

Universidade Federal do Pampa

Alan Júnior Vergütz

**Combustão de gotas com escape de
combustível pela chama para simular regime de
combustão “Cool Flame”**

Alegrete

2016

Alan Júnior Vergütz

**Combustão de gotas com escape de combustível pela
chama para simular regime de combustão “Cool Flame”**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Curso de Graduação em Engenharia Me-
cânica da Universidade Federal do Pampa
como requisito parcial para a obtenção do
título de Bacharel em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Cesar Flaubiano da
Cruz Cristaldo

Alegrete

2016

Ficha catalográfica elaborada automaticamente com os dados fornecidos
pelo(a) autor(a) através do Módulo de Biblioteca do
Sistema GURI (Gestão Unificada de Recursos Institucionais) .

V498c Vergütz, Alan Júnior

Combustão de gotas com escape de combustível pela chama
para simular regime de combustão "Cool Flame" / Alan Júnior
Vergütz.

65 p.

Trabalho de Conclusão de Curso(Graduação)-- Universidade
Federal do Pampa, ENGENHARIA MECÂNICA, 2016.

"Orientação: Cesar Flaubiano da Cruz Cristaldo".

1. Engenharia Mecânica. 2. Combustão de gotas. 3. "Cool
Flame". I. Título.

Alan Júnior Vergütz

Combustão de gotas com escape de combustível pela chama para simular regime de combustão “Cool Flame”

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Curso de Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Pampa
como requisito parcial para a obtenção do
título de Bacharel em Engenharia Mecânica.

Trabalho de Conclusão de Curso defendido e aprovado em 30 de Novembro de 2016.

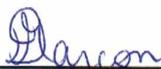
Banca examinadora:



Prof. Dr. Cesar Flaubiano da Cruz
Cristaldo
Orientador



Prof. Dr. Adriano Roberto da Silva
Carotenuto
UNIPAMPA



Prof. Me. Divane Marcon
UNIPAMPA

*A meus pais, por acreditarem em mim
quando eu mesmo não acreditava.*

Agradecimentos

Reservo meus agradecimentos principalmente aos meus pais, Pedro Lauri e Jussara Teresinha, e irmãos, Andressa e Adinan, por todo apoio e principalmente paciência. Por acreditarem em meu potencial, acima de tudo.

Ao Professor Dr. Cesar Flaubiano da Cruz Cristaldo, pelo apoio desde a escolha do tema deste Trabalho de Conclusão de Curso (TCC), até o auxílio na conclusão do mesmo.

Ao Professor Dr. Fernando Fachini Filho e ao Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE) por todo apoio fornecido durante a execução deste trabalho.

Ao CNPq pela bolsa de Iniciação Científica concedida durante os anos de 2014 e 2015 (proc. 159978/2014-9 e 124852/2015-7).

Aos meus amigos, Anderson Lixinski Dalenogare, Fernando Hendges Lopes e Ismael Tonelo, pelas horas de estudo e pelas horas de “zoeira”.

Aos meus amigos e colegas em geral, que, de alguma forma, me auxiliaram a superar as dificuldades e me forneceram apoio.

Aos professores da Engenharia Mecânica da UNIPAMPA, por todo conhecimento ensinado.

“A conquista é um acaso que talvez dependa mais das falhas dos vencidos do que do gênio do vencedor.”

Madame de Staël

Resumo

Recentemente um novo regime de queima de gotas, conhecido como regime “cool flame”, tem sido alvo de investigação por apresentar características diferentes da queima convencional. No regime cool flame a combustão ocorre em duas fases distintas. Na primeira, a gota sofre uma queima normal, com uma chama visível em torno da mesma. Na segunda, a radiação luminosa da chama se extingue, porém, a gota permanece vaporizando sem chama visível e com uma temperatura mais baixa. Além disso, a gota apresenta uma taxa de vaporização praticamente igual a primeira fase. No final da segunda fase, uma nuvem de vapor é formada em torno da gota. Simulações numéricas de cinética química atribuem essa nuvem como sendo resultado do combustível não queimado pela chama. Com a ideia de combustível não queimado, o presente modelo tem por finalidade utilizar um modelo clássico de queima de gotas e impor um escape de combustível pela chama, processo que é um dos efeitos apontados como responsável por manter a chama no regime de cool flame. O modelo clássico é baseado na hipótese de chama estreitamente fina onde o combustível e o oxidante são totalmente consumidos, permitindo que o modelo de Shvab- Zeldovich seja utilizado sem a necessidade de envolver a cinética química no modelo. Os resultados mostram que com o aumento do escape de combustível a temperatura da chama diminui e a chama se aproxima da gota. Porém, a taxa de vaporização, não é tão sensível ao aumento de escape de combustível mantendo-se praticamente constante. Estes comportamentos estão de acordo com análises experimentais observadas no regime cool flame. Considerando um escape de combustível elevado, é possível encontrar a chama a uma distância medindo cinco vezes o raio da gota, coincidindo com os resultados obtidos por modelos de cinética química. Contudo, apesar desses dados concordarem com os obtidos experimentalmente, o modelo é limitado, pois o escape de combustível é imposto pelo modelo, enquanto que deveria ser uma incógnita a ser resolvida. Mesmo assim, o modelo é útil para estimar parametricamente o comportamento das propriedades em função do escape de combustível pela chama.

Palavras-chave: Combustão, Gotas, Cool Flame, Chama.

Abstract

Recently a new regime of burning drops regime "cool flame" has been under investigation by presenting different characteristics of conventional burning. In the cool flame regime, combustion occurs in two distinct phases. At first, the droplet undergoes a normal burning with a visible flame around the same. Second, the luminous radiation from the flame is extinguished, however, the drop remains no visible flame and vaporized at a lower temperature. Furthermore, the droplet has a vaporization rate substantially equal to the first phase. At the end of the second phase, a vapor cloud is formed around the droplet. Numerical simulations of chemical kinetics attribute this cloud as a result of unburned fuel the flame. With the idea of unburned fuel, this model is designed to use a classic model of burning drops and impose a fuel exhaust the flame, a process that is one of the effects identified as responsible for keeping the flame in the cool flame regime. The classic model is based on the hypothesis closely thin flame where all fuel and oxidant are consumed in the same, so the model Shvab- Zeldovich can be used without the need to involve the chemical kinetics to the model. The results show that with increasing fuel leakage decreases the flame temperature and the flame approaches the drop. However, the vaporization rate is not as sensitive to increased fuel exhaust remaining practically constant. These behaviors are consistent with experimental analyzes observed in the cool flame regime. Whereas an exhaust highest fuel, it is possible to find the flame measuring a distance five times the droplet radius coinciding with the results obtained by chemical kinetics models. However, despite these data agree with those obtained experimentally, the model is limited because the fuel exhaust is imposed by the model parametrically serving to estimate the behavior of the properties due to fuel leak in the flame.

Key-words: Combustion, Droplet, Cool Flame, Flame.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Tipos de combustão: (a) Com chama; (b) Sem chama.	19
Figura 2 – Chama pré-misturada.	20
Figura 3 – Chama não pré-misturada (Difusiva).	21
Figura 4 – Representação do modelo clássico de combustão de gotas.	22
Figura 5 – Implantação da gota de n-heptano.	24
Figura 6 – Ignição da gota de n-heptano.	24
Figura 7 – Primeira fase de queima da gota de n-heptano.	25
Figura 8 – Segunda fase de queima da gota de n-heptano.	25
Figura 9 – Nuvem de vapor formada ao redor da gota no segundo estágio.	26
Figura 10 – Gráficos gerados durante o experimento: (a) Variação do raio da gota, (b) Radiação da chama, (c) Taxa de vaporização da gota e (d) Variação da temperatura da chama.	27
Figura 11 – Interface da chama (modelo clássico)	29
Figura 12 – Interface da chama (modelo atual)	30
Figura 13 – Fluxo de calor em função do escape de combustível pela chama	54
Figura 14 – Fluxo de oxidante em função do escape de combustível pela chama	55
Figura 15 – Fluxo de combustível em função do escape de combustível pela chama	56
Figura 16 – Temperatura na zona de reação química em Kelvin	57
Figura 17 – Posição da zona de reação	58
Figura 18 – Fração mássica de combustível na superfície da gota	59
Figura 19 – Taxa de vaporização da gota	60

Lista de siglas

FLEX Experimento de Extinção de Chama

ISS Estação Espacial Internacional

NASA Administração Nacional do Espaço e da Aeronáutica

Lista de símbolos

\bar{a}	Raio instantâneo da gota
a_0	Raio inicial da gota
c_p	Calor específico a pressão constante
D	Difusividade mássica
e	Grau de oxidação parcial
F_{Flux}	Fluxo de combustível
H_{FLux}	Fluxo de calor
k	Condutividade térmica
K_0	Taxa de vaporização
L	Calor latente de vaporização
L'	$= \Lambda - Q_i$
Le	Número de Lewis
\dot{m}	Vazão mássica
\dot{m}_i'''	Consumo de massa nas reações químicas
O_{Flux}	Fluxo de oxidante
Q	Calor de combustão
Q_{in}	Calor absorvido
Q_{out}	Calor emitido
\dot{q}	Energia gerada por unidade de volume
r	Coordenada radial
R_g	Constante dos gases
s	Fração mássica de oxidante necessária para reagir com uma unidade de massa de combustível consumida
t	Tempo

T	Temperatura
t_c	Tempo característico de vida da gota
V	Volume da gota
v	Velocidade radial adimensional
\vec{V}	Velocidade radial
x_p	Posição da chama adimensional
Y_F	Fração mássica de combustível
y_F	Fração mássica de combustível adimensional
Y_{Fp}	Escape de combustível pela chama
Y_O	Fração mássica de oxidante
y_O	Fração mássica de oxidante adimensional
Y_{Op}	Escape de oxidante pela chama

LETRAS GREGAS

α	Difusividade térmica
β	Constante de vaporização (λ/a)
γ	$= L/R_g T_b$
ε	$= \rho_\infty / \rho_l$
θ	Temperatura adimensional
θ_p	Temperatura da chama adimensional
Λ	Calor latente de vaporização adimensional
λ	Taxa de vaporização adimensional
μ	Coefficiente de viscosidade
ρ	Massa Específica
ϱ	Densidade adimensional
τ	Tempo adimensional

Φ Dissipação viscosa

SUBSCRITOS

b Ebulição da gota

F Região da chama sem escape de combustível

i Oxidante ou combustível (O, F)

l Fase líquida

p Região da chama com escape de combustível

s Região da superfície da gota

∞ Condição ambiente (Região afastada da gota)

SOBRESCRITOS

$+$ Lado do oxidante

$-$ lado do combustível

Sumário

1	INTRODUÇÃO	14
1.1	Contextualização do problema	14
1.2	Objetivos	15
1.3	Justificativa	15
1.4	Estrutura do trabalho	16
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	17
2.1	Combustão	17
2.1.1	Tipos de combustão	18
2.1.2	Tipos de chamas	19
2.1.3	Combustão de gotas	21
2.1.3.1	Modelo clássico de combustão de gotas	22
2.2	Revisão bibliográfica	23
2.2.1	Regime de combustão “Cool Flame”	23
3	METODOLOGIA	29
3.1	Formulação matemática	30
3.1.1	Equações de conservação	31
3.1.2	Adimensionalização das equações de conservação	32
3.1.2.1	Fase líquida	32
3.1.2.2	Fase gasosa	34
3.1.3	Condições de contorno	39
3.1.4	Integração das equações de conservação	44
3.1.5	Solução numérica	52
4	RESULTADOS	53
5	CONCLUSÃO	61
	REFERÊNCIAS	62

1 Introdução

Neste capítulo, uma contextualização sobre o problema de combustão de gotas será apresentada. Juntamente com ela, será apresentado também o objetivo, a justificativa e a estrutura do presente trabalho.

1.1 Contextualização do problema

A combustão está presente na humanidade desde a pré-história, quando o homem, como todos os outros animais, temia o fogo. Com o tempo, o homem passou a dominar o mesmo, utilizando-o para cozinhar alimentos, se aquecer nos dias de baixas temperaturas e, posteriormente, para a manufatura de objetos metálicos, com o advento da incipiente metalurgia (TURNS, 2013).

Com o passar dos anos, a ciência foi sendo descoberta e conseqüentemente, os conhecimentos sobre combustão foram se aprimorando. Hoje, aproximadamente 85% da energia consumida no mundo provém da queima de combustíveis fósseis (ENERGÉTICA, 2015). Neste sentido, é importante conhecer os processos que controlam a combustão com o objetivo de conhecer as condições necessárias para uma queima com menos emissão de poluentes e com uma considerável economia de combustível. Porém, uma simulação em combustão torna-se muito difícil, pois os processos que ocorrem durante a combustão apresentam diferentes escalas de tempo e espaço, sendo quase impossível sua modelagem numérica. Para isso recorre-se a modelos submalhas, onde parte do problema é resolvido em uma determinada escala. Por exemplo, numa câmara de combustão, para combustíveis líquidos, podemos encontrar desde a escala de uma gota isolada (pequena escala, na ordem de 10^{-6} metros) até a escala de uma nuvem de gotas (grande escala, na ordem de 1 metro). Para chegar a escala da nuvem é necessário conhecer os fenômenos que ocorrem em pequenas escalas, portanto a modelagem de gotas isoladas torna-se necessária.

O estudo da combustão de gotas isoladas, além de ter sua descrição relativamente simples, seus processos evolutivos em escalas menores podem ser incorporados na simulação de uma nuvem de gotas através de modelos submalhas.

Desde aproximadamente 1950, o estudo teórico da combustão de gotas tem sido objeto de pesquisa. Mesmo assim, até hoje muitos regimes de queima ainda não são entendidos por completo. Por exemplo, experimentos realizados recentemente pela Administração Nacional do Espaço e da Aeronáutica (NASA), descobriram um novo regime de queima conhecido como “cool flame”(NAYAGAM et al., 2012). Desde então, o regime “cool flame” tem sido alvo de investigação.

Segundo dados da NASA, a queima em regime “cool flame” ocorre em duas etapas. Na primeira, a gota sofre queima normal com uma chama visível, semelhante à queima tradicional. Já na segunda, a luz visível da chama se apaga seguindo com uma taxa de vaporização praticamente constante, formando ao final desta etapa, uma nuvem de combustível ao redor da gota (FAROUK; DRYER, 2014). Além disso, todo este processo ocorre a uma temperatura de chama mais baixa em relação a combustão clássica e a chama se encontra mais próxima da superfície da gota (NAYAGAM et al., 2012). Os resultados experimentais e modelos de cinética química, (PACZKO et al., 2014) sugerem que a nuvem de combustível formada no final do segundo estágio é resultado de um escape considerável de combustível pela chama. Neste sentido, com a finalidade de descrever o regime “cool flame” pretende-se estender um modelo clássico já existente (FACHINI; LIÑÁN, 1997) adicionando escape de combustível pela chama. Lembrando que no modelo clássico, todo combustível e oxidante são consumidos completamente na chama, enquanto que, no presente modelo, uma quantidade de combustível não queimado, escapando pela chama, será imposta.

1.2 Objetivos

Este trabalho tem por objetivo estender o modelo já existente, para a condição que descreva o comportamento semelhante ao regime “cool flame”. O modelo é baseado na descrição da combustão de uma gota isolada, onde um escape de combustível é imposto na chama,

O objetivo específico do trabalho é representar o regime de combustão “cool flame” a partir de um modelo simplificado, não existindo a necessidade de resolver as equações da química cinética, que agregam grande complexidade ao problema.

1.3 Justificativa

Atualmente não podemos descrever todos os fenômenos que podem ocorrer numa câmara de combustão e muitos processos ainda desconhecidos são responsáveis pela queima incompleta do combustível. A combustão com escape de combustível pela chama representa que nem todo o combustível está sendo consumido pela zona de reação química. Essa queima parcial do combustível pode gerar uma quantidade considerável de fuligem e emissão de poluentes.

Neste sentido, conhecendo as condições para que ocorram este regime, pode-se projetar câmaras de combustão a fim de evitá-lo.

1.4 Estrutura do trabalho

O seguinte trabalho é composto por cinco seções: introdução, fundamentação teórica, metodologia, resultados e conclusões.

Primeiramente temos a introdução, que, a partir da contextualização do problema, tem o objetivo dar uma visão geral do trabalho, mostrando os aspectos sob o ponto de vista macro a serem estudados. Portanto, o contexto geral que se insere o processo de combustão de gotas é descrito, de modo a situar o leitor com respeito ao problema de queima de gotas isoladas.

Logo após a introdução, uma fundamentação teórica é apresentada. Nesta seção, toda a revisão bibliográfica que será utilizada no trabalho será exibida para facilitar o entendimento e fornecer embasamento teórico para a formulação do código computacional que descreverá o processo de combustão de gotas em regime de combustão “cool flame”.

Em seguida, será apresentada a metodologia que será empregada para a realização do respectivo trabalho. Esta seção exibirá toda a formulação matemática que é utilizada para a descrição do problema de combustão de gotas em questão.

Os resultados obtidos com a simulação numérica, serão apresentados na seção 4, onde será realizada também uma análise dos mesmos.

E por fim, na última seção, encontra-se uma conclusão do respectivo trabalho, comentando se os resultados foram satisfatórios e se atenderam os objetivos impostos no início do trabalho.

