

COMBUSTÃO DE GOTAS COM ESCAPE DE COMBUSTÍVEL PELA CHAMA PARA SIMULAR REGIME DE COMBUSTÃO “COOL FLAME”

**RELATÓRIO FINAL DE PROJETO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA
(PIBIC/CNPq/INPE)**

**Alan Júnior Vergütz (UNIPAMPA, Bolsista PIBIC/CNPq)
E-mail: vergutao@gmail.com**

**Fernando Fachini Filho (LCP/INPE, Orientador)
E-mail: fachini@lcp.inpe.br**

COLABORADOR

Dr. Cesar F. da Cruz Cristaldo (UNIPAMPA)

Julho de 2016

RESUMO

Este trabalho, que vem sendo desenvolvido desde agosto de 2014, tem por objetivo estender o modelo já existente e gerar um código de baixo custo computacional, que descreva a vaporização e a combustão de gotas isoladas, em regime de “cool flame”. Neste caso particular, o oxigênio está disperso na fase gasosa juntamente com o gás inerte hélio. Isto faz com que o número de Lewis do oxidante aumente consideravelmente. A estratégia de análise consiste em utilizar um modelo, que é uma extensão do modelo clássico de combustão de gotas, onde é admitida uma chama infinitamente estreita, porém com um considerado escape de combustível através da mesma, apresentando assim uma solução analítica. Conhecendo a física descrita por este modelo com valores típicos àqueles aos encontrados no regime de cool flame para o número de Lewis, parte-se para a análise com o modelo de chama finita descrita pela taxa de reação química de passo único. Com este modelo, poder-se-á observar o efeito do escape de combustível pela chama, processo que é o responsável por manter a chama no regime de “cool flame”. Com o aumento do escape de combustível a temperatura da chama diminui e a chama se aproxima mais da gota. Porém, a taxa de vaporização, não é tão sensível ao escape de combustível como as variáveis anteriores, e se mantém praticamente constante, conforme análises experimentais. Considerando um escape de combustível elevado e uma oxidação parcial do combustível consumido na chama, é possível encontrar um raio de chama igual a cinco vezes o raio da gota, coincidindo com os resultados obtidos na química detalhada. Contudo, apesar desses dados concordarem com os obtidos experimentalmente, o modelo prevê apenas a combustão de gotas no regime de “cool flame”.

1. INTRODUÇÃO

A combustão e o seu controle são fundamentais para a nossa existência neste planeta, se fazendo presente em todos os setores da sociedade. Atualmente ela é responsável por aproximadamente 85% da energia consumida pelo ser humano. Segundo dados do Balanço Energético Nacional publicado pelo Ministério das Minas e Energia (2015), a energia gerada a partir da combustão de lenha, carvão vegetal, gás natural, derivados do petróleo, carvão mineral e derivados da cana de açúcar correspondem a aproximadamente 80% da energia consumida pelos brasileiros.

Tendo em vista a grande dificuldade em analisar as transferências de calor e massa em *sprays*, o estudo de gotas isoladas tem sido o objeto de inúmeros trabalhos científicos, como por exemplo, Godsave (1953), Goldsmith (1954), Kassooy (1968), Law (1975), Raghunandan (1977), Caprio (1981), Choi (1990), Saastamoine (1993) Peters (2002), dentre outros. Estes trabalhos, sobre vaporização e combustão de gotas, visam avaliar os efeitos das condições físicas do processo, fornecendo subsídio para correlações que possam ser utilizadas em modelos de spray, ampliando os conhecimentos sobre o assunto.

Recentemente, durante um experimento de combustão de gotas realizado pela NASA (Administração Nacional da Aeronáutica e Espaço) chamado de FLEX (Experimento de Extinção de Chama), um novo regime de queima de gotas foi identificado. Este regime, chamado de “cool flame”, tem sido alvo de investigação por apresentar características diferentes da queima convencional. No regime “cool flame” a combustão ocorre em duas fases distintas. Na primeira, a gota sofre uma queima normal, com uma chama visível em torno da mesma (WILLIAMS, 2012).

