

6

Resultados do Estudo Numérico do Queimador de “Spray” de Nakamura *et al.* (2011)

Neste capítulo são apresentados os resultados de simulação no FluentTM, de um queimador não pré-misturado de porte laboratorial, desenvolvido e estudado experimentalmente por Nakamura *et al.* (2008) e Nakamura *et al.* (2011). A relação entre a estrutura da chama, o comportamento das gotículas de querosene e a formação da fuligem foram determinadas como função da pressão de operação. Os resultados numéricos obtidos para pressões de 0, 1 e 0, 3 MPa são comparados com aqueles de Nakamura *et al.* (2011). Isto permitirá discutir a validade dos modelos empregados na simulação. O intuito desta comparação é a avaliação da capacidade preditiva dos modelos utilizados para a simulação da multifísica que envolve a combustão em “sprays”. Assim, a abordagem lagrangiana-euleriana de descrição de “sprays” (ver seção 3.3.3) será acrescentada aos modelos utilizados no capítulo precedente, a fim de descrever a combustão turbulenta não pré-misturada do querosene com o oxigênio e levando em conta a transferência de calor por radiação e a formação/consumo da fuligem.

A Figura 6.1 mostra, de maneira esquemática, a estrutura do queimador de Nakamura *et al.* (2011), o qual apresenta uma configuração cilíndrica. Os reagentes, querosene líquido e oxigênio ingressam, na mesma direção (*coflow*), pela parte inferior do vaso de pressão. Neste trabalho o querosene foi substituído por n-heptano. Cabe ressaltar que o uso do n-heptano como combustível é necessário pois, (i) inexistem mecanismos cinéticos detalhados que permitam simular a queima do querosene como sendo composto de mistura de hidrocarbonetos alifáticos, naftênicos e aromáticos, (ii) embora a oxidação de hidrocarbonetos pesados seja descrita por centenas de espécies e milhares de reações elementares, no FluentTM a geração de biblioteca de elementos de chama é limitada a 50 reações elementares e (iii) dentre os mecanismos cinéticos reduzidos disponíveis para a descrição da cinética das reações de combustíveis líquidos, o mecanismo esqueleto de n-heptano de Wisconsin (Patel *et al.*, 2004) é o que maior afinidade cinética possui com o querosene.

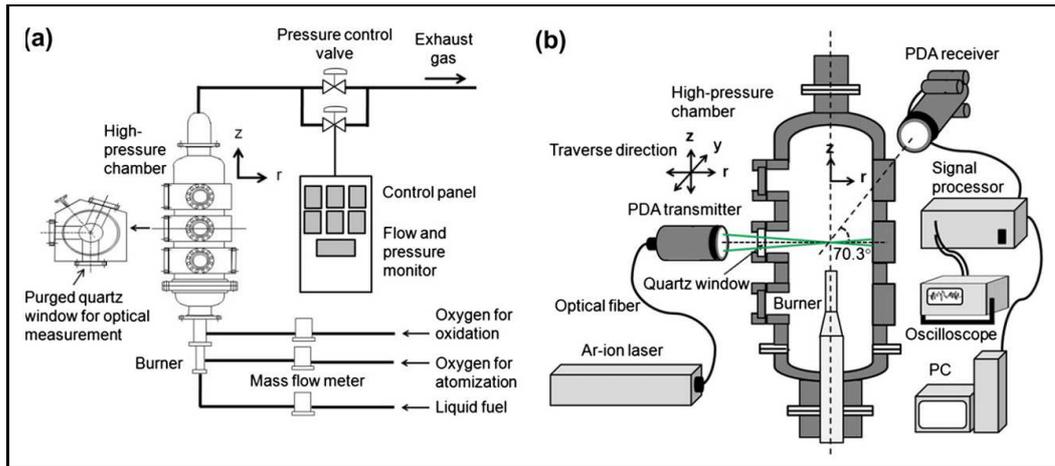


Figura 6.1: Diagrama esquemático do queimador (a) sistema de fornecimentos e (b) bancada experimental PDA (Nakamura et al., 2011).

6.1 Geometria e da Malha do Queimador de Nakamura et al. (2011)

Apresenta-se, na Figura 6.2, o domínio computacional utilizado nas simulações, o qual corresponde à parte da configuração física do queimador de Nakamura et al. (2011) na qual a chama é visualmente detectada. O domínio computacional é criado pelo software Design-ModelingTM, e representa um volume de forma *fatia de pizza*, com uma região circular de 3°, um diâmetro externo de 50 mm e um comprimento de 240 mm. Estas dimensões representam apenas a região na qual foram medidos os dados experimentais, pois a câmara de combustão pressurizada possui 150 mm de diâmetro externo e 1.408 mm de comprimento (Nakamura et al., 2011). Um estudo da influência da extensão do domínio computacional sobre o resultado obtido se encontra fora do escopo deste trabalho.

Neste queimador a entrada de querosene é realizada pela parte inferior através do duto de 5 mm de comprimento e de 0,49 mm de diâmetro, enquanto que a entrada oxigênio acontece na mesma direção do jato do querosene (*coflow*) por um espaço anular de 0,5 mm de diâmetro interno e de 11,9 mm de diâmetro externo.

O domínio computacional é dividido em 7 partes (sub-domínios), as quais, mediante o emprego do software Meshing-Grid, são discretizadas 177.560 elementos hexaédricos não uniformes arranjados sobre 357.636 nós. A Figura 6.2b mostra o alto grau de refino atingido após a discretização. Elementos com arestas de tamanhos no mínimo 35 μm são encontrados na região de entrada do combustível. O alongamento (razão de aspecto) das arestas dos volumes hexaédricos variam entre 1,35 e 94,3, enquanto que a taxa de crescimento (*Bias*

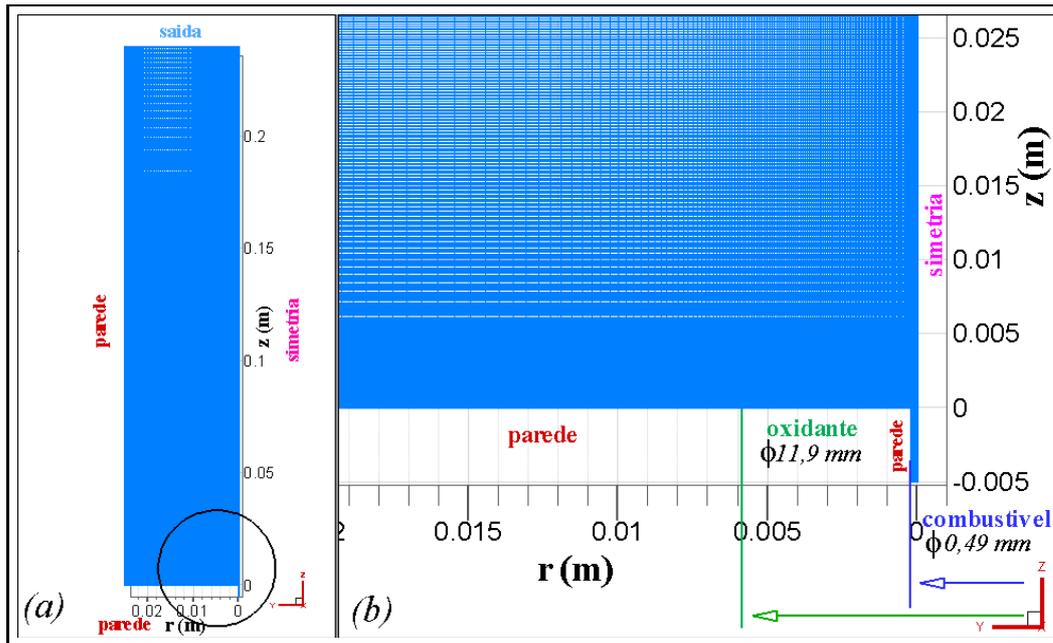


Figura 6.2: Domínio computacional do queimador de Nakamura *et al.* (2011) empregado nas simulações. (a) Vista global, (b) Detalhe da malha na região de entrada dos reagentes.

Factor) oscila entre 1 (malha uniforme) localizada na região de fornecimento de combustível e 5 (máximo) situada na região próxima à saída do escoamento.

6.2 Condições de Operação e de Contorno

Pressões de 0, 1 e 0, 3 MPa são consideradas nas simulações onde é levada em conta a aceleração da gravidade, com $g = 9,81 \text{ m/s}^2$. Na Tabela 6.1 são detalhadas as condições iniciais e de contorno do domínio computacional. Nesta tabela, $U_{z,0}$ é a velocidade longitudinal na entrada de n-heptano líquido e do oxidante (quando é empregado como oxidante e gás atomizador), \dot{m} é a vazão mássica de entrada do combustível, $X_{n-C_7H_{16}}$ e X_{O_2} , são as frações molares do n-heptano e oxigênio, \tilde{Z} e \tilde{Z}''^2 são a média e a variância da fração de mistura, \tilde{k} é a energia cinética turbulenta, $\tilde{\epsilon}$ é a taxa de dissipação da energia cinética da turbulência.

Também nota-se da Tabela 6.1, que a vazão mássica de n-heptano (em forma de gotículas) que ingressa no domínio através da seção transversal do duto de combustível (*fatia de pizza* de 3°) corresponde à 1/120 da vazão mássica de querosene ($1.65 \times 10^{-4} \text{ kg/s}$) fornecida ao queimador de Nakamura *et al.* (2011). A velocidade de oxigênio que ingressa no domínio computacional, tanto como oxidante quanto como gás atomizador, também foi calculada em função das vazões prescritas por Nakamura *et al.* (2011),

Tabela 6.1: Condições de contorno utilizadas nas simulações do queimador de Nakamura *et al.* (2011).

