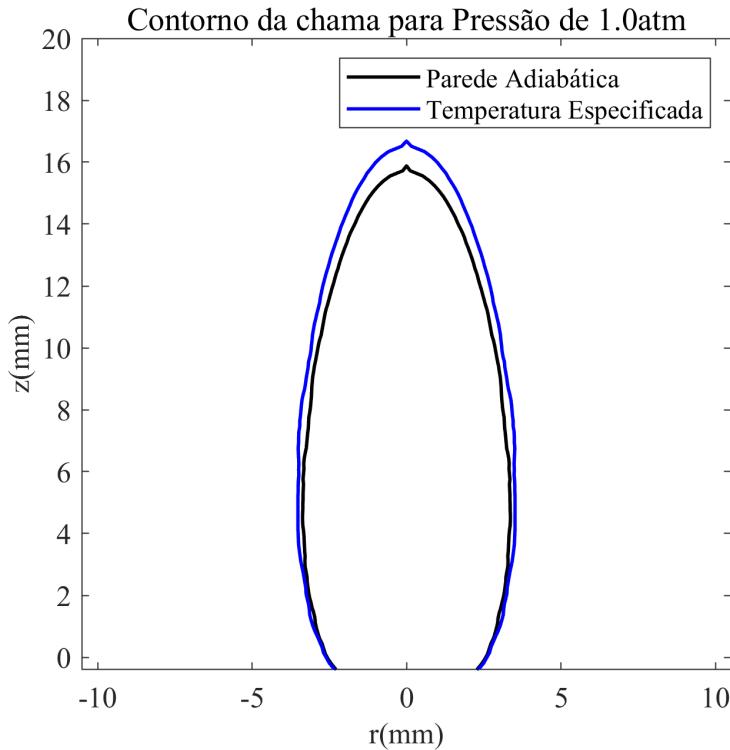


Figura 20 – Comparação dos contornos da chama para pressão de 1.0 atm.

Fonte: Autor, 2025

Observa-se que, em baixas pressões, a chama se torna mais larga e menos alta. Esse comportamento está de acordo com os resultados apresentados em (PANEK, 2009). Isso pode ser observado na Figura 21, que mostra relação entre altura da chama e pressão em ambas condições de contorno e o resultado experimental. É possível ver que o experimento apresentou variações mais acentuadas na altura da chama ao reduzir a pressão, principalmente entre a pressão de 0.4 atm e 0.2 atm.

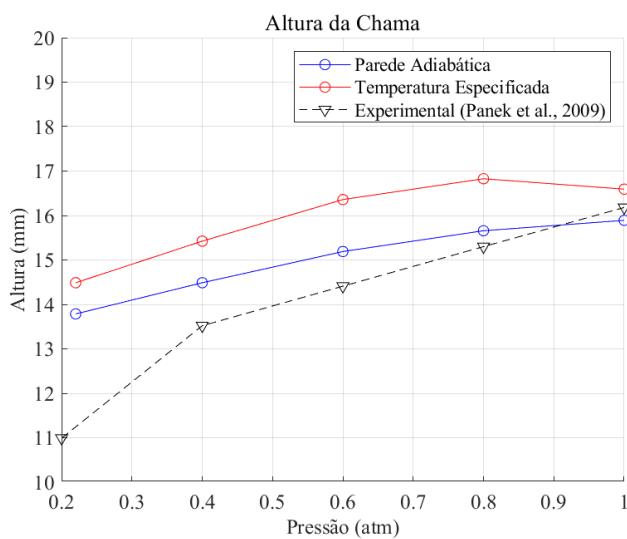


Figura 21 – Altura da chama em função da pressão para ambas as condições de contorno.

Fonte: Autor, 2025

## 5.2 Distribuição do Radical $C_2H_3$

A análise da distribuição do radical  $C_2H_3$  foi realizada para as mesmas pressões analisadas no campo de temperaturas. Esse radical está presente estágios iniciais da combustão e sua distribuição espacial pode indicar variações no processo de oxidação dos hidrocarbonetos. As Figuras 22 a 24 mostram a distribuição do  $C_2H_3$  para cada pressão e condição de contorno. À esquerda, condição de temperatura especificada, e à direita, parede adiabática.

