

CHAMAS DIFUSIVAS DE HIDROGÊNIO

EVANILDO FRANCO DE JESUS¹; RÉGIS SPEROTTO DE QUADROS²;
DANIELA BUSKE³

¹Mestrando do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática (PPGMMat), Instituto de Física e Matemática (IFM), Universidade Federal de Pelotas – evanildofj@yahoo.com.br

²Professor do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática (PPGMMat-UFPel) – quadros99@gmail.com

³Professora do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática (PPGMMat-UFPel) – danielabuske@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

A combustão desempenha um papel fundamental na vida dos seres vivos, pois está envolvida em diversos processos biológicos, físico-químicos e industriais. Sem ela dificilmente o mundo seria como é atualmente, porque foi a partir da descoberta do fogo que o homem conseguiu obter avanços importantes na forma de agir, pensar, se proteger e viver, que provocaram mudanças essenciais em sua vida (HOERLLE, 2015), sendo refletido nos dias atuais pelo avanço tecnológico adquirido ao longo do tempo. É considerada a tecnologia mais antiga da civilização que revolucionou o mundo e o desenvolvimento da humanidade.

A combustão é um processo complexo que ocorre por meio de reações químicas envolvendo combustível e oxidante (DE BORTOLI, 2009), assim como outras variáveis como temperatura, energia, pressão, entre outras. Normalmente a combustão pode acontecer com chamas ou sem chamas, pode ser rápida ou lenta, laminar ou turbulenta, dependendo do meio onde ocorre. Se a combustão for com chamas esta é classificada com pré-misturada ou difusiva, de acordo com a forma que os reagentes são manipulados antes da zona de combustão (PETERS, 1992).

As chamas pré-misturadas são definidas como sendo a situação de combustão onde o combustível e o oxidante são misturados antes de entrarem na zona de combustão (LACAVA, 2014). Chamas pré-misturadas são observadas em fornos de aquecimento por condução ou convecção de calor, fogões domésticos, etc. De acordo com LACAVA (2014) a vantagem das chamas pré-misturadas é que estas conseguem alcançar com facilidade o processo de combustão completa, com menor emissão de fuligem e produtos de combustão de oxidação parcial.

Quando os reagentes são misturados na zona de combustão as chamas são classificadas como difusivas e apresentam características completamente diferentes das chamas pré-misturadas. Nessas o processo de difusão dos reagentes é mais lento do que as reações químicas, ou seja, a taxa de misturas dos reagentes é que controla o processo (LACAVA, 2014). As chamas difusivas são aplicadas para diferentes finalidades nas indústrias, em projetos de queimadores em razão da maior taxa de transferência de calor por meio de radiação, motores a diesel, lamparinas, etc.

Neste trabalho é apresentado os resultados numéricos obtidos da simulação de chamas difusivas de hidrogênio em uma câmara de combustão, utilizando as equações de Navier-Stokes, fração de mistura e fração mássica para a análise do escoamento. Também foram utilizados os métodos de diferenças finitas e simulação de grandes escalas para discretizar as equações e tratar a turbulência presente no fluxo.

2. METODOLOGIA

As equações governantes são fundamentais para simular o escoamento químico, pois através delas podemos obter o comportamento do fluxo e da reação química na região do problema. As equações utilizadas são quantidade de movimento, fração mássica, fração de mistura e energia. Através dessas obtemos a força, o fluxo de massa, mistura e energia para cada espécie química durante a simulação.

Com intuito de diminuir a complexidade são realizadas algumas simplificações e aplicadas hipóteses, como considerar difusividade e capacidade de calor iguais para todas as espécies químicas contidas na reação, desconsidera-se a força da gravidade, a pressão e a radiação, por causa que seus efeitos não são tão significativos na reação no interior da câmara da combustão.

Para realizar a simulação numérica foi necessário tratar a turbulência presente no escoamento. A turbulência é responsável por acelerar o processo de combustão e aumentar a taxa de dissipaçāo e troca de calor, aumentando assim, a complexidade de analisar o fluxo e seu comportamento durante o processo de combustão. Por isso, utilizou-se a técnica da simulação em grandes escalas, conhecida como *Large Eddy Simulation (LES)*. Essa técnica consiste separar as grandes escalas das menores escalas contidas no escoamento, nas quais as grandes escalas são calculadas diretamente e apenas os movimentos das pequenas escalas são modelados. Para isso, as equações governantes passam pelo processo de filtragem espacial, em que são aplicadas as médias de *Reynolds* e *Favre*. Para as quantidades indefinidas que aparecem nas equações quando se aplica a técnica *LES* são utilizados modelos de fechamento como o da viscosidade turbulenta.