REGIÃO	PARÂMETROS
Entrada de Combustível	Combustível: n-Heptano Líquido ($n - C_7H_{16}$) $\dot{m} = 1,375 \times 10^{-6}$ kg/s ($U_{z,0} = 67$ m/s), $T_0 = 300$ K, $\bar{d}_p = 5 \mu\text{m}$ (monodisperso).
Entrada de Oxidante	Oxidante: Oxigênio Gasoso (O_2) $U_{z,0} = 10,8$ m/s, $k = 1$ m ² /s ² , $\varepsilon = 46$ m ² /s ³ , $T_0 = 300$ K, $X_{O_2} = 1$, $\tilde{Z} = 0$, $\widetilde{Z''^2} = 0$
Atomização	Gás Utilizado para a Atomização: Oxigênio Gasoso (O_2) $U_{z,0} = 75,8$ m/s, $k = 254$ m ² /s ² , $\varepsilon = 245.000$ m ² /s ³ , $T_0 = 300$ K, $X_{O_2} = 1$, $\tilde{Z} = 0$, $\widetilde{Z''^2} = 0$
Paredes	Tipo: superfície não deslizante $T_0 = 300$ K, $\epsilon = 1$ (emissividade interna)
Saída	$\epsilon = 0$ (emissividade interna)

iguais a $1,17 \times 10^{-3}$ e $1,5 \times 10^{-5}$ m³/s, respectivamente. Cabe ressaltar que estes parâmetros de entrada são mantidos constantes nas duas condições de operação.

Os parâmetros de entrada da turbulência ($k-\varepsilon$), foram calculados mediante a hipótese de intensidades turbulentas iguais a 5% para o oxidante e 17% para o atomizador. Para ambas entradas de fluido, considerou-se uma razão entre a viscosidade turbulenta e a viscosidade molecular de 100.

As equações de transporte de massa, quantidade de movimento e energia, e aquelas relativas às formulações dos modelos $k-\varepsilon$ e elementos de chama não adiabático (*Non-adiabatic steady flamelet*), foram considerados para a descrição da aerotermodinâmica do escoamento no queimador de Nakamura *et al.* (2011). Além disso os modelos, de ordenadas discretas (DOM), para o cálculo do transporte da radiação, de Moss-Brookes (MB), para a descrição da formação/consumo da fuligem, junto com os modelos de soma poderada dos gases cinzas [com dados de Smith *et al.* (1982)] e a formulação de Sazhin (1994) [WSGGM(Smith)&Sazhin], assim como as formulações lagrangeanas do fluido fase discreta (*Discret Phase Model, DPM*) são usadas para descrever a transferência de energia por radiação, a formação/consumo da fuligem e o transporte e vaporização/ebulição de gotículas do n-heptano. A Tabela 6.2 mostra os parâmetros utilizados no modelo de Moss-Brookes, idênticos aos empregados por Brookes e Moss (1999) para descrever a combustão turbulenta de metano e ar, com a única substituição de C_γ de 11.700 para 8.000 kg-m/kmol-s. Este valor foi estabelecido nas simulações do capítulo precedente, e tem como

Tabela 6.2: Constantes do modelo Moos-Brookes empregados para simulação do queimador de Nakamura *et al.* (2011).

CONSTANTE	VALOR
C_α	54 s^{-1} (constante da taxa de inepção)
T_α	21.000 K (temperatura de ativação da inepção)
C_β	1 (constante da taxa de coagulação)
C_γ	$8.000 \text{ kg}\cdot\text{m}/\text{kmol}\cdot\text{s}$ (fator de escala da taxa de crescimento de superfície)
T_γ	12.100 K (temperatura de ativação da taxa de crescimento de superfície)
C_ω	$105,8125 \text{ kg}\cdot\text{m}\cdot\text{kmol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1/2}\cdot\text{s}^{-1}$ (Constante de oxidação)
η_{coll}	0,04 (parâmetro da eficiência de colisão)
C_{oxid}	0,8 (parâmetro da taxa de escalagem da oxidação)

influência reduzir a taxa de crescimento da fuligem.

Para simular o transporte e a vaporização/ebulição de gotículas de combustível através das formulações de fase discreta (DPM), considera-se a cada passo de tempo, $\Delta t_{inj} = 1 \mu\text{s}$, o lançamento de 63 gotículas de n-heptano monodispersas de forma esférica, de $5 \mu\text{m}$ de diâmetro. Estas gotículas possuem massa de, $\Delta M_p = \dot{m} \times \Delta t_{inj} = 1,375 \times 10^{-12} \text{ kg}$, temperatura inicial de 300 K , e velocidade longitudinal de 67 m/s . Cabe ressaltar que as 63 gotículas são distribuídas em 7 grupos de 9 gotículas cada. Esta divisão está diretamente relacionada à divisão do número de volumes de controle na direção radial do bico injetor.

O passo do tempo do meio contínuo para a simulação transiente do escoamento foi adotado como sendo igual ao dobro da passo do tempo da injeção das gotículas, $\Delta t_{cont} = 2\Delta t_{inj} = 2 \mu\text{s}$, a fim de reduzir o tempo de processamento. Assim, a injeção de gotículas de combustível é realizada duas vezes consecutivas antes de iniciar a iteração do meio contínuo.

Cabe ressaltar que o número mínimo de iterações necessários de forma a obter uma convergência é de cerca de 1.500 por passo de tempo do meio contínuo. Assim, para manter uma solução estável, é necessário de um mínimo de 2.000 passos de tempo do meio contínuo. Isto leva a um custo computacional total de 300.000 iterações. Uma vez que a velocidade de iteração máxima atingida na simulação em paralelo com 22 processadores Quad-Core AMD OpteronTM Processor 2350 de 8 núcleos, 2 Ghz e 32 Gb de memória RAM é de 1,0 s/iteração, o tempo necessário para atingir uma solução estável é de aproximadamente 35 dias.

6.3

Resultados e Discussões

Nesta seção, os resultados da simulação do queimador a 0,1 e 0,3 MPa, são comparados com aqueles obtidos dos experimentos de Nakamura *et al.* (2008) e Nakamura *et al.* (2011). A apresentação é dividida em (i) estrutura da chama, (ii) radiação, e formação/oxidação da fuligem, e (iii) transporte e evaporação/ebulição de gotículas de combustível.

6.3.1

Estrutura da Chama

Os campos de temperatura e da fração mássica de fuligem obtidos para as pressões de 0,1 e 0,3 MPa são apresentados nas Figuras 6.3 e 6.4. Nota-se também imagens da luminosidade direta da chama, para cada pressão de operação (Figuras 6.3c e 6.4c), as quais foram obtidos por Nakamura *et al.* (2011) com uma câmera digital de uso doméstico Everio GZ-MG275. Além disso, nas Figuras 6.3b e 6.4b a escala de temperaturas inferiores a 1.650 K foi intencionalmente desconsiderada de forma a identificar a região da envelope de chama perceptível para olho humano. A escolha deste valor parte da premissa de que o início da formação da fuligem (*inception*), na combustão de uma grande maioria de hidrocarbonetos, acontece acima de 1.650 K (Glassman e Yetter, 2008).

Para a pressão de 0,1 MPa (ver Figura 6.3), é possível observar uma razoável similitude, no que diz respeito à estrutura da chama simulada (caracterizada por temperaturas acima de 1.650 K), quando comparada com o envelope de chama fotografado por Nakamura *et al.* (2011), pelo menos para uma altura inferior a 100 mm. Enquanto a envelope da chama registrado por Nakamura *et al.* (2011) possui um comprimento médio de 223 mm, os resultados numéricos evidenciam um comprimento de 220 mm. Note-se que, para alturas superiores a 100 mm, parece haver uma discrepância entre a extensão lateral da incandescência experimental e a temperatura simulada.

Uma análise mais detalhada permite verificar que a região interna da envelope da chama prevista pela simulação apresenta certa coincidência com a isolinha de fração mássica da fuligem de $8,5 \times 10^{-4}$. Esta constatação permitiria assumir, para fins de exposição, que os valores de 1.650 K e $8,5 \times 10^{-4}$ representam, respectivamente, os valores mínimos de temperatura e fração mássica de fuligem no escoamento necessários para atingir a incandescência, definida aqui (grosseiramente) como a energia térmica radiante que emite um corpo na faixa de comprimento de onda do espectro visível.

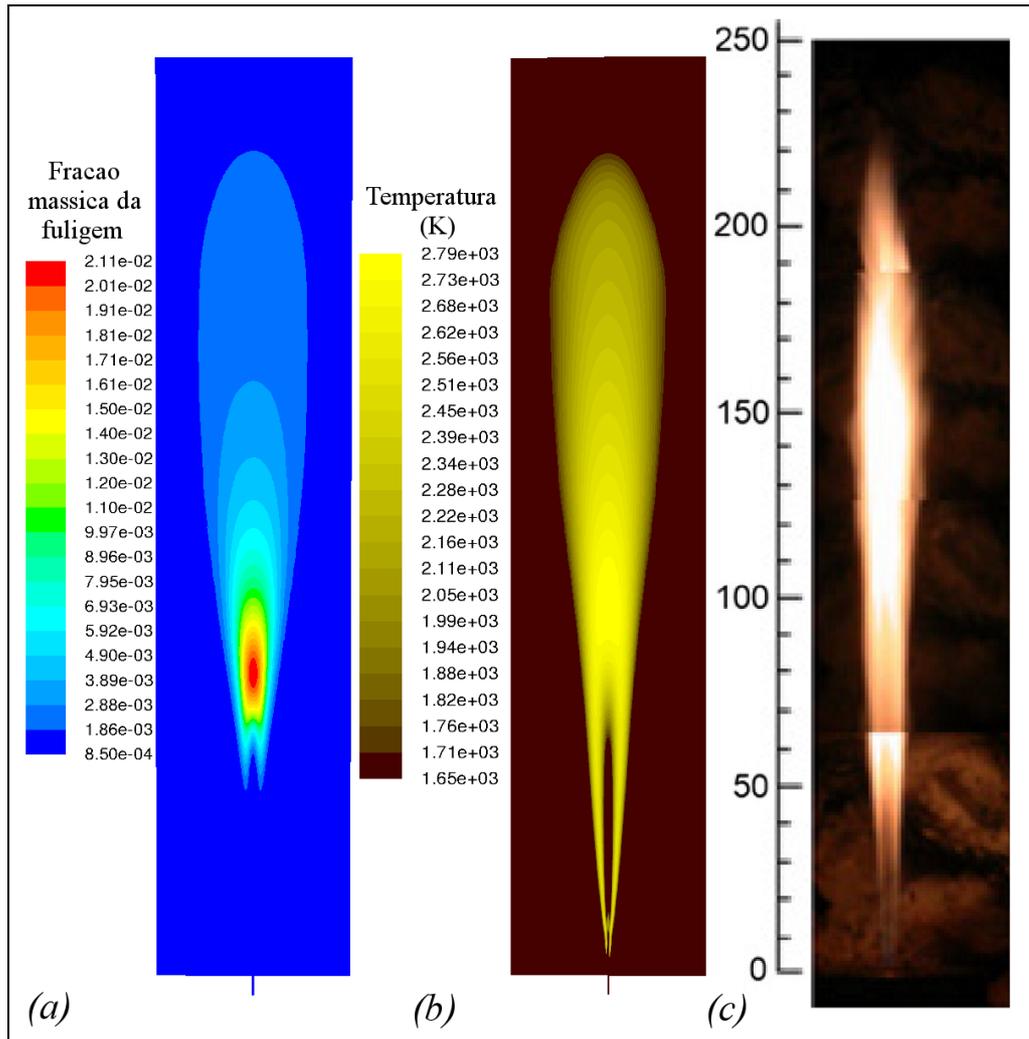


Figura 6.3: Fração mássica da fuligem e temperatura obtidos da simulação do queimador de Nakamura *et al.* (2011) a 0,1 MPa. O campo de temperatura foi comparado com imagens de chama.