Na segunda, a radiação luminosa da chama se extingue, porém, a gota permanece vaporizando sem chama visível e com uma temperatura mais baixa. Além disso, a gota apresenta uma taxa de vaporização praticamente igual a primeira fase. No final da segunda fase, uma nuvem de vapor é formada em torno da gota. Simulações numéricas de cinética química atribuem essa nuvem como sendo resultado do combustível não queimado pela chama.

2. OBJETIVO

Com a ideia de combustível não queimado, o presente trabalho tem por finalidade utilizar um modelo clássico de queima de gotas e impor um escape de combustível pela

chama, processo que é um dos efeitos apontados como responsável por manter a chama no regime de cool flame.

O modelo clássico é baseado na hipótese de chama estreitamente fina onde todo combustível e oxidante são consumidos na chama, assim, o modelo de Zeldovich pode ser utilizado sem a necessidade de envolver a cinética química no modelo.

3. METODOLOGIA

Recentemente, o regime de cool flame foi observado e levantou muitas questões (NAYAGAN, 2015). Para justificar qualitativamente algumas delas, um modelo termo fluido dinâmico usado para descrever a combustão de gotas no regime de queima com temperatura normal será aplicado (GODSAVE, 1953), impondo no mesmo um escape de combustível pela chama. Tornando, este modelo, uma extensão do modelo de combustão clássica de gotas (FACHINI, 1999), devido ao escape de combustível considerado na chama.

O vazamento de combustível através da chama produz um comportamento semelhante ao do regime de “cool flame”, isto é, chama com baixa temperatura ocorrendo perto da gota, como observado em estudos experimentais anteriores (WILLIAMS, 2012). O modelo descreverá de forma contínua a taxa de vaporização da gota no regime de queima normal (nenhum vazamento), passando pelo regime de “cool flame” até o término da gota (vazamento completo).

Para a realização deste trabalho serão utilizadas as equações de conservação de espécies de combustível, de oxidante e de energia. Nelas as variáveis: tempo, temperatura, massa específica do gás, velocidade, fração mássica de oxidante, fração mássica de combustível, coordenada radial e raio serão adimensionalizadas.

Devido à complexidade e quantidade de fenômenos distintos que ocorrem na chama durante o processo de combustão da gota, um método desenvolvido por Shvab-Zeldovich será utilizado para eliminar o termo de reação química, que dentro das equações de conservação é fortemente não linear. Com isso, será possível integrar as equações de conservação do lado do oxidante separadamente das do lado do combustível, sem o termo de reação química e sob a hipótese de uma chama infinitamente estreita.

Integrando as equações de conservação adimensionalizadas, juntamente com as devidas condições de contorno que serão aplicadas, será possível encontrar a posição da chama, a taxa de vaporização da gota, a temperatura, os fluxos de calor, de combustível e

de oxidante na chama, em função do escape de combustível imposto artificialmente na chama.

4. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

4.1. Equações de Conservação

Nas equações de conservação, as variáveis tempo, temperatura, massa específica do gás, velocidade, fração mássica de oxidante, fração mássica de combustível, coordenada radial e raio foram adimensionalizadas, tornando o problema mais geral.

Feito isso e admitindo uma temperatura uniforme dentro da gota e uma temperatura de superfície de gota parecida com a de ebulição da mesma, temos as seguintes equações de conservação de espécies para a fase gasosa.

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} Le_F y_F \\ Le_O y_O \\ \theta \end{pmatrix} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \theta^n \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} y_F \\ y_O \\ \theta \end{pmatrix} \right) = \dot{\omega} \begin{pmatrix} -1 \\ -S \\ Q \end{pmatrix}$$

Onde λ , θ , $\dot{\omega}$, y_F , y_O , Q , Le_O , Le_F , S e x' são taxa de vaporização, temperatura, taxa de reação química, fração mássica de combustível, fração mássica de oxidante, calor de combustão, número de Lewis do oxidante e do combustível e coordenada espacial, respectivamente.

4.2. Condições de Contorno

Condições de contorno foram aplicadas na superfície da gota, na chama e em região afastada da gota.

