

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

SIMULAÇÃO CFD E MODELAGEM DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO EM CHAMAS DIFUSIVAS LAMINARES DE ETILENO

Autor: Vinícius Bueno Macêdo

Orientador: Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha

Brasília, DF

2023



Vinícius Bueno Macêdo

SIMULAÇÃO CFD E MODELAGEM DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO EM CHAMAS DIFUSIVAS LAMINARES DE ETILENO

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 UnB Gama - FGA

Orientador: Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha

Brasília, DF

2023

Vinícius Bueno Macêdo
SIMULAÇÃO CFD E MODELAGEM DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO EM
CHAMAS DIFUSIVAS LAMINARES DE ETILENO/ Vinícius Bueno Macêdo. –
Brasília, DF, 2023-
62 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha

Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade de Brasília - UnB
Faculdade UnB Gama - FGA , 2023.

1. Palavra-chave01. 2. Palavra-chave02. I. Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha.
II. Universidade de Brasília. III. Faculdade UnB Gama. IV. SIMULAÇÃO CFD E
MODELAGEM DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO EM CHAMAS DIFUSIVAS
LAMINARES DE ETILENO

CDU 02:141:005.6

Vinícius Bueno Macêdo

SIMULAÇÃO CFD E MODELAGEM DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO EM CHAMAS DIFUSIVAS LAMINARES DE ETILENO

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, 18 de dezembro de 2023:

Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha
Orientador

Prof. Dr. Ronne Toledo
Examinador interno

**Prof. Dr. Augusto César de Mendonça
Brasil**
Examinador externo

Brasília, DF
2023

Agradecimentos

Gostaria de expressar minha profunda gratidão à minha família por todo o apoio incondicional ao longo desta jornada, vocês foram a minha base sólida e meu porto seguro. Agradeço por cada palavra de encorajamento e por acreditarem em mim quando eu mesmo duvidava, sem o amor, a compreensão e o apoio de vocês, este trabalho não teria sido possível. Agradeço ao meu orientador por sua ótima orientação e paciência. E, por fim, aos colegas de classe e demais professores, sou grato pela colaboração, troca de ideias e aprendizado conjunto.

Resumo

Este estudo concentra-se na modelagem do termo de difusão como elemento central. A contribuição deste trabalho reside na modelagem aprimorada do termo de difusão em chamas difusivas laminares, representando uma contribuição significativa para a precisão na simulação desses fenômenos. Foi feita uma análise aprofundada das teorias de Chapman-Enskog, métodos de Wilke e Lee, assim como a correlação de Fuller, Schetter e Giddings, com o intuito de aprimorar o cálculo do coeficiente de difusão. Além disso, desenvolve-se um modelo de fluidodinâmica computacional voltado à simulação de chamas difusivas em escoamento laminar de etileno. O modelo adota o mecanismo de cinética química BFER em duas etapas globais e integra as equações de Navier-Stokes para o campo de velocidade, a equação de conservação de energia para o campo de temperatura, e equações de conservação de espécies químicas para a composição da mistura de gases. O cálculo dos termos de fonte de reação química é realizado por meio do método de Euler explícito, com um passo de tempo notavelmente reduzido em comparação com a simulação CFD. A implementação prática é efetuada por intermédio de um código computacional em Matlab, utilizado para simular um caso de teste. Os resultados são cuidadosamente confrontados com dados experimentais originados de uma chama de difusão laminar de etileno, abrangendo a comparação das dimensões da chama, perfil de temperaturas e termos difusivos das espécies químicas.

Palavras-chaves: Difusão Binária, Fluidodinâmica Computacional, Combustão de Etileno, Chama Difusiva Laminar.

Abstract

This study focuses on modeling the diffusion term as a central element. The essential contribution of this work lies in the enhanced modeling of the diffusion term in laminar diffusive flames, representing a significant contribution to the accuracy in simulating these phenomena. A thorough analysis of Chapman-Enskog theories, Wilke and Lee methods, as well as the correlation of Fuller, Schetter, and Giddings, was conducted to improve the calculation of the diffusion coefficient. Additionally, a computational fluid dynamics model is developed for simulating diffusive flames in laminar flow of ethylene. The model adopts the BFER chemical kinetics mechanism in two global steps and integrates the Navier-Stokes equations for the velocity field, the conservation of energy equation for the temperature field, and chemical species conservation equations for the composition of the gas mixture. The calculation of chemical reaction source terms is performed using the explicit Euler method, with a significantly reduced time step compared to CFD simulation. Practical implementation is carried out through a Matlab computational code used to simulate a test case. The results are meticulously compared with experimental data from a laminar ethylene diffusion flame, including the comparison of flame dimensions, temperature profile, and diffusive terms of chemical species.

Key-words: Binary Diffusion, Numerical simulation, Ethylene combustion, Laminar flame.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Estrutura de uma chama laminar não pré-misturada. (TURNS, 2000) .	24
Figura 2 – representação do critério de colisão. Fonte:(CREMASCO, 2021)	27
Figura 3 – Colisão entre duas moléculas considerando-se a atração e repulsão entre elas. Fonte: (CREMASCO, 2021)	29
Figura 4 – Algoritmo para simulação numérica da combustão	39
Figura 5 – Esquema do combustor experimental (mm). Fonte: (OLIVEIRA, 2023)	48
Figura 6 – Malha de elementos finitos triangulares	50
Figura 7 – Perfil de temperatura experimental à 1 atm. Fonte:(PANEK, 2010) . .	51
Figura 8 – Perfil de temperaturas.	52
Figura 9 – L1 e L2.	53
Figura 10 – Formato da chama a 1 atm.	54
Figura 11 – Comparação dos Coeficientes de Difusão de 4 Espécies na Combustão de C ₂ H ₄ /ar a 1 atm.	55
Figura 12 – Campo de temperatura considerando Lewis unitário.	56
Figura 13 – Campo de temperatura considerando a teoria de Chapman-Enskog. . .	56
Figura 14 – Campo de temperatura considerando o método de Wilke e Lee.	57
Figura 15 – Campo de temperatura considerando a correlação de Fuller.	57

Lista de tabelas

Tabela 1 – Constantes da Equação 3.18, (CREMASCO, 2021)	32
Tabela 2 – Formas particulares da Equação 4.1	38
Tabela 3 – Condições de Contorno	49
Tabela 4 – Número de passos para convergência no regime permanente	50
Tabela 5 – Alturas da chama luminosa e localizações de fixação a 0,482 mg/s, com erros associados.	53

Lista de abreviaturas e siglas

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
MATLAB	Matrix Laboratory
P&D	Pesquisa e Desenvolvimento
CVFEM	<i>Control Volume Finite Element Method</i>
UnB	Universidade de Brasília
C_2H_4	Etileno
CO_2	Monóxido de Carbono
CO_2	Dióxido de Carbono
O_2	Gás Oxigênio
H_2O	Água
N_2	Gás Nitrogênio
CH_4	Metano

Lista de símbolos

Re	Número de Reynolds
ρ	Massa específica do fluido
u	Velocidade do fluido na direção z
v	Velocidade do fluido na direção r
L	Comprimento característico
μ	Viscosidade dinâmica do fluido
$\vec{\nabla}$	Operador nabla (gradiente)
\vec{v}	Velocidade do fluido
∂	Derivada parcial
p	Pressão
\vec{g}	Vetor de forças de campo
$\hat{\tau}$	Tensor de tensão de cisalhamento
\hat{I}	Tensor identidade
Y_i	Fração molar da espécie i
\vec{j}_i	Fluxo de difusão mássica i
$\dot{\omega}_i$	Taxa de geração da espécie i
$\mathcal{D}_{i,M}$	Coefficiente de difusão mássica do componente i
c	Velocidade de reação química
Le_i	Número de Lewis do componente i
λ	Condutividade térmica do fluido
c_p	Capacidade térmica a pressão constante do fluido
h_i	Entalpia específica da espécie i
\dot{q}_r'''	Termo de fonte radiante

T	Temperatura
$h_{i,f}^0$	Entalpia específica de formação
T_{ref}	Temperatura de referência
ϕ	Escalar genérico
Γ_ϕ	Coefficiente de difusão
S_ϕ	Termo de fonte
Δt	Passo de tempo
M	Matriz global
\dot{Q}	Taxa de transferência de calor por radiação
σ	Constante de Stefan-Boltzmann
T_b	Temperatura ambiente
a_{Pi}	Coefficiente de absorção do corpo
p_i	Pressão parcial da espécie i
k_i	Taxa de reação pré-exponencial da espécie i
A_i	Fator de frequência da reação da espécie i
T_{gas}	Temperatura do gás
C_i	Concentração molar da espécie
M_i	Massa molar do componente i
h_c	Entalpia calculada
h_d	Entalpia desejada
p_0	Pressão atmosférica
R_u	Constante universal dos gases perfeitos
\bar{W}	Massa molar média
n_s	Número de espécies químicas
$\bar{c}_{p,i}$	Capacidade térmica a pressão constante média da espécie química i
$\bar{c}_{p,i}$	Capacidade térmica a pressão constante média da espécie química i

X_i	Fração molar da espécie química i
σ_i	Diâmetro de colisão de uma espécie i
$\Omega_{\mu,i}$	Integral de colisão para viscosidade
Θ_{ij}	Coefficiente de transferência de massa entre as espécies químicas i e j
u_{air}	Velocidades de entrada de ar
u_{fuel}	Velocidades de entrada de combustível
$h_{ar K}$	Entalpia do ar à 298 K
$h_{fuel K}$	Entalpia do etileno à 298 K

Sumário

1	INTRODUÇÃO	15
1.1	Contextualização	15
1.2	Metodologia	16
1.3	Objetivos	17
1.3.1	Objetivos específicos	17
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	19
3	BASE TEÓRICA	22
3.1	Combustão	22
3.1.1	Mecanismo de reação global	22
3.1.1.1	Mecanismo BFER com 2 etapas globais	22
3.2	Mecanismo de reação detalhado	22
3.2.1	Chama pré-misturada e não pré-misturada	23
3.2.2	Chama laminar e turbulenta	23
3.2.3	Estrutura da chama	24
3.3	Difusão	24
3.4	Primeira Lei de Fick	25
3.5	Análise simplificada da teoria da cinética dos gases	26
3.5.1	Diâmetro eficaz de colisão ou diâmetro de choque	27
3.5.2	Caminho Livre Médio	27
3.5.3	Velocidade Relativa	28
3.6	O Potencial de Lennard-Jones	29
3.7	Correlações para Estimar o Coeficiente de Difusão em Gases Apolares	30
3.8	Equação de Chapman-Enskog	31
3.9	A Correlação de Fuller, Schetter e Giddings	32
3.10	Relação entre Coeficiente de Difusão e Coeficiente de Difusão de Energia	32
3.11	Equações de conservação	34
3.11.1	Equação da conservação de massa	34
3.11.2	Equação de conservação da quantidade de movimento	34
3.11.3	Equação da conservação de massa das espécies químicas	35
3.11.4	Equação de conservação de energia	36
4	METODOLOGIA DE SOLUÇÃO DO PROBLEMA DE COMBUSTÃO	38

4.1	Equação da energia para o modelo que considera o transporte de espécies detalhado	40
4.2	Cálculo da entalpia	41
4.2.1	Cálculo da radiação	41
4.3	Cálculo da composição de mistura de gases	41
4.3.1	Mecanismo de reação global de passo duplo	41
4.3.2	Esquema de cálculo dos termos de fonte de espécies químicas	44
4.4	Cálculo das temperaturas em função da entalpia e da composição da mistura de gases	46
4.5	Cálculo das propriedades físico-químicas	46
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	48
5.1	Combustor de Thomson	48
5.2	Domínio Computacional e Discretização	49
5.3	Avaliação da eficiência computacional	50
5.4	Perfil de temperaturas	51
5.5	Dimensões e formato da chama	52
5.6	Análise comparativa dos coeficientes de difusão em função da temperatura	55
5.7	Campo de temperaturas	56
5.8	Conclusões	57
	REFERÊNCIAS	59

1 Introdução

1.1 Contextualização

A combustão e o seu controle são essenciais para a existência humana no planeta Terra, sendo a tecnologia mais antiga da humanidade, utilizada por mais de 1 milhão de anos (WARNATZ et al., 2006). Esse fenômeno revolucionou a mobilidade humana, permitindo a exploração terrestre por meio de automóveis com motor a combustão e a superação dos limites do globo terrestre com foguetes químicos. Os sistemas de transporte são baseados quase que completamente em sistemas de combustão e toda a energia elétrica e de propulsão nos aviões são produzidas pela queima a bordo de combustível líquido (TURNS, 2000).

Problemas práticos relacionados ao fenômeno da combustão podem ser classificados em 5 principais áreas (LAW, 2006): energia derivada da combustão, processos de combustão, poluição e saúde, segurança e defesa, e exploração espacial. A combustão é responsável pela conversão de mais de 80% da energia primária (BRÜBACH; DREIZLER; JANICKA, 2007). A queima de combustíveis fósseis é a fonte predominante de energia em todo o mundo, e essa tendência deve persistir devido à conveniência, alta densidade energética e valor comercial desses combustíveis.

As chamas de difusão turbulentas são encontradas em equipamentos industriais, como turbinas a jato e queimadores comerciais (BRANCO, 2013). Nessas chamas, o combustível e o oxidante se misturam durante a combustão. Embora as chamas de difusão turbulentas sejam mais comuns na indústria, as chamas de difusão laminar são as mais estudadas. As informações obtidas a partir do estudo das chamas de difusão laminar podem ser aplicadas para entender os processos de combustão em chamas turbulentas, identificar as reações que influenciam a extinção da chama e determinar as substâncias responsáveis pela formação de poluentes.

Uma dificuldade enfrentada no estudo da combustão é a necessidade de integrar diversos campos de conhecimento, como mecânica dos fluidos, termodinâmica, transferência de calor e cinética química, em um único problema (HOERLLE, 2012). No passado, as investigações relacionadas à combustão estavam principalmente direcionadas à análise da mecânica dos fluidos e à transferência de calor por meio de reações químicas. Para representar o calor envolvido nesses processos, a termodinâmica era utilizada de forma simplificada, considerando as reações químicas como instantâneas. Embora essa abordagem fosse adequada para fenômenos estacionários, mostrava-se insuficiente para sistemas transientes (WARNATZ et al., 2006).

Um desafio comumente observado em sistemas de combustão, como destacado por Westbrook e Dryer (1981), é a propagação da chama. Para abordar essa questão, o uso de modelos químicos detalhados tem apresentado avanços significativos na compreensão da estrutura das chamas. No entanto, em certos casos, é necessário empregar modelos simplificados para a oxidação de combustíveis, que não exigem a mesma sofisticação e complexidade dos mecanismos de reação detalhados nem a extensa lista de espécies químicas associadas.

Nesse contexto, avanços recentes no desenvolvimento de mecanismos cinéticos químicos detalhados têm contribuído significativamente tanto para a compreensão dos fenômenos de combustão quanto para a previsão precisa dos processos envolvidos, como ignição, propagação de chama e características de extinção. Nesse cenário, o etileno tem recebido um amplo interesse de pesquisa nos últimos anos, uma vez que é um intermediário chave na oxidação de alcanos e alcenos superiores, portanto, desempenha um papel importante na química de combustão da maioria dos combustíveis práticos (XU; KONNOV, 2012). Além disso, os combustíveis de hidrocarbonetos no regime de voo hipersônico inferior são vantajosos devido à sua facilidade de manuseio e alto teor de energia volumétrica (YANG et al., 2020).

Embora o hidrogênio seja comumente utilizado como combustível em foguetes, sua baixa densidade de energia em comparação com os hidrocarbonetos líquidos resulta em tanques de combustível volumosos, o que impacta a aerodinâmica das espaçonaves. Diante dessa dificuldade, o etileno se destaca no campo aeroespacial devido à sua densidade consideravelmente maior em relação ao hidrogênio (XU; KONNOV, 2012). Isso possibilita o uso de tanques menores, tornando seu manuseio mais fácil e seguro. Embora a combustão do hidrogênio seja bem compreendida e sua simulação em ambientes práticos, seja mais simples em comparação com os combustíveis de hidrocarbonetos, ainda há muito a ser pesquisado para um entendimento adequado da combustão do etileno. Essa combinação de fatores torna a pesquisa sobre a combustão do etileno de extrema importância no avanço da tecnologia aeroespacial, especialmente no desenvolvimento de sistemas de propulsão eficientes para voos hipersônicos.

1.2 Metodologia

A metodologia empregada neste projeto é a dinâmica dos fluidos computacional, também conhecida como *CFD* (*Computational Fluid Dynamics*). Essa abordagem consiste na análise de sistemas que envolvem o fluxo de fluidos, transferência de calor e fenômenos associados, como reações químicas, por meio de simulações realizadas em computador.

A partir da década de 1960, a indústria aeroespacial incorporou técnicas de *CFD* nos projetos P&D, fabricação de aeronaves e motores a jato (VERSTEEG; MALALA-

SEKERA, 2007). Esses métodos têm sido aplicados no projeto de motores de combustão interna, câmaras de combustão de turbinas a gás e fornos.