2 Fundamentação teórica

Neste capítulo, toda a fundamentação teórica que será utilizada no trabalho será exibida para facilitar o entendimento e fornecer embasamento teórico para a resolução do problema.

Nele, será exposto detalhadamente, os tipos de combustão existentes, com chama e sem chama, os tipos de chamas, pré-misturadas e difusivas e uma revisão bibliográfica sobre combustão de gotas e, mais especificadamente, sobre o tema do respectivo trabalho que é a combustão de gotas em regime de “cool flame”.

2.1 Combustão

A combustão e o seu controle são fundamentais para a nossa existência neste planeta, se fazendo presente em todos os setores da sociedade. Atualmente ela é responsável por gerar aproximadamente 85% da energia consumida pelo ser humano.

Segundo dados do Balanço Energético Nacional, publicado pelo Ministério das Minas e Energia no ano de 2015, a energia gerada a partir da combustão de lenha, carvão vegetal, gás natural, derivados do petróleo, carvão mineral e derivados da cana de açúcar correspondem a geração de aproximadamente 80% da energia consumida pelos brasileiros.

Nos setores industriais, de transporte e de geração de energia elétrica, a ciência e a tecnologia da combustão são de fundamental importância. Na produção de metais, por exemplo, utilizam-se fornalhas para a obtenção do ferro gusa, do aço e de outros metais, assim como em todos os setores da indústria, onde existem fornos para aquecimento e realização de tratamentos térmicos superficiais, caldeiras, estufas de secagem e cura de revestimento, incineradores e muitos outros exemplos (CHARLES; BAUKAL; ROBERT, 2001).

O petróleo e o gás natural têm seus processos de combustão direcionados para a geração de energia durante os estágios de extração, transporte e refino do produto. Indústrias como a de cimento, de vidro, química, siderúrgica e mineradora utilizam significativamente, em seus processos de fabricação, a combustão de hidrocarbonetos e de gás natural. Combustão esta, de derivados do petróleo e de gás natural, muito comum na maioria dos motores de veículos, navios e aviões.

Porém, apesar de trazer tantos benefícios para o homem, a combustão também tem suas desvantagens, onde a principal é a poluição ambiental provocada pela mesma.

Durante o processo de combustão vários poluentes são produzidos, causando desde

problemas de saúde específicos na população, até nevoeiros químicos, chuvas ácidas, e aquecimento global, contribuindo com a redução da camada de ozônio.

Os principais poluentes produzidos durante os processos de combustão são os hidrocarbonetos, não ou parcialmente queimados, tais como, o monóxido de carbono (CO), os óxidos de nitrogênio (NO e NO_2) e grande quantidade de material particulado em suas várias formas.

Devido ao mal que estes poluentes vêm causando para a sociedade, a legislação ambiental, juntamente com o governo, regulamentou o nível de emissões permitidas, obrigando os geradores de poluição a adotar as práticas de gestão ambiental (TURNNS, 2013). Neste sentido, torna-se necessário conhecer a estrutura dos processos físicos que ocorrem durante a combustão, em seus diferentes regimes de queima.

O processo de combustão pode ocorrer de dois tipos e com dois tipos diferentes de chama, que serão apresentados nas seções 2.1.1 e 2.1.2, respectivamente.

2.1.1 Tipos de combustão

A combustão é um fenômeno complexo de reações químicas que depende de diversos fatores como combustível, oxidante, taxa de mistura ar-combustível, temperatura, pressão, etc., e pode ocorrer de duas maneiras: com chama ou sem chama.

A combustão com chama é aquela que ocorre, por exemplo, no cilindro de motores de combustão interna com vela de ignição, onde, a estreita zona de reação química, conhecida como chama, está queimando em uma região no espaço, tendo em um de seus lados os gases quentes resultantes da combustão e no outro os gases ainda não queimados (TURNNS, 2013).

Neste caso, a chama possui uma espessura bem definida como sendo o comprimento característico da região onde está ocorrendo a reação química, podendo ser claramente visualizada na figura 1a. Já, quando diversos pontos da mistura ar-combustível estão simultaneamente em processo de combustão, não existe uma região definida que possa ser denominada de chama, caracterizando o processo como volumétrico, ou seja, sem chama, conforme é possível verificar na figura 1b.

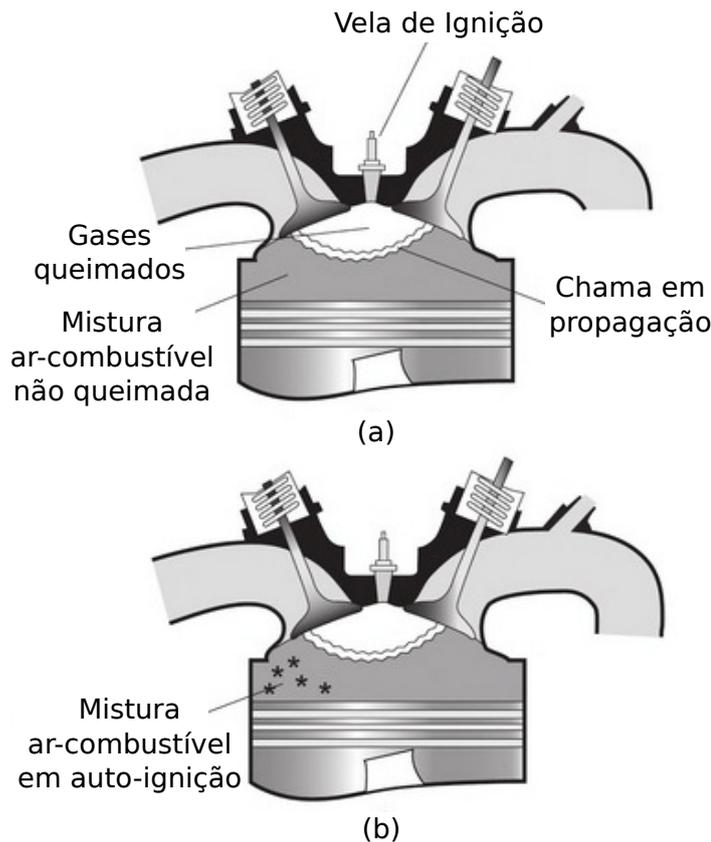
Neste caso, a espessura da chama é da mesma ordem de magnitude da câmara de combustão (espessura larga), pois, processos de oxidação ocorrem simultaneamente na câmara de combustão inteira.

Esse tipo de combustão, sem chama, segundo Turns (2013), ocorre pois, em determinadas condições, a medida que a chama se desloca na câmara de combustão, devido a um processo de compressão isentrópica, a pressão e, conseqüentemente, a temperatura dos gases não queimados aumenta, ocasionando reações de oxidação rápidas em diferentes

pontos da mistura ar-combustível não queimada.

Em motores a combustão interna, essa liberação, essencialmente volumétrica, de energia térmica é chamada de auto-ignição.

Figura 1 – Tipos de combustão: (a) Com chama; (b) Sem chama.



Fonte: Turns (2013)

2.1.2 Tipos de chamas

As chamas, por sua vez, também se dividem em duas classes: as chamas pré-misturadas e as não pré-misturadas (difusivas).

Nas chamas pré-misturadas, a mistura gasosa combustível-oxidante é homogênea, não existindo gradiente de concentração no escoamento, ou seja, o combustível e o oxidante são misturados a nível molecular antes de iniciar a reação química (Figura 2). Este tipo de combustão apresenta a vantagem de ser intensa em volume pequeno, porém, para grandes quantidades de combustível, proporciona baixo nível de segurança, podendo causar uma explosão não controlada (COELHO; COSTA, 2007).

Esta chama, pré-misturada, é encontrada frequentemente em nosso dia-a-dia, como por exemplo, em motores de combustão interna com ignição por centelha (Ciclo Otto) e em fogões domiciliares. Este tipo de chama apresenta perigo devido a sua alta velocidade de propagação. Para que a chama fique parada, é necessário um controle da velocidade de injeção da pré-mistura.

Outra vantagem deste tipo de chama é que o mesmo apresenta uma baixa produção de fuligem, pois, devido a existência de uma pré-mistura entre o combustível e o oxidante, a combustão torna-se mais eficiente, permitindo que a chama consiga consumir praticamente todo o combustível.

Figura 2 – Chama pré-misturada.



Fonte: Fogaça (2016)

Nas chamas não pré-misturadas (difusivas), os reagentes encontram-se inicialmente separados e a difusão do combustível com o oxidante é o que controla o processo de mistura (Figura 3). Nesta, a reação química se dá entre o combustível e o oxidante, onde os processos de mistura e queima ocorrem simultaneamente (COELHO; COSTA, 2007). Sistemas reativos que empregam sprays, líquidos e sólidos, e jatos de combustíveis lançados em atmosferas oxidantes são exemplos de combustão com chamas difusivas.

Este tipo de chama é menos perigoso em relação a pré-misturada, pois neste caso a chama não possui velocidade característica de propagação, ou seja, a chama fica confinada na fronteira entre o combustível e o oxidante. Porém, é uma chama que gera muita fuligem devido a falta da pré-mistura, que ajuda a queimar os reagentes de forma mais eficiente.

Segundo Irvin e Richard (2008), uma característica importante das chamas difusivas é que a taxa de queima, ou seja, o consumo de combustível na mesma é determinado pela velocidade à qual o combustível e o oxidante são reunidos em proporções apropri-

adas para a reação. Sendo assim, se fornecer pouco oxidante, conseqüentemente, pouco combustível será consumido pela chama.

Estes dois tipos de chama (pré-misturada e difusiva), podem ser claramente identificados com o auxílio de um queimador de Bunsen, conforme ilustrado nas figuras 2 e 3. O bico de Bunsen é um queimador que proporciona uma chama relativamente limpa (na configuração pré misturada), sem fumaça ou depósitos de carbono nas superfícies do bico em contato com a chama (ARIELLO, 2011).

Para obter, no Bico de Bunsen, uma chama pré-misturada, existem orifícios laterais para a entrada de oxidante com regulagem manual de abertura. Quando estes estão abertos, o ar é pré-misturado com o combustível antes da combustão ocorrer (Figura 2), já, quando os orifícios estão fechados, a chama precisa buscar oxidante na atmosfera, formando assim uma chama difusiva (Figura 3).

Figura 3 – Chama não pré-misturada (Difusiva).



Fonte: Fogaça (2016)

2.1.3 Combustão de gotas

O estudo da combustão de gotas esféricas isoladas, além de ter sua descrição relativamente simples, também contribui no problema da combustão de uma nuvem de gotas, como por exemplo, em motores diesel. Neste, o combustível entra na câmara de combustão na forma de spray, difundindo com o oxidante aquecido e entrando em processo de combustão, após sua vaporização.

Este spray é formado por um conjunto de gotas, que dependendo do espaçamento existente entre elas, faz com que os processos de transferência de calor, de massa, de espécies e de quantidade de movimento que ocorrem ao redor de uma gota influenciem significativamente nos processos das outras que estão em seu entorno (BELLAN, 2000).

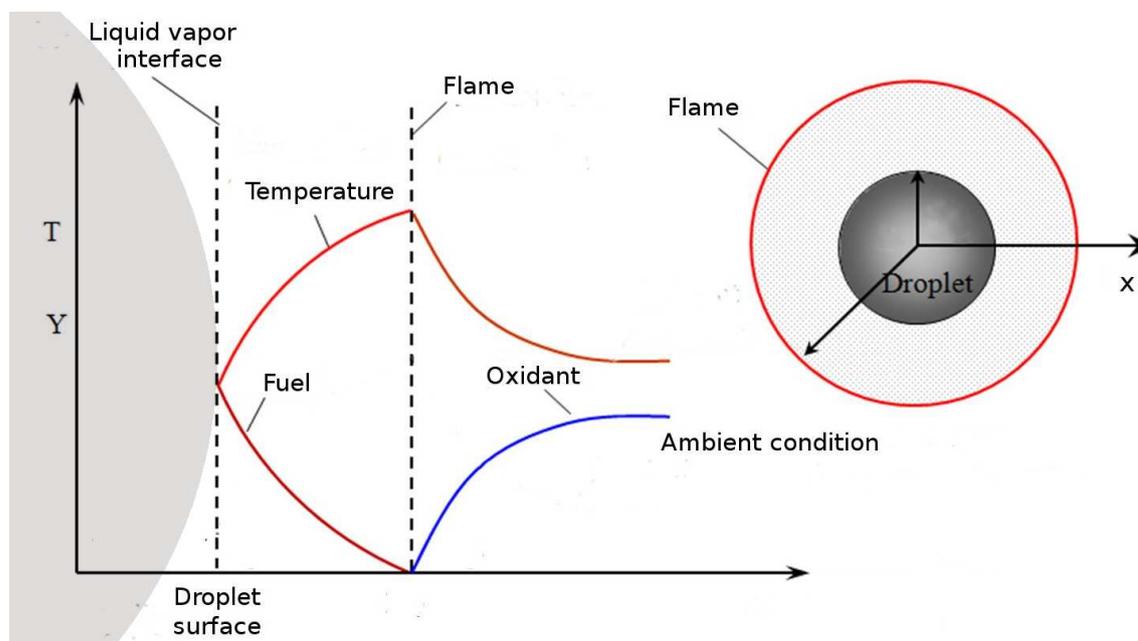
Tendo em vista a grande dificuldade em analisar as transferências de calor e massa em sprays, o estudo de gotas isoladas tem sido o objeto de inúmeros trabalhos científicos, como por exemplo, Godsave (1953), Goldsmith (1954), Kassoy e Williams (1968), Law (1975), Raghunandan e Mukunda (1977), Caprio, Insola e Lignola (1981), Choi, Haggard et al. (1991), Saastamoinen, Aho e Linna (1993) Peters et al. (2002), dentre outros. Estes trabalhos, sobre vaporização e combustão de gotas, visam avaliar os efeitos das condições físicas do processo, fornecendo subsídio para correlações que possam ser utilizadas em modelos de spray, ampliando os conhecimentos sobre o assunto.

2.1.3.1 Modelo clássico de combustão de gotas

Após muitos anos de estudos e experimentos, um modelo clássico de combustão de gotas foi criado, conforme representado na figura 4 (FACHINI, 1999). Este modelo, considera que a zona de reação química é muito estreita, ou seja, a combustão ocorre numa zona de mistura infinitesimal, portanto, sob estas condições a chama divide o domínio físico como lado do combustível e lado do oxidante.

Esta hipótese resulta num modelo simplificado sem a necessidade de resolver as equações com o termo de reação química que é fortemente não linear (exponencial de Arrhenius) que será detalhado na formulação matemática.

Figura 4 – Representação do modelo clássico de combustão de gotas.



Analisando o modelo clássico de combustão de gotas representado na figura 4, é possível perceber que a temperatura tem o seu valor máximo na chama e as concentrações de combustível e oxidante vão a zero na zona de reação química, ou seja, não tem escape de

combustível e nem de oxidante pela chama durante o processo de combustão (FACHINI, 1999).

No processo de combustão de gotas isoladas, uma vez que a reação de combustão ocorre na fase, o calor é transferido do ambiente para a gota fornecendo energia térmica suficiente para vaporizar o líquido e formar um vapor na superfície da mesma, difundindo com o oxidante. Essa vaporização causa uma redução no tamanho do raio da gota até que a mesma seja evaporada por completo (TURNS, 2013).

2.2 Revisão bibliográfica

Nesta seção, uma revisão bibliográfica sobre a combustão de gotas em regime de “cool flame” será apresentada. Também será feita uma descrição, resumidamente, sobre o Experimento de Extinção de Chama (FLEX) que visualizou o fenômeno da combustão em regime de “cool flame”, mostrando as respectivas observações.

2.2.1 Regime de combustão “Cool Flame”

O fogo, apesar de nos aquecer e preparar nossa comida durante milhares de anos, ainda guarda segredos que podem nos surpreender e mudar a nossa visão sobre como as coisas realmente funcionam (GIANNONE, 2012). Segundo Forman Willians, da Universidade da Califórnia em San Diego, que estudou combustão por mais de 50 anos, existem muitas coisas sobre o processo de combustão que ainda não foram descobertas, e serão reveladas futuramente em experimentos científicos.

Após anos de estudos sobre os processos e os tipos de chamas, em um experimento realizado recentemente pela NASA, de combustão de uma gota isolada de n-heptano exposta à diferentes condições de pressão e temperatura, observou-se, inesperadamente, um regime diferente de combustão. A mesma ocorreu em duas fases distintas.

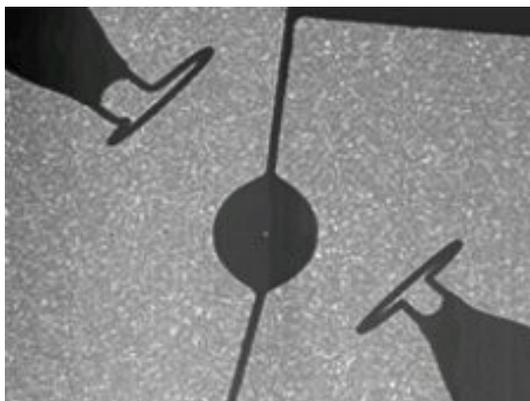
Na primeira, a gota sofreu queima normal, com uma chama visível em torno da mesma. Já na segunda, a radiação da chama se apagou com um tamanho de gota relativamente grande ainda, porém, a mesma seguiu com uma taxa de vaporização praticamente constante, até o término dela, não podendo ser detectada nenhuma chama visível (FA-ROUK; DRYER, 2014).