Superfície da gota: ($x = a$);

$$\theta = \theta_s, \quad x^2 \theta^n \frac{\partial \theta}{\partial x} = \lambda l + q^- = \lambda l',$$

$$y_F = y_{Fs} = \exp[\gamma(1 - \theta_b/\theta_s)], \quad x^2 \theta^n \frac{\partial y_F}{\partial x} = -\lambda Le_F (1 - y_{Fs}),$$

Posição da chama: ($x = x_p$);

$$\theta - \theta_p = y_F - y_{Fp} = y_O = 0$$

Região afastada da gota: ($x \rightarrow \infty$);

$$\theta - 1 = y_O - 1 = y_F = 0$$

4.3. Solução Analítica

A solução do problema foi realizada integrando as equações de conservação com as respectivas condições de contorno e sem o termo de reação química, que foi eliminado pelo método de Shvab-Zeldovich devido o mesmo ser fortemente não linear.

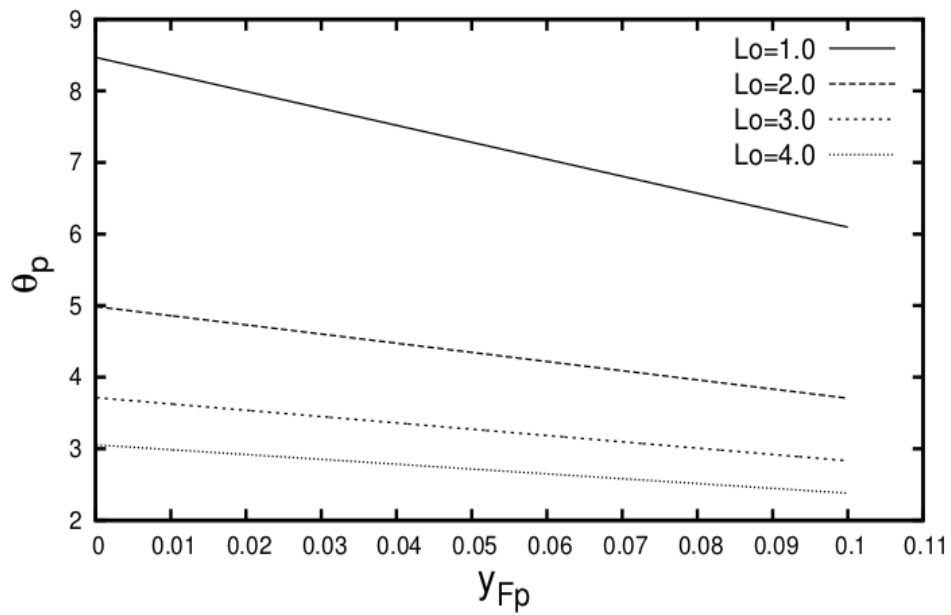
A partir da integração das equações, foi possível encontrar as propriedades da chama (posição e temperatura) e propriedades da gota (taxa de vaporização).

$$\begin{aligned} \frac{(\theta_p - \theta_s)}{(L + q^-)} + 1 &= \left(\frac{1 - y_{Fp}}{1 - \exp[\gamma(1 - \theta_b/\theta_s)]} \right)^{1/Le_F} \\ q_{y_F} + (1 - y_{Fp}) &= \frac{1}{Q} [-q\theta + (\theta_p - \theta_s + L + q^-)] \\ 1 - \frac{\theta_p - 1}{q_\theta} &= \left(1 - \frac{y_{Fp}}{q_{y_F}} \right)^{1/Le_F} \\ \frac{\lambda}{a} &= \int_{\theta_s}^{\theta_p} \frac{\theta^n}{\theta - \theta_s + L + q^-} d\theta + \int_{\theta_p}^1 \frac{\theta^n}{\theta - \theta_p + q_\theta} d\theta \\ \frac{x_p}{a} &= 1 + \left(\int_{\theta_s}^{\theta_p} \frac{\theta^n}{\theta - \theta_s + L + q^-} d\theta \right) / \left(\int_{\theta_p}^1 \frac{\theta^n}{\theta - \theta_p + q_\theta} d\theta \right) \end{aligned}$$