Seguindo essa mesma lógica, a simulação computacional de chamas desempenha um papel fundamental como uma ferramenta de estudo. Por meio dessa abordagem, é possível realizar uma análise detalhada dos fenômenos envolvidos e das propriedades das misturas reagentes, podendo proporcionar resultados consistentes com a realidade e, ao mesmo tempo, com um baixo custo econômico. Assim, a simulação computacional de chamas se destaca como uma solução viável para avançar o conhecimento e compreensão dos processos de combustão. Entretanto, as complexidades presentes nos mecanismos detalhados de reações ainda são grandes desafios para a modelagem de processos de combustão, devido ao elevado tempo computacional exigido (VERSTEEG; MALALA-SEKERA, 2007). Dessa forma, a simulação deve buscar um equilíbrio entre mecanismos detalhados o suficiente para reproduzir dados experimentais e simplificados o suficiente para fornecer uma boa relação entre precisão e tempo de simulação. Essa é a meta dos vários mecanismos reduzidos de combustão disponíveis na literatura.

Na modelagem CFD da combustão gasosa de etileno, as equações de Navier-Stokes são utilizadas para o cálculo do campo de velocidade (laminar incompressível), uma equação de conservação da energia baseada na entalpia é utilizada para o cálculo do campo de temperatura, a composição da mistura de gases é calculada pela solução de um conjunto de equações de conservação para fração de massa de espécies químicas e um mecanismo de reação detalhado que incorpora os efeitos da mudança de pressão é empregado para tratar a cinética química. As propriedades físico-químicas das equações de conservação também incorporam o efeito da variação de pressão. Pelo exposto, o estudo teórico da combustão de etileno requer a programação de mecanismos de reação detalhados, assim como a programação de rotinas computacionais para o cálculo de propriedades termofísicas (CUNHA; FERREIRA, 2020).

1.3 Objetivos

O principal objetivo deste trabalho é aprimorar a modelagem do termo de difusão em chamas difusivas laminares. Isso será alcançado por meio da análise aprofundada das teorias de Chapman-Enskog, métodos de Wilke e Lee, bem como a correlação de Fuller, Schetter e Giddings.

1.3.1 Objetivos específicos

- Incluir na modelagem física e matemática do processo de combustão uma descrição detalhada da modelagem do coeficiente de difusão.

-
- Destacar as equações e técnicas específicas utilizadas para aprimorar o cálculo dos coeficientes de difusão, considerando as teorias de Chapman-Enskog, métodos de Wilke e Lee, bem como a correlação de Fuller, Schetter e Giddings.
 - Realizar uma revisão aprofundada da teoria de Chapman-Enskog, o métodos de Wilke e Lee, e a correlação de Fuller para uma aplicação no contexto da simulação de chamas difusivas laminares;
 - Descrever de forma detalhada a modelagem física e matemática do processo de combustão, destacando as equações e técnicas utilizadas na simulação computacional;
 - Utilizar o *software* GAMBIT para criar a geometria e malha para a simulação numérica da combustão;
 - Realizar comparações e análises de validação, confrontando os resultados obtidos na simulação computacional com dados experimentais disponíveis na literatura, visando avaliar a precisão e confiabilidade do modelo desenvolvido.

2 Revisão Bibliográfica

A modelagem e simulação de chamas de difusão laminar representam um desafio significativo na compreensão dos fenômenos complexos associados à combustão. Nessa conjuntura, (XU; SMOOKE, 1993) introduziram e aplicaram o método de Newton com variáveis primitivas em um contexto de fluxos reativos. A metodologia proposta por XU; SMOOKE é avaliada em comparação com duas abordagens tradicionais: o método de Newton baseado na função de corrente-vorticidade e o algoritmo SIMPLER. O estudo se concentrou na resolução de um sistema de equações elípticas que governam uma chama de difusão laminar metano-ar axis simétrica, modelada pela aproximação da folha de chama. Vale destacar que, a aproximação da folha de chama requer que o número de Lewis seja unitário. Além disso, essa metodologia se destacou na época de sua publicação por sua eficiência computacional, possibilitando o cálculo de chamas multidimensionais com mecanismos de reação detalhados, mesmo em casos nos quais o número de Lewis foge da convenção unitária.

Nesse cenário, o estudo conduzido por CLARAMUNT et al. (2004) se destacou ao explorar, por meio de simulações numéricas detalhadas, como o nível de pré-mistura impacta as características de chamas laminares, considerando número de Lewis fixos e não unitários. A pesquisa abrangeu uma ampla gama de condições, priorizando especialmente a análise da formação de poluentes, fornecendo conhecimentos para otimizar o design de combustores mais eficientes e ecologicamente sustentáveis. A metodologia incorporou a avaliação de diferentes modelos matemáticos, incluindo mecanismos químicos variados, efeitos de radiação, modelos de transporte de massa e condições de contorno de entrada. Os resultados proporcionam visões cruciais, evidenciando a importância de considerar números de Lewis não unitários na modelagem de transporte. O uso de números de Lewis fixos significa uma redução de 25% no tempo de CPU, por outro lado, a consideração de um número de Lewis unitário superestima notavelmente a temperatura máxima na linha central e a altura da chama.

Posteriormente, um framework computacional chamado *laminarSMOKE*, foi desenvolvido por CUOCI et al. (2013), voltado para a modelagem de chamas laminares multidimensionais com mecanismos cinéticos detalhados em fase gasosa. Essa ferramenta utiliza a técnica de divisão de operadores e implementa o código aberto *OpenFOAM* para gerenciar a discretização espacial das equações governantes em geometrias complexas. A validação do código foi realizada por meio de simulações de chamas em cofluxo em estado estacionário, alimentadas com diferentes gases, e posteriormente, aplicaram-no à modelagem de chamas laminares de cofluxo C_2H_4/CH_4 (CUOCI et al., 2013). Os resultados numéricos obtidos contribuem significativamente para o entendimento da combustão e

aprimoramento do design de equipamentos industriais e domésticos. No entanto, é importante notar que o termo difusivo foi simplificado como um coeficiente de difusão médio de mistura das espécies individuais.

Um estudo conduzido pelo autor [DASGUPTA \(2015\)](#), assim como de Xu e Smooke ([1993](#)), também realizou uma simulação numérica de chamas difusivas laminares com simetria radial, incorporando a presença de fuligem e utilizando um código de volume finito no contexto do *OpenFOAM*. Essa pesquisa abordou análises paramétricas com o intuito de explorar os impactos da química gasosa, modelos de fuligem e radiação. Os resultados obtidos destacaram a eficácia do modelo de fuligem, enfatizando sua robustez, escalabilidade e aplicabilidade em diversas configurações de chamas laminar ([DASGUPTA, 2015](#)). Contudo, é relevante notar que, o número de Lewis foi assumido como unitário para todos os componentes, a fim de amenizar o efeito do fluxo de inter-difusão, uma suposição que zera o termo adicional na equação de energia.

Além disso, a importância do formato dos combustores na simulação numérica é necessária para compreender e otimizar os processos de combustão. Uma modelagem numérica precisa do formato do combustor permite analisar como diferentes geometrias afetam a eficiência da queima, a distribuição térmica e a emissão de poluentes. Nesse sentido, o estudo conduzido por [XU et al. \(2018\)](#) simulou com cinco modelos numéricos distintos de parede do combustor, incluindo o combustor usado nesse trabalho de conclusão de curso. Foi investigado experimental e numericamente a anexação de uma chama de difusão laminar coflow CH_4/ar . O mecanismo utilizado foi o *GRI-Mech 3.0* ([SMITH et al., 1999](#)) reduzido, que contém 36 espécies e 219 reações. O estudo contribui para a compreensão de que a geometria do combustor influencia o ponto de anexação da chama no tubo de combustível.

Nesse sentido, a fim de promover inovação e colaboração em estudos relacionados à dinâmica de fluidos e processos térmicos, o artigo de [KAMMA; SUVANJUMRAT \(2023\)](#) aborda o desenvolvimento de um novo modelo de coeficiente de difusão em massa para simulação de chamas pré-misturadas laminar utilizando o *OpenFOAM*. O objetivo principal foi reduzir o tempo computacional, proporcionando uma ferramenta mais eficiente para análises complexas de combustão. O estudo baseia-se em uma teoria preliminar derivada para construir variáveis associadas, corrigida com base em um modelo de referência que utiliza a difusão binária de Chapman-Enskog. Vale destacar a eficiência do modelo proposto, que permite realizar simulações mais complexas de combustão com considerável redução no tempo de processamento, tornando-se uma ferramenta útil para análises em domínios complexos.

Em outra abordagem, o artigo de [CUNHA; VERAS \(2021\)](#) aborda o desenvolvimento de um novo código de simulação tridimensional para analisar chamas laminares não pré-misturadas de metano-ar. Semelhante a este trabalho, o código foi baseado no método

de elementos finitos de volume de controle (*CVFEM*) e implementado no ambiente *MATLAB*. Foi utilizado um modelo de folha de chama aprimorado, que incorpora a equação de entalpia e a equação de fração de mistura, para representar o processo de combustão, incluindo perdas de calor radiativas na equação de energia. Ao comparar as previsões numéricas tridimensionais com dados experimentais, o artigo demonstra melhorias significativas na concordância entre os resultados, especialmente em relação à estrutura da chama, frações de massa de espécies e distribuição de temperatura.

Apesar das modelagens mais avançadas considerarem números de Lewis distintos da unidade, é pertinente observar que o cálculo do coeficiente de difusão nessas abordagens, no máximo, emprega a teoria de Chapman-Enskog. Entretanto, existem métodos mais precisos para calcular o coeficiente de difusão binária, como os apresentados por Wilke e Lee, ou o de Fuller, Schetter e Giddings. Notavelmente, não foi identificada a aplicação desses últimos dois métodos na Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD). Portanto, este estudo propõe a investigação e avaliação dos métodos de Wilke e Lee, assim como o de Fuller, Schetter e Giddings, para o cálculo do coeficiente de difusão. O etileno, sendo um combustível de interesse para a indústria aeroespacial, torna-se um cenário relevante para testar a eficácia desses métodos mais avançados.

3 Base Teórica

3.1 Combustão

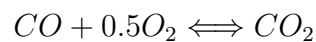
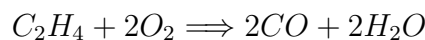
A definição mais abrangente de combustão, conforme apresentada em [TURNES \(2000\)](#), é o processo de oxidação rápida que gera calor e, em alguns casos, também produz luz. No entanto, para o escopo da nossa análise sobre a combustão do etileno, estaremos nos concentrando apenas na combustão de oxidação rápida. As reações químicas desempenham um papel crucial nesse processo, convertendo a energia armazenada nas ligações químicas em energia térmica, que pode ser aproveitada em diversas aplicações industriais, como motores de combustão interna e propulsores de foguetes.

3.1.1 Mecanismo de reação global

Mecanismo de reação, em química, é uma sequência passo-a-passo de reações elementares através dos quais a transformação química total acontece. De outro modo, a reação global acontece via um conjunto de processos químicos descritos via etapas ou reações elementares ([MERLO, 2009](#)).

3.1.1.1 Mecanismo BFER com 2 etapas globais

O mecanismo do seguinte trabalho será o BFER com duas etapas globais. Este modelo simplificado envolve 6 espécies em 2 reações (oxidação de C_2H_4 e equilíbrio de $CO-CO_2$).



O modelo foi testado e validado para vários índices de equivalência, mas é ajustado para uma pressão de operação de 3 bar ([CERFACS, 2017](#)). Mais detalhes podem ser encontrados na seção [4.3.1](#).

3.2 Mecanismo de reação detalhado

Mecanismo de reação detalhada, também conhecido como mecanismo cinético detalhado, refere-se a um conjunto de equações que descrevem as etapas elementares envolvidas em uma reação química complexa. Essas etapas elementares representam as interações entre as espécies químicas envolvidas na reação, incluindo as ligações químicas que são

formadas e quebradas durante o processo. Um mecanismo de reação detalhada geralmente contém inúmeras reações elementares, cada uma com seus próprios coeficientes de taxa (TURNES, 2000). Esses coeficientes de taxa descrevem a velocidade com que as reações ocorrem e são determinados com base em experimentos laboratoriais e cálculos teóricos.

3.2.1 Chama pré-misturada e não pré-misturada

De forma geral, um sistema de combustão é composto por dois reagentes: o combustível e o oxidante, os quais devem ser combinados e misturados ao nível molecular antes que a reação ocorra. No entanto, o mecanismo de reação pode influenciar a combustão. É necessário que pelo menos um dos reagentes esteja na fase líquida ou gasosa para que as moléculas possam se dispersar entre as moléculas do outro reagente (MCALLISTER; CHEN; FERNANDEZ-PELLO, 2011). Devido à importância dessa mistura molecular, o sistema de combustão se comporta de maneira diferente, dependendo se os reagentes são pré-misturados ou não. Em um sistema pré-misturado, os reagentes são completamente misturados antes do início da reação. Por outro lado, em um sistema não pré-misturado, os reagentes estão inicialmente separados e depois se unem por meio do processo de difusão molecular, seguido pela ocorrência da reação.

3.2.2 Chama laminar e turbulenta

A chama também é caracterizada pela natureza do escoamento, que pode ser classificada como laminar ou turbulenta. No caso de um escoamento laminar, diferentes linhas de corrente são claramente visíveis na estrutura, com um movimento convectivo organizado. Por outro lado, em um escoamento turbulento, essas linhas de corrente não existem, e as quantidades de fluxo variam de maneira aleatória no tempo em qualquer ponto do espaço (DENG, 2002).

De acordo com Versteeg e Malalasekera (2007), essa característica é definida pelo número de Reynolds (Eq. 3.1), que é uma medida relativa à relação entre as forças de inércia (associadas ao efeito convectivo) e as forças viscosas. Quando o número de Reynolds está abaixo do valor crítico, o escoamento é suave e as camadas adjacentes do fluido deslizam de forma organizada. Nesse caso, se as condições de contorno forem constantes no tempo, o escoamento é considerado permanente, sendo denominado escoamento laminar.

$$Re = \frac{\rho u L}{\mu} \quad (3.1)$$

No entanto, quando o número de Reynolds ultrapassa o valor crítico, ocorre uma série de eventos complexos que levam a uma mudança radical nas características do escoamento. No estado final, o comportamento do escoamento se torna aleatório e caótico.

3.2.3 Estrutura da chama

A superfície da chama é definida como a região onde o combustível e o oxidante se encontram em proporções estequiométricas. Na figura 1, são apresentadas algumas características essenciais da chama laminar sem pré-mistura. À medida que o combustível flui ao longo do eixo da chama, ele se difunde radialmente para fora, enquanto o oxidante, como o ar, difunde-se radialmente para dentro (TURNES, 2000).

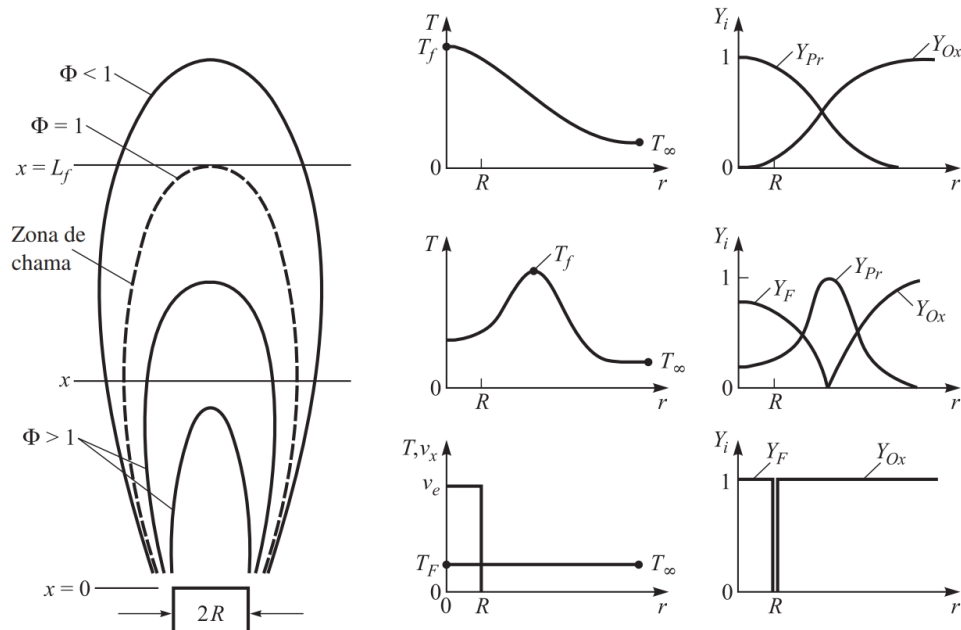


Figura 1 – Estrutura de uma chama laminar não pré-misturada. (TURNES, 2000)

A região onde ocorrem as reações químicas, em geral, possui uma espessura muito pequena. Como visto na Fig. 1, a zona de reação, onde ocorrem as reações químicas em alta temperatura, se estende até a ponta da chama e possui seção transversal normal ao eixo da chama com formato anular.