É possível ver que a distribuição do OH é influenciada pela condição de contorno da parede. Na condição de temperatura especificada observa-se uma redução na concentração máxima de  $C_2H_3$  em todas as pressões.

Além disso, a redução da pressão resulta em um deslocamento do pico de concentração do  $C_2H_3$  para regiões mais afastadas do tubo, especialmente na condição de temperatura especificada. Esse comportamento mostra que a difusão de espécies químicas, favorecida em pressões mais baixas, desempenha um papel fundamental na distribuição do radical  $C_2H_3$ , influenciando sua localização e concentração na chama.

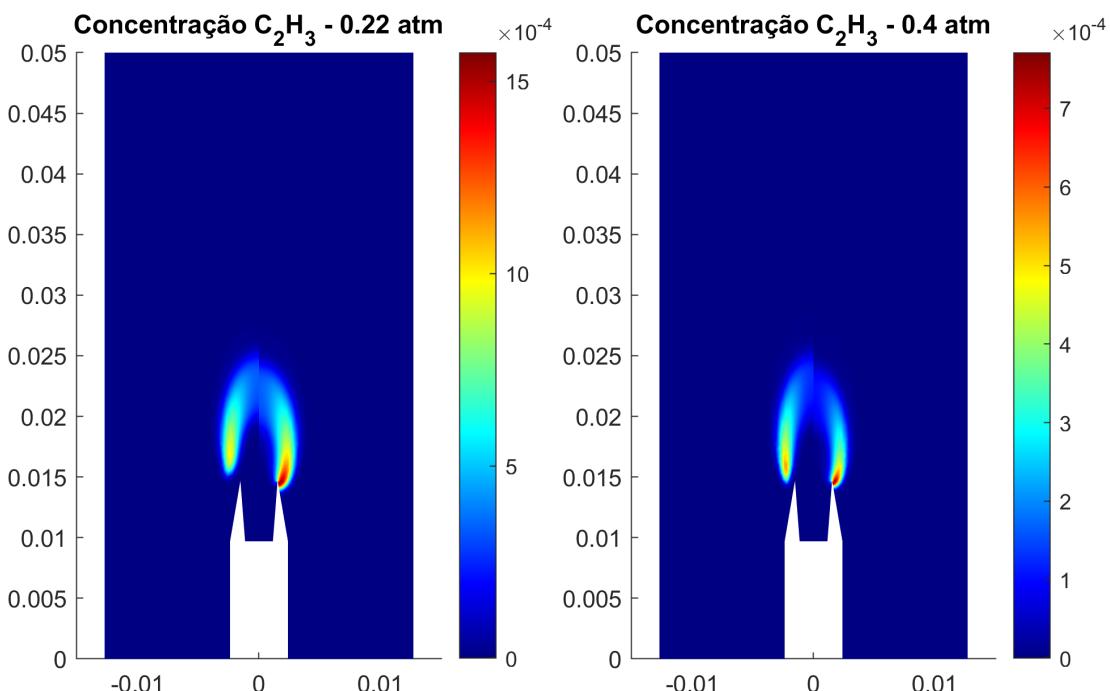


Figura 22 – Distribuição do radical  $C_2H_3$  para pressões de 0.22 atm (esquerda) e 0.4 atm (direita).