5. RESULTADOS

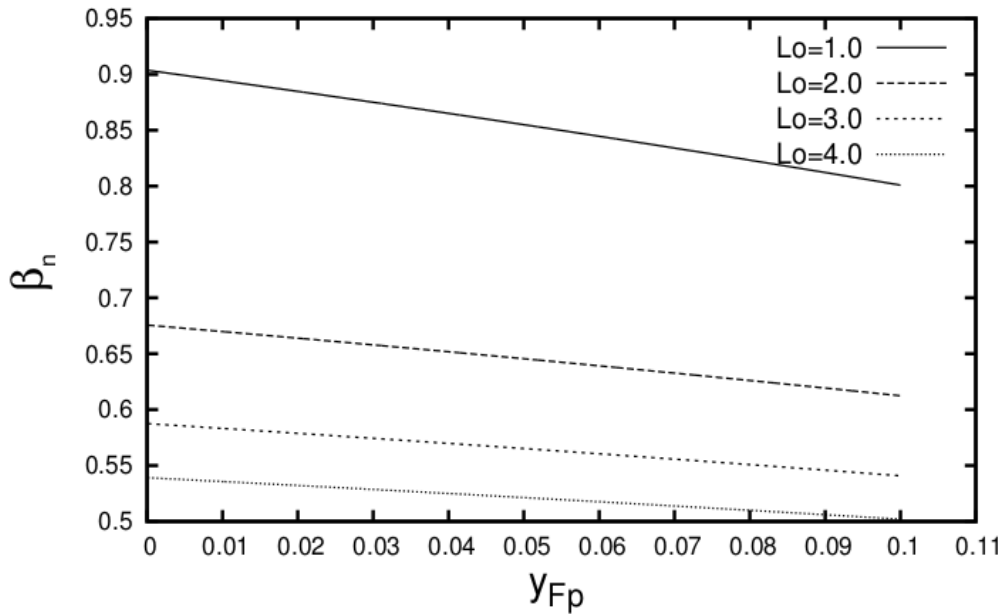
Com as equações encontradas acima, impondo nelas um escape de combustível e uma temperatura na superfície da gota próxima da temperatura de ebulição, obtemos os seguintes resultados expostos nas figuras abaixo.