Chamas pré-misturadas geralmente apresentam tamanho menor e intensidade localmente maior, enquanto chamas não pré-misturadas têm comprimento e volume maiores e temperatura mais elevada a partir das extremidades em direção ao centro da chama (DIAS, 2011).

3.3 Difusão

A difusão é um processo que ocorre quando há uma diferença significativa na concentração de um soluto entre duas áreas adjacentes, e a força motriz por trás desse movimento é o gradiente de concentração do soluto (CREMASCO, 2021). A difusão é um fenômeno que acontece quando uma substância se espalha de uma área onde está

mais concentrada para uma área onde está menos concentrada. Isso acontece porque as moléculas da substância naturalmente se movem para se distribuir de maneira uniforme.

3.4 Primeira Lei de Fick

A Primeira Lei de Fick, representada pela Equação 3.2, descreve o fenômeno da difusão de uma espécie química A em um meio (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2006). Essa lei é fundamental para compreender como a concentração dessa espécie varia em relação à posição no espaço, especificamente na direção z . A equação é formulada da seguinte maneira:

$$J_{A,z} = -D_{AA} \frac{dC_A}{dz} \quad (3.2)$$

O fluxo difusivo ($J_{A,z}$) indica a taxa de movimento vertical das moléculas da espécie química A , contribuindo para o transporte nessa direção. O coeficiente de difusão (D_{AA}) é particular, descrevendo a capacidade de autodifusão da espécie A em um meio composto majoritariamente por essa mesma substância. O coeficiente D_{AA} reflete a facilidade com que as moléculas de A se deslocam pelo meio. Por último, $\frac{dC_A}{dz}$ representa a variação da concentração de A em relação à posição no espaço, especificamente na direção vertical z , medindo como a concentração de A se altera ao longo desse percurso vertical.

O sinal negativo na equação indica que o fluxo de A é oposto à direção em que a concentração de A está diminuindo. Em outras palavras, as moléculas de A se movem da região de maior concentração para a de menor concentração, conforme o gradiente de concentração.

Além disso, podemos relacionar o coeficiente de difusão D_{AA} com o caminho livre médio (λ) e a velocidade média molecular (Ω) por meio da seguinte equação (CREMASCO, 2021):

$$D_{AA} = \frac{1}{3} \Omega \lambda \quad (3.3)$$

Essa equação revela que o coeficiente de difusão está relacionado ao produto da velocidade média molecular pelo caminho livre médio. O caminho livre médio (λ) é a distância média que uma molécula de A percorre entre colisões, e a velocidade média molecular (Ω) está relacionada à velocidade média das moléculas no meio.

Além disso, podemos interpretar o coeficiente de difusão D_{AA} como uma medida da "Resistência à Difusão" no meio, conforme representado por:

$$D_{AA} \equiv \frac{1}{\text{Resistência à Difusão}} \quad (3.4)$$

Essa interpretação enfatiza que o coeficiente de difusão está inversamente relacionado à resistência que as moléculas de A enfrentam ao se moverem no meio. Quanto menor for a resistência à difusão, maior será o coeficiente de difusão e, portanto, maior será a taxa de difusão de A no meio (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2006).

A Equação 3.2 é a expressão fundamental que governa a difusão de espécies químicas em um meio, ela permite quantificar como a concentração de uma espécie química se propaga através do espaço e é essencial para a compreensão de processos difusivos em sistemas naturais e industriais.

3.5 Análise simplificada da teoria da cinética dos gases

As suposições fundamentais para a construção dessa teoria são consequências de: (CREMASCO, 2021)

1. Um gás ideal puro e constituído por inúmeras moléculas iguais de massa m ;
2. As moléculas são esferas rígidas de diâmetro d ;
3. Todas as moléculas movem-se paralelas entre si no seu eixo coordenado.
4. Todas as moléculas são dotadas de mesma velocidade;

Sendo a velocidade média molecular dada por:

$$\Omega = \sqrt{\frac{8kT}{m\pi}} = \sqrt{\frac{8RT}{M\pi}} \quad (3.5)$$

onde:

- k é a constante de Boltzmann,
- T representa a temperatura do gás,
- R é a constante dos gases e
- M denota a massa molar do gás.

Essas suposições são cruciais para a formulação e compreensão da teoria da cinética dos gases, que descreve o comportamento de sistemas gasosos em termos de movimento molecular e interações entre as moléculas. Elas estabelecem uma base simplificada, mas valiosa, para modelar e analisar o comportamento de gases ideais em diversas condições e contextos.

3.5.1 Diâmetro eficaz de colisão ou diâmetro de choque

O conceito de "diâmetro efetivo de colisão" ou "diâmetro de choque" descreve as condições em que ocorrerá uma colisão entre moléculas gasosas. Em particular, consideramos uma situação em que uma molécula está em movimento, enquanto a outra está em repouso.

A colisão entre essas duas moléculas ocorrerá somente se a distância entre os centros das duas moléculas for menor ou igual ao diâmetro das moléculas em questão. Em outras palavras, a colisão acontece quando a distância entre os centros das moléculas é igual ou menor que o seu diâmetro real. Isso é expresso pela seguinte relação, $d^* \leq d$.



Figura 2 – representação do critério de colisão. Fonte: (CREMASCO, 2021)

Se a distância entre as moléculas for maior do que o seu diâmetro, não haverá colisão entre elas, pois elas não chegarão perto o suficiente para interagir de maneira efetiva. Essa condição ajuda a determinar a taxa de colisões entre as partículas gasosas, que por sua vez influencia a taxa de reações químicas e outras propriedades termodinâmicas dos gases.

3.5.2 Caminho Livre Médio

O conceito de caminho livre médio (λ) representa a distância média que uma molécula percorre antes de entrar em iminência de colisão com outra molécula (SILVA; BRITTO; FERREIRA, 2022). A análise do caminho livre médio é essencial para descrever como um soluto se difunde em uma mistura gasosa.

A definição do caminho livre médio pode ser abordada da seguinte forma:

1. Se uma molécula se desloca com uma velocidade média molecular (Ω) durante um intervalo de tempo Δt , ela percorrerá uma distância que é equivalente ao caminho livre de colisão, dado por $\Omega \cdot \Delta t$.

2. Considerando que todo o percurso da molécula é caracterizado por colisões, a molécula experimentará um número z_i de colisões durante esse intervalo de tempo. Agora, o número de colisões sofridas por uma molécula, dada por n_0 (moléculas por unidade de volume do cubo), é calculado como $z \cdot \Delta t$.

Assim, o caminho livre médio (λ) pode ser definido como a relação entre a distância percorrida pela molécula sem colisões e o número de colisões (CREMASCO, 2021):

$$\text{Caminho Livre Médio} = \frac{\text{Distância percorrida sem choques}}{\text{Número de colisões}}$$

ou de forma mais concisa:

$$\lambda = \frac{\Omega \Delta t}{z \Delta t} = \frac{\Omega}{z} \quad (3.6)$$

A partir daí, é possível expressar o caminho livre médio em termos de variáveis termodinâmicas do sistema. Utilizando a equação de estado dos gases ideais, $PV = nRT$, onde P é a pressão, V é o volume, n é a quantidade de substância, R é a constante dos gases, e T é a temperatura, e relacionando n_0 com o número de Avogadro (N_0) e o diâmetro efetivo de colisão (d), obtemos:

$$\lambda = \frac{RT}{N_0 \sqrt{2} \pi d^2 P} \quad (3.7)$$

Esta expressão relaciona o caminho livre médio ao estado termodinâmico do gás, destacando como o caminho livre médio é influenciado pela temperatura, pressão, e características das moléculas, como seu diâmetro efetivo de colisão (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2006).

3.5.3 Velocidade Relativa

Um aspecto importante na teoria da cinética dos gases é a compreensão da velocidade relativa das moléculas, especialmente quando se aproximam da iminência de uma colisão. Para descrever essa velocidade relativa, é necessário levar em consideração não apenas a velocidade média das moléculas (Ω), mas também as posições relativas em que duas moléculas se encontram antes de uma colisão (CREMASCO, 2021).

A velocidade relativa (v_r) entre duas moléculas é representada pela seguinte equação:

$$v_r = \Omega \sqrt{2(1 - \cos \psi)} \quad (3.8)$$

Nesta equação, ψ é um ângulo que descreve a orientação das moléculas antes de uma colisão. Quando as moléculas estão se movendo uma em direção à outra, o ângulo ψ é de 90 graus, o que significa que as moléculas estão se aproximando de maneira perpendicular. Sob essa hipótese ($\psi = 90^\circ$), a equação para a velocidade relativa se simplifica para:

$$v_r = \Omega\sqrt{2} \quad (3.9)$$

Essa equação nos fornece um valor numérico preciso para a velocidade relativa em um cenário de colisão entre moléculas em um gás ideal.

3.6 O Potencial de Lennard-Jones

É importante ressaltar que as moléculas possuem cargas elétricas que resultam em forças atrativas e repulsivas entre pares soluto/solvente.

Considerando uma molécula parada e outra se aproximando, a última atingirá uma distância limite, σ_{AB} , na qual é repelida pela primeira. As energias de atração e repulsão, como pode ser observado (Fig. 3), dependem da distância entre as moléculas, o que caracteriza uma energia "potencial" de atração/repulsão (LOSEY; SADUS, 2019). No ponto onde a energia é nula, temos o que é chamado de diâmetro de colisão.

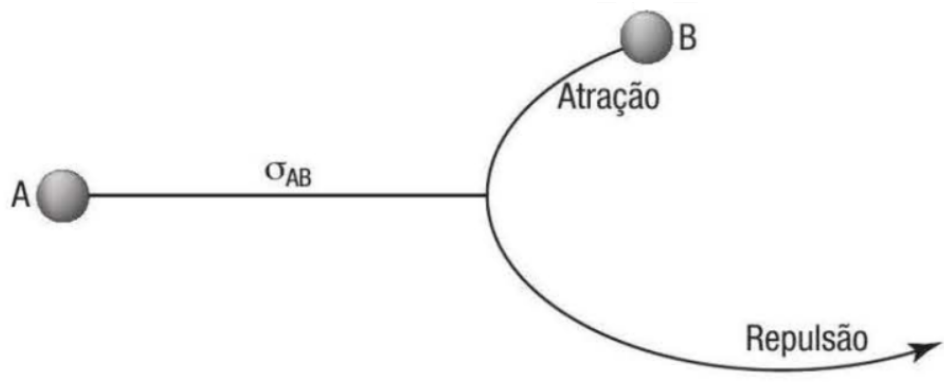


Figura 3 – Colisão entre duas moléculas considerando-se a atração e repulsão entre elas.
Fonte: (CREMASCO, 2021)

A expressão clássica que descreve essa energia potencial de atração/repulsão é conhecida como o potencial de Lennard-Jones (6-12), e é definida da seguinte forma:

$$\varphi_{AB}(r) = 4\epsilon_{AB} \left[\left(\frac{\sigma_{AB}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{AB}}{r} \right)^6 \right] \quad (3.10)$$

onde:

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} \quad (3.11)$$

$$\varepsilon_{AB} = \sqrt{\varepsilon_A \varepsilon_B} \quad (3.12)$$

Nessa equação, σ_i (para $i = A$ ou B) representa um diâmetro característico da espécie química i , diferente do seu diâmetro molecular ou atômico. Este último é considerado como o diâmetro de colisão. O parâmetro ε_{AB} representa a energia máxima de atração entre duas moléculas (CREMASCO, 2021).

3.7 Correlações para Estimar o Coeficiente de Difusão em Gases Apolares

O cálculo do coeficiente de difusão (D_{AB}) para pares de gases apolares é uma tarefa importante na físico-química, pois fornece informações fundamentais sobre a difusão de moléculas nesses sistemas. A abordagem tradicional para estimar o coeficiente de difusão é baseada na análise da função da energia potencial de Lennard-Jones, que origina o chamado "diâmetro de colisão."

Essa abordagem resulta na seguinte equação para o coeficiente de difusão (POLING; PRAUSNITZ; O'CONNELL, 2001):

$$D_{AB} = 1,053 \times 10^{-3} \frac{T^{3/2}}{P\sigma_{AB}^2} \left[\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right]^{1/2} \quad (3.13)$$

Nesta equação, observamos uma tentativa de correção em relação ao resultado obtido a partir da teoria cinética simplificada dos gases. Qualitativamente, a correção não altera a natureza do resultado (CREMASCO, 2021).

Entretanto, uma análise dos desvios relativos revela que essa expressão ainda carece de um fator multiplicativo, aproximadamente igual a 2. Isso nos leva a propor a seguinte forma revisada para o coeficiente de difusão:

$$D_{AB} = b \times 10^{-3} \frac{T^{3/2}}{P\sigma_{AB}^2} \left[\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right]^{1/2} \quad (3.14)$$

Nesta nova formulação, o coeficiente de difusão (D_{AB}) é multiplicado por um fator de correção (b), que ajuda a melhor ajustar a estimativa do coeficiente de difusão aos resultados experimentais. Essa correção é para garantir que o modelo teórico esteja conforme as observações práticas, tornando a estimativa mais precisa e aplicável a sistemas de gases apolares.

3.8 Equação de Chapman-Enskog

A equação de Chapman-Enskog é uma contribuição para a teoria cinética dos gases que foi desenvolvida de forma independente por Chapman e Enskog. Essa abordagem rigorosa possibilitou a obtenção de coeficientes de transporte com base na energia potencial das moléculas (PRESENT, 1968). Um desses coeficientes importantes é o coeficiente de difusão (D_{AB}) para pares de gases apolares.

A equação que descreve o coeficiente de difusão é a seguinte:

$$D_{AB} = b \times 10^{-3} \frac{T^{3/2}}{P\sigma_{AB}^2\Omega_D} \left[\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right]^{1/2} \quad (3.15)$$

Onde b é uma constante com valor de 1,858 e Ω_D é o parâmetro denominado integral de colisão. Essa integral está associada à energia máxima de atração entre as moléculas A e B e é uma função da temperatura (NEUFELD; JANZEN; AZIZ, 1972). A integral de colisão expressa a dependência do diâmetro de colisão com a temperatura, sendo inversamente proporcional a esta.

Wilke e Lee (1955) propuseram a seguinte expressão para o valor da constante b :

$$b_{AB} = 2,17 - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2} \quad (3.16)$$

Essa expressão para b pode ser substituída na equação anterior, fornecendo uma correlação para a estimativa do coeficiente de difusão em gases. Essa correlação é aplicável quando pelo menos uma das espécies na mistura tem uma massa molar superior a 45 g/mol (WILKE; LEE, 1955).

A correlação final para o coeficiente de difusão é, portanto:

$$D_{AB} = \left[2,17 - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2} \right] \times 10^{-3} \frac{T^{3/2}}{P\sigma_{AB}^2\Omega_D} \left[\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right]^{1/2} \quad (3.17)$$

Além disso, (NEUFELD; JANZEN; AZIZ, 1972) propuseram uma correlação para o cálculo de Ω_D :

$$\Omega_D = \frac{A}{T^{*B}} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + \frac{G}{\exp(HT^*)} \quad (3.18)$$

Onde a temperatura reduzida T^* , é definida como:

$$T^* = \frac{kT}{\varepsilon_{AB}} \quad (3.19)$$

Aqui, ε_{AB} representa a energia máxima de atração, e os valores individuais de ε_i/k são obtidos a partir de correlações específicas. As constantes na equação de Ω_D são fornecidas na tabela a seguir:

Tabela 1 – Constantes da Equação 3.18, (CREMASCO, 2021)

A=1,06036	D=0,47635	G=1,76474
B=0,15610	E=1,03587	H=3,89411
C=0,1930	F=1,52996	

3.9 A Correlação de Fuller, Schetter e Giddings

As correlações estabelecidas por Chapman-Enskog e Wilke-Lee, conforme formuladas na Equação (3.15), seguem uma abordagem teórica que considera correções nos coeficientes de difusão com base em parâmetros termodinâmicos. No entanto, a correlação empírica proposta por Fuller, Schetter e Giddings (1966) adota uma formulação original, corrigindo-a em relação à temperatura, como segue:

$$D_{AB} = 1,0 \times 10^{-3} \frac{T^{1,75}}{P d_{AB}^2} \left[\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right]^{1/2} \quad (3.20)$$

Nessa equação, a temperatura (T) é medida em kelvin (K), a pressão (P) em atmosferas (atm), e o resultado do coeficiente de difusão (D_{AB}) é expresso em centímetros quadrados por segundo (cm^2/s). O diâmetro d_{AB} é definido da seguinte forma:

$$d_{AB} = \left(\sum v \right)_A^{1/3} + \left(\sum v \right)_B^{1/3} \quad (3.21)$$

Na definição (3.21), a grandeza $(\sum v)_i$, para $i = A$ ou B , é um volume associado à difusão da molécula A . Esse volume, que será aqui identificado como *volume de Fuller, Schetter e Giddings*, para moléculas simples e complexas (CREMASCO, 2021).