Fonte: Autor, 2025

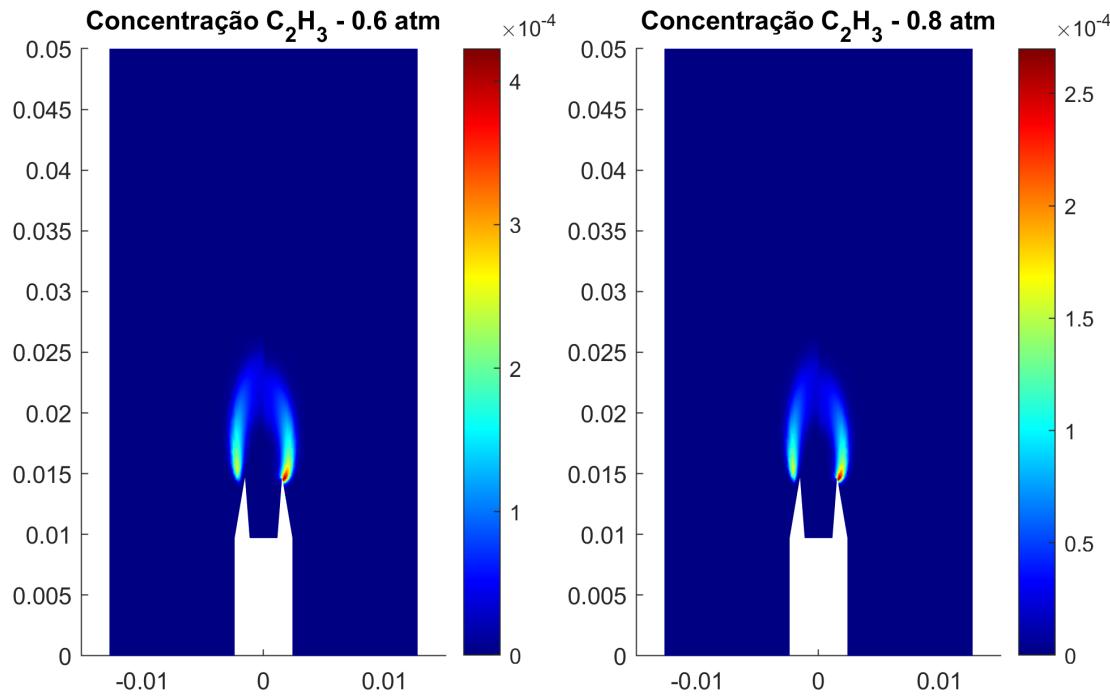


Figura 23 – Distribuição do radical  $C_2H_3$  para pressões de 0.6 atm (esquerda) e 0.8 atm (direita).

Fonte: Autor, 2025

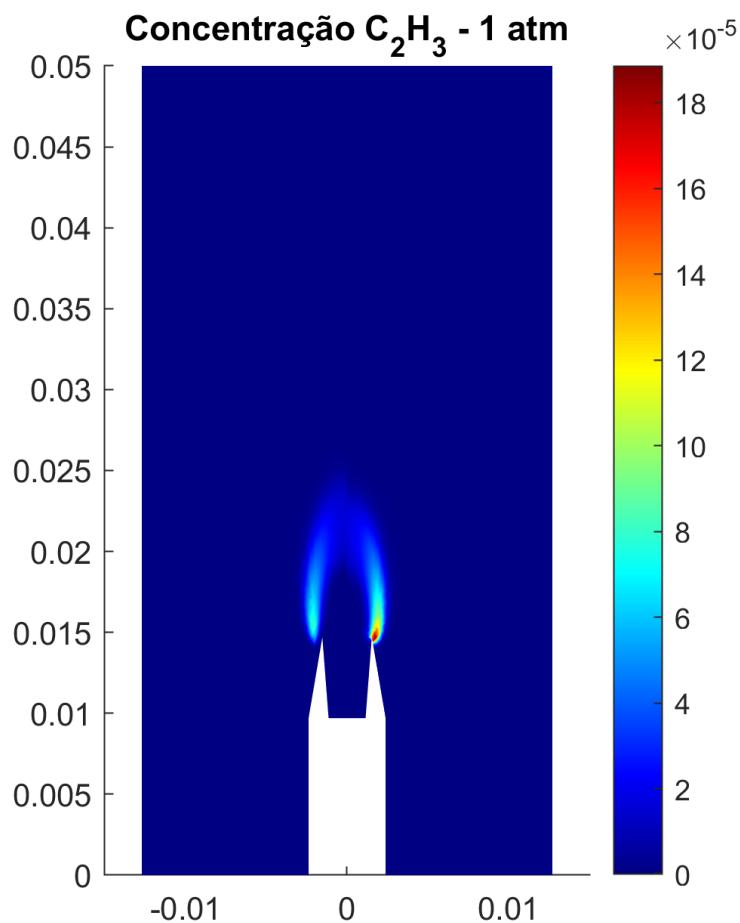


Figura 24 – Distribuição do radical  $C_2H_3$  para pressão de 1.0 atm.