Após esta segunda fase, formou-se uma nuvem de combustível ao redor da gota. Além disso, segundo Nayagam et al. (2012) a chama continuou o processo de combustão, porém com uma temperatura mais baixa em relação a combustão clássica .

Este experimento, chamado de FLEX, foi realizado na Estação Espacial Internacional (ISS), com o intuito de investigar o comportamento de chamas no processo de combustão de gotas isoladas (GIANNONE, 2012). Para realização do experimento (FLEX),

primeiramente, uma gota grande de n-heptano, com aproximadamente 3 milímetros de diâmetro, foi implantada no local indicado para proceder com o teste, conforme ilustrado na figura 5.

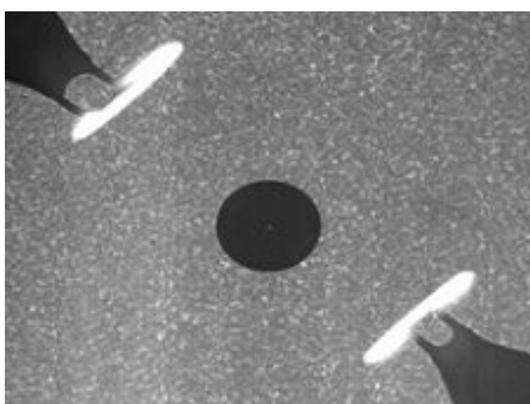
Figura 5 – Implantação da gota de n-heptano.



Fonte: Dietrich et al. (2014)

No centro da figura 5, pode-se verificar a gota de n-heptano sendo implantada, e nos lados inferior direito e superior esquerdo da imagem encontram-se expostas as ferramentas para realização a ignição da mesma. Em seguida, tendo a gota implantada no seu respectivo lugar, a ignição da mesma é realizada, conforme ilustrado na figura 6.

Figura 6 – Ignição da gota de n-heptano.



Fonte: Dietrich et al. (2014)

Nesta figura 6, é possível verificar, em seu centro, a gota de n-heptano implantada, e em seus cantos superior esquerdo e inferior direito, as ferramentas de ignição preparadas para ignitar a gota. Após a ignição da gota, a mesma entrou em processo de queima. Nesta

primeira fase, a chama se apresenta de forma visível e com uma temperatura normal de combustão, em torno de 1800 Kelvin, conforme ilustrado na figura 7.

Figura 7 – Primeira fase de queima da gota de n-heptano.



Fonte: Dietrich et al. (2014)

No centro figura 7, é possível observar, em tom de rosa, a gota em processo de combustão, e em seu entorno, com uma coloração azul, a radiação da chama, que é visível nessa primeira fase de combustão. Até o momento, o experimento se comportava de maneira normal, demonstrando um processo de combustão de gotas comum. Porém, logo após um instante de tempo, com uma gota, ainda, relativamente grande, a chama se extinguiu radiativamente, conforme pode ser visto na figura 8, que representa essa segunda fase observada.

Figura 8 – Segunda fase de queima da gota de n-heptano.



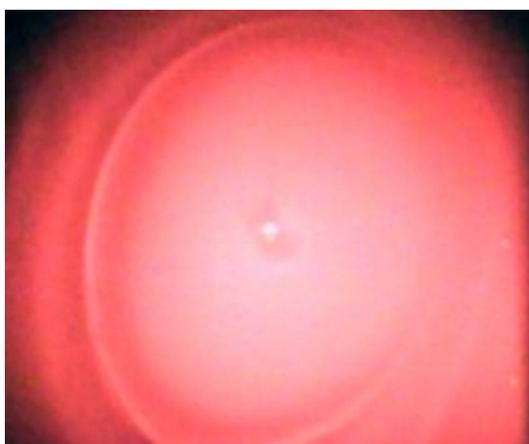
Fonte: Dietrich et al. (2014)

Nesta figura 8 é possível perceber que a radiação da chama, que era visível, em tom de azul, na figura 7 (primeira fase), sumiu, sendo possível apenas, visualizar no centro da imagem, a gota de n-heptano.

Este fato indica, que, mesmo com uma chama invisível e de baixa temperatura, existe uma liberação química de calor. Razão para se pensar num regime de “cool flame”.

Neste momento a temperatura da chama diminuiu drasticamente, de cerca de 1800 Kelvin para aproximadamente 800 Kelvin, mantendo a gota com uma taxa de vaporização praticamente constante (DIETRICH et al., 2014), formando uma nuvem de vapor no entorno da gota de combustível, mostrando o segundo estágio de combustão observado, o chamado de “cool flame” (Figura 9).

Figura 9 – Nuvem de vapor formada ao redor da gota no segundo estágio.



Fonte: Dietrich et al. (2014)

Na figura 9, é possível verificar a nuvem de vapor, em coloração vermelha, que se formou no final da gota, se estendendo do centro da imagem até suas bordas.

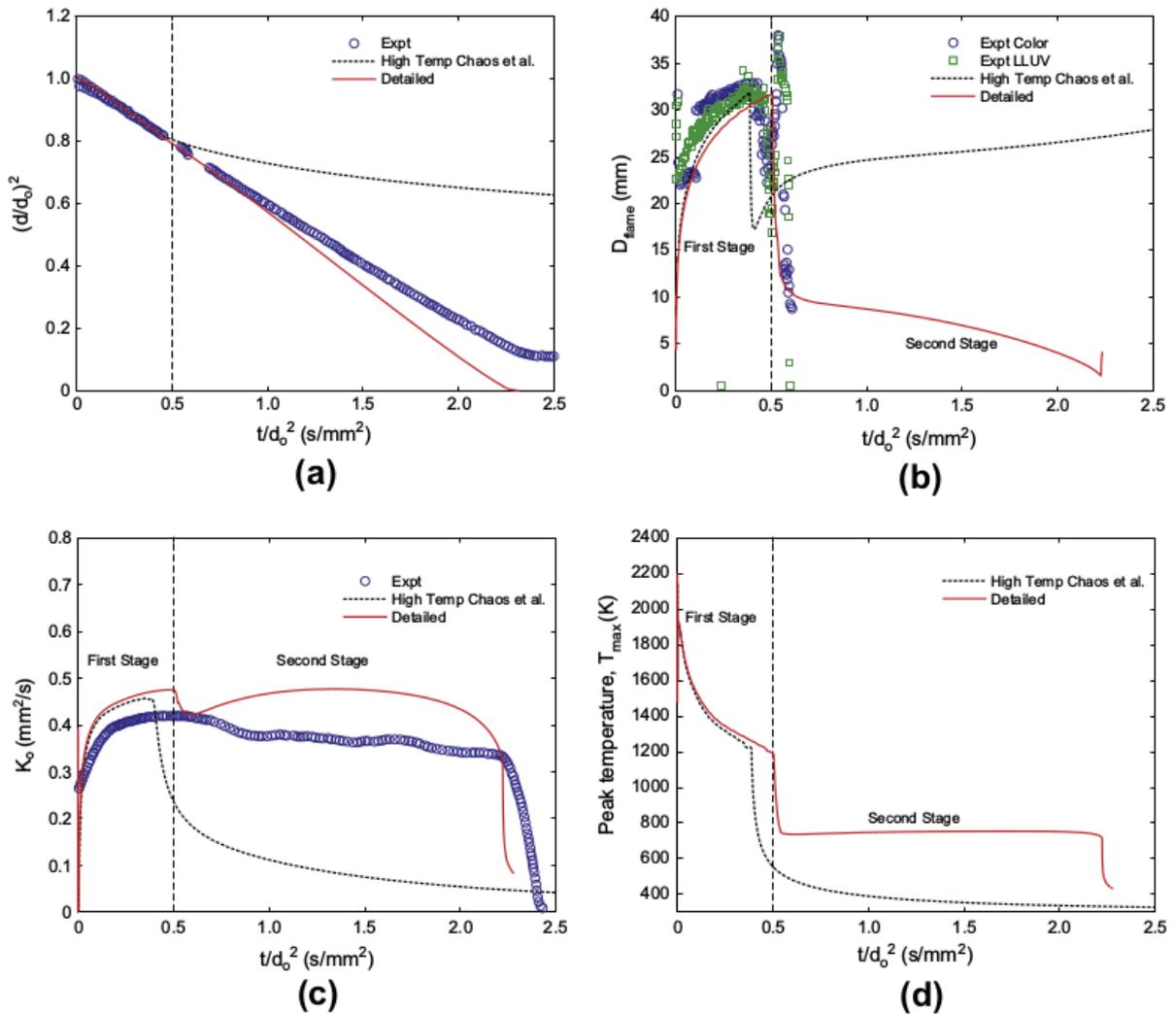
Neste segundo estágio, a vaporização da gota é sustentada por uma chama mais fria e sem radiação visível chamada de “cool flame”. A “cool flame” está diretamente associada com o regime de combustão de chamas não pré-misturadas (CAPRIO; INSOLA; LIGNOLA, 1981), e é a primeira vez que tal regime é encontrado em chamas difusivas.

Algumas misturas de ar-combustível reagem quimicamente em uma temperatura relativamente baixa, formando chamas fracas que geram pouco calor, resultando assim em oxidação parcial do combustível aplicado (POLLARD; TIPPER; BAMFORD, 1977).

Nos gráficos expostos na figura 10, gerados por Dietrich et al. (2013) durante o experimento, é possível perceber que após um certo período de tempo a chama não é mais identificada (Figura 10b), e a temperatura da mesma sofre uma queda brusca (Figura 10d). Contudo, o raio da gota (Figura 10a), continua a diminuir praticamente

com a mesma intensidade, mantendo a taxa de vaporização quase constante nas duas fases identificadas neste processo de combustão (Figura 10c).

Figura 10 – Gráficos gerados durante o experimento: (a) Variação do raio da gota, (b) Radiação da chama, (c) Taxa de vaporização da gota e (d) Variação da temperatura da chama.



Fonte: Farouk e Dryer (2014)

A partir dessas observações, na tentativa de explicar algumas perguntas, Paczko et al. (2014) utilizou a química cinética detalhada para calcular as taxas de queima da gota de combustível, a estrutura da chama e diâmetros de extinção no regime de combustão “cool flame”. Estes cálculos foram realizados admitindo que a queima da gota seja praticamente constante e a fração de mistura, uma variável independente, que está relacionada diretamente com as variáveis físicas da combustão da gota.

Isso revelou que os principais produtos da reação química principal durante a fase

de baixa temperatura foram, monóxido de carbono (CO), água (H_2O), água oxigenada (H_2O_2), glicose (CH_2O) e etileno (C_2H_4), e que durante este estágio existe um escape significativo de combustível e oxigênio (O_2) através da chama. Este escape de combustível explica a formação da nuvem de vapor composta por produtos condensáveis que se formam após a extinção da chama. Além disso, os resultados também mostram a presença de vapores de combustível puro, alcenos maiores, cetohidroperóxidos e éteres cíclicos no ambiente (atmosfera) ao redor da gota. (PACZKO et al., 2014).

Esta descoberta, uma vez que seja entendida e dominada pelo homem, pode vir a trazer benefícios para o ser humano, tanto na melhoria de motores de combustão interna, como na segurança contra incêndios. Nos motores, pode-se reduzir a taxa de emissão de poluentes, aproveitando melhor o combustível e aumentando o rendimento do auto propelido. E na proteção contra incêndios, levando em consideração que a combustão continua após a radiação visível extinguir-se, criando novas técnicas de supressão de incêndios específicas para tais situações (GIANNONE, 2012).

Estudos anteriores, como por exemplo o de Naidja et al. (2003), também sugerem o uso destes produtos, resultantes de oxidação parcial de combustíveis em condições de “cool flame”, atraentes em processos de reforma, como por exemplo, para geração de gás rico em hidrogênio.

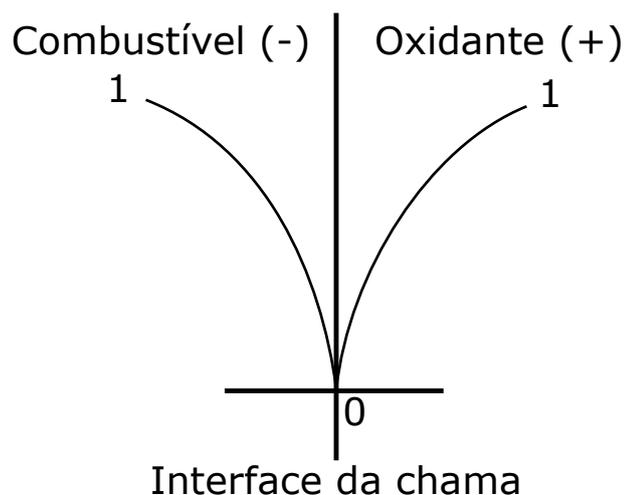
3 Metodologia

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

O vazamento de combustível através da chama produz um comportamento semelhante ao do regime de “cool flame”, isto é, chama com baixa temperatura ocorrendo perto da gota, como observado por Nayagam et al. (2012) em estudos experimentais anteriores.

O modelo clássico de combustão de gotas, como visto na subseção 2.1.3.1, adota uma chama infinitamente estreita, que divide o domínio em lado do combustível e lado do oxidante, conforme ilustrado na figura 11. Neste modelo clássico, as concentrações de combustível e oxidante são totalmente consumidas pela chama, não escapando nada pela mesma. Com isso, para resolver o problema, equações de conservação da massa, da energia e das espécies de combustível e oxidante são integradas nos dois domínios, separadamente.

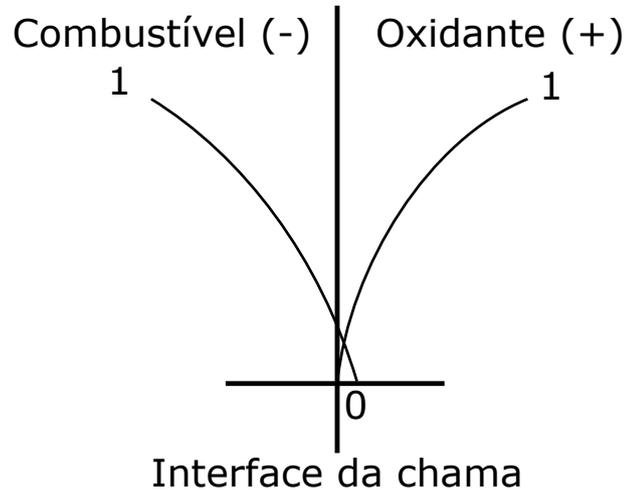
Figura 11 – Interface da chama (modelo clássico)



Com base nisso, o modelo atual, para simular um regime de combustão “cool flame” em chamas difusivas, irá impor, no modelo clássico, um escape de combustível pela chama, conforme ilustrado na figura 12. Logo, o modelo descreverá de forma contínua a taxa de

vaporização da gota no regime de queima normal (nenhum vazamento), passando pelo regime de “cool flame” até o término da gota (vazamento completo).

Figura 12 – Interface da chama (modelo atual)



Para a realização deste trabalho serão utilizadas as equações de conservação de espécies do combustível, do oxidante e da energia. Nelas as variáveis: tempo (t), temperatura (T), massa específica do gás (ρ), velocidade (v), fração mássica de oxidante (Y_O), fração mássica de combustível (Y_F), coordenada radial (r) e raio (\bar{a}) serão adimensionalizadas.

Devido à complexidade e quantidade de fenômenos distintos que ocorrem na chama durante o processo de combustão de uma gota, será considerada uma chama infinitamente estreita, eliminando assim o termo de reação química, que é fortemente não linear dentro das equações de conservação. Esta simplificação, possibilita que a integração das equações de conservação do lado do oxidante sejam realizadas separadamente das do lado do combustível, sem o termo de reação química e sob a hipótese de uma chama infinitamente estreita.

Integrando as equações de conservação adimensionalizadas, juntamente com as devidas condições de contorno que serão aplicadas, será possível encontrar a posição da chama (x_p), a taxa de vaporização da gota (β), a temperatura (θ), os fluxos de calor (H_{Flux}), de combustível (F_{Flux}) e de oxidante (O_{Flux}) na chama, em função do escape de combustível (y_{Fp}) que será imposto artificialmente no modelo.

3.1 Formulação matemática

Para descrever o problema de combustão de gotas, as equações gerais de conservação de massa, de energia, e das espécies de combustível e oxidante (LAW, 2010) foram

utilizadas.

3.1.1 Equações de conservação

A equação geral da conservação de massa é descrita pela equação 3.1 (LAW, 2010).

$$\frac{\partial \rho(x, y, z)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (3.1)$$

onde ρ, t e \vec{V} são, densidade, tempo e velocidade média da mistura da massa de gases, respectivamente.

Já a equação geral da conservação das espécies de combustível e oxidante é descrita pela equação 3.2.

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla Y_i - \nabla \cdot (D_i \nabla Y_i) = \dot{m}_i''' \quad (3.2)$$

onde D_i representa a difusividade mássica da espécie i , Y_i a fração mássica da espécie i e \dot{m}_i''' o consumo de massa nas reações químicas ($i = F$ para combustível ou $i = O$ para oxidante).

A equação geral que descreve a conservação de energia é dada pela equação 3.3.