3.10 Relação entre Coeficiente de Difusão e Coeficiente de Difusão de Energia

O coeficiente de difusão de uma espécie química A em uma mistura B , denotado por D_{AB} , está relacionado ao coeficiente de difusão de energia (α) por meio do número de Lewis ($Le = \alpha/D_{AB}$) (ASPDEN; DAY; BELL, 2011). Simplificar o cálculo do coeficiente de difusão é possível com a hipótese de número de Lewis unitário, isto é, $Le = \alpha/D_{AB} = 1$. Com essa hipótese, o cálculo do coeficiente pode ser realizado como $\rho D_{AB} = k/c_p$. Nesse caso, o coeficiente de difusão perde sua sensibilidade à pressão. Além disso, quando o número de Lewis é unitário, a equação de conservação da energia indica que o transporte

de energia devido à difusão de espécies químicas se torna nulo, a menos de espécies muito leves.

A teoria de Chapman-Enskog fornece expressões para propriedades de transporte com base na energia potencial intermolecular, que é uma consideração complexa para partículas reais (PRESENT, 1968). No entanto, uma aproximação razoável para interações entre moléculas apolares é fornecida pelo potencial de Lennard-Jones, também conhecido como potencial 6-12 (LOSEY; SADUS, 2019). Utilizando a teoria de Chapman-Enskog e o potencial de Lennard-Jones, é possível calcular, de forma aproximada, o efeito da interação entre moléculas reais por meio do parâmetro chamado integral de colisão (Ω), que engloba todos os eventos de colisão possíveis. Essa integral de colisão está associada à energia máxima de atração entre duas moléculas e expressa a dependência do diâmetro de colisão (σ_{AB}) com a temperatura.

De acordo com essa teoria, é possível calcular a viscosidade dinâmica (em kg/m-s), a condutividade térmica (em W/m-K) e o coeficiente de difusão binário (em m²/s) pelas equações apresentadas. As integrais de colisão para a viscosidade ($\Omega_{\mu,k}$) e para a difusividade ($\Omega_{D,AB}$) em gases apolares, estão disponíveis em BIRD; STEWART; LIGHTFOOT (2006) e LAW (2010).

$$\mu_k = 2,6693 \times 10^{-6} \frac{(W_k T)^{0,5}}{\sigma_k^2 \Omega_{\mu,k}} \quad (3.22)$$

$$k_k = \mu_k \frac{c_{p,k} + \frac{5}{4}}{W_k} \quad (3.23)$$

$$D_{kj} = b_{kj} T^{3/2} \frac{(1/W_k + 1/W_j)^{1/2}}{p_{atm} \sigma_{kj}^2 \Omega_{D,kj}} \quad (3.24)$$

Onde $\sigma_{kj} = (\sigma_k + \sigma_j)/2$ e p_{atm} é a pressão termodinâmica em atmosfera (considerada constante sobre o escoamento = 101325Pa).

Em relação às constantes utilizadas, Bird (2006) adotou $b_{kj} = 1.8583 \times 10^{-7}$ na Equação (3.24), um valor amplamente empregado na literatura e adequado para uma primeira aproximação. No entanto, Wilke and Lee (1955) propuseram uma expressão empírica para o cálculo do parâmetro b_{AB} em função dos pesos moleculares, aumentando a precisão da Equação (3.24). Com base no trabalho de Wilke and Lee (1955), Cremasco (2021) apresentou a seguinte equação para o cálculo de D_{AB} em m²/s:

Em Bird (2006) e Law (2010) foi considerado $b_{kj} = 1.8583 \times 10^{-7}$ para Eq. (3.24), que é o valor mais utilizado na literatura e adequado para primeira aproximação. Porém, em Wilke and Lee (1955) foi proposta uma expressão empírica para o cálculo do parâmetro b_{AB} em função dos pesos moleculares, que melhora a precisão da Eq (3.24), algo não utilizado em simulações CFD. Baseado no trabalho de Wilke and Lee (1955), Cremasco (2021) apresentou a seguinte equação de b_{AB} para o cálculo de D_{AB} em m²/s:

$$b_{AB} = [2.17 - 0.5(1/W_A + 1/W_B)^{1/2}] \times 10^{-7} \quad (3.25)$$

A viscosidade dinâmica e a condutividade térmica da mistura gasosa podem ser calculadas conforme as equações mencionadas. O coeficiente de difusão binário efetivo (m^2/s) é obtido pela equação (3.28). Todas essas equações foram derivadas por Bird (2006).

$$\mu = \sum_{A=1}^n \frac{X_A \mu_A}{\sum_{B=1}^n X_B \Theta_{AB}} \quad (3.26)$$

$$k = \sum_{k=1}^n \frac{X_A k_A}{\sum_{B=1}^n X_B \Theta_{AB}} \quad (3.27)$$

$$D_{AB} = \frac{1 - X_A}{\sum_{A \neq 1}^n X_B / D_{AB}} \quad (3.28)$$

Onde x_A é a fração molar e Θ_{AB} é representado por:

$$\Theta_{AB} = \frac{[1 + (\mu_A/\mu_B)^{0,5}(W_A/W_B)^{0,5}]^2}{[8(1 + W_A/W_B)]^{0,5}} \quad (3.29)$$

3.11 Equações de conservação

O conjunto de equações que governa o escoamento reativo leva em consideração a conservação da massa total (continuidade), o transporte de espécies químicas, quantidade de movimento linear e energia. As equações de estado para gases ideais e modelos para propriedades termodinâmicas e de transporte são usados para fechar o sistema (HOERLLE, 2015).

3.11.1 Equação da conservação de massa

A equação de conservação de massa de um sistema, também chamada de continuidade, é expressa como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (3.30)$$

onde ρ é a densidade da mistura e \vec{v} é o vetor velocidade do escoamento (WHEATCRAFT, 2008).

3.11.2 Equação de conservação da quantidade de movimento

A conservação da quantidade de movimento em um escoamento é governada pela equação de *Navier-Stokes*:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \right) = -\vec{\nabla} p + \rho \vec{g} + \vec{\nabla} \cdot \hat{\tau} \quad (3.31)$$

Nessa equação, a pressão é representada por p e o vetor de forças de campo é representado por \vec{g} . O termo entre parênteses no lado esquerdo da equação descreve a aceleração de uma partícula de fluido em movimento, ou seja, a taxa de variação do vetor velocidade ao longo do tempo e do espaço. O lado direito da igualdade representa o somatório das forças por unidade de volume que atuam sobre a partícula (MUNSON; YOUNG; OKIISHI, 2013). Os primeiros dois termos representam as forças de pressão e de campo, respectivamente, enquanto o último termo representa as forças viscosas. Para um fluido newtoniano sob a hipótese de *Stokes*, o tensor $\hat{\tau}$ é dado por:

$$\hat{\tau} = \mu \left[\vec{\nabla} \vec{v} + (\vec{\nabla} \vec{v})^T \right] - \frac{2}{3} \mu (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \hat{I} \quad (3.32)$$

Nessa expressão, μ representa a viscosidade dinâmica e \hat{I} é o tensor de identidade.

3.11.3 Equação da conservação de massa das espécies químicas

Em um escoamento reativo, a evolução temporal da fração mássica Y_i da espécie i , para todas as N_s espécies, é governada pela equação de transporte de massa:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_i + \dot{\omega}_i \quad (3.33)$$

Nessa equação, os termos à esquerda da igualdade representam a taxa de variação temporal da fração mássica da espécie i e o transporte advectivo dessa fração, respectivamente. Os termos à direita representam o divergente do fluxo de difusão mássica (\vec{j}_i) da espécie i , e $\dot{\omega}_i$ representa a produção ou consumo da espécie química i (HOERLLE, 2015).

Neste trabalho, consideramos que a combustão ocorre em condições atmosféricas, onde os gradientes de pressão são negligenciáveis, assim como o efeito de Soret, que é relevante apenas para espécies com baixo peso molecular (COELHO; COSTA, 2007). Com essas considerações, a difusão de espécies ocorre apenas por gradiente de concentração ($\vec{j}_i = \vec{j}_i^d$).

Uma forma simplificada de tratar a difusão em misturas multicomponentes é assumir a Lei de Fick para difusão binária (HOERLLE, 2015). Nessa abordagem, o fluxo difusivo mássico é diretamente proporcional ao gradiente de concentração da própria espécie i , e é dado por:

$$\vec{j}_i^d = -\rho \mathcal{D}_{i,M} \vec{\nabla} Y_i = \rho Y_i c \quad (3.34)$$

Nessa equação, \vec{j}_i^d representa a velocidade de difusão da espécie i , $\mathcal{D}_{i,M}$ é o coeficiente médio de difusão mássica da espécie i na mistura. Os coeficientes de difusão das espécies na mistura podem ser obtidos assumindo-se um número de Lewis constante para

cada espécie envolvida no processo de combustão (GIACOMAZZI, 2008). O número de Lewis relaciona a difusividade mássica das espécies com a difusividade térmica da mistura e é definido como:

$$Le_i = \frac{\lambda}{\rho c_p \mathcal{D}_{i,M}} \quad (3.35)$$

Nessa expressão, λ e c_p representam, respectivamente, a condutividade térmica e o calor específico à pressão constante da mistura, onde $c_p = \sum_{i=1}^{N_s} c_{p,i} Y_i$ e $c_{p,i}$ é a capacidade térmica à pressão constante da espécie i .

Substituindo as expressões anteriores na equação de transporte de massa, obtemos:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = \frac{1}{Le_i} \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \vec{\nabla} Y_i \right) + \dot{\omega}_i \quad (3.36)$$

Essa equação é resolvida para as $N_s - 1$ espécies químicas consideradas.

3.11.4 Equação de conservação de energia

A equação de conservação de energia pode ser escrita em termos da entalpia específica (h) da mistura:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} h) = \frac{Dp}{Dt} + \hat{\tau} \vec{\nabla} \vec{v} - \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_q + \dot{q}''' \quad (3.37)$$

No lado esquerdo da equação, os termos representam a variação temporal da entalpia h da mistura e seu transporte por advecção, respectivamente. No lado direito, os termos representam a derivada material da pressão, a dissipação viscosa, o divergente do vetor de fluxo de calor \vec{j}_q e o termo fonte radiante q (TURNS, 2000).

Na aproximação para baixo Mach, o campo de pressões pode ser diretamente obtido da equação de estado dos gases ideais, o que permite negligenciar a derivada material da pressão (SU, 1999). Além disso, o termo de dissipação viscosa é desconsiderado por ser pequeno em comparação com a liberação de calor na chama.

Assim como o fluxo difusivo mássico, o fluxo difusivo térmico também é composto por três fenômenos. O primeiro é o fluxo de calor devido à condução, causado por gradientes de temperatura (Lei de Fourier). O segundo é o fluxo de calor gerado pelo gradiente de concentração das espécies (efeito Dufour (CENGEL; GHAJAR, 2015), o qual é normalmente negligenciado em processos de combustão. O terceiro e último fenômeno ocorre devido à difusão de massa (HOERLLE, 2015).

Dessa forma, o fluxo de calor pode ser representado pela seguinte equação, em que h_i é a entalpia específica da espécie química i :

$$\vec{j}_q = \lambda \vec{\nabla} T + \sum_{i=1}^{N_s} h_i \vec{j}_i \quad (3.38)$$

Assumindo a Lei de Fick para o fluxo difusivo mássico e a expressão para o número de Lewis (HOERLLE, 2015), e relacionando o gradiente de temperatura com o gradiente de entalpia, temos:

$$\vec{j}_q = -\frac{\lambda}{c_p} \vec{\nabla} h + \sum_{i=1}^{N_s} \left(1 - \frac{1}{Le_i}\right) \frac{\lambda}{c_p} h_i \vec{\nabla} Y_i \quad (3.39)$$

Os efeitos das reações químicas são contabilizados pela entalpia específica da mistura, que é uma função da composição da seguinte forma:

$$h = \sum_{i=1}^{N_s} Y_i h_i \quad (3.40)$$

$$h_i = h_{i,f}^0 + \int_{T_{ref}}^T c_{p,i}(T) dx \quad (3.41)$$

Onde $h_{i,f}^0$ é a entalpia específica de formação na temperatura de referência T_{ref} .

4 Metodologia de solução do problema de combustão

Um código de fluidodinâmica computacional *CFD* desenvolvido por CUNHA (2010) na linguagem do *software MATLAB* foi adaptado para a realização das simulações. A principal rotina do código foi desenvolvida para solução de uma equação de conservação de um escalar genérico (ϕ), isto porque todas as equações governantes do escoamento podem ser expressas no formato dado pela Equação 4.1, cujas formas particulares são exibidas na tabela 2. Somente dois tipos de condições de contorno foram adotados nas simulações: ou o valor de ϕ era prescrito em um contorno, ou o fluxo de ϕ era assumido nulo na direção normal ao contorno, caso no qual $\partial\phi/\partial n = 0$.

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)}_{\text{termo transiente}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z}(\rho u\phi) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho v\phi)}_{\text{termo de advecção}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma_\phi\frac{\partial\phi}{\partial z}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial z}\left(r\Gamma_\phi\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)}_{\text{termo de difusão}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{termo fonte}} \quad (4.1)$$

Onde ρ é a massa específica e Γ_ϕ é o coeficiente de difusão

Tabela 2 – Formas particulares da Equação 4.1

Equação	ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
Continuidade	1	0	0
Componente-z	u	μ	$\partial p/\partial x + (\rho - \rho_\infty)g$
Componente-r	v	μ	$\partial p/\partial y - \mu v/r^2$
Energia	h	k_g/c_p	$\nabla q_{rad} - \nabla \cdot \sum_{i=1}^n \mathbf{J}_i W_i$
Espécies químicas	Y_i	ρD_{im}	\bar{R}_i

O *Control Volume Finite Element Method (CVFEM)* foi utilizado para discretização da equação 4.1 (SHEIKHOLESAMI, 2018). O método é baseado em uma abordagem de malha dupla, na qual uma malha não estruturada de elementos triangulares é utilizada para discretizar o domínio geométrico e uma segunda malha, baseada em volumes de controle poligonais, é empregada na discretização das equações diferenciais.

Um esquema de interpolação linear foi usado para discretização do termo de difusão, o esquema *upwind* orientado pelo escoamento de CUNHA; VERAS (2021) foi usado para discretização do termo de advecção. O termo fonte foi aproximado por integração de ponto único (central ao volume de controle) e o método Euler implícito (SAUER, 2012) foi usado para aproximar o termo transiente, onde o passo de tempo Δt foi usado para avançar a solução de ϕ^0 para ϕ .

A discretização derivou um sistema de equações algébricas: $M\phi = B$, onde M é a matriz global e B é o vetor que armazena termos oriundos de fontes e condições de contorno. Todo o processo de discretização foi baseado nos três sub-volumes internos aos elementos, produzindo matrizes locais para cada elemento (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). A matriz global foi obtida por um procedimento de montagem a partir das matrizes locais. A maioria dos sistemas de equações algébricas foram resolvidos por métodos diretos (variantes de eliminação gaussiana) disponíveis no software MATLAB por meio de funções incorporadas.

Na Figura 4 é apresentado o algoritmo para simulação numérica da combustão.