Fonte: Autor, 2025

### 5.2.1 Distribuição do Radical OH

O radical OH está presente em todas as fases da combustão, participando ativamente das reações químicas que influenciam a velocidade de propagação da chama e a formação de produtos intermediários (TURNS, 2000).

As Figuras 25 a 27 apresentam a distribuição do radical OH para diferentes pressões e condições de contorno.

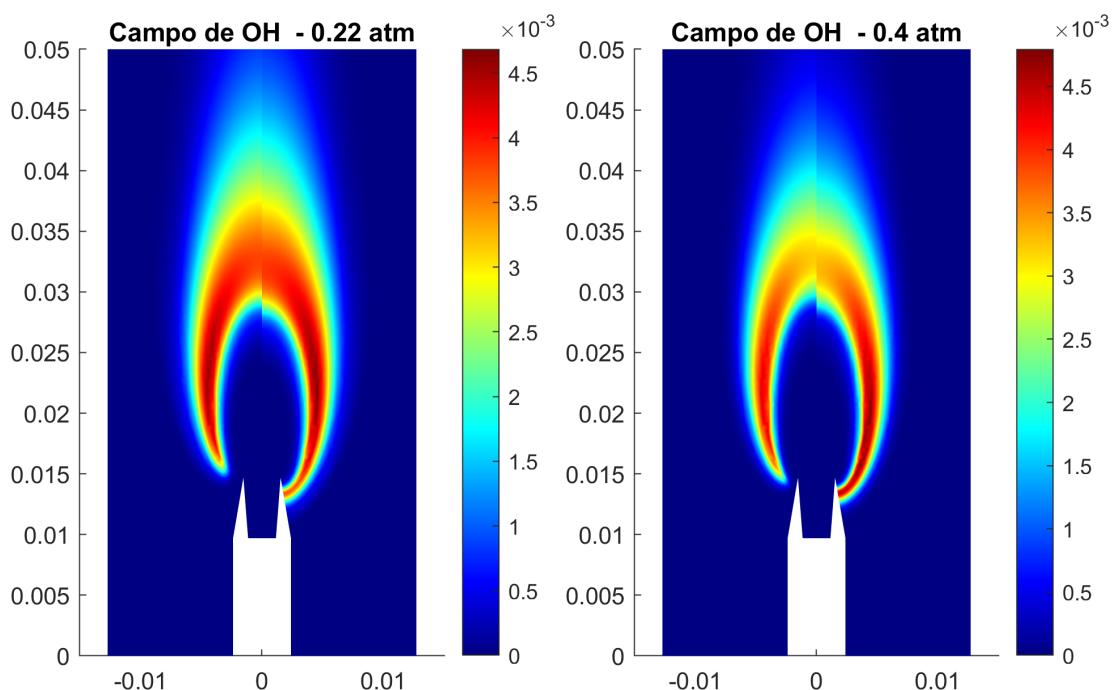


Figura 25 – Distribuição do radical OH para pressões de 0.22 atm (esquerda) e 0.4 atm (direita).

