

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

CONCEPÇÃO DE BICOS INJETORES DE DIESEL PARA IGNIÇÃO DE CARVÃO EM
GERADORES DE VAPOR

por

Raul Vanz

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, julho de 2020

CONCEPÇÃO DE BICOS INJETORES DE DIESEL PARA IGNIÇÃO DE CARVÃO EM
GERADORES DE VAPOR

por

Raul Vanz

Engenheiro Mecânico

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Paulo Smith Schneider

Coorientador: Prof. Dr. Cristiano Vitorino da Silva

Aprovada por:

Prof. Dr. Guenther Carlos Krieger FilhoUSP / PPGEM

Prof. Dr. Julian David HuntIIASA (Austria)

Prof. Dr. Felipe Roman CentenoUFRGS / PROMEC

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 15 de julho de 2020

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho a meu pai, Milton Vanz (*in memoriam*), por ser o meu maior exemplo de vitória nessa vida e por ter me ensinado todos os valores éticos e morais que trago comigo. Dos exemplos por ele deixado, guardo a coragem, a persistência e os bons conselhos para prosseguir. Ensinou-me a só deixar rastros de dignidade para que sirvam de exemplos no dia a dia da minha existência neste mundo. Ensinou-me ainda, que errar é inerente ao Homem, mas que voltar e assumir o erro é hombridade e isso é para poucos. Nas voltas do mundo são tantas as saudades que sinto, dói muito essa falta Sr. Milton. Gostaria de expressar aqui que foi um enorme privilégio poder ter feito parte da sua vida e que me enche de orgulho poder manter a essência dos teus ensinamentos comigo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha namorada, Lara Giovanna de Lima Branco, pelo amor, carinho, amizade, compreensão e apoio em tantos momentos difíceis desta caminhada. Obrigado por permanecer ao meu lado mesmo sem os carinhos rotineiros, sem a atenção devida e depois de tantos momentos de lazer perdidos. Obrigado por saber me fazer feliz.

À minha mãe, Neuza Tereza Valmorbida Vanz, por toda a dedicação que teve e tem comigo, pelo apoio e confiança em mim, e à minha irmã, Sara Vanz. Ao meu pai, Milton Vanz (*in memoriam*), por seus ensinamentos e valores passados a mim.

Ao meu orientador Prof. Dr. Paulo Smith Schneider e meu coorientador Prof. Dr. Cristiano Vitorino da Silva pelo empenho e confiança dedicados a mim e por terem compartilhado conhecimentos para que eu pudesse realizar este trabalho. Obrigado por acreditarem em mim e pelos tantos elogios e incentivos. Juntamente com isso, agradeço a todos os professores por me proporcionarem o conhecimento não apenas racional, mas a manifestação do caráter e afetividade da educação no processo de formação profissional, por tanto que se dedicaram a mim, não somente por terem me ensinado, mas por terem me feito aprender.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à empresa Energias de Portugal (EDP) pelo suporte financeiro para a elaboração deste trabalho.

RESUMO

O presente trabalho é parte de um Projeto de Pesquisa e Desenvolvimento realizado na Usina Termoelétrica de Pecém, pertencente ao grupo EDP. Atualmente, a Usina passa por alta intermitência em função de demandas da ONS, onde os geradores sofrem paradas constantes, fazendo com que o sistema de ignição à diesel seja solicitado com muita frequência para fazer a partida do gerador de vapor. Conforme relatos da equipe de engenharia responsável pela Usina, o uso frequente do sistema de ignição à diesel tem causado problemas relacionados à manutenção deste sistema: entupimentos frequentes devido à carbonização de combustível nos canais internos, tornando necessária a substituição regular e precoce destes; altas temperaturas atingindo algumas regiões do queimador principal durante a queima do diesel, fazendo com que surjam deformações nessas áreas, tendo necessidade de substituição de partes dos queimadores; e do alto consumo de diesel, trazendo gastos excessivos para a operação da planta. Visto isso, o objetivo deste trabalho é a proposição e análise da operação de uma nova geometria de bico injetor de diesel para substituir o atualmente utilizado na Usina, visando minimizar os problemas relatados. O bico injetor utilizado na Usina e a nova geometria proposta são comparados através de uma análise em CFD dos escoamentos multifásicos nos canais e cavidades internas, bem como do escoamento reativo envolvendo atomização e queima do diesel, a fim de buscar subsídios que indiquem a possibilidade de substituição dos bicos injetores. Para estas análises, modelos foram implementados no *software* comercial Ansys CFX v. 2019R2. A nova geometria possui vantagens quanto a sua construção, facilitando a limpeza e manutenção, evitando que problemas com falhas de usinagem e entupimentos possam ocorrer. Os resultados deste trabalho apontam que o bico injetor proposto possui maior capacidade de mistura de ar e diesel, proporcionando melhor homogeneização das pressões, velocidades e frações das fases em cada orifício de saída, promovendo assim, uma injeção de diesel na câmara de combustão com melhor distribuição e maior energia cinética, o que por consequência contribui para a quebra do filme líquido em gotas menores. Além disso, proporciona um SMD 19% menor, com uma vazão de ar de atomização 16% menor, que o injetor utilizado na Usina. Foi constatada uma redução de 9% na vazão de diesel no bico injetor proposto em relação ao bico atualmente utilizado pela Usina. Quanto a combustão, proporcionou uma diminuição de cerca de 150 K na temperatura do *flame holder* do ar primário do queimador principal, o que contribui para não haver superaquecimento e deformações. Somado a isso, constatou-se que a chama teve uma melhora

de 3% de eficiência, com base na radiação emitida, e os radicais não queimados na saída da câmara de combustão reduziram em 30%, em média. O bico injetor proposto neste trabalho está em fase de testes de operação no gerador de vapor da Usina, e, segundo a equipe técnica responsável pela planta, apresenta um bom desempenho na combustão, não tendo os problemas constatados em testes com outros bicos injetores comerciais.

Palavras-chave: Proposta de bico injetor de diesel; análise CFD de bicos injetores; modelagem atomização; modelagem combustão de diesel.