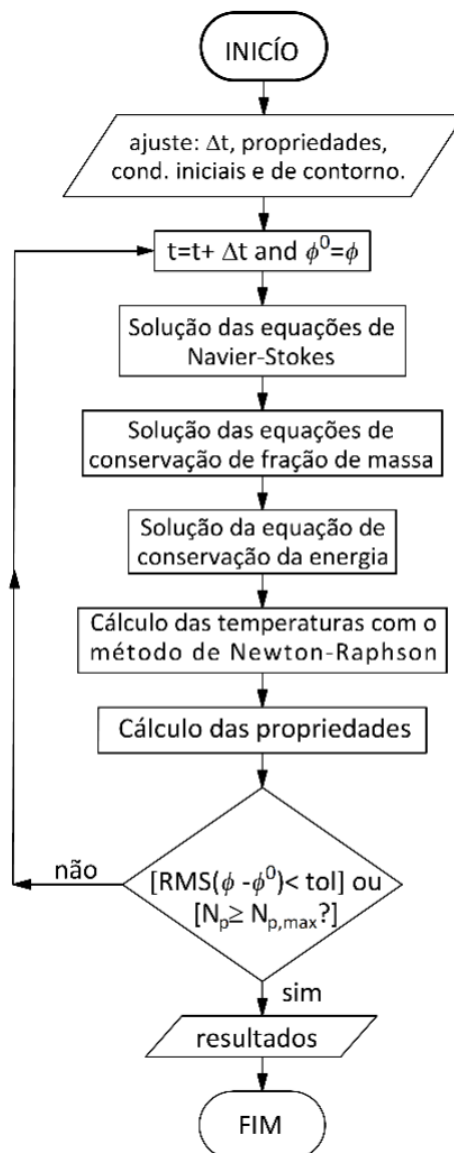


Figura 4 – Algoritmo para simulação numérica da combustão

O acoplamento pressão-velocidade foi tratado com o procedimento apresentado em (SAABAS; BALIGA, 1994). O forte acoplamento dos termos fonte de reação necessitou de uma solução em duas etapas para calcular a fração de massa das espécies. Primeiramente,

concentrações molares C_i^* eram calculadas a partir de um conjunto de equações diferenciais ordinárias do mecanismo de reação química:

$$\frac{dC_i}{dt} = \sum_{j=1}^{n_R} \left[C_{m,j} (v''_{i,j} - v'_{i,j}) \left(k_{f,j} \prod_{i=1}^n C_i^{v'_{i,j}} - k_{r,j} \prod_{i=1}^n C_i^{v''_{i,j}} \right) \right] \quad (4.2)$$

Tal conjunto de equações era resolvido numericamente com o método de Euler explícito com valor inicial C_i^0 e passo de tempo de Δt_r , tal passo de tempo era muito menor que o Δt utilizado na solução CFD (Eq. 4.1). Depois os termos de fonte de espécies químicas de cada espécie i presentes na tabela 2 eram aproximados da seguinte forma:

$$\bar{R}_i = MW_i \frac{(C_i^* - C_i^0)}{\Delta t} \quad (4.3)$$

Por fim, as equações algébricas das frações mássicas eram resolvidas por um método de solução direta disponível no software MATLAB. O sistema de equações algébricas da entalpia também era resolvido por um método de solução direto. O cálculo da temperatura foi realizado através do método Newton-Raphso (SOUZA; BALTHAZAR, 2010), a partir da equação $h = \sum_{k=1}^n h_k Y_k$. Após todas essas etapas, o código atualiza as propriedades termodinâmicas, para a próxima iteração temporal.

A solução convergente em regime permanente foi estabelecida quando $Residual(\phi) < tol$, onde $Residual(\phi) = [\sum_{i=1}^{I_{max}} (\phi_i - \phi_i^0)^2]^{0,5}$ e $tol = 10^{-7}$ é a tolerância. O termo i é um nó da malha e seu valor máximo é dado por $I_{max} = max(i)$. N_p é um intervalo de tempo cujo máximo foi definido como $N_{p,max}$.

4.1 Equação da energia para o modelo que considera o transporte de espécies detalhado

A equação de conservação de energia pode ser escrita em termos de entalpia absoluta para evitar um termo de fonte devido a reação química, a Eq. (4.4). A entalpia absoluta é a soma de uma entalpia que leva em consideração a energia associada a títulos químicos e uma entalpia associada apenas à temperatura (TURNS, 2000).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{u} h + \sum_{i=1}^n \mathbf{J}_i h_i \right) = \nabla \cdot \left(\frac{k_g}{c_p} \nabla h \right) + \nabla q_{rad} \quad (4.4)$$

Onde k_g é a condutividade térmica, a c_p é o calor específico da pressão constante e $\sum_{i=1}^n \mathbf{J}_i h_i$ representa o transporte de entalpia devido à difusão de espécies. O Termo ∇q_{rad} contabiliza perdas de calor radiativas, calculado com uma aproximação opticamente fina dada em (BARLOW et al., 2001), na qual o efeito da absorção de energia era negligenciada e somente a emissão radiativa das espécies CH_4 , CO , CO_2 e H_2O era considerada.

Se o número de Lewis for considerado unitário, então esse termo $\sum_{k=1}^n \mathbf{J}_k h_k$ é nulo.

4.2 Cálculo da entalpia

As equações algébricas da entalpia são resolvidas de forma direta no *MATLAB*, considerando a correlação entre ϕ e a entalpia apresentada na Tabela 2. O único termo de fonte considerado foi o de radiação térmica, calculado conforme o trabalho de (BARLOW et al., 2001), cujas equações são descritas a seguir.

4.2.1 Cálculo da radiação

A radiação da chama foi modelada utilizando a suposição de transferência opticamente fina entre um determinado elemento fluido na chama e o ambiente frio ao redor. O termo de perda radiativa é expresso como:

$$\dot{Q} = 4\sigma(T^4 - T_b^4) \sum_i (p_i a_{Pi}) \quad (4.5)$$

onde $\sigma = 5.669 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$, T é a temperatura local da chama, T_b é a temperatura de fundo, p_i é a pressão parcial da espécie i em atmosferas, e a_i é o coeficiente de absorção médio de Planck para a espécie i . Os coeficientes de absorção médios de Planck para CO_2 , H_2O , CH_4 e CO foram calculados usando o (ZHENG et al., 2021). Foi utilizado o coeficiente de absorção de Planck do metano para o etileno como uma aproximação. A temperatura de fundo é incluída para evitar o resultado não físico de o gás no domínio computacional resfriar abaixo da temperatura do ambiente. O efeito do termo T_b nos perfis de chama calculados é insignificante, de modo que não há diferença prática entre a Eq. 4.5 e a formulação de emissão exclusiva, que exclui T_b .

4.3 Cálculo da composição de mistura de gases

As equações de fração de massa de espécies químicas também precisaram de um procedimento especial de solução devido ao forte acoplamento entre os termos de fonte. Os procedimentos para cálculo dos termos de fonte das equações de espécies químicas são detalhados em função do mecanismo de reação química a seguir.

4.3.1 Mecanismo de reação global de passo duplo

Um mecanismo de reação global de passo duplo para o etileno obtido em (WESTBROOK; DRYER, 1981) foi utilizado para esta parte do trabalho:





Baseado no mecanismo de reação, as espécies químicas para simulação são: C_2H_4 , O_2 , CO_2 , CO , H_2O , N_2 . Vale notar que o N_2 compõe o ar atmosférico, mas não reage quimicamente com outras espécies, por isso não aparece no mecanismo de reação. A fração de massa do N_2 pode ser calculada da seguinte forma:

$$Y_{N_2} = 1 - (Y_{O_2} + Y_{C_2H_4} + Y_{H_2O} + Y_{CO_2} + Y_{CO}) \quad (4.8)$$

Apesar do mecanismo de reação de Westbrook e Dryer (1981) contar com dois passos de reação, um passo irreversível e outro passo reversível, é mais prático considerar três passos de reação irreversíveis:



As taxas para os três passos obtidas na referência são apresentadas a seguir:

$$k_{01} = A_{01} \exp\left(\frac{-30000}{1.987 \cdot T_{gas}}\right)$$

$$k_{02} = A_{02} \exp\left(\frac{-40000}{1.987 \cdot T_{gas}}\right)$$

$$k_{03} = A_{03} \exp\left(\frac{-40000}{1.987 \cdot T_{gas}}\right)$$

As constantes de taxa foram derivadas empiricamente, por isso só são válidas para as condições experimentais para as quais foram determinadas, ou seja, são inválidas para pressões, temperaturas e razões estequiométricas gerais.

Os fatores pré-exponenciais apresentados na referência consideram unidades diferentes das utilizadas no SI, por isso precisaram de conversão de mol para kmol e centímetros para metros, o que é feito da seguinte forma:

$$A_{01} = 2.4 \times 10^{12} \times 1000^{[1-(0.1+1.65)]}$$

$$A_{02} = 10^{14.6} \times 1000^{[1-(1+0.5+0.25)]}$$

$$A_{03} = 5 \times 10^8$$

O código *CFD* utilizado nas simulações trabalha com concentração baseadas em frações de massa, porém as taxas de reação química baseiam todos os cálculos em concentrações molares:

$$\frac{dC_{C_2H_4, passo1}}{dt} = R_{P01} = -k_{01} C_{C_2H_4}^{0.1} C_{O_2}^{1.65} \quad (4.12)$$

$$\frac{dC_{CO, passo2}}{dt} = R_{P02} = -k_{01} C_{O_3}^{1.0} C_{O_2}^{0.25} C_{O_3}^{0.5} \quad (4.13)$$

$$\frac{dC_{CO_2, passo3}}{dt} = R_{P02} = -k_{01} C_{CO_2}^{1.0} \quad (4.14)$$

A conversão de fração de massa para concentração molar é realizada com base na seguinte equação.

$$C_i = \frac{\rho Y_i}{MW_i} \quad (4.15)$$

As taxas dadas pelas equações 4.12, 4.13 e 4.14 são associadas aos passos de reação química. As taxas líquidas de geração para cada espécie química são apresentadas a seguir.

$$\begin{aligned} C_2H_4 : \quad & \frac{dC_{C_2H_4}}{dt} = R_{01} = +(R_{P01}) \\ O_2 : \quad & \frac{dC_{O_2}}{dt} = R_{02} = +(2R_{P01} + 0.5R_{P02}) - (0.5R_{P03}) \\ CO : \quad & \frac{dC_{CO}}{dt} = R_{03} = +(R_{P02}) - (2R_{P01} + R_{P03}) \\ H_2O : \quad & \frac{dC_{H_2O}}{dt} = R_{04} = -(2R_{P01}) \\ CO_2 : \quad & \frac{dC_{CO_2}}{dt} = R_{05} = +(R_{P03}) - (R_{P02}) \end{aligned}$$

Para realizar os cálculos de cinética química, é necessário simplificar algumas equações. Por exemplo, assumimos que a taxa de variação da concentração em relação ao tempo, $\frac{dC_i}{dt}$, é aproximadamente igual a $\frac{C_i - C_{0,i}}{\Delta t_R}$. Também temos a identidade $R_{0,i} = \frac{dC_i}{dt}$ (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). A partir dessas simplificações, podemos deduzir que $R_{0,i}$ é aproximadamente igual a $\frac{C_i - C_{0,i}}{\Delta t_R}$, o que nos leva à equação $C_i = C_{0,i} + R_{0,i} \times \Delta t_R$.

Assim, se avançarmos no tempo em um intervalo Δt_R , podemos calcular a concentração C_i a partir de uma concentração inicial conhecida, $C_{0,i}$. É importante que o intervalo de tempo Δt_R seja pequeno o suficiente para que o produto $R_{0,i} \times \Delta t_R$ seja menor que $C_{0,i}$, evitando valores negativos para C_i . Caso as taxas $R_{0,i}$ sejam muito altas, é necessário utilizar intervalos de tempo Δt_R ainda menores. A escolha adequada do valor de Δt_R depende do problema específico a ser resolvido (PATANKAR, 1980).

A maior escala de tempo químico de interesse é o tempo necessário para atingir o equilíbrio químico a partir da condição inicial prescrita. No entanto, os passos de tempo utilizados na solução de problemas de combustão podem ser tão pequenos quanto $10^{-9} - 10^{-8} s$ (IMREN; HAWORTH, 2016), tal valor inviabilizaria uma solução *CFD*, devido ao elevando número de instantes necessários para simulação. Por isso utiliza-se dois passos de tempo, um para simulação *CFD* e outro só para integração do termo de fonte de reação química. Os passos de tempo se relacionam da seguinte forma $\Delta t_r = \Delta t/n$, em que n é número de vezes que o passo de tempo da simulação *CFD* é maior que o utilizado para integração dos termos de reação química. Assim, se $n=500$, $\Delta t_r = 0,002\Delta t$, ou $\Delta t_r = 2 \times 10^{-7} s$, o que pode ser suficiente para solução de problemas que utilizem mecanismos de taxa global. Se o mecanismo de reação considerar os radicais H, O e OH, um passo de reação $\Delta t_r \simeq 10^{-8} s$ seria mais adequado, o que daria $n=10000$ se $\Delta t = 10^{-4} s$.

Com base no que foi apresentado, é possível esquematizar uma rotina para cálculo dos termos de fonte das equações de fração de massa de espécies químicas. Conforme apresentado na seção 4.3.2, primeiro são realizados os cálculos dos valores iniciais das concentrações químicas. Depois as concentrações químicas são transferidas para as variáveis de cálculo de reação química, que vão se alterar enquanto o tempo se desenvolver. Os cálculos de reação são realizados para n passos. A variável i representa cada instante de tempo, para i iniciando em 1 e crescendo por valores inteiros até n . No final, os termos de fonte das equações de espécies químicas são calculados. De modo geral, enquanto i cresce as concentrações variam, variando também as taxas de reação química. A concentração $C_{0,i}^*$ é a inicial, que existe antes de qualquer instante, e a concentração C_i que aparece no final é aquela que resulta de n instantes de reação, cada um com duração Δt_r , ou seja, o tempo total de cálculo é de Δt . Assim, as taxas médias de reação química ω_i são calculadas baseadas o intervalo de tempo Δt e nas concentrações iniciais e finais (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

4.3.2 Esquema de cálculo dos termos de fonte de espécies químicas

Primeiro são realizados os cálculos dos valores iniciais das concentrações químicas:

$$C_{0,1}^* = \rho Y_{C_2H_4} / MW_{C_2H_4}$$

$$C_{0,2}^* = \rho Y_{O_2} / MW_{O_2}$$

$$C_{0,3}^* = \rho Y_{CO} / MW_{CO}$$

$$C_{0,4}^* = \rho Y_{H_2O} / MW_{H_2O}$$

$$C_{0,5}^* = \rho Y_{CO_2} / MW_{CO_2}$$

Depois as concentrações químicas são transferidas para as variáveis de cálculo de

reação química:

$$C_1 = C_{0,1}^*$$

$$C_2 = C_{0,2}^*$$

$$C_3 = C_{0,3}^*$$

$$C_4 = C_{0,4}^*$$

$$C_5 = C_{0,5}^*$$

Em seguida, os cálculos de reação são realizados para n passos:

Para i iniciando em 1 e crescendo por valores inteiros até n realizar os seguintes cálculos:

Cálculo das taxas para cada passo de reação química

$$R_{P01} = -k_{01}C_{01}^{0.1}C_{02}^{1.65}$$

$$R_{P01} = -k_{02}C_{03}^{1.0}C_{02}^{0.25}C_{04}^{0.5}$$

$$R_{P03} = -k_{03}C_{05}^{0.1}$$

Cálculo das taxas líquidas das espécies

$$R_{01} = +(R_{P01})$$

$$R_{02} = +(+2R_{P01} + 0.5R_{P02}) - (0.5R_{P03})$$

$$R_{03} = +(R_{P02}) - (2R_{P01} + R_{P03})$$

$$R_{04} = -(2R_{P01})$$

$$R_{05} = +(R_{P03}) - (R_{P02})$$

cálculo das concentrações de espécies químicas

$$C_1 = C_1 + R_{01} \times \Delta t_r$$

$$C_2 = C_2 + R_{02} \times \Delta t_r$$

$$C_3 = C_3 + R_{03} \times \Delta t_r$$

$$C_4 = C_4 + R_{04} \times \Delta t_r$$

$$C_5 = C_5 + R_{05} \times \Delta t_r$$

No final, os termos de fonte das equações de espécies químicas são calculados:

$$\dot{\omega}_{C_2H_4} = MW_1(C_1 - C_{0,1}^*)$$

$$\dot{\omega}_{O_2} = MW_2(C_2 - C_{0,2}^*)$$

$$\dot{\omega}_{CO} = MW_3(C_3 - C_{0,3}^*)$$

$$\dot{\omega}_{H_2O} = MW_4(C_4 - C_{0,4}^*)$$

$$\dot{\omega}_{CO_2} = MW_5(C_5 - C_{0,5}^*)$$

4.4 Cálculo das temperaturas em função da entalpia e da composição da mistura de gases

O cálculo da temperatura em função da entalpia e da composição da mistura de gases requer o conhecimento prévio dessas grandezas. Podemos combinar a equação da entalpia total, dada por

$$h = \sum_{i=1}^{n_{\text{especies}}} h_i Y_i$$

com as equações das entalpias das espécies individuais. Isso resulta em uma equação em que a temperatura é a única variável desconhecida (KUO, 1986). No entanto, se o polinômio que relaciona a entalpia das espécies individuais e a temperatura for de alto grau, não é possível isolar a temperatura de forma analítica. Nesses casos, é necessário recorrer a um método numérico para determinar a temperatura.

4.5 Cálculo das propriedades físico-químicas

A massa específica da mistura de gases ρ , a temperatura T , e a pressão p_0 , são relacionadas pela da equação de estado para um gás ideal:

$$\rho = \frac{p_0 \bar{W}}{R_u T} \quad (4.16)$$

$$\bar{W} = \left(\sum_{i=1}^{n_s} \frac{Y_i}{W_i} \right)^{-1} \quad (4.17)$$

em que, p_0 é a pressão atmosférica (101325 Pa) e R_u é a constante universal dos gases perfeitos (8314.51 J/kmol-K) (CUNHA; FERREIRA, 2020).