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla T \right) - \nabla \cdot (k \nabla T) - \mu \Phi = \dot{q} \quad (3.3)$$

onde c_p, k, T, μ, Φ e \dot{q} , representam respectivamente, o calor específico à pressão constante, a condutividade térmica, a temperatura, o coeficiente de viscosidade, a dissipação viscosa e o calor gerado nas reações químicas.

Para descrever o fenômeno de combustão de gotas, devido a geometria do mesmo, um sistema de coordenadas esféricas foi utilizado. Com o intuito de obter uma solução interessante para tal problema de combustão de gotas algumas considerações iniciais também foram feitas. Admitiu-se que:

- existe uma simetria radial na gota;
- o escoamento é unidimensional, ou seja, apenas na direção radial;
- a dissipação viscosa Φ é desprezível;
- o processo de combustão ocorre em regime de baixa pressão ($\varepsilon \ll 1$).

Aplicando as três primeiras considerações, os operadores diferenciais (∇), das equações de conservação se simplificam em,

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial r} \vec{r} \quad (3.4)$$

e,

$$\nabla \cdot \vec{A} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 A_r) \quad (3.5)$$

Substituindo eles nas equações gerais de conservação (Eq 3.1, 3.2 e 3.3), temos que as equações de conservação da massa, de espécies e de energia, que descrevem este problema de combustão de gotas estão dispostas respectivamente nas equações 3.6, 3.7 e 3.8.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho V) = 0 \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + V \frac{\partial Y_i}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(D_i r^2 \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right) = \dot{m}_i''' \quad (3.7)$$

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + V \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(k r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \dot{q} \quad (3.8)$$

Onde \dot{m}_i''' representa o consumo de massa nas reações químicas e \dot{q} representa o calor gerado nas reações.

3.1.2 Adimensionalização das equações de conservação

Com o objetivo de diminuir o número de incógnitas e simplificar o problema de combustão de gotas, as equações que descrevem o mesmo foram adimensionalizadas. Estas equações, que descrevem o problema, encontram-se divididas entre a fase líquida e a fase gasosa do problema de combustão de gotas.

3.1.2.1 Fase líquida

Para descrever a fase líquida do problema, as propriedades: massa específica (ρ_l), calor específico (c_l) e condutividade térmica (k_l) são consideradas constantes no líquido. A partir disso, a equação que descreve esta fase é obtida a partir do volume da gota (V), definido pela equação 3.9.

$$V = \frac{4}{3} \pi \bar{a}^3 \quad (3.9)$$

Onde \bar{a} representa o raio da gota dimensional. Derivando a equação 3.9 em função do tempo (t), obtemos a equação 3.10.

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dt} &= \frac{4}{3} \pi \frac{d\bar{a}^3}{dt} \\ \frac{d\bar{a}^3}{dt} &= 3 \frac{dV}{dt} \frac{1}{4\pi} \end{aligned} \quad (3.10)$$

O raio instantâneo da gota adimensional (a) é definido pela razão entre o raio instantâneo da gota dimensional (\bar{a}) e o raio inicial da gota (a_0), conforme equação 3.11.

$$a = \frac{\bar{a}}{a_0} \quad (3.11)$$

E o tempo adimensional (τ), é definido pela razão entre o tempo (t) e o tempo característico de vida da gota (t_c), conforme equação 3.12.

$$\tau = \frac{t}{t_c} \quad (3.12)$$

Reescrevendo e derivando uma vez a equação 3.12, sabendo que $t_c = a_0^2/\alpha_\infty \varepsilon$, que $\alpha_\infty = k_\infty/c_p \rho_\infty$ e que $\varepsilon = \rho_\infty/\rho_l$, obtemos a equação 3.13.

$$t = \tau t_c = \tau \frac{a_0^2}{\alpha_\infty \varepsilon} = \frac{\tau a_0^2}{k_\infty/c_p \rho_\infty} \frac{\rho_l}{\rho_\infty} = \frac{\tau a_0^2 c_p \rho_l}{k_\infty}$$

$$dt = \frac{a_0^2 c_p \rho_l}{k_\infty} d\tau \quad (3.13)$$

Onde ρ_∞ é a densidade e k_∞ a condutividade térmica do gás em região afastada da chama. O fluxo de massa (\dot{m}), nesta fase, é representado pela equação 3.14.

$$\rho_l \frac{dV}{dt} = -\dot{m} \quad (3.14)$$

Substituindo então, na equação 3.10, as definições expostas nas equações 3.11, 3.13 e 3.14, encontramos

$$(a_0)^3 \frac{da^3}{d\tau} \frac{k_\infty^2}{a_0} c_p \rho_l = -\frac{3\dot{m}}{4\pi \rho_l}$$

$$\frac{da^3}{d\tau} = -3 \frac{\dot{m} c_p}{4\pi a_0 k_\infty} \quad (3.15)$$

Sabendo que a taxa de vaporização é dada por $\lambda = \dot{m} c_p / 4\pi a_0 k_\infty$, e substituindo a mesma na equação 3.15 obtemos

$$da^3 = -3\lambda d\tau \quad (3.16)$$

Logo, reescrevendo a equação 3.16, encontramos a equação 3.17.

$$3a^2 da = -3\lambda d\tau \rightarrow a \frac{da}{d\tau} = -\frac{\lambda}{a} \quad (3.17)$$

Tendo em vista que,

$$\frac{da^2}{d\tau} = 2a \frac{da}{d\tau} \quad (3.18)$$

e substituindo esta relação, disposta na equação 3.18, na equação 3.17, obtemos a equação 3.19, que descreve a fase líquida do problema de combustão de gotas.

$$\frac{da^2}{d\tau} = -2 \frac{\lambda}{a} = -2\beta \quad (3.19)$$

onde a constante de vaporização (β) é a razão entre a taxa de vaporização da gota adimensional (λ) e o raio instantâneo da gota adimensional (a).

O problema térmico, deste trabalho, pode ser facilmente descrito assumindo que o processo de condução é o único processo de transferência de calor, ou seja, este processo ocorre de maneira tão rápida, que a temperatura é considerada uniforme dentro da gota (NAYAGAM et al., 2012).

Assumimos também, para a resolução do problema de combustão de gotas, que a gota está numa atmosfera inativa e que todos os processos da fase gasosa também terão simetria esférica. Além disso, admite-se que não há nenhum outro combustível dentro do ambiente.

A utilização de uma pressão constante se justifica devido ao fato de que a velocidade gasosa, induzida pela expansão na mudança de fase, líquido para gasoso, e pela expansão térmica causada pela chama, é muito menor que a velocidade do som.

3.1.2.2 Fase gasosa

Para descrever a fase gasosa do problema, considera-se que, em região afastada da superfície da gota (atmosfera ambiente), o gás também possui propriedades constantes, as quais são: sua massa específica (ρ_∞), sua condutividade térmica (k_∞), seu calor específico a pressão constante (c_p), sua temperatura (T_∞) e sua fração de mássica de oxidante (Y_{O_∞}).

A variável ϱ representa a razão entre a massa específica (ρ) e a massa específica do ambiente (ρ_∞), conforme equação 3.20.

$$\varrho = \frac{\rho}{\rho_\infty} \quad (3.20)$$

Assim, substituindo esta variável ϱ e dividindo cada termo das equações 3.6 e 3.8 por ρ_∞ , encontramos as equações 3.21 e 3.22, respectivamente.

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \varrho V) = 0 \quad (3.21)$$

$$\varrho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + V \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{1}{\rho_\infty} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(k r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \frac{\dot{q}}{\rho_\infty} \quad (3.22)$$

A variável x é a coordenada radial adimensionalizada pelo raio inicial da gota (a_0), conforme equação 3.23.

$$x = \frac{r}{a_0} \quad (3.23)$$

onde r é a coordenada radial dimensional. Substituindo esta definição, disposta na equação 3.23, nas equações 3.21, 3.7 e 3.22, obtemos respectivamente as equações 3.24, 3.25 e 3.26.

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \frac{1}{a_0 x^2} \frac{\partial}{\partial x} (x^2 \varrho V) = 0 \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \frac{1}{a_0} V \frac{\partial Y_i}{\partial x} - \frac{1}{a_0^2 x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i x^2 \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) = \dot{m}_i''' \quad (3.25)$$

$$\varrho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{a_0} V \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{1}{\rho_\infty a_0^2 x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(k x^2 \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \frac{\dot{q}}{\rho_\infty} \quad (3.26)$$

A velocidade radial adimensional v é definida pela velocidade radial dimensional (V) e pelo raio inicial da gota (a_0) sobre a difusividade térmica no ambiente (α_∞), conforme equação 3.27.

$$v = \frac{V a_0}{\alpha_\infty} \quad (3.27)$$

Aplicando esta variável v nas equações 3.24, 3.25 e 3.26 encontramos respectivamente as equações 3.28, 3.29 e 3.30.

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \frac{\alpha_\infty}{a_0^2 x^2} \frac{\partial}{\partial x} (x^2 \varrho v) = 0 \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \frac{\alpha_\infty}{a_0^2} v \frac{\partial Y_i}{\partial x} - \frac{1}{a_0^2 x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i x^2 \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) = \dot{m}_i''' \quad (3.29)$$

$$\varrho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\alpha_\infty}{a_0^2} v \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{1}{\rho_\infty a_0^2 x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(k x^2 \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \frac{\dot{q}}{\rho_\infty} \quad (3.30)$$

O tempo adimensionalizado τ é definido pela razão entre o tempo (t) e a ordem de magnitude do tempo de vida da gota (t_c), que é determinado pela equação 3.31.

$$t_c = \frac{a_0^2}{\alpha_\infty \varepsilon} \quad (3.31)$$

Onde $\varepsilon = \rho_\infty / \rho_l$. Substituindo estas definições nas equações 3.28, 3.29 e 3.30, obtemos respectivamente as equações 3.32, 3.33 e 3.34.

$$\varepsilon \frac{\partial \varrho}{\partial \tau} + \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (x^2 \varrho v) = 0 \quad (3.32)$$

$$\varepsilon \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} + v \frac{\partial Y_i}{\partial x} - \frac{1}{\alpha_\infty} \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i x^2 \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) = \frac{\dot{m}_i''' a_0^2}{\alpha_\infty} \quad (3.33)$$

$$\varrho c_p \left(\varepsilon \frac{\partial T}{\partial \tau} + v \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{1}{\alpha_\infty \rho_\infty} \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(k x^2 \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \frac{\dot{q} a_0^2}{\rho_\infty \alpha_\infty} \quad (3.34)$$

Levando em consideração a relação disposta na equação 3.35,

$$\frac{\rho D_i}{\rho_\infty D_{i,\infty}} = \frac{k}{k_\infty} = \left(\frac{T}{T_\infty} \right)^n \quad (3.35)$$

e sabendo que a temperatura adimensionalizada (θ) é definida pela razão entre a temperatura dimensional (T) e a temperatura no ambiente (T_∞), encontramos a relação

$$\varrho \frac{D_i}{D_{i,\infty}} = \frac{k}{k_\infty} = \theta^n \quad (3.36)$$

Aplicando essas definições nas equações 3.33 e 3.34, obtemos, respectivamente

$$\varepsilon \varrho \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} + \varrho v \frac{\partial Y_i}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{D_{i,\infty}}{\alpha_\infty} \theta^n x^2 \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) = \frac{\dot{m}_i''' a_0^2 \varrho}{\alpha_\infty} \quad (3.37)$$

$$\varrho \left(\varepsilon \frac{\partial T}{\partial \tau} + v \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta^n x^2 \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \frac{\dot{q} a_0^2}{k_\infty} \quad (3.38)$$

O número de Lewis (Le) representa a razão entre os coeficientes de transporte em condição ambiente, conforme equação 3.39.

$$Le_i = \frac{\alpha_\infty}{D_{i,\infty}} \quad (3.39)$$

Onde, o subscrito i , pode representar tanto o oxidante (O), como o combustível (F). Logo $i = [O, F]$. Substituindo esta definição na equação de conservação das espécies (Eq 3.37), encontramos a equação 3.40.

$$\varepsilon \varrho \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} + \varrho v \frac{\partial Y_i}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_i} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) = \frac{\dot{m}_i''' a_0^2 \varrho}{\alpha_\infty} \quad (3.40)$$

As frações de combustível (Y_F) e oxidante (Y_O) adimensionalizadas, são descritas pelas equações 3.41 e 3.42, respectivamente

$$y_F = Y_F \quad (3.41)$$

e,

$$y_O = \frac{Y_O}{Y_{O,\infty}} \quad (3.42)$$

Aplicando estas definições na equação de conservação das espécies (Eq 3.40), obtemos duas equações, uma para o oxidante (Eq 3.43) e uma para o combustível (Eq 3.44).

$$\varepsilon \varrho \frac{\partial y_O}{\partial \tau} + \varrho v \frac{\partial y_O}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_O} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right) = \frac{\varrho a_0^2}{\alpha_\infty Y_{O,\infty}} \dot{m}_i''' \quad (3.43)$$

$$\varepsilon \varrho \frac{\partial y_F}{\partial \tau} + \varrho v \frac{\partial y_F}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) = \frac{\varrho a_0^2}{\alpha_\infty} \dot{m}_i''' \quad (3.44)$$

A temperatura adimensionalizada θ é definida pela razão entre a temperatura dimensional (T) e a temperatura ambiente (T_∞), que é determinada pela equação 3.45.

$$\theta = \frac{T}{T_\infty} \quad (3.45)$$

Substituindo esta definição na equação de conservação da energia (Eq 3.38), obtemos a equação 3.46.

$$\varrho \left(\varepsilon \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + v \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = \frac{\dot{q} a_0^2}{T_\infty k_\infty} \quad (3.46)$$

Sabendo que \dot{q} é a energia gerada por unidade de volume, temos que a energia gerada por unidade de massa é definida por $\rho \dot{q}$. Com isso, definimos que o calor de combustão (Q), pode ser representado por

$$Q = \frac{\rho \dot{q}}{c_p T_\infty} \quad (3.47)$$

Aplicando a definição, disposta na equação 3.47, na equação de conservação de energia (Eq 3.46), encontramos a equação 3.48.

$$\varrho \left(\varepsilon \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + v \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = \frac{\varrho a_0^2}{\alpha_\infty} Q \quad (3.48)$$

Com isso, as equações de conservação da massa, das espécies de oxidante e combustível e de energia, obtidas até o momento, estão expostas, respectivamente, nas equações 3.49, 3.50, 3.51 e 3.52.

$$\varepsilon \frac{\partial \varrho}{\partial \tau} + \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (x^2 \varrho v) = 0 \quad (3.49)$$

$$\varepsilon \varrho \frac{\partial y_O}{\partial \tau} + \varrho v \frac{\partial y_O}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_O} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right) = \frac{\varrho a_0^2}{\alpha_\infty Y_{O,\infty}} \dot{m}_i''' \quad (3.50)$$

$$\varepsilon \varrho \frac{\partial y_F}{\partial \tau} + \varrho v \frac{\partial y_F}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) = \frac{\varrho a_0^2}{\alpha_\infty} \dot{m}_i''' \quad (3.51)$$

$$\varrho \left(\varepsilon \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + v \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = \frac{\varrho a_0^2}{\alpha_\infty} Q \quad (3.52)$$

Em uma reação química estequiométrica de passo único do tipo Burke-Schumann, para cada unidade de massa de combustível consumida, são necessárias ν unidades de massa de oxidante (GREENBERG, 1989). A partir disso, definimos que $s_F = 1$ e que $s_O = \nu/Y_{O,\infty}$. Adotando que $w = \varrho a_0^2 \dot{m}_i''' / \alpha_\infty$ e substituindo todas essas definições nas equações de conservação de espécies (Eq 3.50 e 3.51), e na equação de conservação de energia (Eq 3.52), obtemos, respectivamente, as equações 3.53 e 3.54.

$$\varepsilon \varrho \frac{\partial y_i}{\partial \tau} + \varrho v \frac{\partial y_i}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_i} \frac{\partial y_i}{\partial x} \right) = -s_i w_i, i = O, F \quad (3.53)$$

$$\varrho \left(\varepsilon \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + v \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = Q w_F \quad (3.54)$$

Aplicando então, nas equações de conservação da massa (Eq 3.49), de conservação das espécies (Eq 3.53) e de conservação da energia (Eq 3.54), a última consideração inicial, que é de baixa pressão, onde ε é desprezível, ou seja, $\varepsilon \ll 1$, encontramos, respectivamente, as equações 3.55, 3.56 e 3.57.

$$\frac{\partial}{\partial x} (x^2 \varrho v) = 0 \quad (3.55)$$

$$\varrho v \frac{\partial y_i}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_i} \frac{\partial y_i}{\partial x} \right) = -s_i w_i, i = O, F \quad (3.56)$$

$$\varrho v \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = Q w_F \quad (3.57)$$

Integrando a equação da conservação de massa (Eq 3.55), encontramos a equação 3.58.

$$x^2 \varrho v = \lambda(\tau) \quad (3.58)$$

Onde λ é a taxa de vaporização adimensional descrita pela equação 3.59.

$$\lambda = \frac{\dot{m}c_p}{4\pi a_0 k_\infty} \quad (3.59)$$

Onde, a variável \dot{m} representa o fluxo de massa. Com isso, substituindo a equação de conservação da massa (Eq 3.58), nas equações de conservação das espécies (Eq 3.56) e de conservação da energia (Eq 3.57), obtemos respectivamente as equações 3.60 e 3.61, que descrevem a parte gasosa do problema de combustão de gotas.