Como nos termos das equações estão presentes diferentes grandezas físicas, como velocidade, pressão, força, energia, foi necessário adimensionalizá-las, substituindo cada termo das equações por um conjunto de variáveis e constantes com as mesmas dimensões, resultando em uma equação adimensional. Portanto, as equações governantes resolvidas numericamente são as seguintes:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{v}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{v}_i\tilde{v}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{(Ma)^2} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} \quad (1)$$

$$\frac{\partial \widetilde{Y}_k}{\partial \tau} = \frac{\partial \widetilde{\chi}}{2} \frac{\partial^2 \widetilde{Y}_k}{\partial \widetilde{Z}_2} \pm \nu_F Da \widetilde{Y}_F \widetilde{Y}_O \exp\left(\frac{-Ze}{T}\right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Z})}{\partial \tau} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{v}_i\tilde{Z})}{\partial x_i} = \frac{1}{Re} \left(\frac{1}{Sc} \frac{\partial^2(\bar{\rho}D_t\tilde{Z})}{\partial x_i \partial x_i} \right) \quad (3)$$

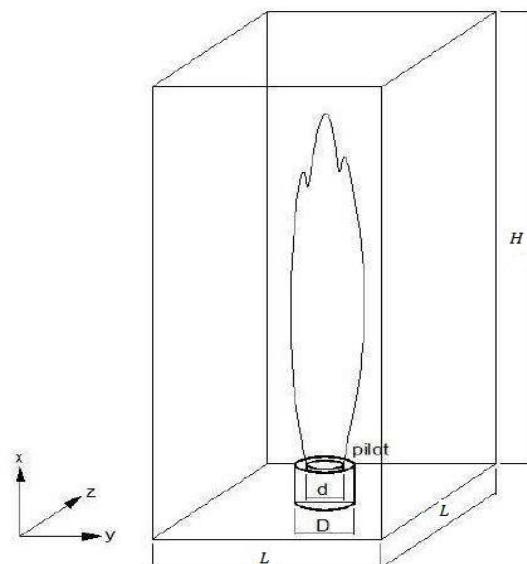
$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial \tau} = \frac{\partial \widetilde{\chi}}{2} \frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial \widetilde{Z}_2} + \nu_F He Da \widetilde{Y}_F \widetilde{Y}_O \exp\left(\frac{-Ze}{T}\right) \quad (4)$$

onde ρ é a densidade, v_i é o vetor velocidade, p a pressão, σ_{ij} o tensor tensão, Ma o número de *Mach*, Re o número de *Reynolds*, Y_k a fração mássica da espécie k , χ a taxa de dissipaçāo escalar, Z a fração de mistura, Da o número de *Damköhler*, Ze o número de *Zel'dovich*, T a temperatura, Sc o número de *Schmidt*, D_t a difusividade turbulenta, He a taxa de liberação de calor, t e τ referem-se ao tempo.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A simulação numérica da chama difusiva de hidrogênio foi realizada considerando a geometria apresentada na Figura 1. O sistema de combustão é formado por uma câmara retangular de dimensões $H = 11$ e $L = 1$ no qual em seu centro, na extremidade inferior, contém dois cilindros concêntricos de diâmetro interno 0,025 e diâmetro externo 0,0267. O combustível é ejetado no cilindro de diâmetro menor e no de diâmetro maior têm-se o *pilot*, no qual são posicionadas pequenas chamas com a finalidade de estabilizar a chama do jato, e assim, evitar possíveis instabilidades durante o processo de combustão.

Figura 1: Representação Tridimensional da Câmara da Combustão.