A dependência do calor específico a pressão constante e da entalpia absoluta específica de cada espécie i com a temperatura são calculadas por meio de polinômios, conforme as equações 4.18 e 4.19, respectivamente (MCBRIDE, 1993). O calor específico a pressão constante (c_p) em J/kg-K e a entalpia absoluta (h) em J/kg da mistura de gases são calculados pelas equações 4.20 e 4.21.

$$\frac{\bar{c}_{p,i}}{R_u} = a_{1,i} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 \quad (4.18)$$

$$\frac{h_i}{R_u} = a_{1,i}T + a_{2,i}\frac{T^2}{2} + a_{3,i}\frac{T^3}{3} + a_{4,i}\frac{T^4}{4} + a_{5,i}\frac{T^5}{5} + a_{6,i} \quad (4.19)$$

$$c_p = \sum_{i=1}^{n_s} \frac{Y_i \bar{c}_{p,i}}{W_i} \quad (4.20)$$

$$h = \sum_{i=1}^{n_s} h_i Y_i \quad (4.21)$$

A viscosidade (μ) em kg/m-s e a condutividade térmica (k) em W/m-K de um componente puro são calculadas pelas equações 4.22 e 4.23, na sequência. A viscosidade e a condutividade térmica da mistura de gases são calculadas pelas equações 4.24 e 4.25 (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2006).

$$\mu_i = 2,6693 \times 10^{-6} \frac{(W_i T)^{1/2}}{\sigma_i^2 \Omega_{\mu,i}} \quad (4.22)$$

$$k_i = \left(\bar{c}_{p,i} + \frac{5R_u}{4} \right) \left(\frac{\mu_i}{MW_i} \right) \quad (4.23)$$

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^{n_s} X_i \mu_i}{\sum_{j=1}^{n_s} X_j \Theta_{ij}} \quad (4.24)$$

$$k = \frac{\sum_{i=1}^{n_s} X_i k_i}{\sum_{j=1}^{n_s} X_j \Theta_{ij}} \quad (4.25)$$

$$\Theta_{ij} = 8^{-1/2} \left(1 + \frac{W_i}{W_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{W_j}{W_i} \right)^{1/4} \right]^2 \quad (4.26)$$

Onde X_i e σ_i representam a fração molar e o diâmetro de colisão de uma espécie i , respectivamente, e $\Omega_{\mu,i}$ é a integral de colisão para viscosidade. Os parâmetros necessários para os cálculos das propriedades foram obtidos em (CERFACS, 2017).

5 Resultados e Discussões

Neste capítulo, será comparado os resultados experimentais de Panek (2010) com simulações que empregam quatro modelos de difusão. Estes incluem um modelo que considera o número de Lewis unitário, uma simulação baseada na teoria de Chapman-Enskog (1968), outra utilizando o método de Wilke e Lee (1955), bem como o método proposto por Fuller, Schetter e Giddings (1966).

5.1 Combustor de Thomson

O estudo da chama de difusão laminar do etileno (C_2H_4) realizado por PANEK (2010), que empregou o combustor desenvolvido por THOMSON et al. (2005), serve como ponto de referência nesta seção do trabalho. Um esquema do domínio geométrico bidimensional com simetria radial utilizado neste estudo para aproximar o combustor experimental de referência é apresentado na figura 5.

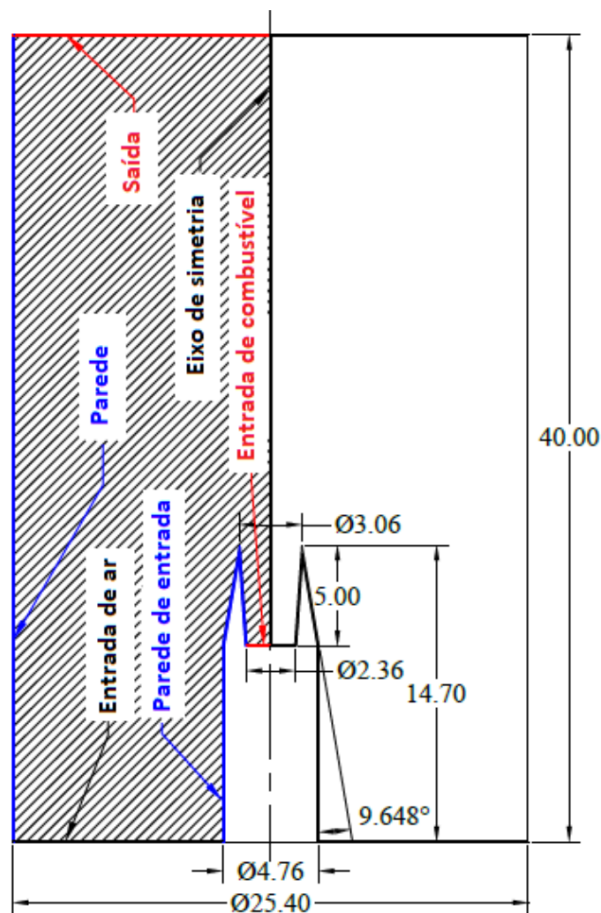


Figura 5 – Esquema do combustor experimental (mm). Fonte: (OLIVEIRA, 2023)

As velocidades de entrada de combustível e ar no combustor foram determinadas com base nas vazões mássicas de combustível e ar, respectivamente. A velocidade do combustível (u_{fuel}), foi definido como 0,0960 m/s, enquanto a velocidade do ar (u_{air}), foi definido como 0,1899 m/s. As vazões mássicas de combustível e ar, denotadas por \dot{m}_{fuel} e \dot{m}_{air} , foram medidas como 0,482 mg/s e 0,11 g/s, respectivamente de acordo com PANEK (2010). Além disso, as áreas de entrada do combustor foram consideradas para determinar as velocidades.

Tabela 3 – Condições de Contorno

Contorno	u	v	Y	h	p
Eixo de simetria	$\frac{\partial u}{\partial n} = 0$	$v = 0$	$\partial Y_i / \partial n = 0$	$\partial h / \partial n = 0$	-
Parede	$u = 0$	$v = 0$	$\partial Y_i / \partial n = 0$	$h = h_M$	-
Parede de entrada	$u = 0$	$v = 0$	$\partial Y_i / \partial n = 0$	$h = h_M$	-
Entrada de combustível	$u = u_{Fuel}$	$v = 0$	$Y_{Fuel} = 1$	$h = h_{Fuel}$	-
Entrada de ar	$u = u_{Air}$	$v = 0$	$Y_i = Y_{i,oxid}$	$h = h_{Air}$	-
Saída	$\frac{\partial u}{\partial n} = 0$	$\frac{\partial v}{\partial n} = 0$	$\frac{\partial Y_i}{\partial n} = 0$	$\frac{\partial h}{\partial n} = 0$	$p = p_0$

No instante inicial, assumimos que o ar preenche o interior do combustor, e sua composição foi considerada como $Y_{O_2} = 0,2315$, $Y_{N_2} = 0,7556$, e $Y_{Ar} = 0,0129$. As condições de contorno assumidas neste estudo estão resumidas na Tabela 3. A pressão foi admitida igual a 101325 Pa no contorno saída. As entalpias do etileno e do ar a 298 K são representadas por h_{fuel} e h_{air} , respectivamente. Durante a simulação, a entalpia da mistura de gases é atualizada em cada instante para manter as paredes internas e a parede de entrada a 298 K. Essa atualização é feita usando a fórmula $h_M = \sum_n^{k=1} Y_i h_i$, onde Y_i representa a fração molar de cada componente da mistura.

5.2 Domínio Computacional e Discretização

Uma malha de elementos finitos triangulares não estruturada (Fig. 6) é utilizada para discretização do domínio de cálculo e uma segunda malha de volumes de controle poligonais, centrado nos vértices, é utilizada para discretização das equações diferenciais de conservação (CUNHA, 2010). A malha de volumes de controle é obtida a partir da malha de elementos finitos através do método das medianas, e o volume de controle poligonal é formado pela união de vários subvolumes de controle que compartilham um mesmo nó.

Para assegurar um erro pequeno de discretização nas regiões de entrada de combustível, entrada de ar e paredes, um refinamento elevado na malha foi realizado nessas regiões. Além disso, um refinamento adicional foi aplicado no eixo de simetria próximo à saída do bocal do combustor para melhorar os resultados relacionados ao tamanho da chama.

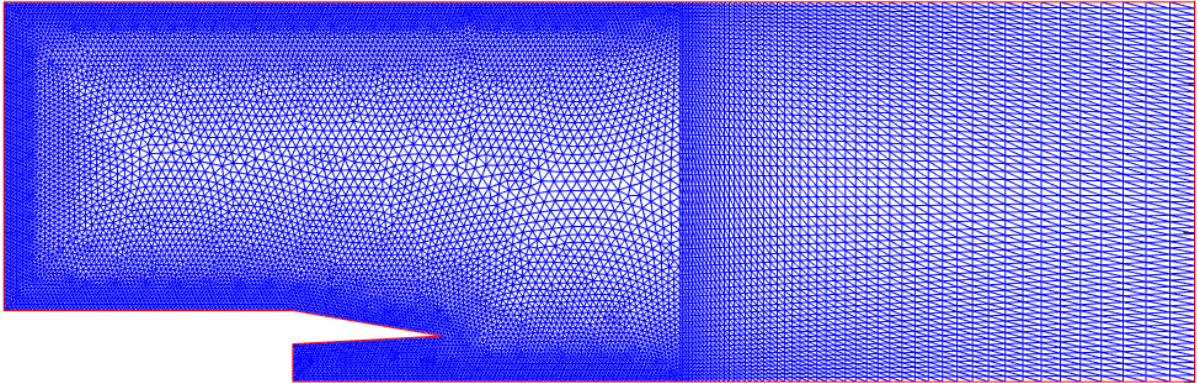


Figura 6 – Malha de elementos finitos triangulares

Um computador pessoal foi usado para realizar as simulações, com os seguintes recursos: processador Intel®Core(TM) i3-7020U CPU @ 2.30GHz, 4GB de memória DDR4, SSD de 256GB e SO Windows 10 Version 22H2 de 64 bits. Foram necessários entre 1501 e 4155 iterações para a convergência no regime permanente.

5.3 Avaliação da eficiência computacional

A eficiência computacional torna-se um fator relevante na escolha do método de difusão para garantir não apenas precisão nos resultados, mas também uma abordagem eficiente na resolução numérica do problema em questão.

Tabela 4 – Número de passos para convergência no regime permanente

Método	Iterações
Lewis Unitário	4155
Chapman-Enskog	2015
Wilke-Lee	1501
Fuller et al.	1603

Para alcançar a convergência, é analisada a magnitude do erro. No contexto do código, o monitoramento do erro é realizado por meio de grandezas que representam as raízes do erro quadrático médio nas componentes x e y da velocidade. Essas grandezas são avaliadas por meio das diferenças entre as iterações consecutivas nas componentes de velocidade. A simulação é interrompida quando ambos os valores das velocidades x e y são inferiores a 10^{-5} . Esse critério de interrupção é adotado para garantir a precisão e a estabilidade do resultado numérico.

O modelo que incorpora o número de Lewis unitário (que considera o coeficiente de difusão como k/c_p), embora simplifique os cálculos na equação de energia, revela uma demanda computacional significativamente maior. Este método exigiu 4155 iterações para

atingir a convergência, mais que o dobro de iterações em relação ao modelo de Chapman-Enskog, o segundo método que precisou de mais passos para convergir. Esse aumento pode ser atribuído à simplificação introduzida por esse modelo, que resulta em um erro muito maior em comparação com os demais modelos avaliados.

Destacando-se pela eficiência, o modelo de Wilke e Lee alcançou a convergência em apenas 1501 iterações. Não ficando atrás, a correlação de Fuller, Schetter e Giddings necessitou de apenas 1603 iterações para atingir o regime permanente.

Dessa forma, ao analisar o desempenho dos diferentes modelos, é possível perceber que a escolha da formulação para os coeficientes de difusão não apenas impacta a convergência, mas também influencia diretamente a eficiência computacional, uma vez que o tempo de processamento tende a crescer exponencialmente à medida que o número de iterações aumenta.

5.4 Perfil de temperaturas

As distâncias do bocal do combustor foram selecionadas semelhante à tese da [PANEK \(2010\)](#) para permitir uma comparação visual entre os perfis de temperatura experimentais (Fig. 7), e os simulados (Fig. 8).

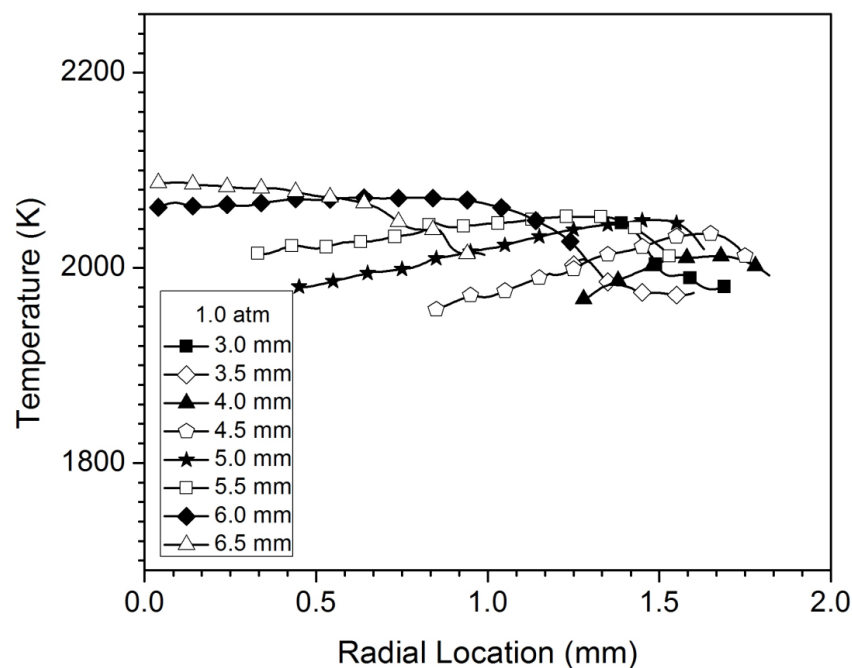


Figura 7 – Perfil de temperatura experimental à 1 atm. Fonte:([PANEK, 2010](#))

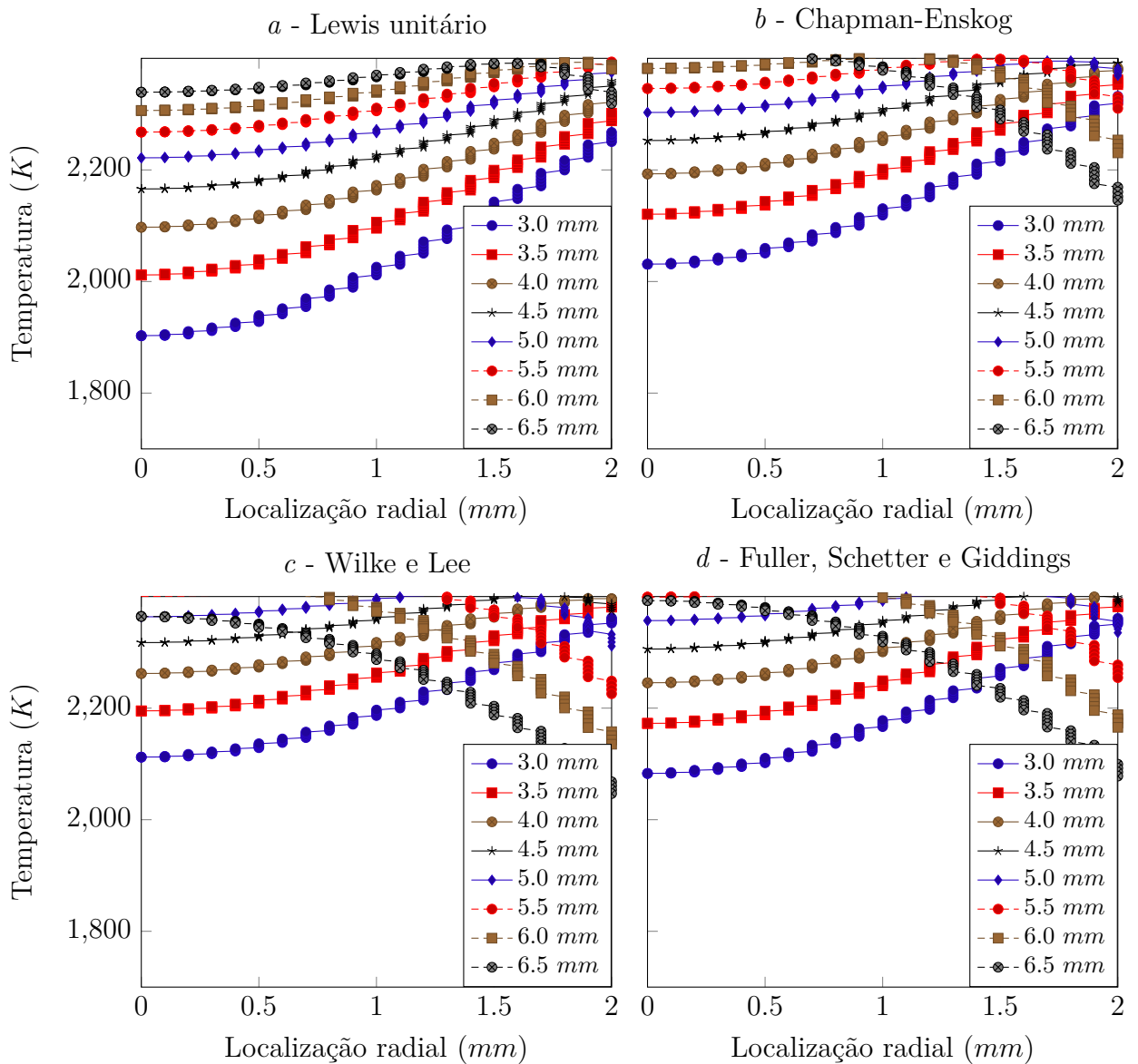


Figura 8 – Perfil de temperaturas.