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial y_i}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_i} \frac{\partial y_i}{\partial x} \right) = -s_i w_i, i = O, F \quad (3.60)$$

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = Q w_F \quad (3.61)$$

Nas equações de conservação 3.60 e 3.61, é possível verificar que, o primeiro termo das mesmas é um termo convectivo, responsável por realizar o transporte das massas, e o segundo, consiste em um termo difusivo, que tem a função de realizar a mistura delas.

3.1.3 Condições de contorno

Para resolver o problema de combustão de gotas em questão, algumas condições de contorno se fazem necessárias. Integrando a equação de conservação da espécie de combustível (Eq 3.60) através da interface líquido-gás, considerando que não há reação química, encontramos a equação 3.62.

$$\int_{a^-}^{a^+} \lambda \frac{\partial y_F}{\partial x} dx - \int_{a^-}^{a^+} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) dx = 0$$

$$\left[\lambda y_F - \frac{\theta^n x^2}{Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right]_{a^-}^{a^+} = 0 \quad (3.62)$$

Considerando que a fração mássica de combustível no interior da gota (y_F) é igual a uma unidade, na superfície (y_{Fs}), a mesma possui um comportamento descrito pela expressão de Clausius-Clapeyron (Eq 3.63).

$$y_{Fs} = e^{\gamma \left(1 - \frac{\theta_b}{\theta_s} \right)} \quad (3.63)$$

Onde θ_b e θ_s são, respectivamente, as temperaturas adimensionais de ebulição e da superfície da gota. Assim, com essa expressão de Clausius-Clapeyron (Eq 3.63), torna-se possível relacionar a temperatura θ_s com a fração de combustível na superfície da gota y_{Fs} , onde, $\gamma = L/R_g T_b$. As variáveis L , R_g e T_b , nesta expressão, são o calor latente de vaporização, a constante dos gases e a temperatura de ebulição dimensional, respectivamente. Adotando então, que o gradiente de concentração na gota é nulo, conforme equação 3.64.

$$\frac{\theta^n x^2}{Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \Big|_{a^-} = 0 \quad (3.64)$$

E substituindo o mesmo na equação 3.62, obtemos a equação 3.65.

$$\lambda(y_{Fs} - 1) - \frac{\theta^n x^2}{Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \Big|_a = 0 \quad (3.65)$$

Então, reescrevendo a mesma, encontramos a primeira condição de contorno na superfície da gota (Eq 3.66), que demonstra que o fluxo de massa que entra é igual ao que evapora na superfície da gota.

$$-\frac{\theta^n x^2}{Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \Big|_a = \lambda(1 - y_{Fs}) \quad (3.66)$$

Tendo encontrada a primeira condição de contorno, partimos para a obtenção da próxima. Integrando a equação de conservação de energia (Eq 3.61) através da interface, considerando que não há geração de calor e que toda a gota se encontra na temperatura de ebulição θ_b , temos a equação 3.67.

$$\begin{aligned} \int_{a^-}^{a^+} \lambda \frac{\partial \theta}{\partial x} dx - \int_{a^-}^{a^+} \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) dx &= 0 \\ \left[\lambda \theta - \theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right]_{a^-}^{a^+} &= 0 \\ \left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right)_{x=a^+} &= \lambda(\theta^+ - \theta^-) + \left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right)_{x=a^-} \end{aligned} \quad (3.67)$$

O calor de combustão Q_i é determinado pela expressão $Q_i = q_i/c_p T_\infty$, onde q_i é a energia no interior da gota, definida pela expressão $q_i = c_p T_b$. Substituindo uma expressão na outra encontramos uma relação importante, em que o calor de combustão Q_i é igual a temperatura adimensional de ebulição da gota θ_b , ou seja, $Q_i = \theta_b$.

Analisando um volume de controle localizado na superfície da gota, e levando em consideração a lei da conservação de energia, temos que o calor absorvido pela gota para evaporar o combustível (\dot{Q}_{in}) e o calor emitido pela gota durante a evaporação (\dot{Q}_{out}) são iguais, ou seja

$$\dot{Q}_{in} = \dot{Q}_{out} \quad (3.68)$$

Sabendo que $\dot{Q}_{in} = \dot{m}L$, onde \dot{m} é a vazão mássica e L é o calor latente de vaporização, e que $\dot{Q}_{out} = \dot{m}c_p T^+$, e substituindo estas definições na equação 3.68, encontramos a relação

$$L = c_p T^+ \quad (3.69)$$

O calor latente de vaporização adimensional Λ é definido pela equação 3.70.

$$\Lambda = \frac{L}{c_p T_\infty} \quad (3.70)$$

Substituindo o calor latente de vaporização adimensional Λ exposto na equação 3.70 na equação 3.69, lembrando que a temperatura adimensional $\theta = T/T_\infty$, obtemos que $\Lambda = \theta^+$. Lembrando também que $Q_i = \theta_b = \theta^-$, e substituindo estas definições na equação 3.67, encontramos mais uma condição de contorno na superfície da gota, exposta na equação 3.71.

$$\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_a = \lambda (\Lambda - Q_i) \quad (3.71)$$

Esta condição de contorno, disposta na equação 3.71, que demonstra que o fluxo de calor é igual a quantidade de calor necessária para aquecer e vaporizar a gota, também pode ser escrita conforme equação 3.72.

$$\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_a = \lambda L' \quad (3.72)$$

Onde $L' = \Lambda - Q_i$, e representa a quantidade de calor necessária para aquecer e vaporizar a gota.

Para encontrarmos a última condição de contorno necessária para a resolução do problema de combustão de gotas, a condição de salto na chama (“*jump conditions*”), primeiramente abrimos a equação geral de conservação das espécies (Eq 3.60) em duas, tendo uma para o combustível (Eq 3.73) e uma para o oxidante (Eq 3.74).

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial y_F}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) = -s_F w_F \quad (3.73)$$

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial y_O}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_O} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right) = -s_O w_O \quad (3.74)$$

Então, subtraindo a equação 3.73 da equação 3.74, obtemos a equação 3.75.

$$\frac{\partial}{\partial x} (y_O - y_F) - \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\theta^n x^2}{\lambda Le_O s_O} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right) - \left(\frac{\theta^n x^2}{\lambda Le_F s_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) \right] = 0 \quad (3.75)$$

Integrando a equação 3.75 através da zona de reação delimitada entre $x_F^- < x < x_F^+$, onde x_F é a posição da chama, obtemos a equação 3.76.

$$\int_{x_F^-}^{x_F^+} \frac{\partial}{\partial x} (y_O - y_F) dx - \int_{x_F^-}^{x_F^+} \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\theta^n x^2}{\lambda L e_{O S O}} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right) - \left(\frac{\theta^n x^2}{\lambda L e_{F S F}} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) \right] dx = 0 \quad (3.76)$$

Que reescrita, se torna a equação 3.77.

$$[y_O - y_F]_{x_F^-}^{x_F^+} - \left[\frac{\theta^n x^2}{\lambda L e_{O S O}} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right]_{x_F^-}^{x_F^+} - \left[\frac{\theta^n x^2}{\lambda L e_{F S F}} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right]_{x_F^-}^{x_F^+} = 0 \quad (3.77)$$

Considerando que a zona de reação química é infinitamente estreita, temos que o primeiro termo da equação 3.77 some, pois $(x_F^+ - x_F^-) \rightarrow 0$. As frações mássicas de combustível (s_F) e oxidante (s_O), são definidas, respectivamente como -1 e s , ou seja, $s_F = -1$ e $s_O = s$, sendo s a fração mássica de oxidante necessária para reagir com uma unidade de massa de combustível consumido. Aplicando essas definições na equação 3.77 encontramos a equação 3.78.

$$\left[\frac{\theta^n x^2}{\lambda L e_{O s}} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right]_{x_F^-}^{x_F^+} = \left[\frac{\theta^n x^2}{\lambda L e_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right]_{x_F^-}^{x_F^+} \quad (3.78)$$

Da mesma maneira que foi feito com as equações de conservação das espécies de combustível e de oxidante, subtraindo a equação de conservação da energia (Eq 3.61) da equação de conservação de espécie de oxidante (Eq 3.74), obtemos a equação 3.79.

$$\frac{\partial}{\partial x} (y_O - \theta) - \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\theta^n x^2}{\lambda L e_{O S O}} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right) - \left(\frac{\theta^n x^2}{\lambda Q} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \right] = 0 \quad (3.79)$$

Integrando então, a equação 3.79 através da zona de reação delimitada entre $x_F^- < x < x_F^+$, onde x_F representa a posição da chama, encontramos a equação 3.80.

$$\int_{x_F^-}^{x_F^+} \frac{\partial}{\partial x} (y_O - \theta) dx - \int_{x_F^-}^{x_F^+} \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\theta^n x^2}{\lambda L e_{O S O}} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right) - \left(\frac{\theta^n x^2}{\lambda Q} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \right] dx = 0 \quad (3.80)$$

Que reescrita fica

$$[y_O - \theta]_{x_F^-}^{x_F^+} - \left[\frac{\theta^n x^2}{\lambda L e_{O S O}} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right]_{x_F^-}^{x_F^+} - \left[\frac{\theta^n x^2}{\lambda Q} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right]_{x_F^-}^{x_F^+} = 0 \quad (3.81)$$

Nesta equação 3.81, semelhante ao que acontece na equação 3.77, o primeiro termo da mesma tende a zero ($(x_F^+ - x_F^-) \rightarrow 0$) e acaba sumindo. Isso se deve a consideração feita de que a zona de reação química é infinitamente estreita. Então, aplicando essa definição, obtemos a equação 3.82.

$$\left[\frac{\theta^n x^2}{\lambda Le_{Os}} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right]_{x_F^-}^{x_F^+} = - \left[\frac{\theta^n x^2}{\lambda Q} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right]_{x_F^-}^{x_F^+} \quad (3.82)$$

Substituindo a equação 3.82 na equação 3.78, encontramos as condições de salto na chama, conhecidas também como “*jump conditions*” (LAW, 2010) para os fluxos de combustível, de oxidante e energia através da zona de reação química (Eq 3.83).

$$\left[\frac{\theta^n x^2}{\lambda Le_{Os}} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right]_{x_F^-}^{x_F^+} = \left[\frac{\theta^n x^2}{\lambda Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right]_{x_F^-}^{x_F^+} = - \left[\frac{\theta^n x^2}{\lambda Q} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right]_{x_F^-}^{x_F^+} \quad (3.83)$$

A partir disso, as equações, de conservação das espécies e de conservação de energia, que serão utilizadas para descrever o problema de combustão de gotas, estão dispostas nas equações 3.84 e 3.85, respectivamente.

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial y_i}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_i} \frac{\partial y_i}{\partial x} \right) = -s_i w_i, i = O, F \quad (3.84)$$

$$\frac{\lambda}{x^2} \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = Q w_F \quad (3.85)$$

E, as condições de contorno que serão aplicadas, para resolução do mesmo, são:

- Na superfície da gota ($x = a$):

$$y_F = y_{Fs}, y_O = 0, \theta = \theta_b \quad (3.86)$$

$$-\frac{\theta^n x^2}{Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \Big|_a = \lambda(1 - y_{Fs}) \quad (3.87)$$

$$\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_a = \lambda L' \quad (3.88)$$

- Na chama ($x = x_F$):

$$\theta = \theta_p, y_F = y_{Fp}, y_O = y_{Op} \quad (3.89)$$

$$\frac{x^2 \theta^n}{\lambda Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \Big|_{x_F^-}^{x_F^+} = \frac{x^2 \theta^n}{\lambda Le_{Os}} \frac{\partial y_O}{\partial x} \Big|_{x_F^-}^{x_F^+} = - \frac{x^2 \theta^n}{\lambda Q} \frac{d\theta}{dx} \Big|_{x_F^-}^{x_F^+}, \quad (3.90)$$

- Em região longe da chama (atmosfera ambiente) ($x \rightarrow \infty$):

$$\theta = 1, y_O = 1, y_F = 0 \quad (3.91)$$

3.1.4 Integração das equações de conservação

Integrando as equações de conservação das espécies de combustível (Eq 3.73), de oxidante (Eq 3.74) e de energia (Eq 3.85), nos domínios entre $a \leq x \leq x_F$ e entre $x_F \leq x \leq \infty$, conforme equações 3.92, 3.93 e 3.94,

$$\int \lambda \frac{\partial y_F}{\partial x} dx - \int \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) dx = 0 \quad (3.92)$$

$$\int \lambda \frac{\partial y_O}{\partial x} dx - \int \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_O} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right) dx = 0 \quad (3.93)$$

$$\int \lambda \frac{\partial \theta}{\partial x} - \int \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = 0 \quad (3.94)$$

obtemos as equações para o combustível (Eq 3.95), para o oxidante (Eq 3.96) e para a energia (Eq 3.97), com suas respectivas constantes de integração C , D e E .

$$\lambda(y_F - C^{-/+}) = \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) \quad (3.95)$$

$$\lambda(y_O - D^{-/+}) = \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_O} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right) \quad (3.96)$$

$$\lambda(\theta - E^{-/+}) = \left(\theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \quad (3.97)$$

Onde os subscritos $(-/+)$ representam os dois lados da chama, conforme ilustrado na Figura 12, que ilustra o comportamento do modelo atual de combustão de gotas, considerando um escape de combustível pela chama. O subscrito $(-)$, neste caso, representa o domínio entre $a \leq x \leq x_F$, ou seja, o lado do combustível, e, o subscrito $(+)$ o domínio entre $x_F \leq x \leq \infty$, lado do oxidante.

Para encontrar as equações que descrevem o problema de combustão de gotas, nos dois domínios, x_F^+ e x_F^- , devemos primeiramente descobrir o valor das constantes de integração C , D e E .

Portanto, num primeiro momento, utilizaremos as equações 3.95, 3.96 e 3.97, reescritas apenas com as constantes C^- , D^- e E^- , descrevendo somente um domínio, que é entre $a \leq x \leq x_F$, ou seja, o lado do combustível. Aplicando nelas as condições de contorno para a superfície da gota, disposta na equação 3.86, encontramos as equações 3.98, 3.99 e 3.100.

$$\lambda(y_{Fs} - C^-) = \left. \frac{\theta^n x^2}{Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right|_{x=a^+} \quad (3.98)$$

$$\lambda(y_{O_s} - D^-) = \frac{\theta^n x^2}{Le_O} \frac{\partial y_O}{\partial x} \Big|_{x=a^+} \quad (3.99)$$

$$\lambda(\theta_b - E^-) = \theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{x=a^+} \quad (3.100)$$

Substituindo então, nas equações 3.98, 3.99 e 3.100, as demais condições de contorno para a superfície da gota, expostas nas equações 3.87 e 3.88, obtemos, respectivamente, as equações 3.101, 3.102 e 3.103.

$$\lambda(y_{F_s} - C^-) = -\lambda(1 - y_{F_s}) \quad (3.101)$$

$$\lambda(y_{O_s} - D^-) = \lambda y_{O_s} \quad (3.102)$$

$$\lambda(\theta_b - E^-) = \lambda L' \quad (3.103)$$

Logo, reescrevendo as equações 3.101, 3.102 e 3.103, e levando em consideração que a fração mássica de oxidante na superfície da gota (y_{O_s}) é nula, encontramos, para as constantes C^- , D^- e E^- , os valores representados nas equações 3.104, 3.105 e 3.106.

$$C^- = 1 \quad (3.104)$$

$$D^- = 0 \quad (3.105)$$

$$E^- = \theta_b - L' \quad (3.106)$$

Então, substituindo os valores encontrados para as constantes C^- , D^- e E^- , expostos nas equações 3.104, 3.105 e 3.106, nas equações 3.95, 3.96 e 3.97, obtemos as equações que descrevem a zona de reação x_{F^-} , ou seja, o domínio entre $a \leq x \leq x_F$, que são, respectivamente, as equações 3.107, 3.108 e 3.109.

$$\frac{\theta^n x^2}{\lambda Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \Big|_{x_{F^-}} = y_{F_p} - 1 \quad (3.107)$$

$$\frac{\theta^n x^2}{\lambda Le_O} \frac{\partial y_O}{\partial x} \Big|_{x_{F^-}} = y_{O_p} \quad (3.108)$$

$$\left. \frac{\theta^n x^2}{\lambda} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{x_{F-}} = \theta_p - \theta_b + L' \quad (3.109)$$

Onde y_{Fp} e y_{Op} representam, respectivamente, os escapes de combustível e oxidante pela chama, e a variável θ_p , a temperatura na zona de reação química.

Para encontrar as equações que descrevem o outro lado da chama (lado do oxidante), ou seja, que descrevem a zona de reação x_{F+} , determinada pelo domínio entre $x_F \leq x \leq \infty$, primeiramente precisamos conhecer o valor das constantes C^+ , D^+ e E^+ .