ABSTRACT

This work is part of a Research and Development Project carried out at the Pecém Thermoelectric Plant, belonging to the EDP group. Currently, the Plant undergoes high intermittency in ONS demand functions, where the generators interrupt constantly, causing the diesel ignition system to be requested very frequently to start the steam generator. According to reports by the engineering team responsible for the Plant, the frequent use of the diesel ignition system has caused problems related to the maintenance of this system: frequent blockages due to the carbonization of fuel in the internal channels, making it necessary to replace them regularly and early; high temperatures reaching some regions of the main burner during the burning of diesel, causing deformations to appear in these areas, requiring the replacement of parts of the burners; and the high consumption of diesel, leading to excessive expenses for the plant's operation. In view of this, the objective of this work is to propose and analyze the operation of a new diesel nozzle geometry to replace the one currently used at the Plant, aiming to minimize the reported problems. The injector nozzle used by the plant and the proposed new geometry are compared through a CFD analysis of multiphase flows in the internal channels and cavities, as well as reactive flow involving atomization and burning of diesel, in order to seek subsidies that indicate the possibility of substitution. injector nozzles. For these analyzes, models were implemented in the commercial software Ansys CFX v. 2019R2. The new geometry has advantages regarding its construction, facilitating cleaning and maintenance, preventing problems with machining failures and clogging from occurring. The results of this work point out that the proposed injector nozzle has a greater capacity for mixing air and diesel, providing better homogenization of the pressures, speeds and fractions of the phases in each outlet orifice, thus promoting an injection of diesel into the combustion chamber with better distribution and greater kinetic energy, which consequently contributes to breaking the liquid film into smaller drops. In addition, it provides a SMD 19% lower, with an atomization air flow 16% lower, than the injector used in the Plant. It was found a 9% reduction in the diesel flow rate in the proposed injector nozzle in relation to the nozzle currently used by the Plant. As for combustion, it provided a decrease of about 150 K in the temperature of the primary air burner of the main burner, which contributes to avoid overheating and deformation. In addition, it was found that the flame had an improvement of 3% in efficiency, based on the radiation emitted, and the unburned radicals at the exit of the combustion chamber reduced by an average of 30%.

The injector nozzle proposed in this work is undergoing operation tests on the plant's steam generator, and, according to the technical team responsible for the plant, has a good performance in combustion, not having the problems found in tests with other commercial injectors.

Key-Words: *Diesel injector proposal; nozzle CFD analysis; atomization modeling; diesel combustion modeling.*

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Motivações	2
1.2	Revisão Bibliográfica	5
1.3	Investigações Experimentais de Bicos Injetores	7
1.3.1	Modelagem Numérica de <i>Sprays</i>	9
1.3.2	Abordagem Numérica para Combustão	12
1.4	Objetivos.....	15
1.5	Organização da Dissertação.....	16
2	ATOMIZAÇÃO.....	18
2.1	Atomizadores de Dois Fluidos (<i>twin-fluid</i>).....	18
2.1.1	Injetores de Mistura Interna do Tipo Y	19
2.1.2	Injetores Efervescentes	22
3	MODELO MATEMÁTICO	26
3.1	Equações Governantes.....	26
3.1.1	Conservação da Massa.....	26
3.1.2	Conservação da Quantidade de Movimento.....	27
3.1.3	Conservação das Espécies Químicas.....	27
3.1.4	Conservação da Energia	30
3.1.5	Visão Geral do Método de Simulação de Turbulência RANS	31
3.2	Modelagem da Turbulência	32
3.2.1	Médias de Reynolds e Favre.....	32
3.2.2	Equações Governantes em Média de Favre.....	34
3.2.3	Modelo $k-\varepsilon$ Padrão	36
3.3	Método VOF (<i>Volume of Fluid</i>).....	38
3.3.1	Tensão Superficial	40
3.4	Modelagem do Transporte da Partícula.....	41
3.4.1	Rastreamento Lagrangeano	42
3.4.1.1	Transferência Entre Fases Através do Termo Fonte	43
3.4.2	Transferência de Momento	45
3.4.2.1	Turbulência no Rastreamento de Partículas	46
3.4.3	Transferência de Calor e de Massa.....	47

3.4.3.1	Transferência de Calor.....	47
3.4.3.2	Modelo de Evaporação	49
3.4.4	Modelo de Quebra Primária (Atomizador) – LISA.....	50
3.4.4.1	Formação do Filme.....	51
3.4.4.2	Rompimento da Folha e Atomização	53
3.4.5	Modelo de Quebra Secundária – Reitz e Dawkar.....	59
3.5	Modelagem da Combustão	61
3.5.1	Abordagem pela Fração de Mistura Escalar Conservada.....	61
3.5.1.1	Modelo para Química de Sistemas	62
3.5.2	Modelo de Flamelet Laminar Estável.....	63
3.5.2.1	Equações de <i>Flamelet</i>	65
3.5.2.2	Estatística da Fração de Mistura e da Taxa de Dissipação Escalar	68
3.5.2.3	Biblioteca <i>Flamelet</i>	70
3.6	Modelagem da Radiação Térmica	72
3.6.1	Equação da Transferência Radiativa – RTE.....	74
3.6.2	Modelo de Transferência de Calor por Radiação – DTRM.....	77
3.6.3	Modelo Espectral de Gás Cinza – GC.....	78
4	DISCRETIZAÇÃO NUMÉRICA	80
4.1	Método dos Volumes Finitos.....	80
4.2	Estrutura Numérica do RANS	83
4.2.1	Acoplamento Pressão-Velocidade.....	84
4.2.2	Solução das Equações RANS	85
4.2.3	Método Algebraic Multigrid.....	86
5	MODELO FÍSICO E DOMÍNIO COMPUTACIONAL.....	88
5.1	Domínios e Malhas Computacionais.....	96
5.1.1	Metodologia para Análise das Malhas.....	96
5.1.2	Escoamento Multifásico Interno nos Bicos Injetores	98
5.1.2.1	Condições de Contorno	99
5.1.2.2	Estudo de Malha	101
5.1.3	Combustão Produzida pelos Bicos Injetores	103
5.1.3.1	Condições de Contorno	105
5.1.3.2	Estudo de Malha	107
6	VALIDAÇÕES	111

6.1	Escoamento nos Canais Internos dos Bicos Injetores e Quebra do Filme de Líquido em Gotas	112
6.2	Validação Combustão.....	122
7	RESULTADOS	127
7.1	Escoamento Multifásico Interno nos Bicos Injetores	127
7.2	Combustão do <i>Spray</i> Gerado pelos Bicos Injetores	133
8	CONCLUSÕES.....	148
8.1	Sugestões de Continuação do Trabalho.....	149
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	150
	APÊNDICE A – DETALHAMENTO BICO INJETOR PROPOSTO	167