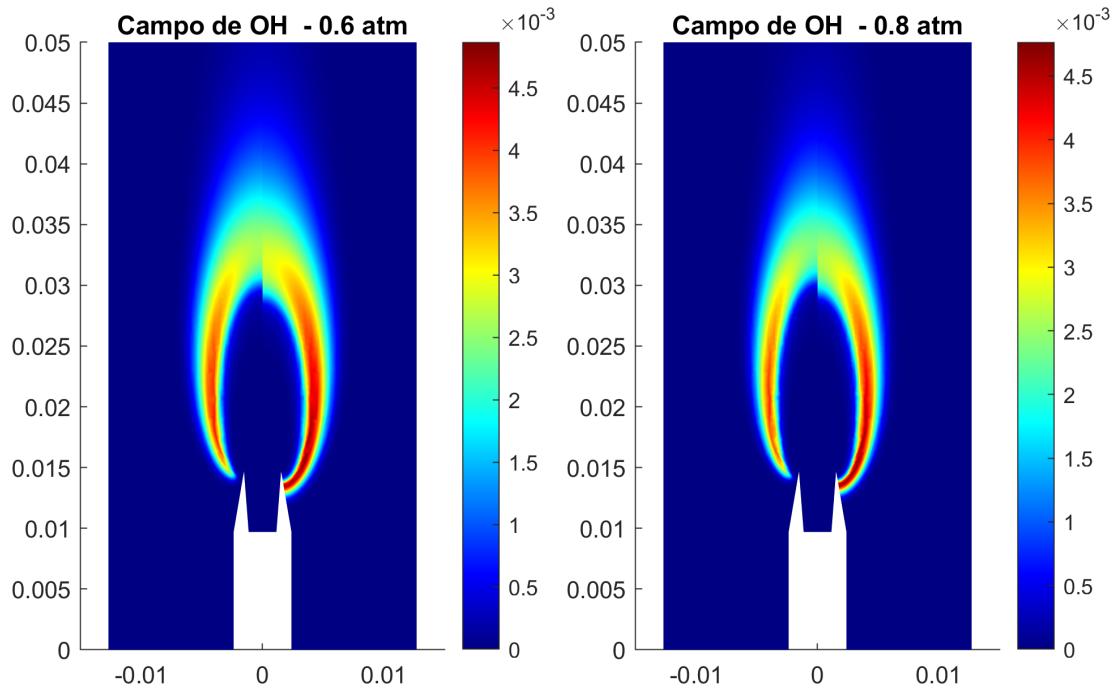


Figura 26 – Distribuição do radical OH para pressões de 0.6 atm (esquerda) e 0.8 atm (direita).

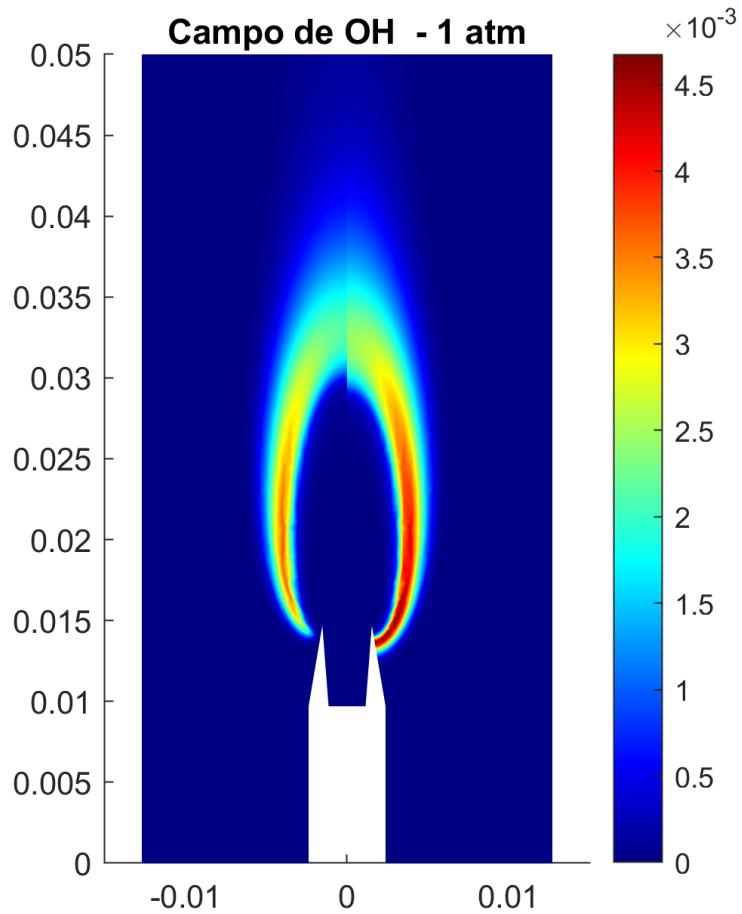


Figura 27 – Distribuição do radical OH para pressão de 1.0 atm.