De modo similar à Figura 6.3, são apresentadas na Figura 6.4 os campos de temperatura e da fração mássica da fuligem para pressão de 0,3 MPa. Neste caso, a simulação prevê um envelope da chama (caracterizada pela região interna à isoterma de $T = 1.650$ K) cujo comprimento é menor do que o obtido para pressão de 0,1 MPa. Este comportamento foi também observado nos experimentos, onde a redução do comprimento da envelope de chama calculado, 136 mm para $p = 0,3$ MPa, concorda com aquele oriundo das imagens de chama obtidas por Nakamura *et al.* (2011), 120 mm (ver Figuras 6.4b e 6.4c). Embora as principais razões deste comportamento não tenham sido completamente elucidadas, acredita-se que este fenômeno acontece devido, principalmente, ao aumento do transporte turbulento que ocorre quando se aumenta a pressão. Este aumento da turbulência é oriundo do maior cisalhamento provocado, para a mesma velocidade do oxidante, pela

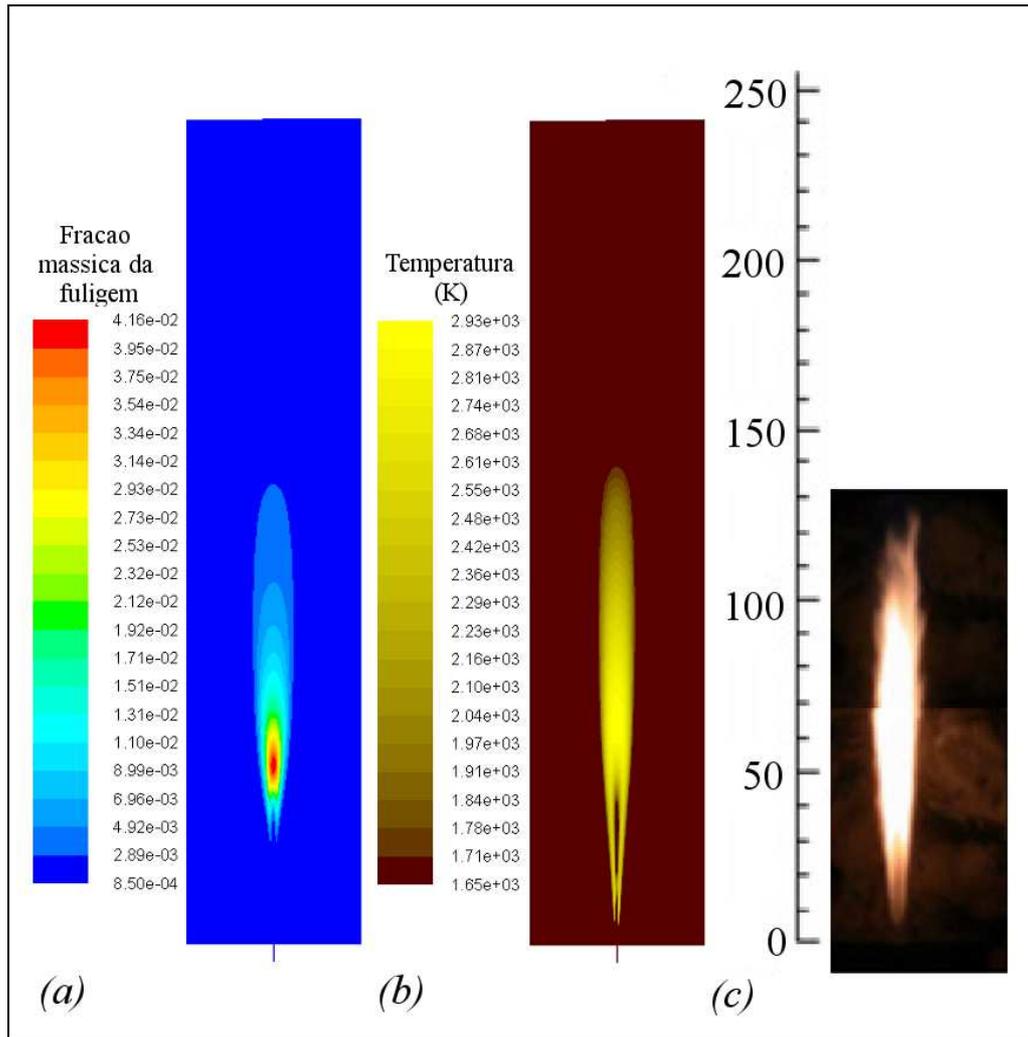


Figura 6.4: Fração mássica da fuligem e temperatura obtidos da simulação do queimador de Nakamura *et al.* (2011) a 0,3 MPa. O campo de temperatura foi comparado com imagens de chama.

redução da velocidade do escoamento de combustível, consequência do uso de uma mesma vazão mássica para ambas pressões. Esta explicação, simplificada, concorda com a análise apresentada por Borghi e Champion (2000), a qual estabelece que, para uma chama laminar de difusão, o comprimento da chama é proporcional a $\dot{m}/\rho d$.

Frações mássicas de fuligem superiores a $8,5 \times 10^{-4}$ correspondem a uma região do escoamento cuja forma e tamanho são similares à da região de temperatura envolvida pela isoterma de 1650 K e à região do envelope de chama fotografada por Nakamura *et al.* (2011). Neste caso particular é corroborada a hipótese de que a incandescência da fuligem que pode ser distinguida pelo olho humano corresponde a valores de Y_{soot} e T superiores a $8,5 \times 10^{-4}$ e 1.650 K, respectivamente.

As Figuras 6.5 e 6.6 apresentam os campos de componente longitudinal

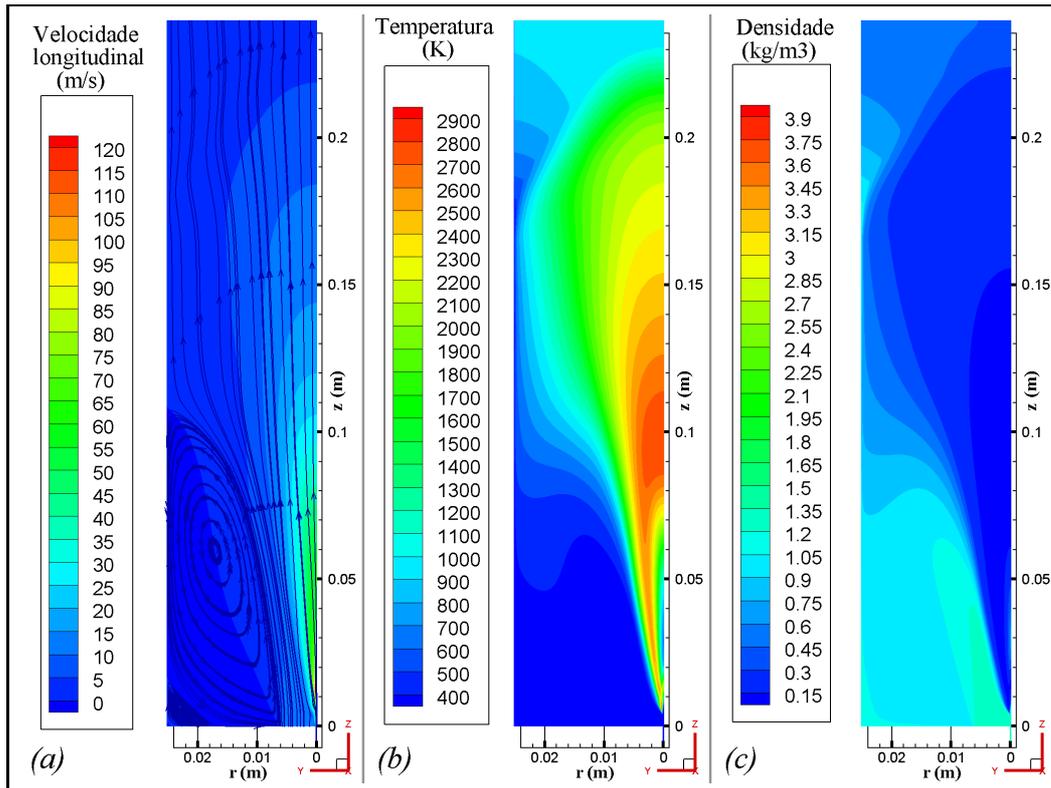


Figura 6.5: Campos de componente longitudinal de velocidade, temperatura e pressão obtidos para o queimador de Nakamura *et al.* (2011) para 0,1 MPa.

da velocidade, temperatura e densidade, calculados para pressões de 0,1 e 0,3 MPa, respectivamente. A comparação dos campos de velocidade do escoamento (ver Figuras 6.5a e 6.6a), permite verificar a sua estrutura não é apreciavelmente modificada quando a pressão é incrementada de 0,1 para 0,3 MPa. Apenas o valor máximo da velocidade, 121 m/s, para $p = 0,1$ MPa, é reduzido para 84 m/s quando $p = 0,3$ MPa. Esta redução é devida ao aumento da densidade do escoamento, o que levaria a uma mudança na dinâmica do escoamento e de sua interação com as gotículas de n-heptano.

As Figuras 6.5b e 6.5c evidenciam claramente a variação do campo de temperatura como resultado do incremento da pressão do queimador. Assim, nota-se a existência de regiões de altas temperaturas, que são maiores em extensão para $p = 0,1$ MPa do que aquelas obtidas para $p = 0,3$ MPa. As causas desta variação foram discutidas na análise do envelope de chama apresentada acima.