A proximidade das temperaturas em torno de 2100 K em todos os casos, reforça a fidelidade dos resultados às condições experimentais. Diferenças mais significativas serão discutidas na próxima seção, que aborda o formato da chama, incluindo sua altura e dimensões de fixação.

5.5 Dimensões e formato da chama

A relação entre formato da chama e as características da combustão é um assunto complexo e em desenvolvimento (LI et al., 2015). Para determinar o comprimento da chama pode-se usar como critério o valor máximo na linha de centro de algumas variáveis, como a temperatura (HOERLLE, 2012).

A Figura 9 mostra duas medições distintas das dimensões da chama, resumidas na Tabela 5 para os resultados experimentais e simulados.

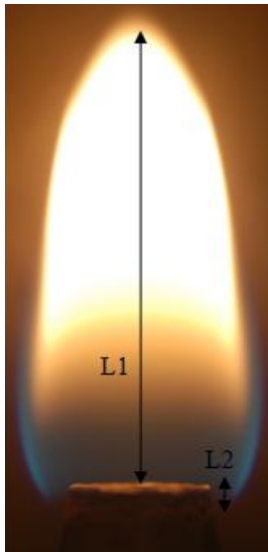


Figura 9 – L1 e L2.

Tabela 5 – Alturas da chama luminosa e localizações de fixação a 0,482 mg/s, com erros associados.

Chama	L1 (mm)	L2 (mm)	Erro (%)
Experimental	6,24	0,28	-
Lewis unitário	7,61	0,76	21,27
Chapman-Enskog	6,60	0,66	5,65
Wilke-Lee	5,90	0,59	5,08
Fuller et al.	6,10	0,61	2,42

Nas figuras 5.5 e 10, apresenta-se o contorno da chama obtido para uma pressão de 1 atm. A altura da chama foi calculada a partir das posições axiais de temperatura máxima ao longo do eixo do combustor. Por outro lado, a largura da chama foi calculada com base nas posições radiais de temperatura máxima, em alturas específicas.

Os gráficos apresentados acima e a tabela 5 revelam que, ao considerar o número de Lewis unitário, a altura da chama exibe um erro significativo de 21%. Contudo, ao aprimorar o termo de difusão binário, observa-se uma redução expressiva na altura da chama. Quando aplicamos a teoria de Chapman-Enskog (ver Eq. 3.15), que assume b como constante, o erro associado é de 5,65%. Por outro lado, o método de Wilke e Lee, que leva em conta b_{AB} (ver Eq. 3.16) com base nas massas molares das espécies, apresenta um erro ligeiramente inferior, atingindo 5,05%. No entanto, a correlação proposta por Fuller, Schetter e Giddings, que incorpora um volume associado à difusão molecular entre duas espécies, é o método que mais se aproxima do valor experimental, revelando um erro menor de 2,42%.

Os valores simulados para L2 revelam um erro associado consideravelmente elevado, indicando a necessidade de uma modelagem mais precisa da anexação da chama. Para reduzir esse erro, é preciso empregar abordagens mais refinadas, como aquela desenvolvida por XU et al. (2018).

O erro de L2 pode ser devido a condições de contorno, os quais, para todos os casos, foram modeladas utilizando a mesma condição térmica na parede do tubo: transferência de calor conjugada com condição adiabática (ou gradiente de temperatura zero). É

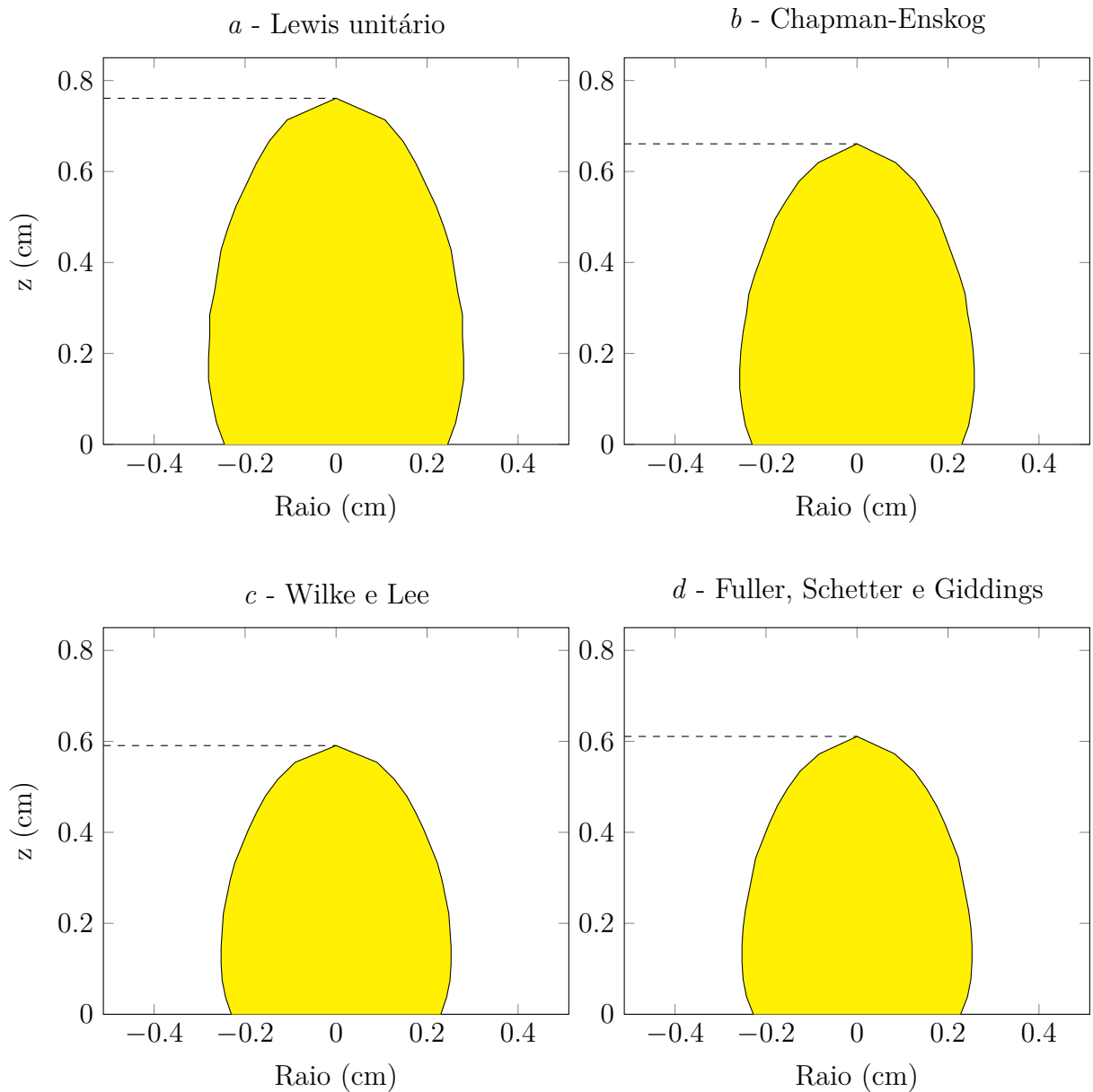


Figura 10 – Formato da chama a 1 atm.

importante destacar que, na realidade, a condição térmica na superfície inferior da parede do combustor não é adiabática, o que pode ter influenciado na dimensão de anexação.

A posição de anexação da chama (L2) pode ser influenciada pela geometria do combustor, resultando em variações no nível de recirculação de calor. Este fenômeno foi observado por [XU et al. \(2018\)](#), que também investigou a anexação da chama no Combustor de Thomson. Os resultados indicaram que a base da chama nesse combustor está essencialmente em contato com a parede do combustor. Consoante essa observação, neste estudo foi adotada a abordagem de selecionar a temperatura mais elevada na parede do tubo para o cálculo de L2.

De acordo com XU et al. (2018) o ponto de anexação da chama é controlado pela combinação da reatividade do combustível, velocidades dos fluxos de combustível e oxidante, e do material do tubo de combustível, afetando direta ou indiretamente a composição do gás próximo à borda do combustor por meio dos processos de transferência de calor e mistura.

5.6 Análise comparativa dos coeficientes de difusão em função da temperatura

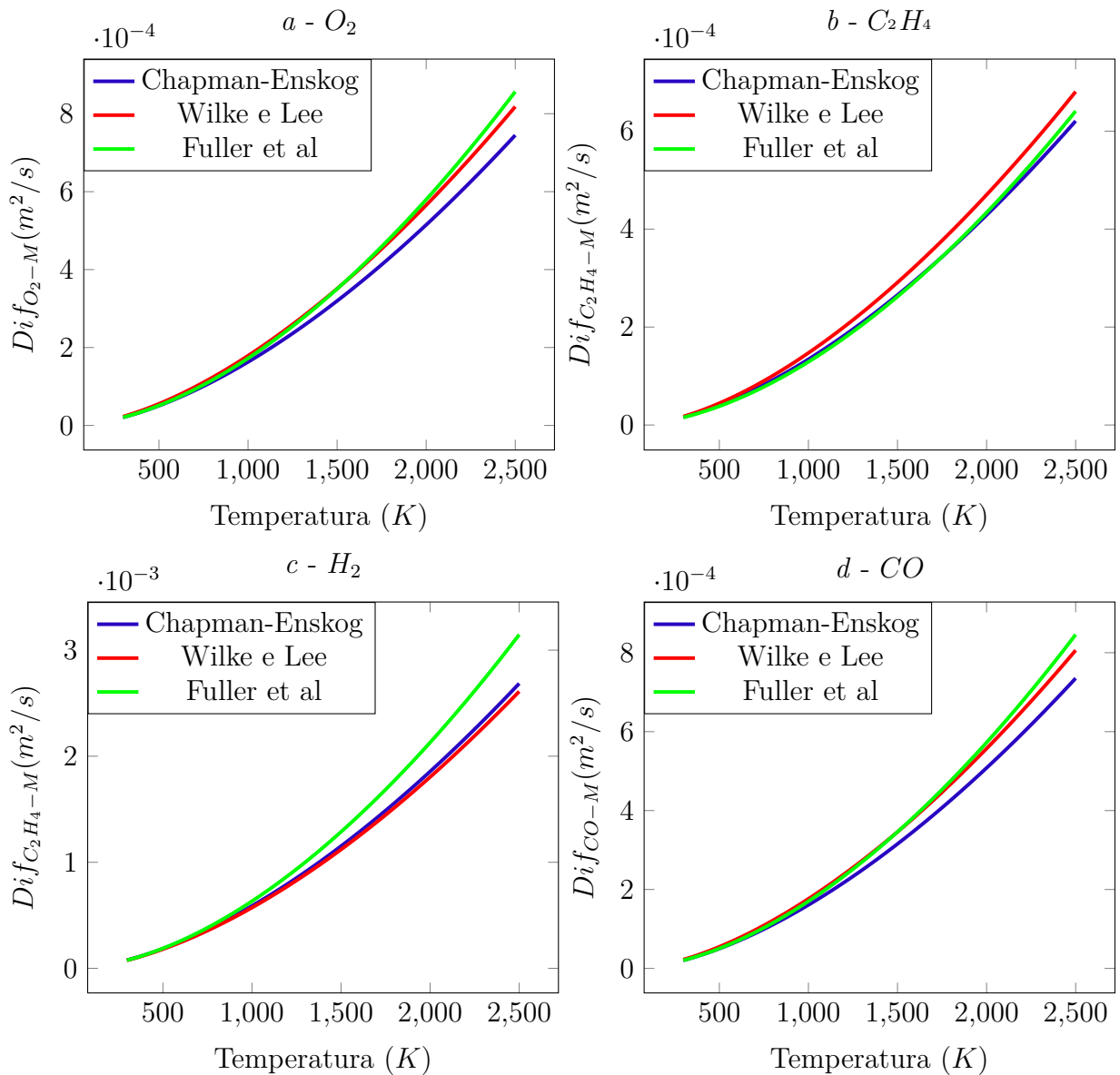


Figura 11 – Comparação dos Coeficientes de Difusão de 4 Espécies na Combustão de C_2H_4 /ar a 1 atm.

Os gráficos na Figura 11 oferecem uma comparação dos coeficientes de difusão em relação à temperatura para quatro espécies químicas, considerando os três modelos que não incorporam o número de Lewis unitário. Embora os resultados de validação não tenham sido incluídos para comparação, os resultados são satisfatórios, levando em conta a melhora no tamanho da chama e a proximidade entre esses termos difusivos.

Uma diferença mais acentuada foi observada a partir de 1000 K , especialmente para radicais rápidos e espécies intermediárias como o H_2 . Um aumento na temperatura aumenta significativamente a difusividade. Os modelos utilizados fornecem um coeficiente de difusão bem aproximado em comparação com o modelo de difusão que considera o número de Lewis unitário, ao variar a temperatura nas condições de combustão pré-misturada. Além de sua precisão, as fórmulas são relativamente simples, tornando a tarefa computacional de estimar vários termos de difusão binária simplificada.

5.7 Campo de temperaturas

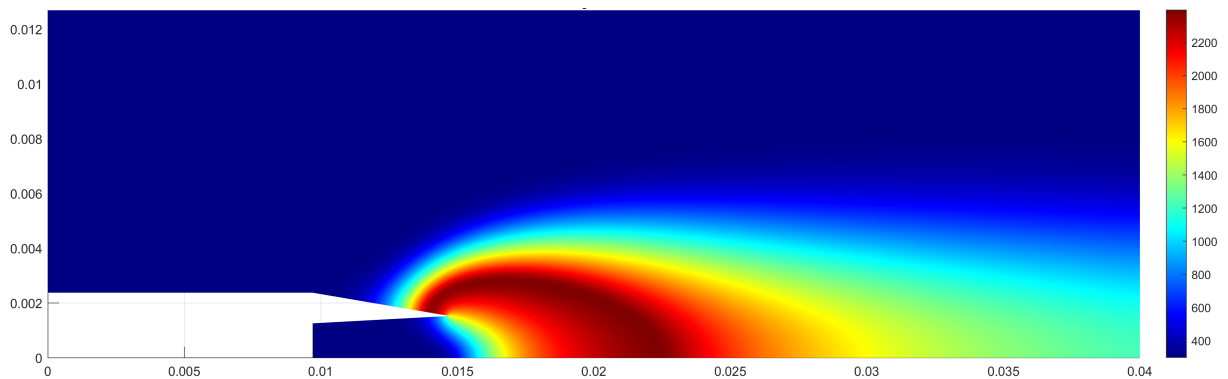


Figura 12 – Campo de temperatura considerando Lewis unitário.

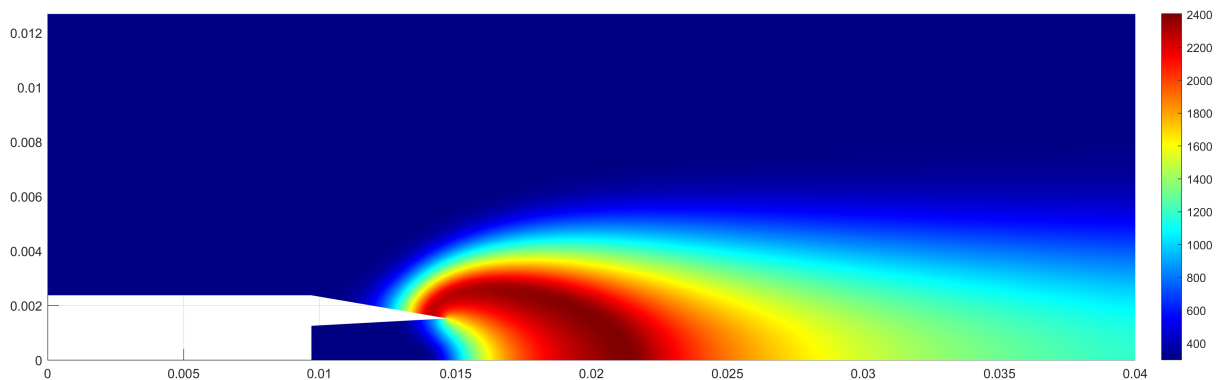


Figura 13 – Campo de temperatura considerando a teoria de Chapman-Enskog.