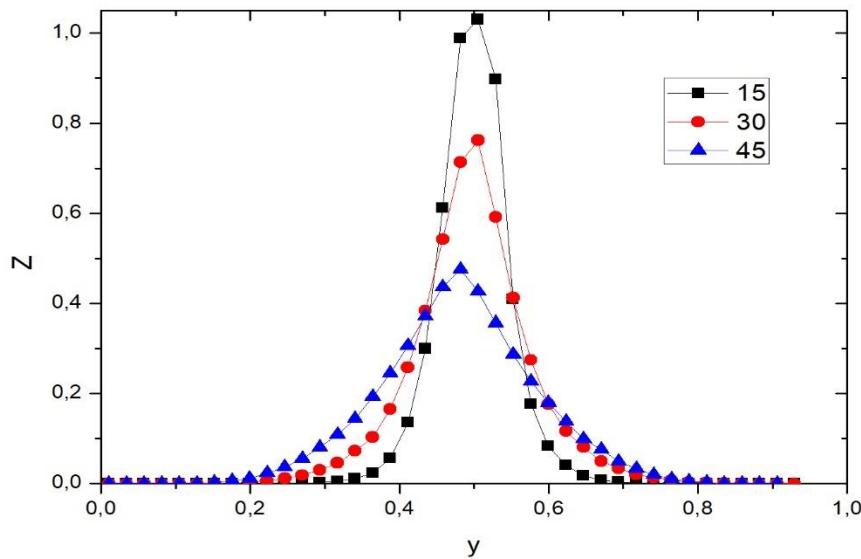
Fonte: Adaptado de (Vaz, 2010).

Na entrada do domínio da câmara são utilizadas condições de fronteira de *Dirichlet* que estabelecem os valores das variáveis nas fronteiras do domínio (ZILL; CULLEN, 2008). Na saída da câmara são aplicadas condições de *Neumann*, pois essas determinam o fluxo das variáveis no domínio.

A simulação foi realizada para uma malha tridimensional com 91 pontos na direção x e 41 pontos na direção y e z , sendo refinada nas direções verticais, horizontais e transversais. O combustível é injetado na câmara por meio da fração mássica $Y_{H_2} = 0,067$ e o oxidante por meio da fração mássica $Y_{O_2} = 0,2329$, e quando esses entram em contato começa a reação química.

Os resultados são apresentados aqui apenas para a fração de mistura, pois esta é um escalar conservativo, quimicamente independente, e por meio dela podemos determinar a fração mássica e molar e outras quantidades. Essa foi analisada para x/d igual a 15, 30, 45, na qual observa na Figura 2 que próxima ao bocal a fração de mistura começa com valor máximo, pois o combustível ainda não se misturou com o oxidante. Quando o combustível começa a se misturar com o oxidante nota-se que há um decaimento ao longo do eixo axial, porque ele está sendo consumido devido a reação química. Esse decrescimento da fração de mistura fica evidente para as posições 30 e 45 onde os efeitos de difusão e turbulência são mais fortes.

Figura 2: Fração de mistura em relação ao eixo axial



4. CONCLUSÕES

A simulação numérica utilizando as equações de *Navier-Stokes* e equações da fração mássica e de mistura demonstraram resultados satisfatórios e o comportamento do fluxo do combustível foi representado adequadamente no interior da câmara da combustão. Posteriormente, um dos objetivos deste trabalho será comparar os resultados numéricos obtidos com os resultados experimentais de uma chama difusiva de hidrogênio, a fim de validar e analisar o comportamento da solução numérica do problema.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- DE BORTOLI, A. L. Analytical/numerical solution for confined jet diffusion flame (Sandia Flame C). **Latin American Applied Research**, v.39, p.157-163, 2009.
- HOERLLE, C. A. **Estudo numérico de chamas difusivas de CH₄ diluído com CO₂ empregando mecanismos cinéticos globais e a técnica flamelet-generated manifold**. 2015. 120f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- LACAVA, P. T. **Elementos de combustão**. São José dos Campos: Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 2014.
- PETERS, N. **Fifteen Lectures on Laminar and Turbulent Combustion**. Germany: Ercofac Summer School, 1992.
- VAZ, F. A. **Modelagem e simulação de chamas difusivas turbulentas de etanol**. 2013. 120f. Tese (Doutorado em Matemática Aplicada) – Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- ZILL, D. G.; CULLEN, M. R. **Equações Diferenciais**. São Paulo: Pearson, 2008.