Além disso é percebido, nas Figuras 6.5b e 6.6b, um aumento da temperatura máxima do escoamento de 2.750 K para 2.950 K, quando a pressão de operação do queimador é incrementada de 0,1 MPa para 0,3 MPa. Acredita-se que este acréscimo se encontra diretamente relacionado à termoquímica de equilíbrio das espécies participantes na combustão. Classicamente, à medida

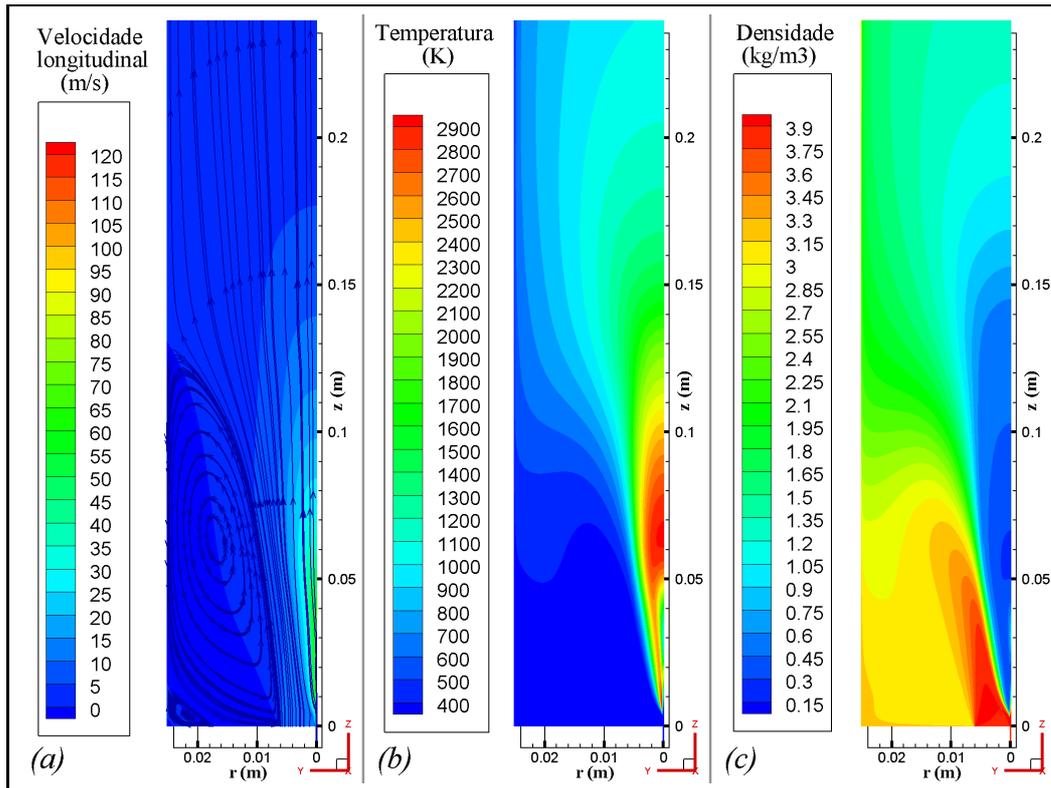


Figura 6.6: Campos de componente longitudinal de velocidade, temperatura e pressão obtidos pela simulação do queimador de Nakamura *et al.* (2011) para 0,3 MPa.

que a pressão é incrementada, o número de moles de espécies químicas dissociadas é também reduzido (Glassman e Yetter, 2008), o que resulta em um incremento na temperatura dos produtos da combustão.

A comparação entre as Figuras 6.5c e 6.6c mostra, também, que a densidade aumenta com a pressão, acréscimo que é consequência direta da equação dos gases perfeitos.

Nas Figuras 6.7 e 6.8, apresenta-se a comparação, em duas seções transversais, entre a distribuição da temperatura dos gases calculada e os resultados experimentais obtidos por Nakamura *et al.* (2011). Cabe resaltar que a temperatura foi medida por Nakamura *et al.* (2011) empregando método de duas cores, que usa uma correlação empírica entre concentração de fuligem e temperatura dos gases. No presente estudo não se busca pós-processar os resultados de cálculo a fim de obter, a partir da concentração da fuligem e do caminho óptico, um valor de temperatura de natureza semelhante ao medido. Assim os resultados de comparação são apenas qualitativos.

Antes de discutir os resultados de temperatura, cabe ressaltar que o método de duas cores empregada por Nakamura *et al.* (2011) é caracterizado por valores de incerteza experimental de até $\pm 15\%$, tipicamente (Duwel *et al.*,

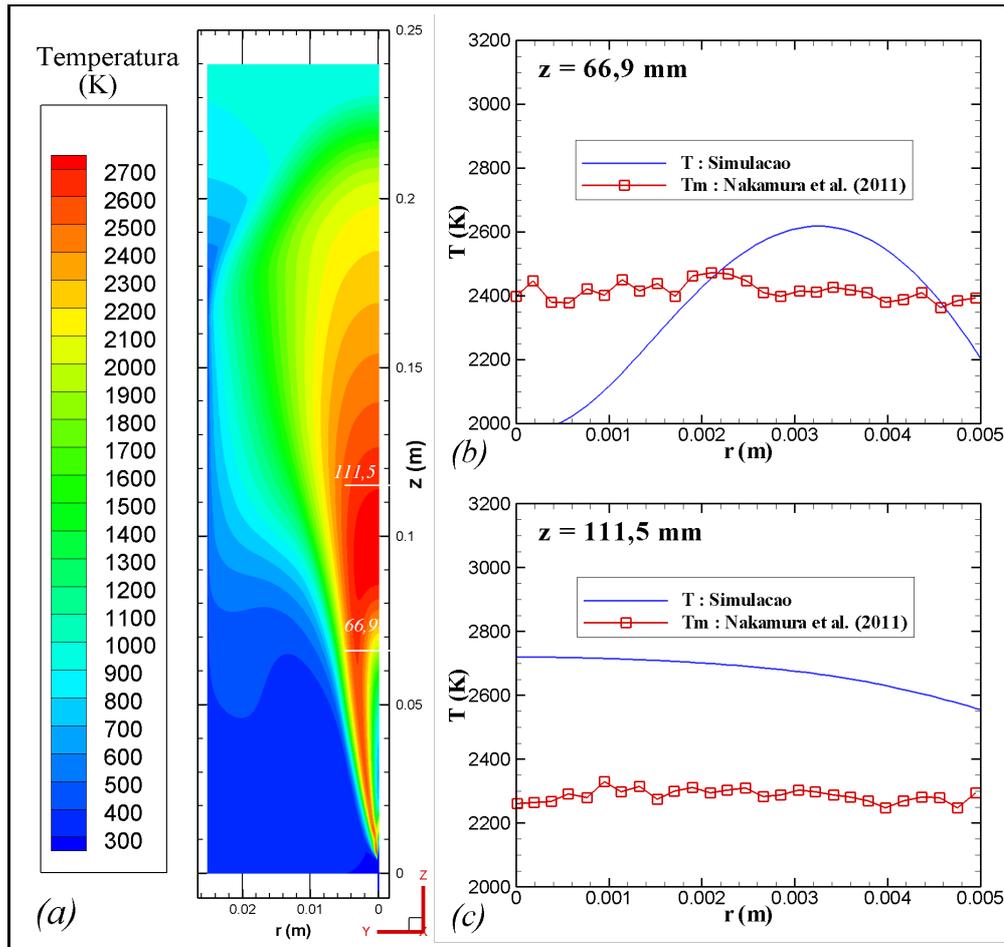


Figura 6.7: Distribuição radial de temperatura para z iguais a (a) 66,9 mm e (b) 111,5 mm, obtidos do experimento de Nakamura *et al.* (2011) e da simulação numérica para 0,1 MPa. .

2007). Além disto, as medidas foram realizadas em volumes extremamente reduzidos, o que coloca dúvidas no que diz respeito à incerteza associada à posição das medidas devido às limitações que poderiam estar associadas à distorção dos feixes luminosos. Os resultados experimentais de Nakamura *et al.* (2011) apresentam incertezas da temperatura, para $r = 1$ mm de ± 250 K.

A Figura 6.7 apresenta, para 0,1 MPa, a comparação entre a simulação e o experimento do perfil de temperatura como função do raio, para valores de z iguais a 66,9 mm (Figura 6.7b) e 115,5 mm (Figura 6.7c). Os resultados experimentais obtidos por Nakamura *et al.* (2011) mostram temperaturas praticamente constantes de 2.400 e 2.250 K nestas posições. Por outro lado, a distribuição calculada exibe uma variação não monotônica com r em $z = 66,9$ mm, apresentando valores mínimo e máximo de 2.000 e 2.600 K em r igual a 0,4 e 3,4 mm, respectivamente.