ÍNDICE DE FIGURAS

- Figura 1.1: Deformações por altas temperaturas no *flame holder* do queimador principal. A imagem representa apenas uma parte do queimador principal (tubo de ar primário e ar central). 3
- Figura 1.2: Fotografia dos jatos produzidos pelos bicos injetores: (a) bico injetor comercial do tipo Y; (b) bico injetor com câmara de mistura interna. [Fonte: Lincheta et al., 2002] 4
- Figura 2.1: Esquema idealizado para o escoamento interno e externo em bicos injetores *twin-fluid* do tipo Y. [Adaptado de Mullinger e Chigier, 1974] 20
- Figura 2.2: Ilustração esquemática do mecanismo de formação de gotas em um injetor do tipo Y. Na figura A é a região de colisão direta, B é a região de arraste e deposição de gotas e C é a região de desintegração da película líquida. [Adaptado de Song e Lee, 1996] 21
- Figura 2.3: Esquema simplificado de um atomizador efervescente. 22
- Figura 2.4: Salto de pressão no escoamento bifásico na saída do injetor. [Adaptado de Sovani et al., 2001] 23
- Figura 3.1: Ilustração da reconstrução da interface pelo método PLIC: (a) forma da interface real; (b) forma da interface representada pela reconstrução geométrica do método PLIC. 40
- Figura 3.2: Esboço da transição do injetor interno para o *spray* externo (processo de atomização). [Adaptado de Senecal et al., 1999] 51
- Figura 3.3: Esquemático de (a) onda simétrica (*Varicose Wave*) e (b) onda antissimétrica ou senoidais (*Sinuuous Wave*). 54
- Figura 3.4: Demonstrativo de *flamelet* de difusão de contrafluxo laminar. 64
- Figura 3.5: Superfície de mistura estequiométrica em um chama de difusão turbulenta. Na imagem, o subíndice *st* significa estequiométrico. 65
- Figura 3.6: Exemplo de representação visual de uma tabela de consulta para o valor escalar (valor médio das frações mássicas, densidade ou temperatura) como função da fração média da mistura e da variância da fração de mistura. [Fonte: Ansys INC, 2020] 71
- Figura 3.7: Acoplamento entre o código CFD e o código *flamelet* do conceito de RIF. 71

- Figura 3.8: Esquema do transporte de luz (fótons) no meio participante. O feixe de fótons é atenuado pela absorção e espalhamento e aumentado pelos processos de emissão e espalhamento. 74
- Figura 4.1: Posicionamento da malha escalonada e dos nós em duas dimensões. Círculos indicam nós escalares, setas horizontais indicam a componente de velocidade u e setas verticais indicam a componente de velocidade v . Exemplos de u , v e célula escalar são mostrados. 81
- Figura 4.2: Célula de volume finito e sua vizinhança em três dimensões. 83
- Figura 4.3: Prolongamentos aplicados na malha original do Método *Algebraic Multigrid*, mostrando exemplos de malhas virtuais mais grosseiras. 87
- Figura 5.1: Esquemático do gerador de vapor da Usina e seus principais equipamentos. 88
- Figura 5.2: Desenho esquemático do queimador mostrando a disposição dos estágios de ar, *swirlers* e *flame holder*. 89
- Figura 5.3: Detalhes geométricos do queimador com detalhe para o *flame holder*. 91
- Figura 5.4: Sistema de queima de diesel para ignição do carvão. 91
- Figura 5.5: Foto da frente do queimador equipado com a sistema de ignitor a diesel. 92
- Figura 5.6: Bico injetor utilizado na Usina tipo Y: (a) em um corte central para visualização dos canais internos de ar e diesel e rebarbas da usinagem; (b) vista dos orifícios por onde entram ar e diesel; (c) vista dos orifícios de saída do bico. 93
- Figura 5.7: Dimensões do Bico Injetor Y. 93
- Figura 5.8: Detalhes das duas peças que formam o novo bico injetor. 94
- Figura 5.9: Detalhe da montagem do novo bico injetor formando a câmara de mistura interna. Na imagem, todas as unidades estão em milímetros. 95
- Figura 5.10: Bico Injetor IMCA fabricado: (a) vista da peça externa; (b) vista da peça interna; (c) vista superior do bico injetor; (d) vista inferior da peça externa mostrando detalhes na parte interna do encaixe e da câmara de mistura; (e) vista inferior da peça interna; (f) vista inferior do bico injetor montado mostrando o encaixe das peças. 96
- Figura 5.11: Domínio computacional considerado para simulação, representando os canais internos dos bicos injetores. Cores representam as entradas de diesel e ar (vermelho e verde, respectivamente) e os orifícios de saída do bico injetor (azul): (a) Bico Injetor Y; (b) Bico Injetor IMCA. 99

Figura 5.12: Região do queimador considerada como domínio para as simulações. A região em azul indica a região considerada como domínio.	103
Figura 5.13: Geometria considerada do queimador com as cores indicando as entradas e detalhe do bico injetor de diesel (na figura, bico injetor Y).	105
Figura 5.14: Domínio computacional considerado no estudo mostrando a câmara de combustão equipada com o queimador.	105
Figura 5.15: Exemplo da mesclagem das duas superfícies da malha.	108
Figura 6.1: Procedimento de validação utilizado neste trabalho.	111
Figura 6.2: Desenho em corte central dos bicos injetores de Barreras et al., 2006a mostrando suas principais dimensões: (a) bico injetor tipo Y; (b) bico injetor com câmara de mistura interna.	112
Figura 6.3: Fotografia mostrando o comportamento do escoamento bifásico no interior da câmara de mistura. Na imagem “a” é o cilindro formado pelo escoamento de ar e “b” é a colisão do jato de ar com a base cônica. [Fonte: Barreras et al., 2006b]	114
Figura 6.4: Fotografia mostrando as estruturas formadas devido ao comportamento do escoamento no interior da câmara de mistura. [Fonte: Barreras et al. 2006b]	115
Figura 6.5: Esboço da formação de uma estrutura toroidal pela interação de fluxo bifásico na câmara de mistura no interior do bico injetor. [Adaptado de Ferreira et al. 2009b]	115
Figura 6.6: Resultados da simulação do Caso 2 do bico injetor com a câmara de mistura interna: (a) campo de velocidades no plano central do bico injetor com indicação do local de colisão do jato de ar com a base cônica; (b) vetores de velocidade no plano central do bico injetor mostrando a estruturas de vórtices no interior da câmara de combustão.	116
Figura 6.7: Resultado da simulação do Caso 2 para linhas de corrente do escoamento com cores indicando velocidade no bico injetor com câmara de mistura interna: (a) linhas de corrente do escoamento de água; (b) linhas de corrente do escoamento de ar.	117
Figura 6.8: Domínio hipotético criado para simulação da quebra primária das gotas.	119
Figura 6.9: Comparação dos valores experimentais de Ferreira et al., 2009b e resultados obtidos nas simulações do SMD em função da vazão mássica de ar de atomização medido 42 diâmetros a jusante da saída do bico injetor para os dois bicos injetores. Na legenda da imagem “C. Mistura” se refere ao bico injetor com câmara de mistura.	120