Figura 1 – Temperatura da chama em função do escape de combustível



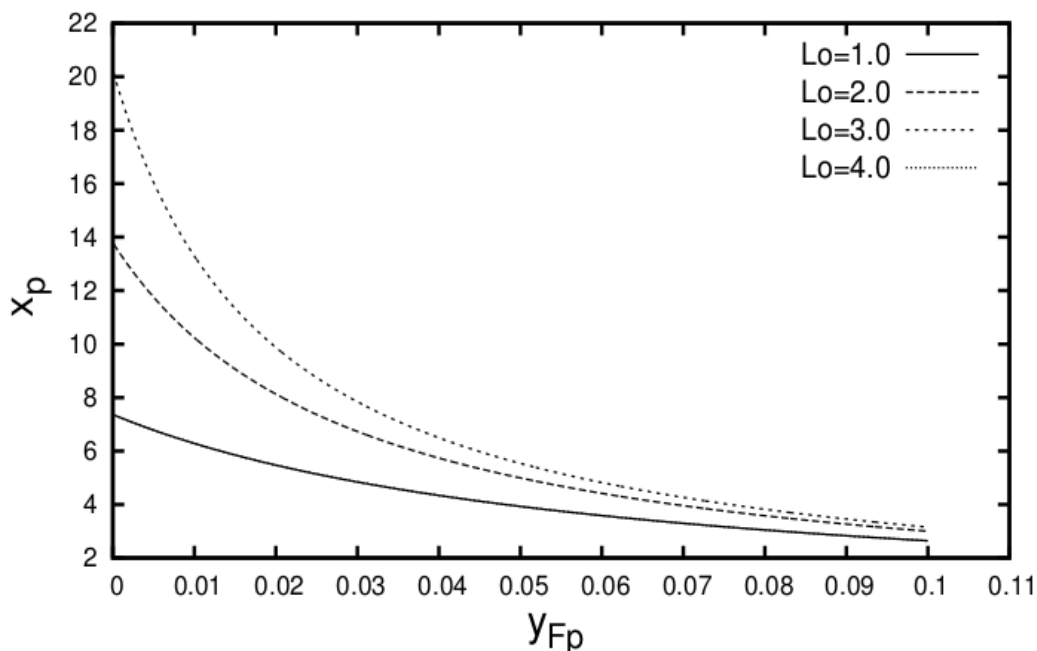
Fonte: Próprio autor

Figura 2 – Taxa de vaporização da gota em função do escape de combustível



Fonte: Próprio autor

Figura 3 – Posição da chama em função do escape de combustível



Fonte: Próprio autor

Analisando os gráficos, é possível perceber que a medida em que aumenta o escape de combustível, diminui a temperatura da chama (Figura 1), diminui a taxa de vaporização da gota (Figura 2) e a chama se aproxima da gota (Figura 3) para diferentes números de Lewis. Assim, os resultados exibem comportamentos semelhantes aos obtidos experimentalmente, exceto a taxa de vaporização que deveria se manter praticamente constante.

6. CONCLUSÃO

As propriedades da chama, neste trabalho, foram descritas todas em função do escape de combustível e para uma temperatura de superfície da gota imposta, para visualizar o comportamento da chama.

Como a taxa de vaporização não se apresentou constante, como verificado no experimento FLEX, a próxima etapa do trabalho será impor a taxa de vaporização constante no problema, tendo a temperatura da superfície da gota como uma variável a ser encontrada na solução.

REFERÊNCIAS

CAPRIO, V.; INSOLA, A.; LIGNOLA, P. G. Isobutane cool flames in a CSTR: the behavior dependence on temperature and residence time. **Combustion and Flame**, v. 43, p. 23-33, 1981.

CHOI, Mun Y. et al. Observations on a slow burning regime for hydrocarbon droplets: n-heptane/air results. In: **Symposium (International) on Combustion**. Elsevier, 1991. p. 1597-1604.

EPE – EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA. Balanço Energético Nacional-BEN 2015. **Ministério de Minas e Energia. Brasília**, 2015.

FACHINI, Fernando F. An analytical solution for the quasi-steady droplet combustion. **Combustion and flame**, v. 116, n. 1, p. 302-306, 1999.

FAROUK, Tanvir I.; DRYER, Frederick L. Isolated n-heptane droplet combustion in microgravity: “Cool Flames”—Two-stage combustion. **Combustion and Flame**, v. 161, n. 2, p. 565-581, 2014.

GODSAVE, G. A. E. Studies of the combustion of drops in a fuel spray—the burning of single drops of fuel. In: **Symposium (International) on Combustion**. Elsevier, 1953. p. 818-830.

GOLDSMITH, Martin. On the burning of single drops of fuel in an oxidizing atmosphere. **Journal of Jet Propulsion**, v. 24, n. 4, p. 245-251, 1954.

KASSOY, David R.; WILLIAMS, Forman A. Effects of chemical kinetics on near equilibrium combustion in nonpremixed systems. **Physics of Fluids (1958-1988)**, v. 11, n. 6, p. 1343-1351, 1968.

LAW, C. K. Quasi-steady droplet vaporization theory with property variations. **Physics of Fluids (1958-1988)**, v. 18, n. 11, p. 1426-1432, 1975.

NAYAGAM, Vedha et al. Cool-flame extinction during n-alkane droplet combustion in microgravity. **Combustion and Flame**, v. 162, n. 5, p. 2140-2147, 2015.

PETERS, N. et al. Temperature cross-over and non-thermal runaway at two-stage ignition of n-heptane. **Combustion and Flame**, v. 128, n. 1, p. 38-59, 2002.

POLLARD, R. T.; TIPPER, C. F. H.; BAMFORD, C. J. Comprehensive chemical kinetics. **by CH Bamford and CFH Tipper, Elsevier, New York**, v. 17, p. 249-367, 1977.

RAGHUNANDAN, B. N.; MUKUNDA, H. S. The problem of liquid droplet combustion—a reexamination. **Combustion and flame**, v. 30, p. 71-84, 1977.

SAASTAMOINEN, Jaakko J.; AHO, Martti J.; LINNA, Veli L. Simultaneous pyrolysis and char combustion. **Fuel**, v. 72, n. 5, p. 599-609, 1993.

WILLIAMS, Forman A. Can cool flames support quasi-steady alkane droplet burning?. **Combustion and Flame**, v. 159, n. 12, p. 3583-3588, 2012.