Em $z = 111,5$ mm, a temperatura calculada apresenta um comportamento ligeiramente decrescente com r , sendo que seu valor máximo, 2.700 K,

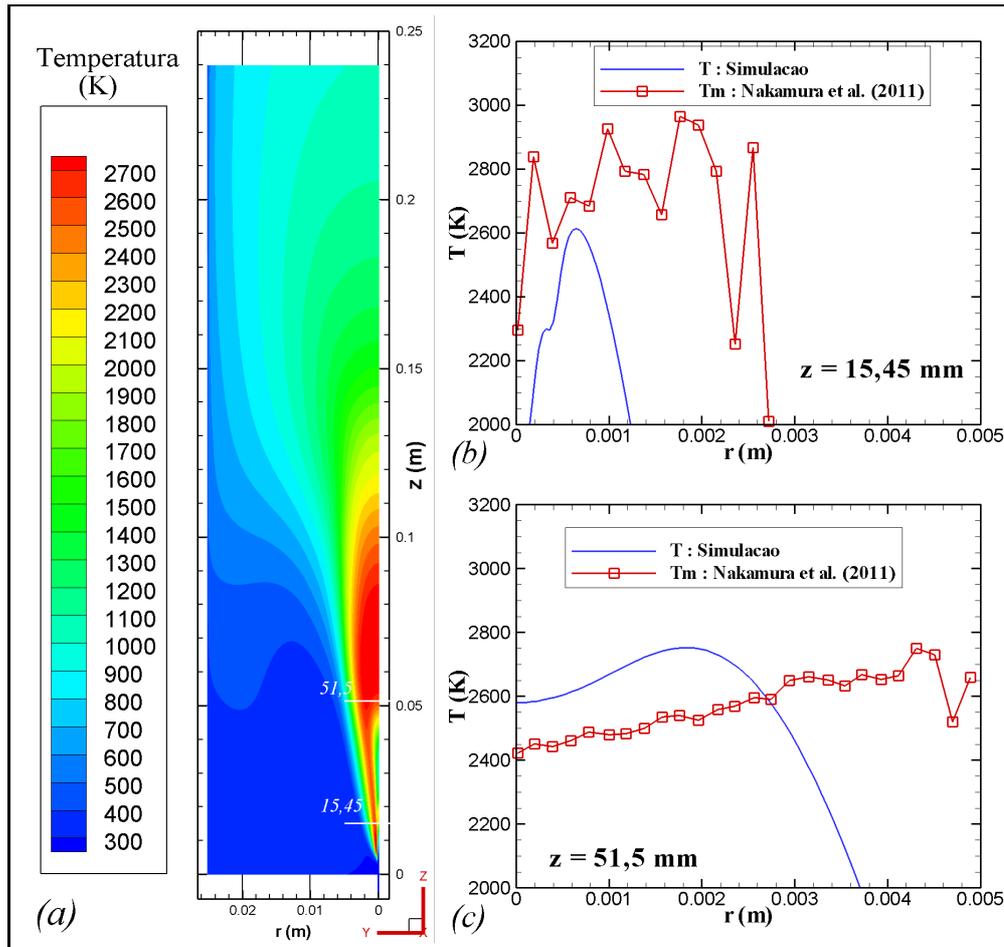


Figura 6.8: Distribuição radial de temperatura para z iguais a (a) 15,45 mm e (b) 51,5 mm, obtidos do experimento de Nakamura *et al.* (2011) e da simulação numérica. Para 0,3 MPa

é localizado em $r = 0$ mm, valor que cai para $T = 2.550$ K em $r = 5$ mm. Note-se que, de modo geral, as temperaturas medidas são menores da que as calculadas.

No caso de $p = 0,3$ MPa, mostrado na Figura 6.8, os valores obtidos de temperatura a $z = 15,45$ mm são consideravelmente menores do que os experimentais. Os resultados experimentais de Nakamura *et al.* (2011) registram temperaturas acima de 2.000 K para $r < 2,7$ mm, já as temperaturas calculadas são maiores do que 2.000 K apenas para desde $0,2 \leq r \leq 1,2$ mm.

Em $z = 51,5$ mm, a temperatura resultante da simulação varia de 2.600 K ($r = 0$ mm) para um máximo local de 2.750 K ($r = 1,8$ mm), sendo que este incremento é sempre maior, de cerca de 200 K, do que o exibido no experimento. No entanto, para $r > 1,8$ mm, a temperatura obtida da simulação cai de maneira abrupta, enquanto que a temperatura registrada dos resultados experimentais cresce monotonicamente até atingir um máximo de 2.700 K, que é obtido para $r = 4,3$ mm.

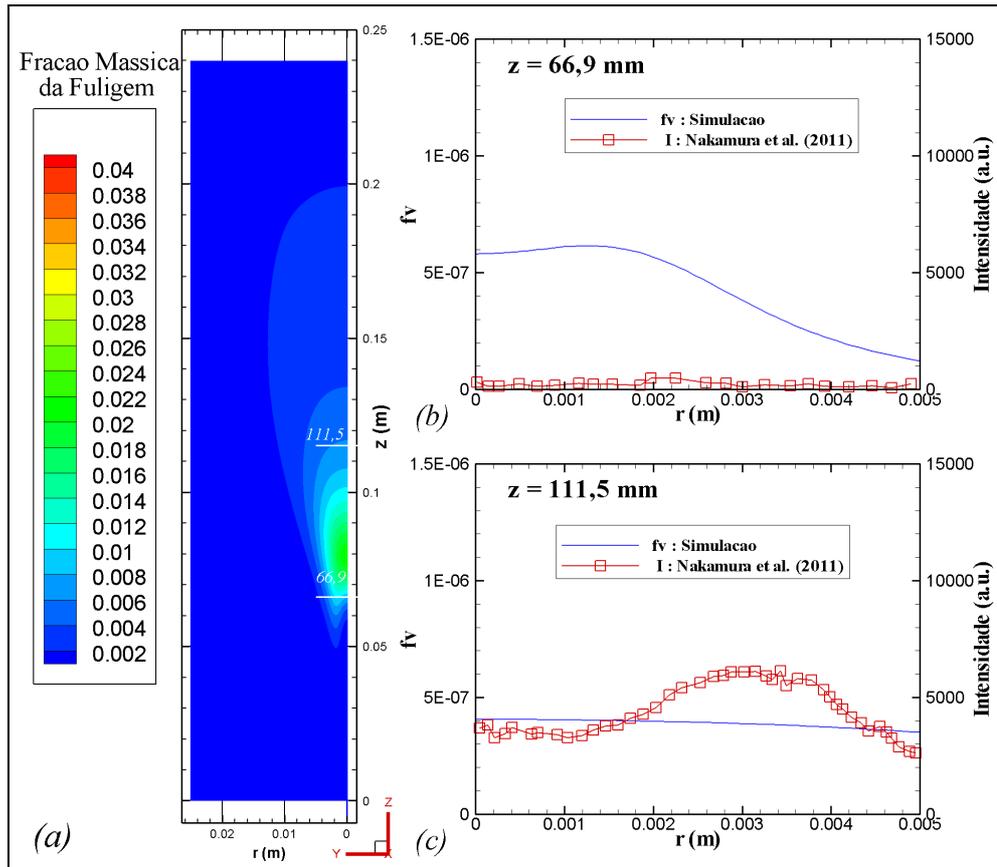


Figura 6.9: Operação do queimador a 0,1 MPa. (a) Fração mássica da fuligem calculada e distribuição radial da fração volumétrica da fuligem obtida para (b) 66,9 mm e (c) 111,5 mm.

Em geral, é evidenciada para ambas pressões a ausência de uma variação apreciável da temperatura medida ao longo do raio, em contraposição aos resultados da simulação, que evidenciam perfis de temperaturas com variações apreciáveis em função do raio do queimador.

6.3.2 Radiação e Formação da Fuligem

As Figuras 6.9 e 6.10, apresentam para 0,1 e 0,3 MPa, a comparação entre as medidas e a simulação da evolução radial das frações volumétricas da fuligem para diferentes valores de z .

No caso de $p = 0,1$ MPa, nota-se para $z = 66,9$ mm (ver Figura 6.9b), a existência de quantidades insignificantes de fuligem obtidas nos experimentos de Nakamura *et al.* (2011). A ausência de fuligem nesta região também foi confirmada pelos autores mediante a visualização de uma chama azulada, o que é característico da presença de radicais C_2 . Não obstante, os resultados da simulação indicam quantidades médias de fuligem que atingem valores de f_v de

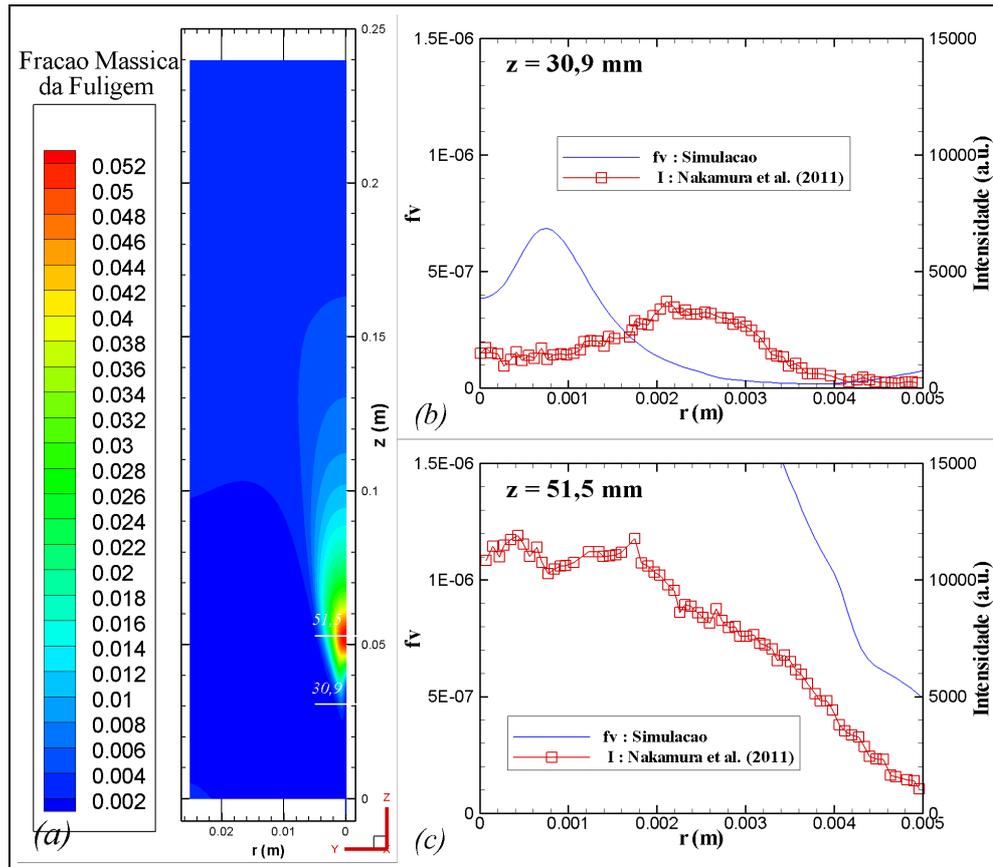


Figura 6.10: Operação do queimador a 0,3 MPa. (a) Fração mássica da fuligem calculada e distribuição radial da fração volumétrica da fuligem obtida para (b) 30,9 mm e (c) 51,5 mm.

até 6×10^{-7} . Desta forma, demonstra-se que a simulação estima, para $p = 0,1$ MPa, uma produção de fuligem antecipada cuja possível causa seria a formação antecipada de radicais de acetileno, C_2H_2 , precursor da fuligem. Acredita-se que isto deve-se a dois fatores, (i) à adoção de gotículas monodispersas de n-heptano ($d_p = 5 \mu\text{m}$), o que resulta em uma rápida mudança de fase do n-heptano líquido e, por conseguinte, a uma produção antecipada de C_2H_2 , e, (ii) ao mecanismo de cinética química empregada para a descrição da combustão do n-heptano que estaria antecipando a formação de C_2H_2 .