- Figura 6.10: Equações para o fator de correção de tamanho de gota em função da vazão mássica de ar de atomização. 121
- Figura 6.11: Comparação dos valores experimentais de Ferreira et al., 2009b e resultados obtidos nas simulações considerando o fator de correção de tamanho de gota do SMD em função da vazão mássica de ar de atomização medido 42 diâmetros a jusante da saída do bico injetor para os dois bicos injetores. Na legenda da imagem “C. Mistura” se refere ao bico injetor com câmara de mistura. 122
- Figura 6.12: Domínio computacional representando a câmara de combustão do estudo de Young et al., 1994. 124
- Figura 6.13: Comparação dos valores experimentais de Young et al., 1994 e resultados obtidos por simulação da temperatura e fração de mistura normalizados ao longo de uma linha radial a 205 mm de distância do ponto de injeção. 125
- Figura 6.14: Comparação dos valores experimentais de Young et al., 1994 e resultados obtidos por simulação da temperatura e fração de mistura normalizados ao longo de uma linha radial a 300 mm de distância do ponto de injeção. 126
- Figura 7.1: Campo de distribuição de pressão em um plano de corte central aos bicos injetores: (a) bico injetor Y; (b) bico injetor IMCA. 129
- Figura 7.2: Linhas de corrente do escoamento de ar no interior dos injetores com cores indicando magnitude da velocidade do ar: (a) bico injetor Y; (b) bico injetor IMCA. 130
- Figura 7.3: Linhas de corrente do escoamento de diesel no interior dos injetores com cores indicando magnitude da velocidade do diesel: (a) bico injetor Y; (b) bico injetor IMCA. 130
- Figura 7.4: Campo de velocidade (em cima) e vetores (em baixo) em um plano central aos injetores: (a) bico injetor Y; (b) bico injetor IMCA. 131
- Figura 7.5: Distribuição da velocidade nos orifícios de saída do injetor: (a) bico injetor Y; (b) bico injetor IMCA. 132
- Figura 7.6: Campo de fração de volume de diesel em vista isométrica (em cima) e em um plano no central aos injetores (em baixo): (a) bico injetor Y; (b) bico injetor IMCA. 132
- Figura 7.7: Distribuição da fração volumétrica de diesel nos orifícios de saída do injetor: (a) bico injetor Y; (b) bico injetor IMCA. 133

Figura 7.8: Vetores de velocidade em um plano central na câmara de combustão para os dois injetores com cores indicando velocidade. Na imagem são identificadas zonas características desse tipo de chama, mostrando também um detalhe em zoom dos vórtices de ancoragem de chama.	134
Figura 7.9: Campo de velocidade axial do escoamento em um plano central a câmara de combustão para os dois injetores.	135
Figura 7.10: Linhas de corrente mostrando o comportamento do escoamento do ar de atomização (ar que é injetado no bico, junto com o diesel) e o ar central para os dois injetores. O escoamento de ar primário, secundário e terciário não sofreram alterações com a mudança de bico.	135
Figura 7.11: Campo de temperatura em um plano central a câmara de combustão para os injetores.	136
Figura 7.12: Temperatura nas paredes do queimador em vista isométrica.	137
Figura 7.13: Detalhe da temperatura no <i>flame holder</i> .	137
Figura 7.14: Campo de O ₂ em um em um plano central a câmara de combustão para os dois injetores.	139
Figura 7.15: Campo de OH em um plano central a câmara de combustão para os dois injetores.	140
Figura 7.16: Campo de CO em um plano central a câmara de combustão para os dois bicos.	140
Figura 7.17: Campo de CO ₂ em um em um plano central a câmara de combustão para os dois injetores.	141
Figura 7.18: Comportamento do <i>spray</i> gerado pelos bicos injetores com cores indicando o diâmetro das gotas de diesel em 3 vistas para ambos os bicos injetores.	142
Figura 7.19: Comportamento da temperatura e diâmetro da gota ao longo do caminho de uma partícula para ambos os casos.	143
Figura 7.20: Comportamento das frações mássicas e temperatura ao longo do caminho de uma gota para o bico injetor Y.	144
Figura 7.21: Comportamento das frações mássicas e temperatura ao longo do caminho de uma gota para o bico injetor IMCA.	144
Figura 7.22: Foto comparativa da operação de combustão do bico injetor IMCA (proposto) e o bico injetor Y (utilizado até então pela Usina).	147

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 3.1: Constantes padrões do modelo $k-\varepsilon$. [Fonte: Launder e Sharma, 1974]	38
Tabela 3.2: Regimes de quebra relacionados com o número de Werber. [Fonte: Reitz e Diwakar, 1987]	59
Tabela 3.3: Constantes do modelo de quebra de Reitz e Diwakar e seus valores assumidos. [Fonte: Reitz e Diwakar, 1987]	61
Tabela 5.1: Condições de contorno para o estudo do escoamento interno nos bicos injetores.	100
Tabela 5.2: Parâmetros prescritos no <i>setup</i> das simulações do escoamento interno.	100
Tabela 5.3: Detalhes da quantidade da quantidade de volume em cada malha.	101
Tabela 5.4: Dados médios de velocidade e densidade do ar de atomização nos orifícios de saída dos bicos injetores obtidos nas simulações para as três malhas geradas.	102
Tabela 5.5: GCI e convergência do método calculados para os dados médios de velocidade e densidade do ar de atomização nos orifícios de saída dos bicos injetores para as três malhas geradas.	102
Tabela 5.6: Condições de contorno para as entradas do queimador principal.	106
Tabela 5.7: Parâmetros prescritos no <i>setup</i> das simulações de combustão.	107
Tabela 5.8: Detalhes da quantidade de volumes em cada malha.	109
Tabela 5.9: Dados médios de temperatura, velocidade e fração mássica de CO_2 na saída da câmara de combustão obtidos nas simulações de combustão do bico injetor Y para as três malhas avaliadas.	110
Tabela 5.10: GCI e convergência do método calculados para os dados médios de velocidade e densidade do ar de atomização nos orifícios de saída dos bicos injetores para as três malhas geradas.	110
Tabela 6.1: Condições de contorno das simulações do escoamento nos canais internos dos bicos injetores. [Fonte: Barreras et al., 2006a]	114
Tabela 6.2: Velocidade da água medida nos orifícios de saída dos bicos injetores para os 4 casos do experimental de Barreras et al., 2006a e simuladas neste trabalho.	117
Tabela 6.3: Espessura de Filme Líquido medida nos orifícios de saída dos bicos injetores para os 4 casos do experimental de Barreras et al., 2006a e simuladas neste trabalho.	118
Tabela 6.4: Dados médios de turbulência nos orifícios de saída dos bicos injetores resultados das simulações.	119
Tabela 6.5: Condições de contorno para simulação de validação da combustão. [Fonte: Young et al., 1994]	124

Tabela 7.1: Dados nos orifícios de saída dos bicos injetores obtidos nas simulações.	127
Tabela 7.2: Dados de radiação obtidos dos resultados das simulações.	145
Tabela 7.3: Dados na saída da câmara de combustão obtidos dos resultados das simulações.	146