É possível ver que a distribuição do OH é influenciada pela condição de contorno

da parede. Na condição de temperatura especificada, o resfriamento da chama reduz a concentração máxima de OH, principalmente nas pressões mais altas.

Além disso, a redução da pressão resulta em um deslocamento do pico de concentração do OH para regiões mais afastadas do tubo, especialmente na condição de temperatura especificada. Esse comportamento mostra que a difusão de espécies químicas, favorecida em pressões mais baixas, desempenha um papel fundamental na distribuição do radical OH, influenciando sua localização e concentração na chama. .



## 6 Conclusão

A simulação computacional conseguiu reproduzir qualitativamente a variação no formato da chama em função da pressão, evidenciando tendências coerentes com o comportamento esperado. No entanto, para as menores pressões, a variação na altura e na largura da chama não foi adequadamente capturada pela simulação numérica, o que pode estar relacionado a diferentes fatores.

Um dos possíveis motivos para essa limitação é o uso do mecanismo de reação DRM22, que, por ser simplificado, pode não representar com precisão a química da combustão em baixas pressões. A adoção de um mecanismo mais detalhado, como o GRI-Mech 3.0, pode permitir uma melhor descrição das reações químicas e, consequentemente, uma melhor concordância com os dados experimentais. Essa implementação, no entanto, aumentaria muito o custo computacional da simulação.

Além disso, a ausência de um modelo de fuligem na simulação pode ter impactado os resultados, uma vez que partículas de fuligem influenciam a transferência de calor e a estrutura da chama, principalmente nas pressões mais altas. A consideração desse efeito em estudos futuros pode contribuir para uma modelagem mais realista.

Outro fator relevante é a escolha das condições de contorno. A condição de Temperatura Especificada impõe uma elevada perda de calor para a parede, o que, em pressões abaixo de 0.2 atm, leva ao apagamento da chama, dificultando a comparação com os experimentos. Por outro lado, a condição de Parede Adiabática subestima a perda de calor da chama para a parede, o que pode resultar em uma altura de chama superestimada para pressões mais baixas. Dessa forma, nenhuma das condições de contorno adotadas reflete exatamente o comportamento do experimento, o que pode ser um fator limitante na reprodução quantitativa dos dados experimentais.

A análise dos resultados indica a necessidade de aprimoramentos no modelo numérico para melhor representar o comportamento da chama em diferentes pressões. Ajustes no mecanismo de reação, a inclusão de modelos de fuligem e a implementação de condições de contorno mais representativas do experimento podem contribuir para uma maior precisão nas previsões numéricas.



## Referências

- BARLOW, R. S. et al. Scalar profiles and no formation in laminar opposed-flow partially premixed methane/air flames. *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 127, p. 2102–2118, 2001. Citado na página 47.
- BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. *Transport Phenomena*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2002. Citado 3 vezes nas páginas 33, 34 e 35.
- BURKE, S. P.; SCHUMANN, T. E. W. Diffusion flames. *Industrial and Engineering Chemistry*, American Chemical Society, v. 20, n. 10, p. 998–1004, 1928. Citado na página 32.
- CENGEL, Y. A.; GHAJAR, A. J. *Heat and Mass Transfer: Fundamentals and Applications*. 4th. ed. [S.l.]: McGraw-Hill Education, 2011. ISBN 978-0073398181. Citado na página 47.
- CREMASCO, M. A. *Fundamentos de Transferência de Massa*. 3. ed. São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda., 2015. ISBN 978-85-212-0904-1 (impresso). Citado 2 vezes nas páginas 34 e 35.
- CUNHA, F. A. da. *Modelo matemático para estudos de processos reativos de partículas de carvão e biomassa*. Tese (Doutorado) — Universidade de Brasília, Brasília, DF, 2010. Citado na página 45.
- CUNHA, F. A. da; VERAS, C. A. G. Modelling laminar diffusion flames using a fast convergence three-dimensional cvfem code. *Combustion Theory and Modelling*, Informa UK Limited, trading as Taylor & Francis Group, v. 2021, n. DOI: 10.1080/13647830.2021.1889682, 2021. Citado na página 45.
- FLAGAN, R. C.; SEINFELD, J. H. *Fundamentals of Air Pollution Engineering*. [S.l.]: Editora, 1988. Citado na página 23.
- FROLOV, S. M. et al. Spherical diffusion flames of ethylene in microgravity: Multidimensional effects. *Fire*, v. 6, n. 285, 2023. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.
- GOKOGLU, S. A. et al. *A Researcher's Guide to: Combustion Science*. [S.l.], 2015. International Space Station (ISS) Researcher's Guide. Disponível em: <<https://www.nasa.gov>>. Citado na página 23.
- JONES, A. R. Combustion physics. *Physics Education*, v. 20, p. 292–298, 1985. Disponível em: <<https://consensus.app/papers/combustion-physics-jones/091b4a9e3db85f08bca61b46ecf8f959/>>. Citado na página 23.
- KOHSE-HÖINGHAUS, K. Combustion in the future: The importance of chemistry. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2020. Disponível em: <<https://consensus.app/papers/combustion-importance-chemistry-kohsehöinghaus/a94ba71a5d725c4a973196d5bb7dff61/>>. Citado na página 24.
- KUO, K. K. *Principles of Combustion*. [S.l.]: Wiley-Interscience, 2005. Citado na página 49.