Em $z = 111,5$ mm (ver Figura 6.9c), as frações volumétricas da fuligem medida e calculada apresentam valores que são da mesma ordem. Contudo, os dados medidos apresentam valores oscilantes de f_V cujo máximo, localizado em $r = 3$ mm, é aproximadamente maior em 50% maior do que aquele simulado.

De maneira análoga, a Figura 6.10 mostra a comparação entre o experimento e a simulação referente à quantidade fuligem que é formada no queimador para $p = 0,3$ MPa. Neste caso, percebe-se para $z = 30,9$ mm (ver Figura 6.10b) que as frações volumétricas da fuligem obtidas com ambas abor-

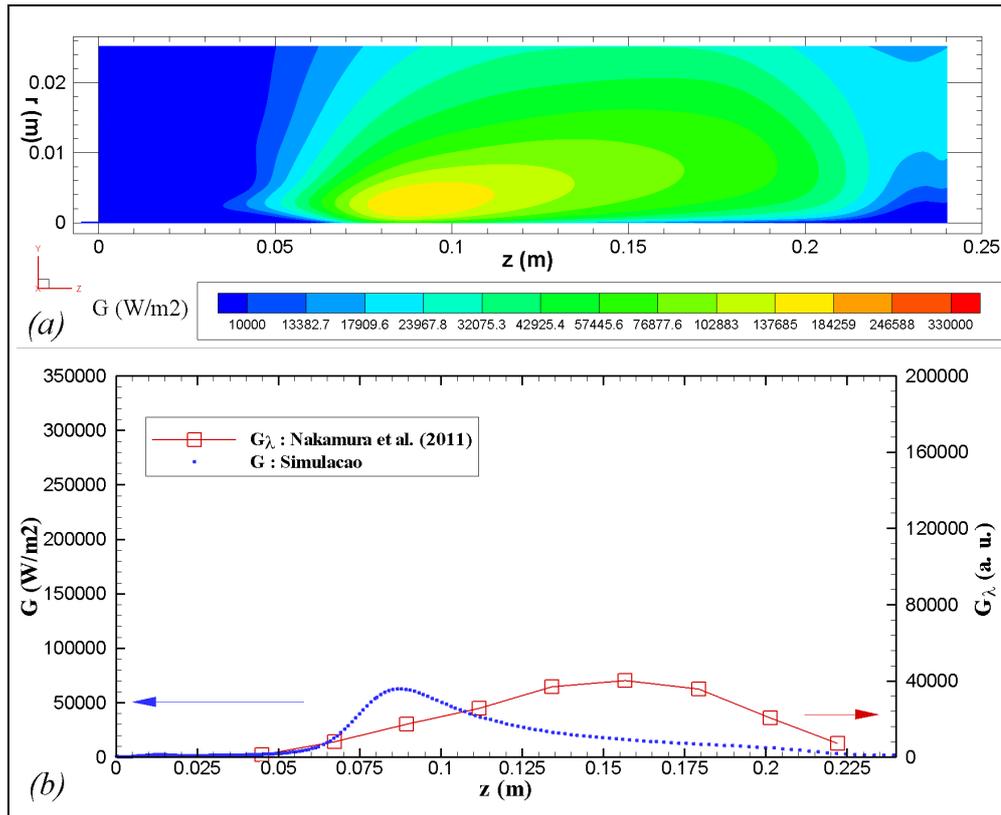


Figura 6.11: Operação do queimador a 0,1 MPa. (a) Campo simulado de radiação global incidente, G , com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin, e (b) Comparação qualitativa ao longo da parede, entre a radiação global incidente, G , obtida da simulação, e a radiação espectral incidente, G_λ , obtida nos experimentos de Nakamura *et al.* (2011).

dagens exibem distribuições qualitativamente idênticas. Não obstante, note-se que os valores máximos de f_V se encontram deslocados 1,4 mm, sendo que o valor máximo obtido da simulação é aproximadamente o dobro do experimental. No caso de $z = 51,5$ mm (ver Figura 6.10c), percebe-se que, embora ambas abordagens possuam uma mesma distribuição de f_V , os resultados obtidos da simulação numérica superestimam em até 150% os resultados experimentais.

Resumindo, percebe-se dos resultados apresentados na Figura 6.10, que a simulação numérica superestima ligeiramente os valores de f_V obtidos por Nakamura *et al.* (2011). Esta superestimação poderia ser modificada atuando-se no expoente m do modelo de Moss-Brookes [Equação (3-99)] que relaciona a taxa de crescimento da fuligem, cujo valor prescrito, 1, sfoi validado para a combustão turbulenta do metano a pressão atmosférica (Brookes e Moss, 1999). Os autores do modelo Moss-Brookes propõem ajustar o valor de m para 0,4 no caso da combustão turbulenta do metano a 3 atm. Infelizmente, o FluentTM não permite a modificação deste parâmetro.

As Figuras 6.11 e 6.12 apresentam, para as pressões de operação do

queimador de 0,1 e 0,3 MPa, a radiação incidente total calculada, G (em W/m^2), e a comparação com a radiação incidente espectral, G_λ (em unidades arbitrárias), medida por Nakamura *et al.* (2011) para um comprimento de onda de 516,5 nm. A comparação entre G e G_λ é pertinente, pois neste caso a fuligem é a principal responsável pelo transporte de energia radiante, quando comparado com gases produtos da combustão (CO_2 e H_2O). Ademais, segundo a teoria de Rayleigh, a absorção de energia térmica radiante da fuligem é contínua, diretamente proporcional à fração volumétrica da fuligem e inversamente proporcional ao comprimento de onda [ver Equação (3-113)]. Um aumento da radiação incidente espectral, G_λ , consequência, por exemplo, do incremento da fração volumétrica da fuligem, f_V , repercute-se em todos comprimentos de onda, resultando assim em um incremento da radiação global incidente, G .

O resultado da simulação do campo de radiação incidente total, G , em todo domínio para uma pressão de 0,1 MPa, apresenta-se na Figura 6.11a. Nota-se valores máximos de G que são superiores a $135 \text{ kW}/\text{m}^2$ e inferiores a $185 \text{ kW}/\text{m}^2$, localizados na região do escoamento entre $z = 75$ e 110 mm e $r = 1$ a 5 mm . Nesta região do escoamento são encontradas temperaturas acima de 2.500 K (ver Figura 6.5b), além de concentrações apreciáveis de fuligem (ver Figura 6.9a). Por isto, nesta região poderiam ser esperados valores apreciáveis da radiação incidente total, G .

Tendo como base esta última afirmação, a Figura 6.11b mostra que valores máximos de G são encontrados nas regiões de z entre 75 e 110 mm , sendo que o seu máximo se encontra nas proximidades de $z = 85 \text{ mm}$. Estes resultados exibem uma grande discrepância com os resultados experimentais de Nakamura *et al.* (2011), que possui um máximo de G_λ na região de z próxima a 155 m . A discordância na localização do valor máximo das radiações incidentes (G e G_λ) é devida à formação prematura da fuligem obtida na simulação numérica, discutida acima.

No caso da operação do queimador a $0,3 \text{ MPa}$, é possível verificar na Figura 6.12a a existência de campos de radiação incidente total, G , cujos máximos, superiores a $250 \text{ kW}/\text{m}^2$ e inferiores a $375 \text{ kW}/\text{m}^2$, são obtidos na região do escoamento localizada entre $z = 40$ e 90 mm , e $r < 5 \text{ mm}$. Estes valores máximos de G são aproximadamente o dobro dos máximos previstos pela simulação para $0,1 \text{ MPa}$.

Os resultados numéricos de G e os experimentais de G_λ para $0,3 \text{ MPa}$, mostrados na Figura 6.12b, apresentam configuração similar à obtida para o caso de $0,1 \text{ MPa}$, mas onde o valor máximo de G previsto pelas simulações antecipa levemente o máximo de G_λ obtido do experimento. Além

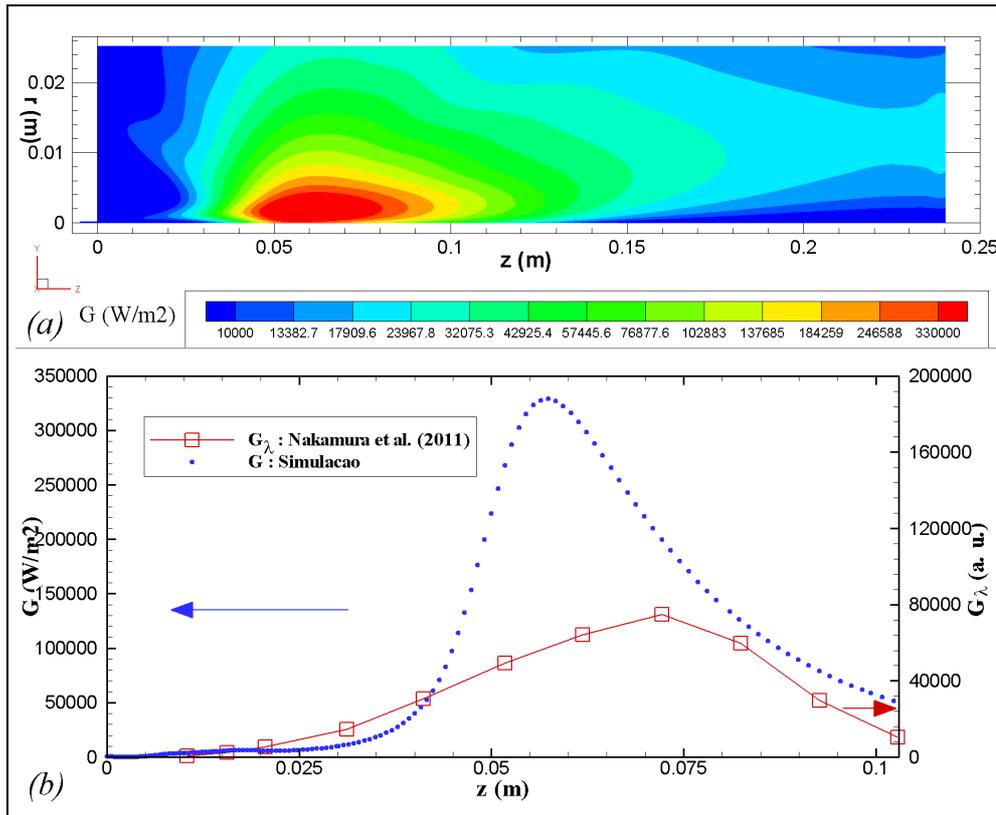


Figura 6.12: Operação do queimador a 0,3 MPa. a) Campo calculado de radiação global incidente, G , com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin, e (b) Comparação qualitativa ao longo da parede, entre a radiação global incidente, G , obtido da simulação, e a radiação espectral incidente, G_λ , obtida nos experimentos de Nakamura *et al.* (2011).

disso, nota-se que os resultados numéricos da radiação incidente total, G , exibem uma valor máximo que é 1,5 vezes superior àquele medido por Nakamura *et al.* (2011). Este comportamento está associado às concentrações de fuligem previstas pelas simulações, que excedem em até 150% os valores encontrados na experimentação. Desta forma, é verificada a superpredição do transporte de energia radiante como resultado à superestimação da fuligem.