SIMBOLOGIA

Letras Romanas

A	Constante de estado de referência de Antoine	[-]
a / b	Coefficientes da função PDF	[-]
A_f	Área da seção transversal efetiva das partículas	[m ²]
b	Espessura das palhetas guias do <i>swirl</i>	[m]
B	Coefficiente de entalpia de Antoine	[-]
C	Coefficiente de temperatura de Antoine	[-]
c	Velocidade da luz no vácuo	[m/s]
$C_1 / C_2 / C_{s1}$	Constantes do modelo de quebra secundária	[-]
C_D	Coefficiente de arrasto	[-]
c_p	Calor específico	[J/(kg.K)]
$C_{\varepsilon 1} / C_{\varepsilon 2}$	Constantes empíricas do modelo de turbulência	[-]
C_μ	Constantes do modelo de turbulência	[-]
D	Difusividade cinemática	[m ² /s]
d	Diâmetro	[m]
d_0	Diâmetro do orifício de saída do injetor	[m]
d_{sack}	Diâmetro da “ <i>sack chamber</i> ”	[m]
F_B	Força de flutuação devido à gravidade atuando na partícula	[N]
F_{CSF}	Força de volume concentrada na superfície	[N]
F_D	Força de arrasto atuando na partícula	[N]
f_l	Fator de ligamento de onda longa	[-]
F_P	Força do gradiente de pressão atuando na partícula	[N]
F_S	Fator de segurança	[-]
f_s	Fator de ligamento de onda curta	[-]
F_T	Somatório de forças que atuam na partícula	[N]
f_T	Fator de tamanho do diâmetro da gota	[-]
\vec{g}	Vetor aceleração gravitacional	[m/s ²]
GCI ₁₂	Índice de Convergência de Malha para a malha 1 e 2	[%]

GCI_{23}	Índice de Convergência de Malha para a malha 2 e 3	[%]
h	Entalpia	[J/kg]
h	Espessura do filme líquido	[m]
\hbar	Constante de Planck	[J.s]
I	Intensidade da radiação	[W/(m ² .sr)]
I	Intensidade de radiação	[W/(m ² .sr)]
$J_{\alpha j}$	Fluxo de massa molecular da espécie α na direção j	[kg/(m ² .s)]
k	Energia Cinética Turbulenta / Número de onda	[m ² /s ²] / [m ⁻¹]
k_B	Constante de Boltzmann	[J/K]
K_s	Máxima taxa de crescimento	[-]
k_v	Coefficiente de descarga do injetor	[-]
l_0	Comprimento característico do injetor	[m]
l_r	Comprimento do redemoinho	[m]
L_V	Calor latente de vaporização	[J/kg]
M	Número de elementos	[-]
m	Massa	[kg]
\dot{m}	Vazão mássica	[kg/s]
$m_{\alpha e}$	Massa do elemento e presente em um quilograma de espécies α	[kg/kg]
N	Número de amostras	[-]
n	Índice de refração	[-]
Nu	Número de Nusselt	[-]
Oh	Número de Ohnesorge	[-]
p	Pressão estática	[Pa]
p_3	Ordem de convergência	[-]
P	Função Densidade de Probabilidade	[-]
P_k	Taxa de produção de turbulência	[kg/(m.s ³)]
Pr	Número de Prandtl	[-]
Q	Razão de densidade gás/líquido	[-]
Q	Potência radiativa	[W]
Q_C	Transferência de calor por convecção	[W]

Q_M	Transferência de calor associada a transferência de massa	[W]
Q_R	Transferência de calor radiativa	[W]
\dot{Q}_{rad}	Perda de calor por radiação	[W/m ³]
R	Fonte não linear geral	[-]
r	Raio / Fator de refinamento de malha	[m] / [-]
R_1	Raio interno	[m]
R_2	Raio externo	[m]
Re	Número de Reynolds	[-]
R_o	Constante universal dos gases perfeitos	[J/(kg.K)]
S	Tensor taxa de deformação	[1/s]
s	Caminho do raio	[m]
\vec{s}	Vetor direção de transferência de raios	[-]
Sc	Número de Schmidt	[-]
Sh	Número de Sherwood	[-]
S_M	Termo fonte da equação da conservação da quantidade de movimento	[kg/(m ² .s ²)]
SMD	Sauter Mean Diameter (Diâmetro Médio de Sauter)	[μm]
S_p	Termo fonte das partículas	[-]
\dot{S}_{rad}	Termo fonte da radiação	[W/m ³]
t	Tempo	[s]
T	Temperatura	[K]
t_{br}	Tempo de rompimento	[s]
U	Velocidade	[m/s]
U_s	Velocidade de escorregamento	[m/s]
V	Velocidade absoluta da folha de líquido	[m/s]
\vec{v}	Vetor velocidade	[m/s]
W	Peso molecular / Velocidade Tangencial	[mol/kg] / [m/s]
We	Número de Werber	[-]
x	Convergência da solução do método GCI	[-]

X_S^V	Fração molecular de vapor de equilíbrio do componente de evaporação na superfície da gota	[mol/mol]
X_{vap}^V	Fração molar do componente de evaporação na fase gasosa	[mol/mol]
Y	Fração mássica	[kg/kg]
Z	Fração de mistura	[-]
z	Número de palhetas guias do <i>swirl</i>	[-]
Z''^2	Variança da fração de mistura	[-]
Z_e	Frações de massa dos elementos	[kg/kg]

Letras Gregas

α	Fração de volume de fluido	[-]
β	Ângulo das palhetas guias do <i>swirl</i>	[°]
Γ	Número aleatório normalmente distribuído / Coeficiente de difusão	[-] / [-]
δ_{ij}	Função delta de Kronecker	[-]
δ_t	Passo Temporal	[s]
ε	Dissipação da energia cinética turbulenta	[m ² /s ³]
ε_{12}	Erro relativo para as malhas 1 e 2	[-]
ε_{23}	Erro relativo para as malhas 2 e 3	[-]
ε_p	Emissividade da partícula	[-]
ζ	Coeficiente de correção para cálculo da transferência de calor por convecção	[-]
$\vec{\eta}$	Vetor unitário normal à interface	[-]
η	Amplitude de onda	[m]
θ	Ângulo do <i>spray</i>	[°]
K	Curvatura da interface	[m]
κ	Coeficientes de radiação (absorção e espalhamento)	[m ⁻¹]
κ_t	Condutividade térmica	[W/(m.K)]
λ	Comprimento de onda	[m]
μ	Viscosidade dinâmica	[N.s/m ²]
ν	Viscosidade cinemática	[m ² /s]