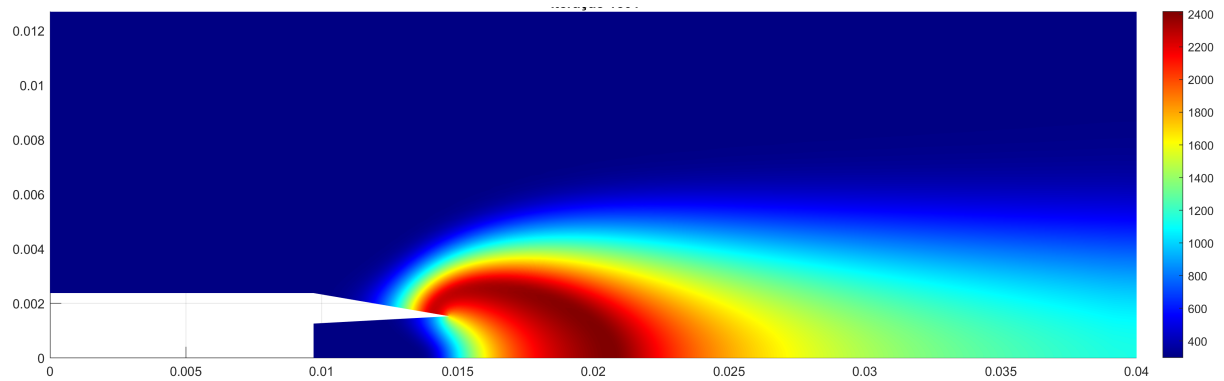


Figura 14 – Campo de temperatura considerando o método de Wilke e Lee.

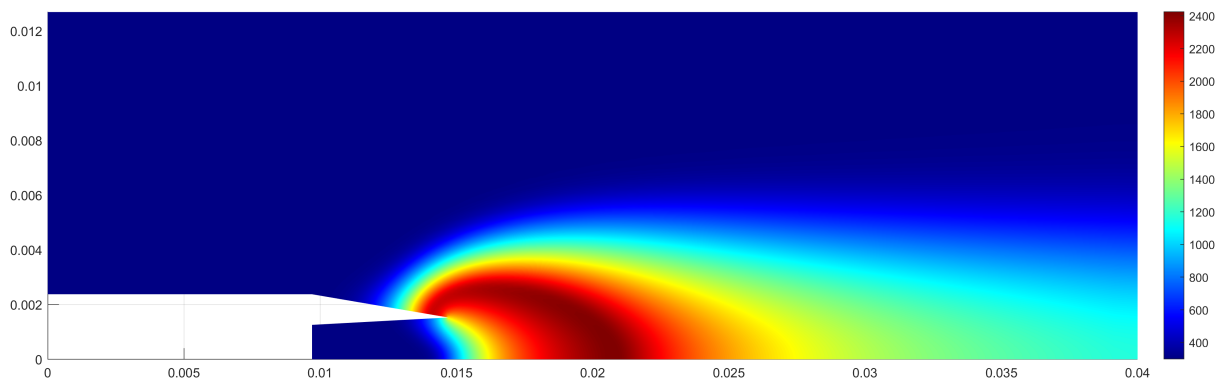


Figura 15 – Campo de temperatura considerando a correlação de Fuller.

Os campos de temperaturas exibiram resultados notavelmente consistentes e satisfatórios durante a análise, assemelhando-se aos valores apresentados no perfil de temperaturas (ver seção 5.4). Não foram identificadas discrepâncias significativas nessa variável. Divergências mais substanciais foram observadas ao analisar as dimensões da chama (ver seção 5.5).

5.8 Conclusões

Os resultados obtidos através das simulações comparadas com os experimentos de Panek (2010) revelaram uma concordância geral nas condições de contorno, perfil de temperatura e formato da chama. No entanto, a escolha do modelo de difusão teve um impacto significativo na eficiência computacional, convergência e precisão dos resultados.

O modelo que incorpora o número de Lewis unitário mostrou uma demanda computacional substancialmente maior. Por outro lado, o modelo de Wilke e Lee se destacou pela eficiência, atingindo a convergência em um número significativamente menor de ite-

rações. A correlação proposta por Fuller, Schetter e Giddings também demonstrou uma eficiência computacional notável.

Ao analisar o perfil de temperatura, os resultados numéricos exibiram uma concordância satisfatória com os dados experimentais, com temperaturas em torno de 2100 K. No entanto, a análise das dimensões e formato da chama revelou variações entre os modelos. O modelo que considera o número de Lewis unitário apresentou o maior erro na altura da chama, enquanto a correlação de Fuller, Schetter e Giddings se aproximou mais dos resultados experimentais.

A investigação das dimensões da chama indicou a necessidade de melhorar a modelagem da anexação da chama, especialmente para reduzir o erro associado à posição de anexação (L2). A influência da geometria do combustor e das condições de contorno na anexação da chama também é destacada como um ponto crítico para futuros estudos.

Por fim, a análise dos coeficientes de difusão molecular revelou que o modelo de Fuller, Schetter e Giddings apresenta comportamentos mais realistas em comparação com os outros métodos avaliados. No entanto, é importante considerar que os coeficientes de difusão dependem fortemente da temperatura e das espécies envolvidas, e os resultados obtidos dependem da precisão dos dados termodinâmicos e cinéticos utilizados nos modelos.

Em suma, a escolha do modelo de difusão deve ser cuidadosamente ponderada, levando em consideração não apenas a precisão dos resultados, mas também a eficiência computacional, convergência e a capacidade de representar adequadamente fenômenos complexos, como a anexação da chama em combustores laminarmente difusivos.

Referências

- ASPDEN, A.; DAY, M.; BELL, J. Lewis number effects in distributed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, Elsevier, v. 33, n. 1, p. 1473–1480, 2011. Citado na página 32.
- BARLOW, R. et al. Scalar profiles and soot formation in laminar opposed-flow partially premixed methane/air flames. *Combustion and flame*, Elsevier, v. 127, n. 3, p. 2102–2118, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 41.
- BIRD, R.; STEWART, W.; LIGHTFOOT, E. *Transport Phenomena*. Wiley, 2006. (Transport Phenomena, v. 1). ISBN 9780470115398. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=L5FnNIIaGfcC>>. Citado 6 vezes nas páginas 25, 26, 28, 33, 34 e 47.
- BRANCO, N. N. *Estudo analítico do mecanismo de blowout de chamas de difusão turbulenta*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2013. Citado na página 15.
- BRÜBACH, J.; DREIZLER, A.; JANICKA, J. Gas compositional and pressure effects on thermographic phosphor thermometry. *Measurement Science and Technology*, IOP Publishing, v. 18, n. 3, p. 764, 2007. Citado na página 15.
- CENGEL, Y. A.; GHAJAR, A. J. *Heat and Mass Transfer: Fundamentals & Applications*. [S.l.]: McGraw Hill Education, 2015. Citado na página 36.
- CERFACS. *Ethylene/air combustion*. 2017. <<https://www.cerfacs.fr/cantera/mechanisms/eth.php#bfer>>. (Accessed on 06/02/2023). Citado 2 vezes nas páginas 22 e 47.
- CLARAMUNT, K. et al. Multidimensional mathematical modeling and numerical investigation of co-flow partially premixed methane/air laminar flames. *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 137, n. 4, p. 444–457, 2004. Citado na página 19.
- COELHO, P.; COSTA, M. Combustão. *Edições Orion*, v. 1, 2007. Citado na página 35.
- CREMASCO, M. A. *Fundamentos de transferência de massa*. [S.l.]: Editora Blucher, 2021. Citado 11 vezes nas páginas 7, 8, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 32 e 33.
- CUNHA, F. A. d. Modelo matemático para estudo de processos reativos de partículas de carvão e biomassa. 2010. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 49.
- CUNHA, F. A. d.; VERAS, C. A. G. Modelling laminar diffusion flames using a fast convergence three-dimensional cvfem code. *Combustion Theory and Modelling*, Taylor & Francis, v. 25, n. 3, p. 460–487, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 38.
- CUNHA, F. A. da; FERREIRA, P. F. P. Modelagem cfd da combustão com mecanismo de cinética química detalhada para escoamento incompressível laminar. *Revista Interdisciplinar de Pesquisa em Engenharia*, v. 6, n. 2, p. 81–91, 2020. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 46.

- CUOCI, A. et al. A computational tool for the detailed kinetic modeling of laminar flames: Application to c2h4/ch4 coflow flames. *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 160, n. 5, p. 870–886, 2013. Citado na página 19.
- DASGUPTA, A. *Numerical simulation of axisymmetric laminar diffusion flames with soot*. [S.l.]: The Pennsylvania State University, 2015. Citado na página 20.
- DENG, Q. hong. Numerical visualization of mass and heat transport for conjugate natural convection/heat conduction by streamline and heatline. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2002. Citado na página 23.
- DIAS, F. L. G. Projeto preliminar e simulação computacional de câmara de combustão de turbina a gás considerando a queima de biocombustíveis. 2011. Citado na página 24.
- FULLER, E. N.; SCHETTLER, P. D.; GIDDINGS, J. C. New method for prediction of binary gas-phase diffusion coefficients. *Industrial & Engineering Chemistry*, ACS Publications, v. 58, n. 5, p. 18–27, 1966. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 48.
- GIACOMAZZI, E. A review of chemical diffusion: Criticism and limits of simplified methods for diffusion coefficient calculation. *Combustion Theory and Modelling*, 2008. Citado na página 36.
- HOERLLE, C. A. *Simulação numerico computacional de chamas difusivas laminares*. Porto Alegre, RS, Brasil: [s.n.], 2012. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 52.
- HOERLLE, C. A. Estudo numérico de chamas laminares difusivas de ch4 diluído com co2 empregando mecanismos cinéticos globais e a técnica flamelet-generated manifold. 2015. Citado 4 vezes nas páginas 34, 35, 36 e 37.
- IMREN, A.; HAWORTH, D. On the merits of extrapolation-based stiff ode solvers for combustion cfd. *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 174, p. 1–15, 2016. Citado na página 44.
- KAMMA, P.; SUVANJUMRAT, C. Uma nova modelagem de fluxo de difusão para simulação de chama laminar pré-misturada com openfoam. *Resultados em Engenharia*, Elsevier, v. 20, p. 101–462, 2023. Citado na página 20.
- KUO, K. K. Principles of combustion. Elsevier Science Pub. Co. Inc., New York, NY, 1986. Citado na página 46.
- LAW, C. Combustion physics. cambridge university press. *New York, USA*, p. 89–96, 2006. Citado na página 15.
- LAW, C. K. *Combustion physics*. [S.l.]: Cambridge university press, 2010. Citado na página 33.
- LI, H. et al. Effect of pressure and type of fuel on laminar diffusion flame height at subatmospheric pressures. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*, Springer, v. 51, p. 389–396, 2015. Citado na página 52.
- LOSEY, J.; SADUS, R. J. The widom line and the lennard-jones potential. *The Journal of Physical Chemistry B*, ACS Publications, v. 123, n. 39, p. 8268–8273, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 33.

- MCALLISTER, S.; CHEN, J.-Y.; FERNANDEZ-PELLO, A. C. *Fundamentals of combustion processes*. [S.l.]: Springer, 2011. v. 302. Citado na página 23.
- MCBRIDE, B. J. *Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species*. [S.l.]: National Aeronautics and Space Administration, Office of Management . . . , 1993. v. 4513. Citado na página 46.
- MERLO, A. A. *Mecanismos de reação*. 2009. <http://www.iq.ufrgs.br/lasomi/materiais/Mecanismos_de_reacao_-_parte_I.pdf>. (Accessed on 07/05/2023). Citado na página 22.
- MUNSON, B. R.; YOUNG, D. F.; OKIISHI, T. H. *Fundamentals of Fluid Mechanics*. [S.l.]: Wiley, 2013. Citado na página 35.
- NEUFELD, P. D.; JANZEN, A.; AZIZ, R. Empirical equations to calculate 16 of the transport collision integrals ω (l, s)* for the lennard-jones (12–6) potential. *The Journal of chemical physics*, American Institute of Physics, v. 57, n. 3, p. 1100–1102, 1972. Citado na página 31.
- OLIVEIRA, C. E. L. d. *Estudo computacional da formação de fuligem em chamas de difusão*. Brasília, DF, Brasil: [s.n.], 2023. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 48.
- PANEK, N. *An investigation of ethylene laminar diffusion flames at sub-atmospheric pressures to simulate microgravity*. [S.l.]: Master's thesis, University of Toronto, 2009. 138 References, 2010. Citado 5 vezes nas páginas 7, 48, 49, 51 e 57.
- PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. [S.l.]: CRC Press, 1980. Citado na página 43.
- POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P. *Properties of gases and liquids*. [S.l.]: McGraw-Hill Education, 2001. Citado na página 30.
- PRESENT, R. Chapman–enskog method in chemical kinetics. *The Journal of Chemical Physics*, American Institute of Physics, v. 48, n. 11, p. 4875–4877, 1968. Citado 3 vezes nas páginas 31, 33 e 48.
- SAABAS, H.; BALIGA, B. Co-located equal-order control-volume finite-element method for multidimensional, incompressible. fluid flow-part i: formulation. *Numerical Heat Transfer*, Taylor & Francis, v. 26, n. 4, p. 381–407, 1994. Citado na página 39.
- SAUER, T. *Numerical Analysis*. [S.l.]: Pearson Higher Ed, 2012. Citado na página 38.
- SHEIKHOESLAMI, M. *Application of Control Volume Based Finite Element Method (CVFEM) for Nanofluid Flow and Heat Transfer*. [S.l.]: Elsevier, 2018. Citado na página 38.
- SILVA, A. S. da; BRITTO, A. L. M.; FERREIRA, R. M. da S. Aplicação da teoria do livre caminho médio no estudo da difusão. *Revista Eletrônica de Ciências Exatas e Tecnológicas*, n. 3, 2022. Citado na página 27.
- SMITH, G. et al. *GRI-Mech 3.0*. 1999. <http://www.me.berkeley.edu/gri_mech>. Accessed: 2023-11-20. Citado na página 20.

- SOUZA, C. P. d.; BALTHAZAR, J. M. *Métodos Numéricos para Cálculo Científico*. [S.l.]: Editora da UFSC, 2010. Citado na página 40.
- SU, M. Low-speed flow simulation by the gas-kinetic scheme. *Journal of Computational Physics*, 1999. Citado na página 36.
- THOMSON, K. A. et al. Soot concentration and temperature measurements in co-annular, nonpremixed ch₄/air laminar flames at pressures up to 4 mpa. *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 140, n. 3, p. 222–232, 2005. Citado na página 48.
- URNS, S. *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. McGraw-Hill, 2000. (An Introduction to Combustion: Concepts and Applications, v. 1). ISBN 9780072350449. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=Qx5LAQAAIAAJ>>. Citado 7 vezes nas páginas 7, 15, 22, 23, 24, 36 e 40.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. [S.l.]: Pearson education, 2007. Citado 5 vezes nas páginas 17, 23, 39, 43 e 44.
- WARNATZ, J. et al. *Combustion*. [S.l.]: Springer, 2006. Citado na página 15.
- WESTBROOK, C. K.; DRYER, F. L. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combustion science and technology*, Taylor & Francis, v. 27, n. 1-2, p. 31–43, 1981. Citado 3 vezes nas páginas 16, 41 e 42.
- WHEATCRAFT, S. Fractional conservation of mass. *Advances in Water Resources*, 2008. Citado na página 34.
- WILKE, C.; LEE, C. Estimation of diffusion coefficients for gases and vapors. *Industrial & Engineering Chemistry*, ACS Publications, v. 47, n. 6, p. 1253–1257, 1955. Citado 3 vezes nas páginas 31, 33 e 48.
- XU, C.; KONNOV, A. A. Validation and analysis of detailed kinetic models for ethylene combustion. *Energy*, v. 43, n. 1, p. 19–29, 2012. ISSN 0360-5442. 2nd International Meeting on Cleaner Combustion (CM0901-Detailed Chemical Models for Cleaner Combustion). Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360544211007249>>. Citado na página 16.
- XU, H. et al. Influence of preheating and burner geometry on modeling the attachment of laminar coflow ch₄/air diffusion flames. *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 191, p. 381–393, 2018. Citado 4 vezes nas páginas 20, 53, 54 e 55.
- XU, Y.; SMOOKE, M. D. Application of a primitive variable newton's method for the calculation of an axisymmetric laminar diffusion flame. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 104, n. 1, p. 99–109, 1993. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.
- YANG, W. et al. Hydrated eutectic electrolytes with ligand-oriented solvation shells for long-cycling zinc-organic batteries. *Joule*, Cell Press, v. 4, n. 7, p. 1557–1574, jul. 2020. ISSN 2542-4785. Citado na página 16.
- ZHENG, S. et al. Effects of c₂h₂ and c₂h₄ radiation on soot formation in ethylene/air diffusion flames. *Applied Thermal Engineering*, Elsevier, v. 183, p. 116194, 2021. Citado na página 41.