6.3.3 Transporte e Evaporação de Gotas

Nesta seção são apresentados os resultados referentes ao transporte e vaporização de gotículas de n-heptano, combustível utilizado como representante do querosene na simulação. Cabe lembrar que foi assumida, como condição inicial, a injeção de gotículas monodispersas de n-heptano, com diâmetro de entrada de 5 μ m. Este valor foi obtido mediante a extrapolação linear dos dados experimentais de Nakamura *et al.* (2008).

Como será visto abaixo, a hipótese de “spray” monodisperso não é ad-

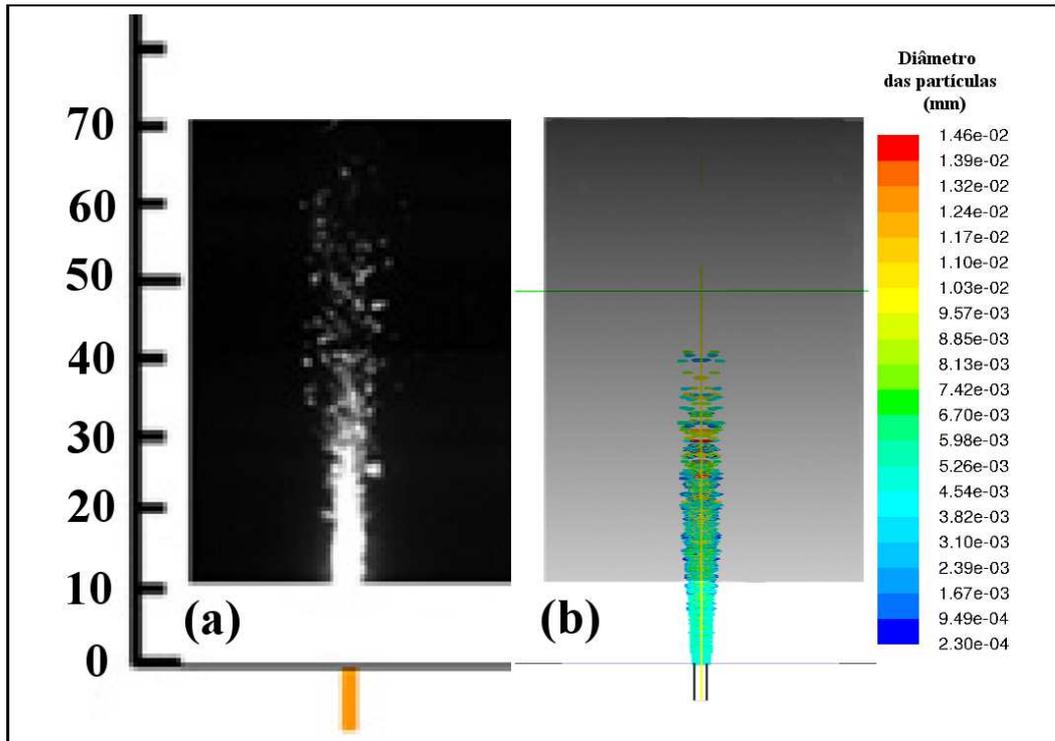


Figura 6.13: Operação do queimador a 0,1 MPa. Visualização das gotículas obtidos, (a) dos experimentos de Nakamura *et al.* (2011) e (b) da simulação numérica.

equada e deverá ser revista, pois as discrepâncias são evidentes entre resultados obtidos das simulações e os experimentos de Nakamura *et al.* (2008) e Nakamura *et al.* (2011). Assim, as discussões desta seção são relativamente superficiais, comparando apenas o comportamento das gotículas nas situações numérica e experimental.

As Figuras 6.13 e 6.14 mostram a visualização das gotículas obtidas nos experimentos de Nakamura *et al.* (2011) e nas simulações a 0,1 e 0,3 MPa, respectivamente. Assim, para o caso de 0,1 MPa, o conjunto de gotículas observadas por Nakamura *et al.* (2011), através visualização usando laser, é similar em forma àquele obtido nos resultados numéricos. Não obstante, note-se, dos resultados de Nakamura *et al.* (2011), a presença de algumas gotículas em regiões do escoamento a jusante de $z = 41$ mm, enquanto que os resultados da simulação preveem o completo desaparecimento das gotículas.

Quando a pressão de operação do queimador é incrementada para 0,3 MPa, os resultados de Nakamura *et al.* (2011) indicam uma redução na penetração de gotas de querosene em até 40%. Assim, a presença de gotículas de querosene, verificada até 65 mm a 0,1 MPa, cai para aproximadamente $z = 40$ mm a 0,3 MPa (Ver Figuras 6.13b e 6.14b). A redução da penetração das gotas com o aumento da pressão é de se esperar, pois a diferença entre as

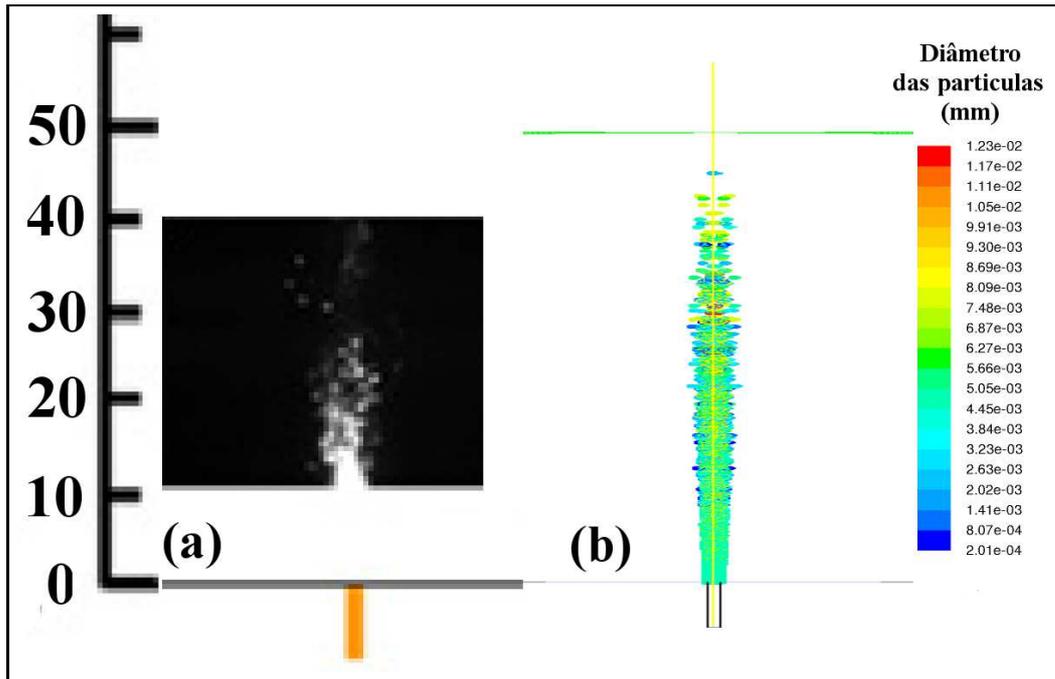


Figura 6.14: Operação do queimador a 0,3 MPa. Visualização das gotículas obtidos, (a) dos experimentos de Nakamura *et al.* (2011) e (b) da simulação numérica.

concentrações do vapor de combustível na interface da gotícula, $C_{i,s}$ [Equação (3-144)], e do meio contínuo, $C_{i,\infty}$ [Equação (3-145)], aumenta com a pressão do sistema, o que favorece o fluxo molar de vaporização, \dot{N}_i [Equação (3-143)]. Nota-se, porém, que a penetração das gotículas simuladas (Ver Figuras 6.13b e 6.14b) não é significativamente alterada com o incremento da pressão. A possível causa deste comportamento é o uso do coeficiente de difusão do vapor de fase contínua para o n-heptano, $D_{i,m}$, como sendo igual a $3,76 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ o qual é característicos de combustíveis pesados (i.e. óleo Diesel). A adoção de $D_{i,m} = 1,25 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ levaria a uma redução na penetração da gota. Acredita-se a alteração das propriedades físicas do n-dodecano líquido (i.e. $D_{i,m}$) levaria a uma melhor estimativa dos processos de vaporização/ebulição do querosene.

As distribuições do tamanho de gota são completamente discrepantes entre a experimentação e simulação. Isto pode ser apreciado nas Figuras 6.15 e 6.16, onde se mostram para $p = 0,1 \text{ MPa}$, histogramas simulados e experimentais da distribuição do diâmetro médio das gotas em $z = 10$ e 50 mm .

Assim, nota-se que em $z = 10 \text{ mm}$, o histograma apresentado na Figura 6.15a indica a presença de gotículas de n-heptano cujos diâmetros são maiores do que $5 \mu\text{m}$, resultado da coalescência entre as gotículas de menores diâmetros.