ρ	Massa específica	[kg/m ³]
σ	Coeficiente de tensão superficial / Constante de Stefan-Boltzmann	[N/m] / [W/(m ² K ⁴)]
τ	Tensor de tensões	[Pa]
τ_r	Vida útil do redemoinho	[s]
τ_s	Tempo de separação	[s]
ϕ	Qualquer variável transportada	[-]
χ	Dissipação escalar	[s ⁻¹]
ω	Taxa de crescimento da onda / Velocidade angular	[s ⁻¹] / [rad/s]
$\dot{\omega}_\alpha$	Taxa de formação da espécie α por unidade de volume (termo fonte químico)	[kg/(m ³ .s)]
Ω	Ângulo sólido	[sr]
Ω_s	Taxa mínima de crescimento	[s ⁻¹]

Marcas Diacríticas

$\bar{\phi}$	Média de Reynolds de ϕ
$\tilde{\phi}$	Média de Favre de ϕ
ϕ''	Flutuações sobre a média de Favre de ϕ

Subscritos e Sobrescritos

0	Valor antigo/inicial
abs	Absorção
ate	Atenuando
aum	Aumentando
c	Combustível
cn	Corpo Negro
$crit$	Crítico
$emit$	Emissão
esc	Escala
esp	Espalhamento
f	Fluido circundante
g	Gás circundante

i / j	Direção cartesiana
inj	Injeção
l	Líquido
L	Ligamentos
mg	Mistura gasosa
n	Valor novo
o	Oxidante
p	Partícula
pri	Fase fluida primária do modelo VOF
q	Fase fluido do modelo VOF
sec	Fase fluida secundária do modelo VOF
st	Estequiométrico
sup	Superfície
t	Turbulento
v	Vácuo
vap	Vapor
vis	Viscoso
α	Espécie química
λ	Espectral

Abreviações

AMM	<i>Algebraic Multigrid Method</i> (Método <i>Algebraic Multigrid</i>)
BBO	Basset-Boussinesq-Ossen
BEN	Balanço Energético Nacional
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i> (Dinâmica dos Fluidos Computacional)
CSF	<i>Continuum Surface Force</i> (Força de Superfície Contínua)
DOM	<i>Discrete Ordinate Method</i> (Método das Ordenadas Discretas)
DPM	<i>Discrete Phase Model</i> (Modelo de Fase Discreta)
DTRM	<i>Discrete Transfer Radiation Model</i> (Modelo de Transferência Discreta de Radiação)
EDP	Energia de Portugal

FEM	<i>Finite Element Method</i> (Método dos Elementos Finitos)
FVM	<i>Finite Volume Method</i> (Método dos Volumes Finitos)
GC	Modelo Espectral de Gás Cinza
GCI	<i>Grid Convergence Index</i> (Convergência de Malha)
IMCA	<i>Internal Mixing Chamber Atomizer</i> (Atomizador com Câmara de Mistura Interna)
IPI	<i>Interferometric Particle Image</i> (Imagem de Partícula Interferométrica)
LCF	<i>Liquid Cross Flow</i> (Escoamento Cruzado de Líquido)
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
LISA	<i>Linearized Instability Sheet Atomization</i>
LITEC	<i>Research Laboratory in Combustion Technologies</i> (Laboratório de Pesquisa em Tecnologias de Combustão)
LSF	<i>Liquid Straight Flow</i> (Escoamento Reto de Líquido)
MCM	Monte Carlo <i>Method</i> (Método Monte Carlo)
MMD	<i>Mass Median Diameter</i> (Diâmetro Médio de Massa)
OFA	<i>Over-Fire Air</i>
ONS	Operador Nacional do Sistema
PDF	<i>Probability Density Function</i> (Função de Densidade de Probabilidade)
PLIC	<i>Piecewise Linear Interface Calculation</i>
PTV	<i>Particle Tracking Velocimetry</i> (Velocimetria de Rastreamento de Partículas)
RANS	<i>Reynolds-Average-Navier-Stokes</i>
RIF	<i>Representative Interactive Flamelet</i>
RMS	<i>Root Mean Square</i> (Raiz Quadrada Média)
RNG	Re-Normalization Group
RTE	<i>Radiation Transfer Equation</i> (Equação da Transferência Radiativa)
SLFM	<i>Steady Laminar Flamelet Model</i>
SMD	<i>Sauter Mean Diameter</i> (Diâmetro Médio de Sauter)
UTE	Usina Termoelétrica
VOF	<i>Volume of Fluid</i> (Volume de Fluido)

1 INTRODUÇÃO

A abundante oferta de energia obtida principalmente a partir de combustíveis fósseis, como gás natural, derivados do petróleo e carvão mineral, durante todo o século XX contribuiu para o crescimento e as transformações da economia mundial. Nos últimos anos, o desenvolvimento tecnológico e o crescimento populacional aumentaram significativamente a demanda energética no mundo, onde, segundo projeções de um estudo conduzido pela Exxon Mobil Corporation em 2018, a expectativa é que até 2040 tenha um aumento de cerca de 35% nesta demanda, podendo esse número dobrar se os processos de conversão de energia não tiverem ganhos de eficiência.

Atualmente, aproximadamente 92% da energia total gerada no mundo é obtida por meio da queima de combustíveis, renováveis ou não, o que justifica o crescente interesse pela pesquisa deste processo [IEA, 2018]. Segundo dados do IPCC, 2018, 91,94% da energia dos meios de transporte, 12,98% da energia utilizada na indústria, 13,13% da energia utilizada em construções são vindas da queima de combustíveis líquidos derivados do petróleo.

No contexto de queima de combustíveis para geração de energia elétrica, além dos combustíveis líquidos serem utilizados como combustíveis primários, são utilizados como combustível de apoio em centrais termoeletricas que operam com queima de combustível sólido pulverizado, principalmente carvão mineral, onde a função é fazer a ignição e a manutenção da estabilidade da chama do queimador principal. Para isso, são instalados ignitores permanentes em cada queimador principal, geralmente acionados por óleo diesel, onde a capacidade de ignição pode atingir 10% ou mais do queimador principal, permitindo com isso o seu uso na ignição ou na estabilização da chama. A alta capacidade de entrada pode, em alguns casos, ser usada até mesmo para aquecer o gerador de vapor ou sincronizar a turbina antes de iniciar o sistema principal do queimador.

Nos últimos anos, a alta intermitência em usinas termoeletricas tem causado grande números de paradas, principalmente pelo fato de que fontes de energia elétrica sustentáveis são preferenciais, sendo a energia vinda da queima de combustíveis fósseis utilizada em casos de alta demanda e necessidade. No Brasil, segundo dados do ANELL, 2018, 4,1% da oferta interna de energia elétrica é vinda da queima de carvão, por isso, a intermitência se tornou um fator que elevou os custos de operações destas usinas, que inicialmente foram projetadas para

trabalhar sem interrupções. Portanto, torna-se desejável a redução de custos em partidas dessas centrais através da otimização do processo de ignição, tornando-o mais eficiente e trazendo reduções no consumo de combustível.