Integrando as equações de conservação das espécies de combustível (Eq 3.95) e de oxidante (Eq 3.96) no domínio entre $x_F \leq x \leq \infty$, obtemos as equações 3.110 e 3.111.

$$\lambda(y_F - C^+) = \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) \Rightarrow \int_{\infty}^x \frac{\lambda dx}{x^2 \theta^n} = \int_{\infty}^x \frac{dy_F}{Le_F(y_F - C^+)} \quad (3.110)$$

$$\lambda(y_O - D^+) = \left(\frac{\theta^n x^2}{Le_O} \frac{\partial y_O}{\partial x} \right) \Rightarrow \int_{\infty}^x \frac{\lambda dx}{x^2 \theta^n} = \int_{\infty}^x \frac{dy_O}{Le_O(y_O - D^+)} \quad (3.111)$$

Tendo em vista que as duas equações, 3.110 e 3.111, possuem um termo em comum, juntando as duas, encontramos a equação 3.112.

$$\int_{\infty}^x \frac{\lambda dx}{x^2 \theta^n} = \int_{\infty}^x \frac{dy_F}{Le_F(y_F - C^+)} = \int_{\infty}^x \frac{dy_O}{Le_O(y_O - D^+)} \quad (3.112)$$

Então, resolvendo a integral da equação 3.112, obtemos a equação 3.113.

$$\int_{\infty}^x \frac{\lambda dx}{x^2 \theta^n} = \frac{1}{Le_F} \ln(y_F - C^+) \Big|_{\infty}^{y_F} = \frac{1}{Le_O} \ln(y_O - D^+) \Big|_{\infty}^{y_O} \quad (3.113)$$

Aplicando na equação 3.113 as condições de contorno para a chama ($x = x_F$), dispostas na equação 3.89, e para atmosfera ambiente ($x \rightarrow \infty$), dispostas na equação 3.91, encontramos a equação 3.114.

$$\int_{\infty}^x \frac{\lambda dx}{x^2 \theta^n} = \ln \left(\frac{y_{Fp} - C^+}{-C^+} \right)^{1/Le_F} = \ln \left(\frac{y_{Op} - D^+}{1 - D^+} \right)^{1/Le_O} \quad (3.114)$$

Reescrevendo a equação 3.114, chegamos a uma relação importante entre C^+ e D^+ , exposta na equação 3.115.

$$\left(\frac{y_{Fp} - C^+}{-C^+} \right)^{1/Le_F} = \left(\frac{y_{Op} - D^+}{1 - D^+} \right)^{1/Le_O} \quad (3.115)$$

Substituindo nas equações 3.95, 3.96 e 3.97 as condições de contorno referentes a zona de reação x_F^+ , dispostas na equação 3.89, encontramos as equações 3.116, 3.117 e 3.118, onde as três constantes C^+ , D^+ e E^+ são especificadas.

$$\lambda(y_{Fp} - C^+) = \frac{\theta^n x^2 \partial y_F}{Le_F \partial x} \Big|_{x_F^+} \quad (3.116)$$

$$\lambda(y_{Op} - D^+) = \frac{\theta^n x^2 \partial y_O}{Le_O \partial x} \Big|_{x_F^+} \quad (3.117)$$

$$\lambda(\theta_p - E^+) = \theta^n x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{x_F^+} \quad (3.118)$$

A partir das condições de salto, dispostas na equação 3.90 e das equações 3.116, 3.117 e 3.118, encontramos mais duas relações importantes entre as constantes C^+ , D^+ e E^+ , expostas nas equações 3.119 e 3.120.

$$\begin{aligned} \frac{x^2 \theta^n \partial y_F}{\lambda Le_F \partial x} \Big|_{x_F^-}^{x_F^+} &= \frac{x^2 \theta^n \partial y_O}{\lambda Le_O s \partial x} \Big|_{x_F^-}^{x_F^+} \\ \left(\frac{x^2 \theta^n \partial y_F}{\lambda Le_F \partial x} \Big|_{x_F^+} - \frac{x^2 \theta^n \partial y_F}{\lambda Le_F \partial x} \Big|_{x_F^-} \right) &= \left(\frac{x^2 \theta^n \partial y_O}{\lambda Le_O s \partial x} \Big|_{x_F^+} - \frac{x^2 \theta^n \partial y_O}{\lambda Le_O s \partial x} \Big|_{x_F^-} \right) \\ (y_{Fp} - C^+) - (y_{Fp} - 1) &= \frac{1}{s} [(y_{Op} - D^+) - (y_{Op})] \\ D^+ &= s(C^+ - 1) \end{aligned} \quad (3.119)$$

$$\begin{aligned} \frac{x^2 \theta^n \partial y_F}{\lambda Le_F \partial x} \Big|_{x_F^-}^{x_F^+} &= - \frac{x^2 \theta^n d\theta}{\lambda Q dx} \Big|_{x_F^-}^{x_F^+} \\ \left(\frac{x^2 \theta^n \partial y_F}{\lambda Le_F \partial x} \Big|_{x_F^+} - \frac{x^2 \theta^n \partial y_F}{\lambda Le_F \partial x} \Big|_{x_F^-} \right) &= - \left(\frac{x^2 \theta^n d\theta}{\lambda Q dx} \Big|_{x_F^+} - \frac{x^2 \theta^n d\theta}{\lambda Q dx} \Big|_{x_F^-} \right) \\ (y_{Fp} - C^+) - (y_{Fp} - 1) &= \frac{1}{Q} [(\theta_p - E^+) - (\theta_p - \theta_b + L')] \\ E^+ &= Q(1 - C^+) + \theta_b - L' \end{aligned} \quad (3.120)$$

Substituindo a relação entre C^+ e D^+ encontrada na equação 3.119, na relação disposta na equação 3.115, obtemos a equação 3.121, que determina o valor da constante C^+ , em função do escape de combustível pela chama (y_{Fp}).

$$\begin{aligned} \left(\frac{y_{Fp} - C^+}{-C^+} \right)^{1/Le_F} &= \left(\frac{y_{Op} - D^+}{1 - D^+} \right)^{1/Le_O} \Rightarrow \left(\frac{y_{Fp} - C^+}{-C^+} \right)^{1/Le_F} = \left(\frac{y_{Op} - s(C^+ - 1)}{1 - s(C^+ - 1)} \right)^{1/Le_O} \\ \frac{y_{Fp} - C^+}{-C^+} &= \left(\frac{y_{Op} + s(1 - C^+)}{1 + s(1 - C^+)} \right)^{Le_F/Le_O} \Rightarrow 1 - \frac{y_{Fp}}{C^+} = \left(\frac{y_{Op} + s(1 - C^+)}{1 + s(1 - C^+)} \right)^{Le_F/Le_O} \\ \frac{y_{Fp}}{C^+} &= 1 - \left(\frac{y_{Op} + s(1 - C^+)}{1 + s(1 - C^+)} \right)^{Le_F/Le_O} \Rightarrow y_{Fp} = C^+ - C^+ \left(\frac{y_{Op} + s(1 - C^+)}{1 + s(1 - C^+)} \right)^{Le_F/Le_O} \end{aligned}$$

$$C^+ - C^+ \left(\frac{y_{Op} + s(1 - C^+)}{1 + s(1 - C^+)} \right)^{Le_F/Le_O} = y_{Fp} \quad (3.121)$$

Com isso, as constantes de integração C^+ , D^+ e E^+ , tem seus valores especificados através da solução do sistema formado pelas equações 3.122, 3.123 e 3.124.

$$D^+ = s(C^+ - 1) \quad (3.122)$$

$$E^+ = Q(1 - C^+) + \theta_b - L' \quad (3.123)$$

$$C^+ - C^+ \left(\frac{y_{Op} + s(1 - C^+)}{1 + s(1 - C^+)} \right)^{Le_F/Le_O} = y_{Fp} \quad (3.124)$$

Tendo em vista que neste trabalho não é considerado escape de oxidante pela chama, temos que $y_{Op} = 0$. Porém, o escape de combustível pela zona de reação química (y_{Fp}) existe, e será imposto artificialmente, influenciando, significativamente no valor das constantes C^+ , D^+ e E^+ . Por isso, a análise do campo de fluxo, neste caso, não fornece uma solução fechada.

Considerando um escape zero de combustível pela chama encontramos a solução clássica para o problema, onde temos $C^+ = 0$, $D^+ = -s$ e $E^+ = Q + \theta_b - L'$. Enquanto isso, sob escapes de combustível correspondentes a fração mássica de combustível na superfície da gota $y_{Fp} = y_{Fs}$, a solução clássica para a vaporização da gota no regime congelado é recuperada.

Neste trabalho as propriedades da chama (posição e temperatura da chama) e as propriedades da gota (temperatura e taxa de vaporização) são determinadas em função do escape de combustível pela zona de reação química (y_{Fp}).

Para determinar a temperatura na zona de reação química (θ_p), precisamos de equações que descrevam o comportamento das equações de conservação das espécies de combustível (Eq 3.95) e oxidante (Eq 3.96) em função da temperatura (θ). Para isso, num primeiro momento, integrando as equações 3.107 e 3.109 no domínio entre $a \leq x \leq x_F$, e aplicando as condições de contorno expostas na equação 3.86, obtemos as equações 3.125 e 3.126.

$$\int_a^x \frac{\lambda dx}{x^2 \theta^n} = \int_a^x \frac{dy_F}{(y_F - 1) Le_F} = \frac{1}{Le_F} \ln(y_F - 1) \Big|_a^x = \ln \left(\frac{y_F - 1}{y_{Fs} - 1} \right)^{1/Le_F} \quad (3.125)$$

$$\int_a^x \frac{\lambda dx}{x^2 \theta^n} = \int_a^x \frac{d\theta}{\theta - \theta_b + L'} = \ln(\theta - \theta_b + L') \Big|_a^x = \ln \left(\frac{\theta - \theta_b + L'}{L'} \right) \quad (3.126)$$

Então, igualando essas equações 3.125 e 3.126, encontramos a relação exposta na equação 3.127.

$$\left(\frac{y_F - 1}{y_{Fs} - 1}\right)^{1/Le_F} = \left(\frac{\theta - \theta_b + L'}{L'}\right) \quad (3.127)$$

Uma vez obtida a relação para o domínio entre $a \leq x \leq x_F$ (Eq 3.127), partimos para o outro lado da chama. Integrando então, as equações 3.116, 3.117 e 3.118 no domínio entre $x_F \leq x \leq \infty$, e aplicando as condições de contorno descritas na equação 3.91, obtemos as equações 3.128, 3.129 e 3.130.

$$\int_{\infty}^x \frac{\lambda dx}{x^2 \theta^n} = \int_{\infty}^x \frac{dy_F}{(y_F - C^+) Le_F} = \frac{1}{Le_F} \ln(y_F - C^+) \Big|_{\infty}^x = \ln \left(\frac{y_F - C^+}{-C^+} \right)^{1/Le_F} \quad (3.128)$$

$$\int_{\infty}^x \frac{\lambda dx}{x^2 \theta^n} = \int_{\infty}^x \frac{dy_O}{(y_O - D^+) Le_O} = \frac{1}{Le_O} \ln(y_O - D^+) \Big|_{\infty}^x = \ln \left(\frac{y_O - D^+}{1 - D^+} \right)^{1/Le_O} \quad (3.129)$$

$$\int_{\infty}^x \frac{\lambda dx}{x^2 \theta^n} = \int_{\infty}^x \frac{d\theta}{\theta - E^+} = \ln(\theta - E^+) \Big|_{\infty}^x = \ln \left(\frac{\theta - E^+}{1 - E^+} \right) \quad (3.130)$$

Igualando, da mesma forma, as equações 3.128, 3.129 e 3.130, encontramos uma segunda relação, exposta na equação 3.131.

$$\left(\frac{\theta - E^+}{1 - E^+}\right) = \left(\frac{y_O - D^+}{1 - D^+}\right)^{1/Le_O} = \left(\frac{y_F - C^+}{-C^+}\right)^{1/Le_F} \quad (3.131)$$

Impondo, na equação 3.127, as condições de contorno referentes à chama, dispostas na equação 3.89, é possível determinar a temperatura da chama (θ_p) em função do do escape de combustível pela chama (y_{Fp}).

Essa temperatura da chama (θ_p), também pode ser determinada utilizando qualquer uma das relações indicadas na equação 3.131, tendo em vista que o escape de oxidante pela chama é nulo ($y_{Op} = 0$).

Para encontrar a constante de vaporização da gota (β), reorganizamos e integramos as equações 3.95, 3.96 e 3.97, no domínio entre $x_F \leq x \leq \infty$. Aplicando então as condições de contorno para a chama, dispostas na equação 3.89 e para a atmosfera ambiente, dispostas na equação 3.91, e substituindo uma na outra, obtemos a equação 3.132.

$$\int_{\infty}^{x_F} \frac{\lambda dx}{x^2} = \int_0^{y_{Fp}} \frac{\theta^n dy_F}{Le_F (y_F - C^+)} = \int_1^{y_{Op}} \frac{\theta^n dy_O}{Le_O (y_O - D^+)} = \int_1^{\theta_p} \frac{\theta^n d\theta}{\theta - E^+} \quad (3.132)$$

Reescrevendo e resolvendo a integral do termo da esquerda da equação 3.132, lembrando que a constante de vaporização da gota β é equivalente a razão entre a taxa de vaporização da gota λ e o raio da gota a ($\beta \equiv \lambda/a$), encontramos a equação 3.133.

$$\int_{\infty}^{x_F} \frac{\lambda dx}{x^2} = \int_1^{\theta_p} \frac{\theta^n d\theta}{\theta - E^+} \Rightarrow -\frac{\beta}{x_F/a} = \int_1^{\theta_p} \frac{\theta^n d\theta}{\theta - E^+} \quad (3.133)$$

Sabendo que a posição da chama x_p é determinada pela razão entre x_F e o raio da gota a , e substituindo esta definição na equação 3.133, obtemos uma relação importante, exposta na equação 3.134.

$$-\frac{\beta}{x_p} = \int_1^{\theta_p} \frac{\theta^n d\theta}{\theta - E^+} \quad (3.134)$$

Encontrada a primeira relação (Eq 3.134), na etapa seguinte reorganizamos as equações 3.107, 3.108 e 3.109 e integramos as mesmas no domínio entre $a \leq x \leq x_F$. Aplicando as condições de contorno referentes a superfície da gota, dispostas na equação 3.86, e referentes a chama, dispostas na equação 3.89, encontramos a equação 3.135.

$$\int_a^{x_F} \frac{\lambda dx}{x^2} = \int_{y_{Fs}}^{y_{Fp}} \frac{\theta^n dy_F}{Le_F(y_F - 1)} = \int_{y_{Os}}^{y_{Op}} \frac{\theta^n dy_O}{Le_O y_O} = \int_{\theta_s}^{\theta_p} \frac{\theta^n d\theta}{\theta - \theta_b + L'} \quad (3.135)$$

Reescrevendo a equação 3.135 e resolvendo a integral do termo da esquerda, obtemos a equação 3.136.

$$-\frac{\lambda}{x} \Big|_a^{x_F} = \int_{\theta_s}^{\theta_p} \frac{\theta^n d\theta}{\theta - \theta_b + L'} \quad (3.136)$$

Lembrando que a constante de vaporização da gota $\beta \equiv \lambda/a$ e que a posição da chama $x_p = x_F/a$, e substituindo estas definições na equação 3.136, temos que seu primeiro termo se comporta conforme representado na equação 3.137.

$$-\frac{\lambda}{x} \Big|_a^{x_F} = \left[-\frac{\lambda}{x_F} - \left(-\frac{\lambda}{a} \right) \right] = \left(\beta - \frac{\lambda}{x_F} \right) = \left(\beta - \frac{\beta}{x_p} \right) \quad (3.137)$$

Substituindo então, esse termo representado na equação 3.137, na equação 3.136, encontramos a segunda relação importante, representada pela equação 3.138.

$$-\frac{\beta}{x_p} = -\beta + \int_{\theta_s}^{\theta_p} \frac{\theta^n d\theta}{\theta - \theta_b + L'} \quad (3.138)$$

Então, relacionando as equações 3.134 e 3.138, obtemos a equação 3.139, que determina a constante de vaporização da gota (β).

$$-\frac{\beta}{x_p} = -\beta + \int_{\theta_s}^{\theta_p} \frac{\theta^n d\theta}{\theta - \theta_b + L'} = \int_1^{\theta_p} \frac{\theta^n d\theta}{\theta - E^+}$$

$$\beta = \int_{\theta_s}^{\theta_p} \frac{\theta^n d\theta}{\theta - \theta_b + L'} + \int_{\theta_p}^1 \frac{\theta^n d\theta}{\theta - E^+} \quad (3.139)$$

E, relacionando as equações 3.134 e 3.139, encontramos a equação 3.140, que determina a posição da chama (x_p).

$$\int_{\theta_s}^{\theta_p} \frac{\theta^n d\theta}{\theta - \theta_b + L'} + \int_{\theta_p}^1 \frac{\theta^n d\theta}{\theta - E^+} = x_p \int_{\theta_p}^1 \frac{\theta^n d\theta}{\theta - E^+}$$

$$x_p = 1 + \int_{\theta_s}^{\theta_p} \frac{\theta^n d\theta}{\theta - \theta_b + L'} \Big/ \int_{\theta_p}^1 \frac{\theta^n d\theta}{\theta - E^+} \quad (3.140)$$

Utilizando as condições de salto, descritas na equação 3.90, e impondo algumas considerações na mesma, uma aproximação dos resultados do problema de combustão de gotas pode ser feita.