LAW, C. K. *Combustion Physics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 29.

MCALLISTER, S.; CHEN, J.-Y.; FERNANDEZ-PELLO, A. C. *Fundamentals of Combustion Processes*. New York: Springer, 2011. ISBN 978-1441979448. Citado 3 vezes nas páginas 13, 30 e 31.

MCBRIDE, B. J.; GORDON, S.; RENO, M. A. *Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species*. [S.l.]: National Aeronautics and Space Administration, Lewis Research Center, 1993. Citado 2 vezes nas páginas 47 e 48.

PANEK, N. *An Investigation of Ethylene Laminar Diffusion Flames at Sub-Atmospheric Pressures to Simulate Microgravity*. Dissertação (Mestrado) — University of Toronto, Toronto, Canada, 9 2009. Graduate Department of Aerospace Engineering. Citado 6 vezes nas páginas 13, 24, 51, 52, 59 e 64.

PANEK, N.; CHAREST, M. R. J.; GÜLDER, Ö. L. Simulation of microgravity diffusion flames using sub-atmospheric pressures. *AIAA Journal*, v. 50, n. 4, p. 976–978, 2012. Citado na página 51.

PELUCCI, M.; ABIÁN, M.; COMMODO, M. Editorial: Experimental and modelling approaches for clean combustion technologies. *Frontiers in Energy Research*, v. 10, 2022. Disponível em: <<https://consensus.app/papers/editorial-experimental-modelling-approaches-combustion-pelucchi/182b9a6ced4e5bb69564833b29d6349c>>. Citado na página 23.

ROSS, H. D. (Ed.). *Microgravity Combustion: Fire in Free Fall*. San Diego: Academic Press, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 32.

TANIGUCHI, H. et al. Exergy analysis on combustion and energy conversion processes. *Energy*, v. 30, p. 111–117, 2005. Disponível em: <<https://consensus.app/papers/analysis-combustion-energy-conversion-processes-taniguchi/f763ba98330d5b27827513a002f46a19>>. Citado na página 23.

THOMSON, K. A. et al. Soot concentration and temperature measurements in co-annular, nonpremixed ch4/air laminar flames. *Combustion and Flame*, v. 140, n. 3, p. 222–232, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 13, 52 e 53.

TURNS, S. R. *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. [S.l.]: McGraw-Hill, 2000. Citado 11 vezes nas páginas 13, 28, 29, 30, 35, 36, 37, 39, 40, 41 e 67.

VERSTEEG, H.; MALALASEKERA, W. *An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method*. [S.l.]: Pearson Education, 2007. Citado na página 43.

WARNATZ, J.; MAAS, U.; DIBBLE, R. W. *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*. [S.l.]: Springer, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.

ZETTERVALL, N.; FUREBY, C.; NILSSON, E. J. K. Evaluation of chemical kinetic mechanisms for methane combustion: A review from a cfd perspective. *Fuels*, MDPI, v. 2, p. 210–240, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 41.