Os combustores modernos de combustíveis líquidos envolvem processos complexos de padrões de escoamento para garantir a estabilização da chama. Desta forma, a otimização passa a exigir uma quantidade significativa de recursos para pesquisa e desenvolvimento, realização de testes ou utilização de simulação computacional para obter resultados mais rapidamente. Neste sentido, a partir de avanços significativos em tecnologias e metodologias computacionais, a indústria está adotando cada vez mais a modelagem numérica como prioridade em novos estudos, a fim de reduzir gastos com a experimentação, muitas vezes inviável. A modelagem numérica facilita o estudo de uma ampla gama de fenômenos físicos e químicos acoplados presentes nos escoamentos reativos, laminares ou turbulentos, inclusive com maior flexibilidade em comparação aos testes experimentais. No entanto, é importante que a capacidade preditiva da modelagem numérica tenha precisão suficiente para que as previsões forneçam a orientação correta aos projetistas e, conseqüentemente, ajudem a reduzir a extensão da experimentação e o custo, minimizando o tempo do ciclo de projeto.

1.1 Motivações

O presente trabalho é parte de um Projeto de Pesquisa e Desenvolvimento nomeado como “Ferramenta de Auxílio à Operação da UTE-Pecém para a Predição do Comportamento dos Processos de Operação e de Combustão do seu Gerador de Vapor por Meio de uma Combinação de Abordagens Experimental e de Simulação Numérica” realizado na Usina Termoeletrica (UTE) de Pecém instalada no Complexo Industrial e Portuário de Pecém, no estado do Ceará/Brasil, pertencente ao Grupo EDP (Energias de Portugal).

Durante os acertos iniciais do projeto, a equipe de engenharia da planta mostrou intenção em investigar a operação dos bicos injetores de diesel responsáveis pela ignição do carvão e estabilização da chama no gerador de vapor. Naquele momento a Usina estava passando por uma alta intermitência em função de demandas da ONS (Operador Nacional do Sistema), situação que ainda se mantém atualmente, onde os geradores de vapor sofriam paradas constantes, fazendo com que o sistema de ignição à diesel fosse solicitado com muita

frequência para fazer a partida do gerador de vapor, ou então a estabilização da chama em baixas cargas do gerador de vapor e/ou mudança nos parâmetros de queima.

Conforme relatos da equipe responsável pela Usina, os principais problemas eram à respeito da manutenção dos bicos injetores de diesel, que sofriam entupimentos frequentes devido a carbonização de combustível nos canais internos, tornando necessária sua substituição regular e precoce; as altas temperaturas atingido algumas regiões do queimador principal durante a queima do diesel, fazendo com que deformações surgissem nestas áreas (Figura 1.1), vindo a ser um problema grave e trazendo a necessidade de uma parada longa para a manutenção e gastos excessivos em troca de partes dos queimadores; do alto consumo de diesel nas frequentes partidas do gerador de vapor, trazendo gastos excessivos para a operação da planta. Ainda em relatos da equipe de operação da planta, na história de operação do gerador de vapor já tinham sido feitos vários testes com bicos injetores comerciais e alguns redimensionados pela própria equipe da Usina, os quais não obtiveram sucesso, muitos nem conseguindo acender e/ou manter a chama de diesel.



Figura 1.1: Deformações por altas temperaturas no *flame holder* do queimador principal. A imagem representa apenas uma parte do queimador principal (tubo de ar primário e ar central).

Uma vez que os testes indicaram que os injetores comerciais não entregaram um bom resultado, entendeu-se como necessário o desenvolvimento de um novo bico injetor para substituir o atual utilizado na planta.

A partir disto, foi realizada uma pesquisa na literatura que identificou a possibilidade de melhoria da condição de queima e uma consequente redução do consumo de diesel nos queimadores da Usina por meio da proposição de uma nova geometria para o bico injetor destes queimadores, sendo capazes de proporcionar a ignição do carvão e manter a estabilidade da chama. Barreras et al., 2006a mostraram que a troca de um bico injetor comercial do tipo Y, que é do mesmo tipo daquele utilizado pela Usina, por um com uma câmara de mistura interna pode levar a significantes melhoras na eficiência de atomização, gerando um *spray* com menor SMD (*Sauter Mean Diameter* – Diâmetro Médio de Sauter), assim como uma diminuição na vazão de combustível da ordem de 10%, se comparado os dois conceitos de injetores para a mesma condição de operação. Em um estudo anterior ao de Barreras, Lincheta et al., 2002 já haviam realizado uma observação quanto a diferença no jato produzido pelos dois bicos injetores, mostrada na Figura 1.2. Os autores relataram que o bico injetor com câmara de mistura interna desenvolve um jato mais homogêneo e espalhado na sua dispersão angular quando comparado ao injetor comercial do tipo Y.

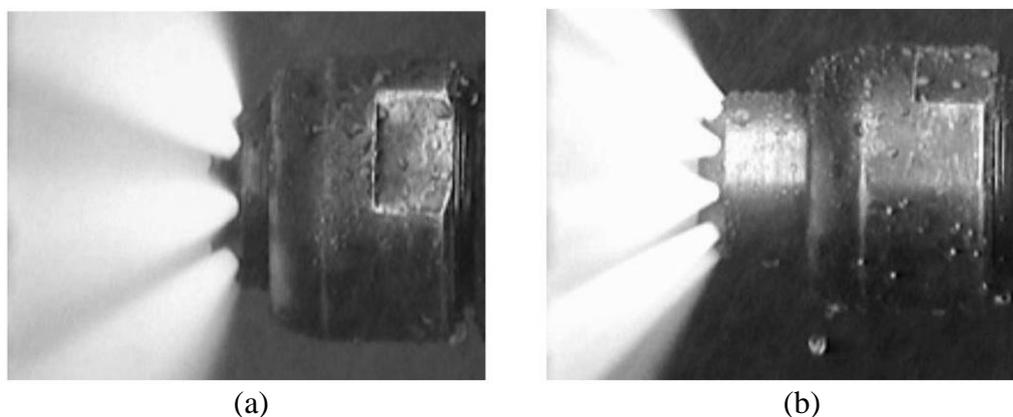


Figura 1.2: Fotografia dos jatos produzidos pelos bicos injetores: (a) bico injetor comercial do tipo Y; (b) bico injetor com câmara de mistura interna. [Fonte: Lincheta et al., 2002]

Estes estudos encontrados na literatura tratam apenas de uma condição laboratorial, utilizando água como líquido atomizador, não sendo tratada a atomização e a combustão de diesel. Além disso, os injetores utilizados nos artigos foram propostos para condições de operação diferentes da Usina. Portanto, para a condução deste trabalho foi feito um redimensionamento de um novo bico injetor para Usina utilizando o conceito de câmara de mistura interna, relatada nos artigos acima citados.