Expandindo a equação 3.90 encontramos a equação 3.141.

$$\left(\frac{x^2 \theta^n}{\lambda Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \Big|_{x_F^+} - \frac{x^2 \theta^n}{\lambda Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \Big|_{x_F^-} \right) = \left(\frac{x^2 \theta^n}{\lambda Le_{Os}} \frac{\partial y_O}{\partial x} \Big|_{x_F^+} - \frac{x^2 \theta^n}{\lambda Le_{Os}} \frac{\partial y_O}{\partial x} \Big|_{x_F^-} \right) \quad (3.141)$$

Admitindo que, na equação 3.141, no lado do combustível o fluxo de oxidante é nulo e no lado do oxidante o fluxo de combustível é nulo, conforme ilustrado na Figura 12, temos que o primeiro e o último termo da equação 3.141 podem ser eliminados.

Com isso, reorganizando e simplificando a equação 3.141, obtemos a equação 3.142.

$$-\frac{1}{Le_F} \frac{\partial y_F}{\partial x} \Big|_{x_F^-} = \frac{1}{Le_{Os}} \frac{\partial y_O}{\partial x} \Big|_{x_F^+} \quad (3.142)$$

Adotando um número de Lewis unitário para o combustível (Le_F) e para o oxidante (Le_O), os mesmos também podem ser eliminados. Logo, encontramos a equação 3.143.

$$-\frac{\partial y_F}{\partial x} \Big|_{x_F^-} = \frac{1}{s} \frac{\partial y_O}{\partial x} \Big|_{x_F^+} \quad (3.143)$$

Então, integrando o lado esquerdo da equação 3.143 da superfície da gota (a) até a posição da chama (x_p), e o lado direito, da superfície da gota (a) até uma região afastada da gota (∞), obtemos a equação 3.144.

$$-s \int_a^{x_p} \frac{\partial y_F}{\partial x} = \int_a^{\infty} \frac{\partial y_O}{\partial x} \quad (3.144)$$

Tendo a distância entre a superfície da gota e a atmosfera ambiente (região afastada da gota) representada por um comprimento característico (l_c). Assumindo que $y_{O_s} = 0$ e aplicando as condições de contorno descritas nas equações 3.86, 3.89 e 3.91 na equação 3.144, encontramos uma aproximação, exposta na equação 3.145.

$$\frac{x_p - a}{l_c} \sim s(1 - y_{F_p}) \quad (3.145)$$

Esta análise de grandeza da condição de salto entre o combustível e o oxidante (Eq 3.145) mostra a dependência da distância da superfície da gota até a chama ($x_p - a$), em relação ao comprimento característico l_c (medido pela distância da variação do oxidante), que diminui linearmente com o escape de combustível. Onde, o termo de difusão no lado do oxidante $y_{F_p} l_c / l_{dif}$ é negligenciado para escapes pequenos de combustível pela chama, pois l_{dif} , que é o comprimento característico da difusão para a atmosfera ambiente, é grande.

Para valores grandes de s , como é o caso dos hidrocarbonetos, cerca de 15 para n-heptano, a zona de reação química se aproxima rapidamente da superfície da gota com o escape de combustível. Este resultado leva à, apesar da temperatura da zona de reação química diminuir com o escape de combustível, a chama se aproxima da gota de tal forma que a taxa de vaporização da mesma acaba mudando pouco, se mantendo praticamente constante.

3.1.5 Solução numérica

A solução do problema de combustão de gotas é realizada de forma numérica. Para obter os resultados, um sistema de equações não linear, formado pelas equações 3.122, 3.123 e 3.124, deve ser resolvido. Para isso, será utilizado o método de Brown, que tem a mesma forma de convergência do Método de Newton (convergência quadrática), porém, segundo Brown e Conte (1967), com a vantagem de reduzir o esforço computacional na obtenção da solução para uma dada precisão de um sistema não linear.

O código computacional, referente ao método de Brown, é escrito em linguagem FORTRAN (ENGELN-MUELLER; UHLIG, 1996), e para rodar o mesmo, um compilador “gfortran”, no sistema operacional LINUX, é utilizado.

Para facilitar a análise dos resultados, os dados obtidos serão plotados em função do escape de combustível pela chama, com o auxílio do software “gnuplot”, que também tem como sistema operacional o LINUX.

4 Resultados

Os casos analisados no presente trabalho consideram uma gota de n-heptano em repouso, em uma atmosfera a uma temperatura de 298 Kelvin. A constante de vaporização da gota (β), a temperatura da chama (θ_p) e a posição da chama (x_p) são descritas como uma função do escape de combustível pela chama, que é imposto artificialmente. Para efeito de comparação dos resultados obtidos neste modelo com os observados experimentalmente, a constante de vaporização (β) é apresentada na forma dimensional (K_0), em mm^2/s , conforme equação 4.1.

$$K_0 = 8\alpha\beta\frac{\rho_\infty}{\rho_l} \quad (4.1)$$

O combustível não queimado na zona de reação química do modelo atual de combustão de gotas (y_{Fp}), não é o único responsável pela redução do calor liberado pela chama. Essa liberação também é causada pela oxidação parcial dos combustíveis que ocorre na zona de reação química. Consideração essa que é muito importante para a resolução do problema em questão.

O antigo processo, de combustão de gotas, é modelado pelo termo $Q(1 - C^+)$ na equação 3.123, onde, para $C^+ = 0$, não temos nenhum escape de combustível pela chama, e para $C^+ = 1$ um escape completo. O modelo atual, é obtido através da expressão $Q = eQ_0$, na sequência de trabalhos anteriores (Choi, Haggard et al. (1991) e Saastamoinen, Aho e Linna (1993)), onde Q_0 é a quantia de calor liberado pela chama para oxidação completa do oxidante em condição adiabática (calor de combustão). Porém, como a chama perde calor para o ambiente é necessário fazer uma correção no calor de combustão através de um fator de correção, $0 < e < 1$, permitindo que os resultados fiquem mais próximos dos experimentais.

Portanto, estipulando um escape de combustível adequado e variando o calor de combustão é possível encontrar características semelhantes às do regime de combustão "cool flame".

O escape de combustível pela chama influencia diretamente nos fluxos (lado direito das Eq 3.95, 3.96 e 3.97) da zona de reação ou para a zona de reação e, conseqüentemente, na temperatura da chama, na posição da chama e na taxa de vaporização. No lado do combustível (Figura 12), por possuírem um comportamento relativamente simples e previsível, os fluxos para a chama não são representados em gráficos, tendo suas curvas apenas comentadas.

O fluxo de combustível, neste lado (lado do combustível), com uma constante

$C^- = 1$ imposta na Eq 3.95, tende a diminuir linearmente com o escape. E o fluxo de calor, neste mesmo lado, devido a redução da temperatura da chama ($\theta_p - \theta_b + L$), também tende a diminuir de acordo com o escape de combustível.

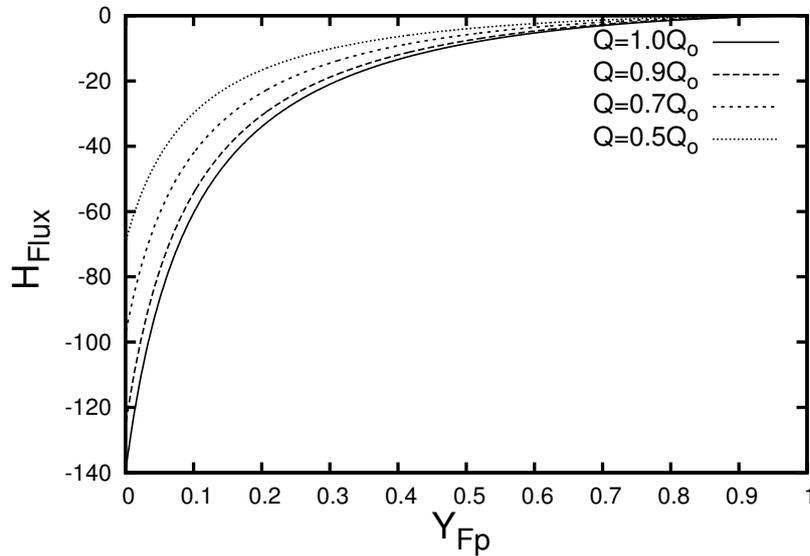
Para analisar os outros três fluxos: de calor pela chama, de oxidante e de combustível no lado direito da figura 12(lado do oxidante), faz-se necessária a resolução do sistema de equações não linear disposto nas equações 3.122, 3.123 e 3.124.

Impondo artificialmente, nesse sistema, um escape de combustível pela chama (y_{Fp}), é possível encontrar valores para as constantes C^+ , D^+ e E^+ . Variando então, este escape de combustível pela chama, obtem-se diferentes valores para essas constantes (C^+ , D^+ e E^+), o que nos permite gerar gráficos em função do escape de combustível (y_{Fp}).

Na figura 13, encontra-se o comportamento do fluxo de calor (H_{Flux}) em função do escape de combustível pela chama (y_{Fp}), representado pela equação 4.2.

$$H_{Flux} = \frac{x^2 \theta^n}{\lambda Q} \frac{\partial \theta}{\partial x} = (\theta - E^+) \quad (4.2)$$

Figura 13 – Fluxo de calor em função do escape de combustível pela chama



Nesta figura 13, é possível perceber que o fluxo de calor diminui com a variação da constante $E^+ \sim Q(1 - C^+)$, principalmente para escapes de combustível menores que 0,3. Para escapes maiores, a variação é pequena, se prolongando até escape igual a 1 (regime congelado). Esse comportamento se deve a pequena influência que a temperatura da chama tem sobre o fluxo de calor ($E^+ \gg \theta_p$).

Para escapes pequenos de combustível pela chama ($y_{Fp} < 0,3$), tem-se que praticamente todo o combustível é consumido pela mesma. Com isso, a chama libera mais

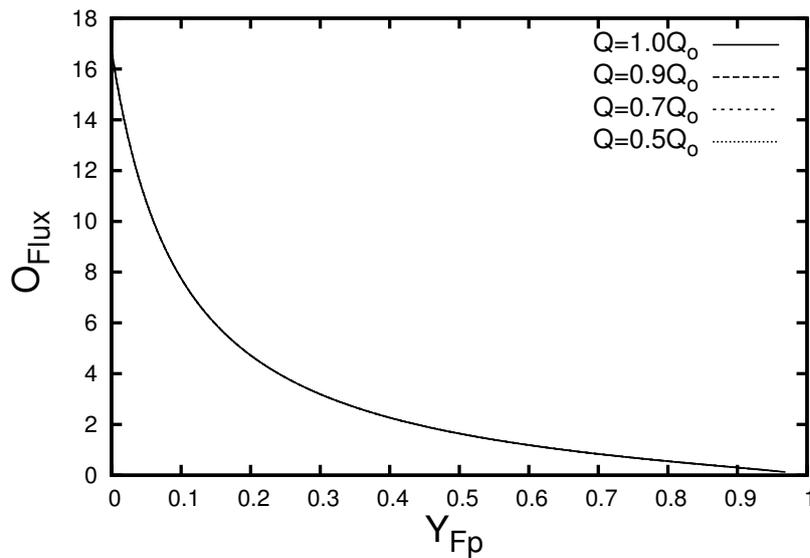
calor, aumentando assim, conseqüentemente, o fluxo de calor através da mesma, que tem seu máximo para escape zero de combustível ($y_{Fp} = 0$). Já para escapes muito grandes, praticamente não existe mais zona de reação química, diminuindo o fluxo de calor através dela, chegando a zero para escape completo ($y_{Fp} = 1$).

Observando ainda a figura 13, pode-se perceber que quanto menor o valor de e , maior é a perda de energia calorífica da chama para o ambiente externo, ocasionando em uma diminuição do fluxo de calor na zona de reação química.

Na figura 14, encontra-se o comportamento do fluxo de oxidante (O_{Flux}) em função do escape de combustível pela chama (y_{Fp}), representado pela equação 4.3.

$$O_{Flux} = \frac{x^2 \theta^n}{\lambda L e_O} \frac{\partial \theta}{\partial x} = (y_O - D^+) \quad (4.3)$$

Figura 14 – Fluxo de oxidante em função do escape de combustível pela chama



Nesta figura 14, pode-se observar, que o comportamento do fluxo de oxidante, descrito pela variação da constante D^+ , que é uma função de C^+ (Eq 3.122), que por sua vez, é diretamente proporcional ao escape de combustível pela chama, conforme a exposto na equação 3.124, demonstra uma redução significativa para escapes de combustível (y_{Fp}) menores que 0,5.

Percebe-se também que para escapes pequenos de combustível pela chama, o fluxo de oxidante é maior. Isso se deve ao fato, de que com escapes menores, mais combustível está sendo queimado pela chama, consumindo assim mais oxidante na zona de reação química. Já, para escapes muito grandes, o fluxo de oxidante na chama diminui, chegando

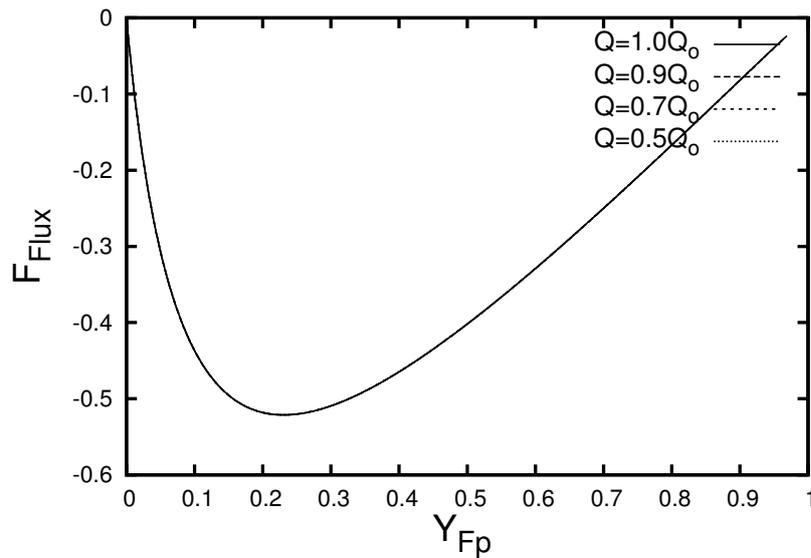
a zero para escape completo de combustível ($y_{F_p} = 1$). Isso ocorre, pois nessa fase, praticamente não existe mais zona de reação química.

Ao contrário do fluxo de oxidante (Figura 14), o fluxo de combustível (Figura 15), no lado do oxidante, não é afetado linearmente apenas pelo escape de combustível (y_{F_p}), mas também pela variação da constante C^+ , que é uma função não linear do escape (Eq 3.124).

A figura 15 representa o fluxo de combustível (F_{Flux}) no lado do oxidante em função do escape de combustível pela chama (y_{F_p}). Este, é determinado pela equação 4.4.

$$F_{Flux} = \frac{x^2 \theta^n}{\lambda L e_F} \frac{\partial \theta}{\partial x} = (y_F - C^+) \quad (4.4)$$

Figura 15 – Fluxo de combustível em função do escape de combustível pela chama



Analisando a figura 15 percebe-se que, para escapes de combustível pela chama até aproximadamente 0,2, o aumento do fluxo de combustível é controlado pela constante C^+ . Após esta faixa, ou seja, para grandes escapes de combustível pela chama, o fluxo é controlado pelo escape (y_{F_p}), tendo um fluxo máximo em $y_{F_p} = 0,224$.

Para um escape zero de combustível através da chama, ao contrário do fluxo de oxidante, que é máximo, o fluxo de combustível é nulo. Isso se deve ao fato de que a análise dos fluxos está sendo realizada no lado direito da chama (lado do oxidante), conforme ilustrado na figura 12. No regime congelado, ou seja, para escape completo de combustível, o fluxo de combustível também é nulo. Isso ocorre, pois nessa fase não existe mais reação química, escapando todo o combustível e saturando o lado do oxidante, tendendo a fluxo zero.

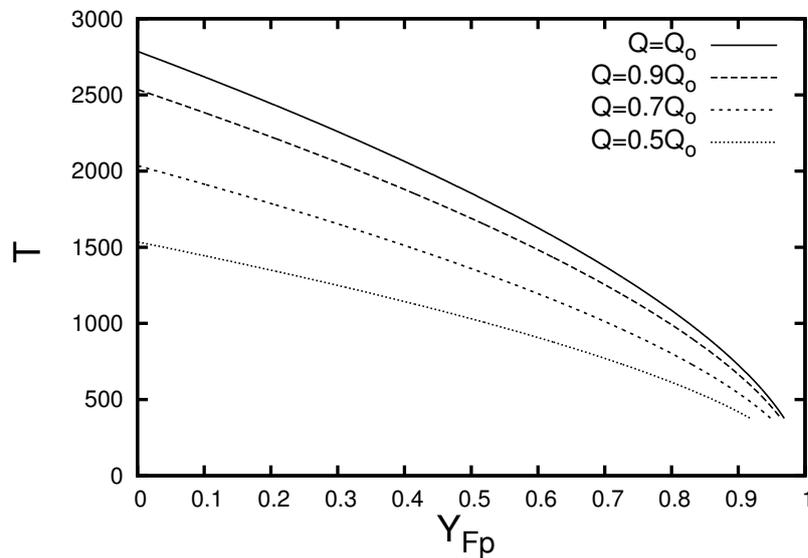
Este comportamento, que não tem influência alguma sobre as propriedades da gota, pode ser explicado pela rápida redução na posição da chama, representada na figura 17, onde na faixa de $0 < y_{F_p} < 0,2$, a chama se aproxima da gota com uma velocidade maior, variando menos após passada essa faixa.