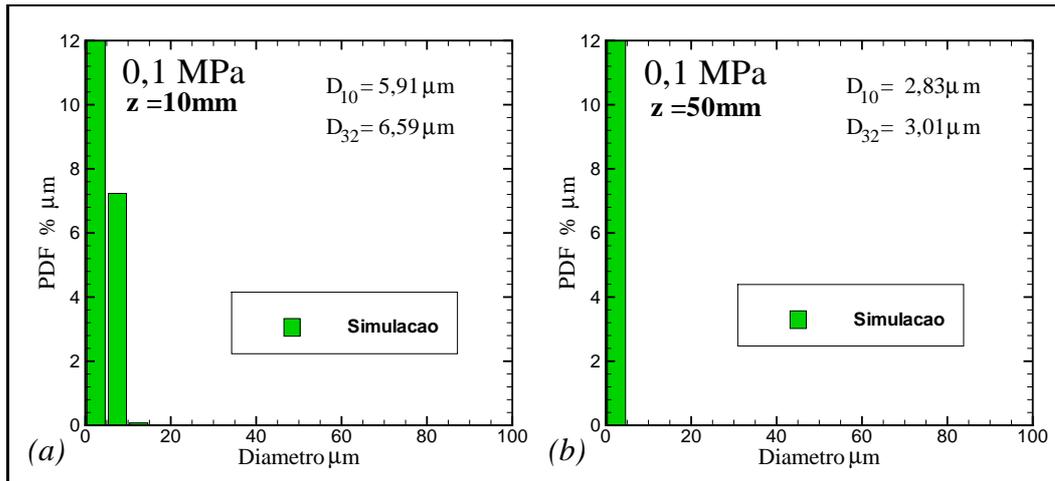


Figura 6.15: Distribuição do diâmetro gota calculada para (a) $z = 10$ mm, e (b) $z = 50$ mm, na operação do queimador a 0,1 MPa.

Por outro lado, para $z = 50$ mm (ver Figura 6.15b), o histograma é do tipo delta de Dirac, o que indica (i) a presença de gotículas cujo diâmetros são menores que $5 \mu\text{m}$ e (ii) o iminente desaparecimento das gotículas de n-heptano por vaporização/ebulição.

A Figura 6.16 mostra a distribuição de tamanho de gotas no experimento de Nakamura *et al.* (2008) para $z = 10$ e 50 mm. É possível perceber uma maior variedade de diâmetros de gotas do que no caso simulado. Entre $z = 10$ mm e $z = 50$ mm, a predominância de gotículas de pequeno diâmetro diminui como consequência da evaporação. Desta forma, a distribuição medida de diâmetro de gotas conta com a presença de gotas maiores apenas por causa da completa vaporização das menores gotas.

A comparação entre a simulação e dados experimentais da velocidade longitudinal, $U_{p,z}$, do diâmetro médio, D_{10} , das gotículas ao longo do eixo longitudinal, é mostrada nas Figuras 6.17 e 6.18, as quais correspondem a pressões de 0,1 e 0,3 MPa, respectivamente.

Para o caso de pressão de 0,1 MPa, note-se que a velocidade calculada das gotículas de combustível (ver Figura 6.17), apresenta uma boa concordância com os resultados experimentais. Em ambos casos se observa um decréscimo de U_z com a distância longitudinal, z , sendo que a discrepância da velocidade longitudinal das gotículas não ultrapassa 10%.

O diâmetro médio das gotículas ao longo do escoamento, nos experimentos de Nakamura *et al.* (2008), é mostrado na Figura 6.17b. Neste caso, um incremento linear de D_{10} é obtido com a distância. Este comportamento está ligado à maior dificuldade de se vaporizar gotículas de querosene de diâmetros grandes, quando comparadas às de pequenos diâmetros.

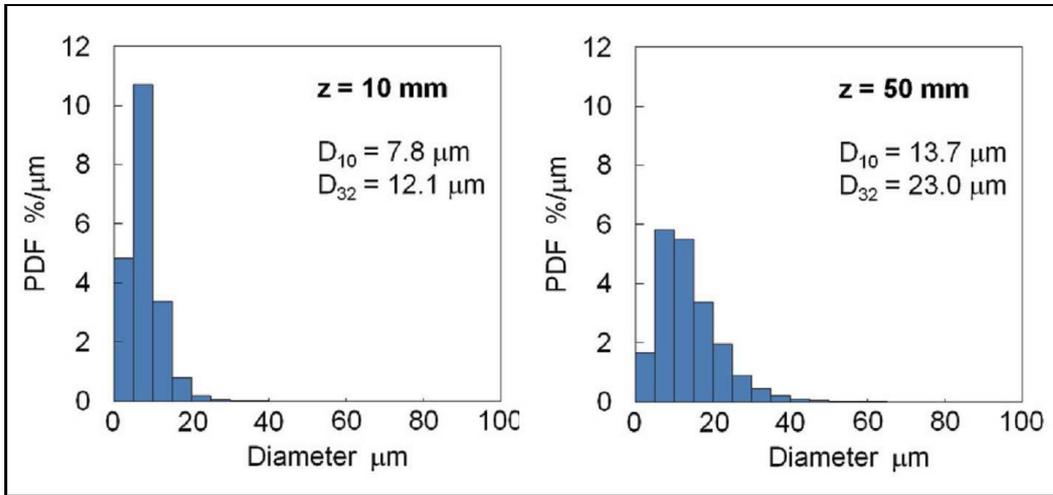


Figura 6.16: Distribuição do diâmetro de gota para (a) $z = 10$ mm, e (b) $z = 50$ mm, obtidos dos resultados experimentais de Nakamura *et al.* (2008), na operação do queimador a 0,1 MPa.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0821304/CA

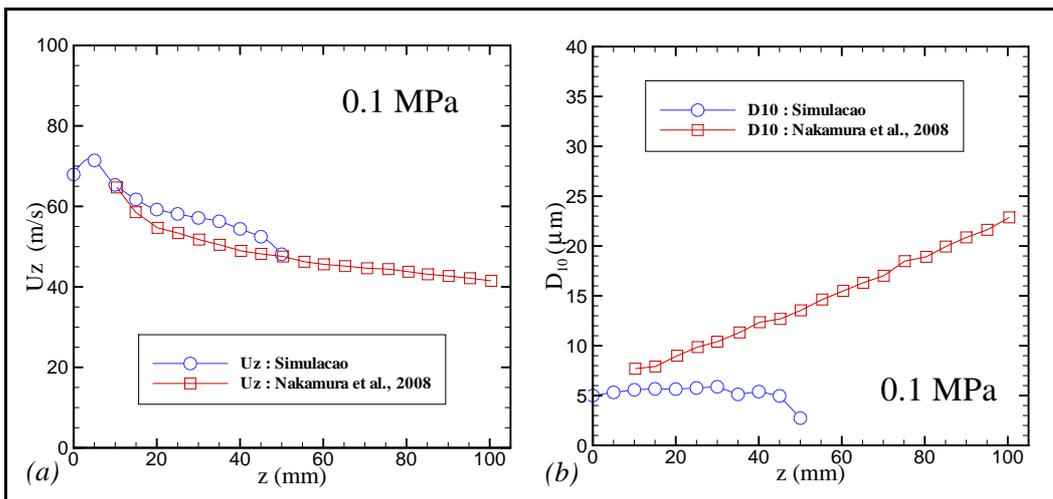


Figura 6.17: Comparação entre os resultados de simulação e os dados experimentais de Nakamura *et al.* (2008) para 0,1 MPa: (a) velocidade longitudinal e (b) diâmetro médio das gotículas de combustível líquido.

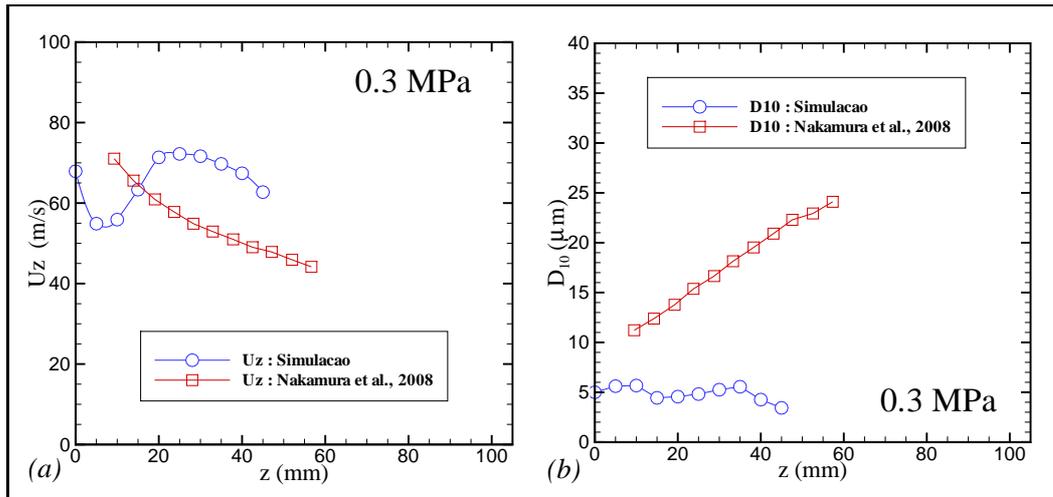


Figura 6.18: Comparação entre os resultados de simulação e os dados experimentais de Nakamura *et al.* (2008) para 0,3 MPa: (a) velocidade longitudinal e (b) diâmetro médio das gotículas de combustível líquido.

No caso da simulação a 0,1 MPa, o diâmetro médio das gotículas de n-heptano, D_{10} , exibe um comportamento que é praticamente constante até $z = 40$ mm, diminuindo monotonicamente em seguida. Acredita-se que a uniformidade de D_{10} , é devida à coalescência das gotículas que ocorre com maior frequência nas proximidades da entrada do combustível. A subsequente redução de D_{10} é o resultado de sua vaporização.

No caso de $p = 0,3$ MPa, um comportamento experimental de D_{10} similar ao caso precedente é obtido, tal como exibido na Figura 6.18b. Por outro lado, a velocidade longitudinal calculada das gotículas (ver Figura 6.18a), exibe fortes discrepâncias com os resultados experimentais, que atingem 40% durante o desenvolvimento inicial do jato. Uma vez mais, a origem destas discrepâncias é certamente relacionada às condições de entrada de distribuição de diâmetro de gota, assumidas como sendo de diâmetro uniforme e iguais a $D_{10,o} = 5 \mu\text{m}$.

Os resultados aqui apresentados mostram claramente que a modelagem da combustão de sprays de mistura de hidrocarbonetos ainda é um problema aberto.