Observando o gráfico da figura 15, também é possível perceber que o calor de combustão e a quantidade de energia calorífica perdida pela chama para o meio externo não afetam o fluxo de combustível, se mantendo o mesmo para diferentes valores de e . Demonstrando com isso, que o fluxo varia apenas com o escape de combustível pela chama (y_{F_p}).

A temperatura na zona de reação química (θ_p), também é representada utilizando sua forma dimensional (T), em Kelvin, permitindo assim uma comparação com o valor conhecido da temperatura de combustão em regime de “cool flame“, que é de aproximadamente 700 K.

A variação da temperatura dimensional na chama (T), em função do escape de combustível pela chama (y_{F_p}) está representada na figura 16.

Figura 16 – Temperatura na zona de reação química em Kelvin



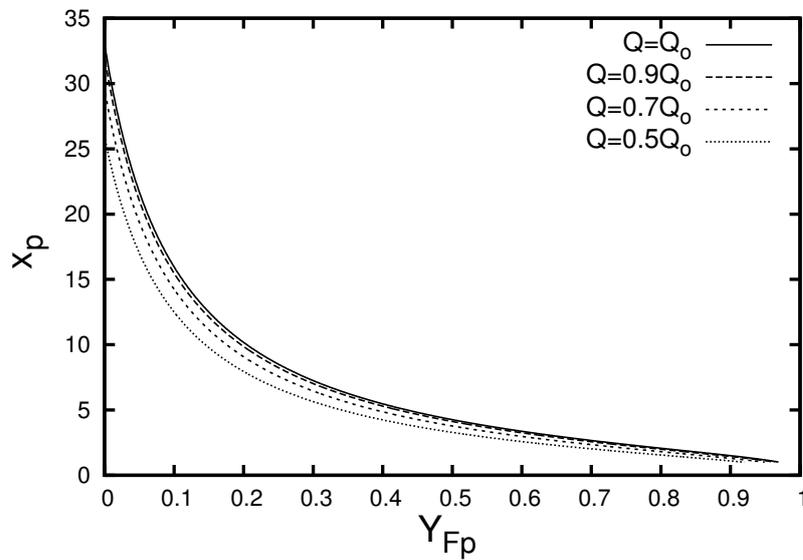
Analisando a variação da temperatura da chama, disposta no gráfico da figura 16, é possível perceber que a mesma diminui com o aumento do escape de combustível, o que explica a redução do fluxo de calor exposto na figura 13. Para escapes pequenos de combustível, a temperatura da chama diminui de forma quase que linear, tendo uma queda um pouco mais significativa para escapes maiores.

Na figura 16, também é possível visualizar, que para a chama chegar a uma tem-

peratura de 700 Kelvin (temperatura da combustão em regime de "cool flame"), o escape de combustível pela chama (y_{F_p}) deve ser superior a 0,5 e a oxidação parcial dos produtos (e) inferior a 0,5.

Com um comportamento totalmente distinto deste encontrado para temperatura da chama, temos exposto na figura 17, a posição da chama (x_p) em função do escape de combustível (y_{F_p}).

Figura 17 – Posição da zona de reação



Observando o comportamento da posição da chama no gráfico da figura 17, identifica-se que a mesma, para pequenos escapes de combustível pela chama (y_{F_p}), tem um comportamento que coincide com o previsto a partir da aproximação realizada e exposta na equação 3.145. Onde a chama reduz significativamente sua posição, se aproximando rapidamente da gota, na mesma faixa em que a temperatura da chama tem um comportamento decrescente de forma quase que linear.

Analisando a figura 17, também é possível verificar que, para um escape de combustível pela chama de $y_{F_p} = 0,4$ e um teor de oxidação parcial dos produtos de $e = 0,5$, a posição da chama é de aproximadamente 5, o que coincide com os dados obtidos experimentalmente por Dietrich et al. (2014).

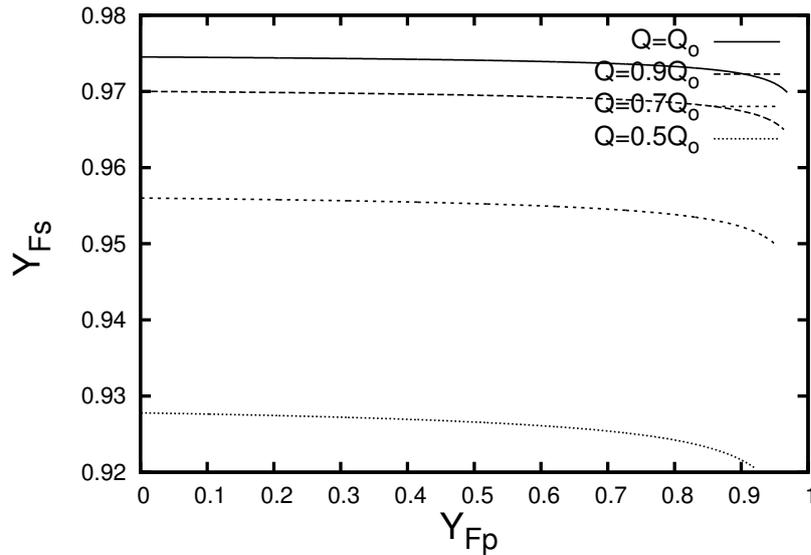
Esse comportamento da posição da zona de reação química, visualizado na figura 17, se deve ao fato de que com o aumento do escape de combustível a temperatura da mesma diminui, conforme demonstrado na figura 16. Com isso, para se manter viva, a chama se aproxima da gota em busca de combustível.

Impondo uma oxidação parcial dos produtos (e) menor, a chama se aproxima

mais da gota, tendo em vista que, com essa alteração, a chama perde mais energia para o ambiente externo, diminuindo ainda mais sua temperatura.

Na figura 18 está representada a fração mássica de combustível na superfície da gota (y_{Fs}) em função do escape de combustível pela chama (y_{Fp}).

Figura 18 – Fração mássica de combustível na superfície da gota



Analisando este gráfico, representado na figura 18, é possível observar que embora a temperatura da zona de reação química diminua linearmente com o escape de combustível pela chama, a fração mássica de combustível na superfície da gota (y_{Fs}) se mantém praticamente constante para quase toda a faixa de escape de combustível ($0 < y_{Fp} < 0,8$), exceto perto do regime congelado ($y_{Fp} = 1$).

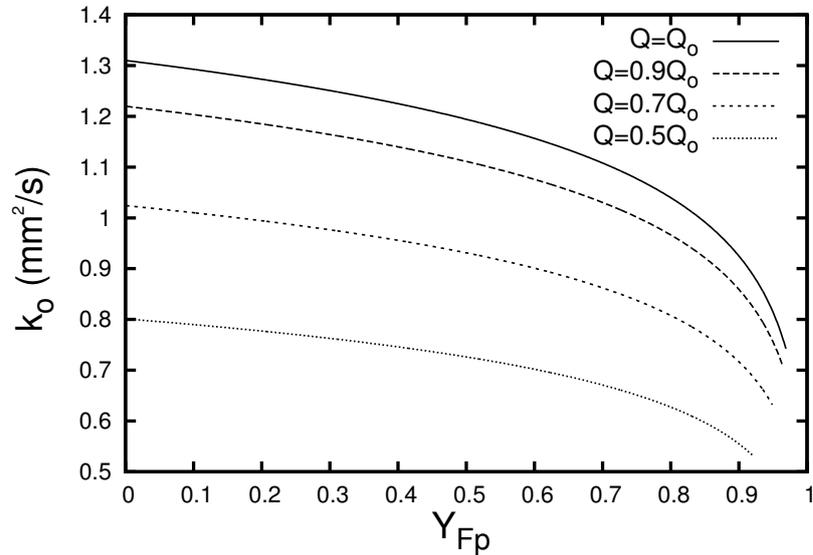
Perto da região de escape total (regime congelado), a chama se aproxima tanto da gota que acaba interferindo na fração mássica de combustível na superfície da gota. Fato que não ocorre para escapes menores, onde essa fração é praticamente constante.

Como não é possível encontrar uma expressão explícita para a fração de massa de combustível na superfície da gota (y_{Fs}) em função do escape de combustível pela chama (y_{Fp}), mesmo reescrevendo as Eq 3.127 e 3.131, uma explicação para o comportamento independente de y_{Fs} sobre y_{Fp} até o término do regime congelado, torna-se complexo.

Ainda observando a figura 18, pode-se perceber que com a redução do valor de e , a fração mássica de combustível na superfície da gota também diminui. Isso se deve ao fato de que, quanto menor o valor de e , maior a energia perdida pela chama para o ambiente externo, diminuindo sua temperatura, se aproximando da gota e diminuindo a fração mássica de combustível na superfície da gota.

A figura 19 representa a taxa de vaporização dimensional (K_0) em função do escape de combustível pela chama (y_{Fp}).

Figura 19 – Taxa de vaporização da gota



Observando o gráfico representado na figura 19, nota-se que a taxa de vaporização da gota, até um escape de 0,5 não se mostra muito sensível ao escape de combustível pela chama, decrescendo quase que de forma linear. Quantitativamente, na faixa de $0 < y_{Fp} < 0,5$, obteve-se uma redução na taxa de vaporização de 9%, o que coincide com os resultados experimentais encontrados por Nayagam et al. (2012).

Comparações realizadas entre os resultados obtidos experimentalmente e os encontrados a partir de simulações numéricas, como os atuais, revelam grandes expectativas. Esses resultados, encontrados por Farouk e Dryer (2014) apresentam uma taxa de vaporização de cerca de $0,4 \text{ mm}^2/\text{s}$. Para obter esse valor no atual modelo realizado, faz-se necessário submeter o mesmo a escapes maiores de combustível pela chama, aumentando assim a oxidação parcial do combustível consumido na zona de reação química.

5 Conclusão

O presente trabalho foi realizado, tomando como base um modelo clássico de chama infinitamente estreita de gotas, e impondo no mesmo, um escape de combustível pela chama, para simular um regime de combustão “cool flame”.

Neste regime, a temperatura da chama diminui linearmente com o escape de combustível, mas, a posição da chama se aproxima da gota mesmo com escapes pequenos de combustível. Além disso, neste regime de combustão, também observa-se que a redução na taxa de vaporização da gota é pequena, mesmo com grandes escapes de combustível, característica essa observada experimentalmente.

Portanto, o modelo de termo-fluído-dinâmica formulado no presente trabalho é capaz de reproduzir parametricamente as principais características da combustão de gotas no regime de “cool flame” sem a necessidade de incluir modelos de cinética química.

Para trabalhos futuros, o escape de combustível será uma nova incógnita no modelo através da adição de mais uma equação para o fechamento do problema. Isso só será possível com um modelo de análise de estrutura de chama.

Referências

- ARIELLO, A. F. Simulação de auto-ignição e propagação de chamas liminares de etanol, n-heptano e isoctano com modelos cinéticos detalhados. 2011. Citado na página 21.
- BELLAN, J. Supercritical (and subcritical) fluid behavior and modeling: drops, streams, shear and mixing layers, jets and sprays. *Progress in energy and combustion science*, Elsevier, v. 26, n. 4, p. 329–366, 2000. Citado na página 21.
- BROWN, K. M.; CONTE, S. D. The solution of simultaneous nonlinear equations. In: ACM. *Proceedings of the 1967 22nd national conference*. [S.l.], 1967. p. 111–114. Citado na página 52.
- CAPRIO, V.; INSOLA, A.; LIGNOLA, P. Isobutane cool flames in a cstr: the behavior dependence on temperature and residence time. *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 43, p. 23–33, 1981. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 26.
- CHARLES, E.; BAUKAL, J.; ROBERT, E. The john zink combustion handbook. *John Zink Company LLC, Tulsa, Oklahoma*, 2001. Citado na página 17.
- CHOI, M. Y.; HAGGARD, J. B. et al. Observations on a slow burning regime for hydrocarbon droplets: n-heptane/air results. In: ELSEVIER. *Symposium (International) on Combustion*. [S.l.], 1991. v. 23, n. 1, p. 1597–1604. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 53.
- COELHO, P.; COSTA, M. Combustão. 1.ª edição. *Amadora. Edições Orion*, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.
- DIETRICH, D. et al. *Detailed results from the flame extinguishment experiment (FLEX)*. *Technical Publication NASA*. [S.l.], 2013. Citado na página 26.
- DIETRICH, D. L. et al. Droplet combustion experiments aboard the international space station. *Microgravity Science and Technology*, Springer, v. 26, n. 2, p. 65–76, 2014. Citado 4 vezes nas páginas 24, 25, 26 e 58.
- ENERGÉTICA, E.-E. de P. Balanço energético nacional 2015: ano base 2014. *Ministério de Minas e Energia*, 2015. Citado na página 14.
- ENGELN-MUELLER, G.; UHLIG, F. *Numerical Algorithms with C. 1996*. [S.l.]: Springer-Verlag, 1996. Citado na página 52.
- FACHINI, F. F. An analytical solution for the quasi-steady droplet combustion. *Combustion and flame*, Elsevier, v. 116, n. 1, p. 302–306, 1999. Citado 3 vezes nas páginas 22, 23 e 29.
- FACHINI, F. F.; LIÑÁN, A. M. Transient effects in droplet ignition phenomenon. *Combustion and flame*, Elsevier, v. 109, n. 3, p. 303–313, 1997. Citado na página 15.
- FAROUK, T. I.; DRYER, F. L. Isolated n-heptane droplet combustion in microgravity: “cool flames”–two-stage combustion. *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 161, n. 2, p. 565–581, 2014. Citado 4 vezes nas páginas 15, 23, 27 e 60.

- FOGAÇA, J. R. V. *Combustão e chamas de cores diferentes*. 2016. Disponível em: <<http://brasilecola.uol.com.br/quimica/combustao-chamas-cores-diferentes.htm>>. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 21.
- GIANNONE, M. *An Old Theory Goes up in Cool Flames. NASA's Glenn Research Center*. 2012. Disponível em: <https://www.nasa.gov/mission_pages/station/research/news/cool_flame.html#.V1jbJ4-cHIU>. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 28.
- GODSAVE, G. Studies of the combustion of drops in a fuel spray—the burning of single drops of fuel. In: ELSEVIER. *Symposium (International) on Combustion*. [S.l.], 1953. v. 4, n. 1, p. 818–830. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 29.
- GOLDSMITH, M. On the burning of single drops of fuel in an oxidizing atmosphere. *Journal of Jet Propulsion*, v. 24, n. 4, p. 245–251, 1954. Citado na página 22.
- GREENBERG, J. The burke-schumann diffusion flame revisite—with fuel spray injection. *Combustion and flame*, Elsevier, v. 77, n. 3, p. 229–240, 1989. Citado na página 38.
- IRVIN, G.; RICHARD, Y. *Combustion*. [S.l.]: Academic Press, 2008. Citado na página 20.
- KASSOY, D. R.; WILLIAMS, F. A. Effects of chemical kinetics on near equilibrium combustion in nonpremixed systems. *Physics of Fluids (1958-1988)*, AIP Publishing, v. 11, n. 6, p. 1343–1351, 1968. Citado na página 22.
- LAW, C. Quasi-steady droplet vaporization theory with property variations. *Physics of Fluids (1958-1988)*, AIP Publishing, v. 18, n. 11, p. 1426–1432, 1975. Citado na página 22.
- LAW, C. K. *Combustion physics*. [S.l.]: Cambridge university press, 2010. Citado 3 vezes nas páginas 30, 31 e 43.
- NAIDJA, A. et al. Cool flame partial oxidation and its role in combustion and reforming of fuels for fuel cell systems. *Progress in Energy and Combustion Science*, Elsevier, v. 29, n. 2, p. 155–191, 2003. Citado na página 28.
- NAYAGAM, V. et al. Can cool flames support quasi-steady alkane droplet burning? *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 159, n. 12, p. 3583–3588, 2012. Citado 6 vezes nas páginas 14, 15, 23, 29, 34 e 60.
- NAYAGAM, V. et al. Cool-flame extinction during n-alkane droplet combustion in microgravity. *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 162, n. 5, p. 2140–2147, 2015. Citado na página 29.
- PACZKO, G. et al. The role of cool-flame chemistry in quasi-steady combustion and extinction of n-heptane droplets. *Combustion Theory and Modelling*, Taylor & Francis, v. 18, n. 4-5, p. 515–531, 2014. Citado 3 vezes nas páginas 15, 27 e 28.
- PETERS, N. et al. Temperature cross-over and non-thermal runaway at two-stage ignition of n-heptane. *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 128, n. 1, p. 38–59, 2002. Citado na página 22.

POLLARD, R.; TIPPER, C.; BAMFORD, C. Comprehensive chemical kinetics. *by CH Bamford and CFH Tipper, Elsevier, New York*, v. 17, p. 249–367, 1977. Citado na página 26.

RAGHUNANDAN, B.; MUKUNDA, H. The problem of liquid droplet combustion—a reexamination. *Combustion and flame*, Elsevier, v. 30, p. 71–84, 1977. Citado na página 22.

SAASTAMOINEN, J. J.; AHO, M. J.; LINNA, V. L. Simultaneous pyrolysis and char combustion. *Fuel*, Elsevier, v. 72, n. 5, p. 599–609, 1993. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 53.

URNS, S. R. *Introdução à Combustão-: Conceitos e Aplicações*. [S.l.]: AMGH Editora, 2013. Citado 4 vezes nas páginas 14, 18, 19 e 23.