Durante os acertos iniciais do projeto, também foi acordado que esta investigação seria feita por simulação via CFD, onde se faria uma avaliação do processo de atomização e a consequente combustão gerada pelo bico injetor de diesel. Portanto, com a proposição da nova geometria, utilizou-se a plataforma Ansys CFX como ferramenta de simulação para a análise dos bicos injetores, onde foram desenvolvidos modelos capazes de prever os fenômenos físicos que ocorrem no escoamento multifásico nos canais internos destes bicos injetores, a atomização gerada por eles e sua consequente combustão.

1.2 Revisão Bibliográfica

Ainda que os primeiros usos de *sprays* datem do século IX, somente no século XX observou-se um interesse na análise dos aspectos relacionados com seu uso em sistemas de combustão. Os estudos precursores se referem com a caracterização de *sprays*, especificamente sobre a distribuição de tamanhos e velocidade de gotas geradas pelo processo de atomização, para citar como exemplo tem-se os trabalhos de Rosin e Rammler, 1933, Nukiyama e Tanasawa, 1939, e Ingebo e Foster, 1957. Entre 1950 e 1970, as pesquisas científicas direcionaram-se para a compreensão do comportamento de gotas no processo de combustão de *sprays*. Pode-se citar os trabalhos de Hottel e Hawthorne, 1949, Spalding, 1954, Godsave, 1954, Kumagai e Isoda, 1957, os quais formaram a base de entendimento do mecanismo de oxidação de um combustível volátil na forma de gota. Um dos trabalhos considerado como um marco histórico é o de Kumagai e Isoda, 1957, que confirmaram a combustão em chama envolvente (*envelope flame*) por meio de ensaios realizados sob condições de microgravidade. De forma breve, o líquido da gota evapora deixando-a rodeada por uma camada de vapor que queima em contato com o oxigênio do ar. A combustão pode ser classificada como homogênea ou heterogênea, dependendo da configuração do *spray* e sua interação com o ar de combustão. Na combustão homogênea, as gotas evaporam-se antes de chegar na zona da chama, sendo a frente de chama suportada essencialmente pelo vapor de combustível. Na combustão heterogênea, as gotas queimam como gotas individuais, com uma chama envolvendo cada uma, e como gotas num mar de chama. Embora os dois casos estejam sempre presentes, a combustão homogênea é favorecida em *sprays* com gotas pequenas, particularmente de combustíveis voláteis.

Formulações empíricas simplificativas permitiram descrever o comportamento das taxas de transferência de calor e massa da gota, que em ordem crescente são: (i) modelo de gota de temperatura constante (que é a famosa lei d^2 , na qual o quadrado do diâmetro ou raio da gota diminui linearmente com o tempo [Chigier, 1976]); (ii) modelo de condutividade infinita de líquido (temperatura da gota é uniforme, porém varia com o tempo); (iii) modelo de aquecimento transiente de uma gota esfericamente simétrica; (iv) modelo de condutividade efetiva; (v) modelo de vórtice de aquecimento de gota [Sirignano, 1999]; (vi) solução das Equações de Navier-Stokes na gota. Nos cinco primeiros modelos, uma fase gasosa quase estável é frequentemente considerada, mas esse recurso pode ser ignorado e os modelos podem ser construídos para incluir fases gasosas instáveis. Os três primeiros modelos podem ser aplicados diretamente a situações em que não há movimento relativo entre a gota e o gás ou na qual uma correção baseada no número de Reynolds pode ser aplicada para considerar a transferência de calor por convecção do gás para o líquido [Ranz e Marshall, 1952]. No entanto, a circulação interna na gota não é considerada nesses três modelos, pois não tem impacto no aquecimento quando a temperatura do líquido é uniforme ou constante. Os modelos de condutividade efetiva são responsáveis pela circulação interna na gota e pelo aquecimento convectivo interno, enquanto o modelo de vórtice descreve mais diretamente a situação física. Obviamente, as soluções Navier-Stokes são, em princípio, exatas no regime contínuo.

Ao longo do tempo, a teoria da combustão de gotas foi incluindo diversos fenômenos não lineares e transientes, tais como: preaquecimento de gota esférica [Law, 1976, 1977; Sazhin, 2006]; circulação no interior da gota [Prakash e Sirignano, 1978, 1980; Clift et al., 1978; Naterer et al., 2005; Eslamian e Ashgriz, 2006]; ignição e extinção da chama [Peskin, 1966, 1967; Aggarwal, 1998; Law, 1975; Mansour e Chen, 2008]; interação gota-turbulência [Gokalp et al., 1992; Berlement et al., 1991; Nasr e Ahmadi, 2007]; e interação gota-gota [Chiu e Liu, 1997; Annamalai e Ryan, 1993].

A abordagem teórica da combustão de gotas foi por muitos anos limitada por conta das dificuldades associadas com a não-linearidade das Equações de Navier-Stokes [Faeth, 1977; Law, 1982; Sirignano, 1983]. Porém, desde a década de 1980, avanços nas técnicas de simulação e a crescente disponibilidade de capacidade computacional a baixo custo possibilitaram alto desenvolvimento de técnicas de CFD para simulação de sistemas bifásicos,

não isotérmicos e com reações químicas. Basicamente, duas abordagens são utilizadas nestes sistemas: modelos Euler-Euler, os quais assumem escoamento localmente homogêneo e modelos Euler-Lagrange, os quais assumem a interação nos dois sentidos entre as fases contínuas e dispersas. Códigos comerciais generalistas, como o Ansys CFX e Ansys Fluent, são atualmente utilizados para modelagem e simulação de *sprays* e a consequente combustão.

A história do comportamento físico das gotas desde 1950 é demarcada por duas abordagens: empirismo e modelagem. Os estudos analíticos e numéricos tradicionais de Spalding, 1954, Godsave, 1954, Williams, 1973, Sirignano, 1984 e Law, 1982 proporcionaram as bases da modelagem moderna para preaquecimento, vaporização e combustão convectiva de gotas. A abordagem empírica proporcionou o desenvolvimento de correlações importantes para situações de ausência de estudos analíticos ou onde a simulação numérica é restrita. O empirismo, apoiado por técnicas e equipamentos de análise de imagem de alta velocidade e outras técnicas ópticas, permitiu identificar a fundamentação física de modelos fenomenológicos, a sua tradução em correlações úteis e a validação de modelos e teorias.

Nas Seções a seguir, são relatados estudos que tiveram influências nas tomadas de decisões neste trabalho.

1.3 Investigações Experimentais de Bicos Injetores

Os estudos apresentados nesta seção foram desenvolvidos no Laboratório de Pesquisa em Tecnologias de Combustão (LITEC - *Research Laboratory in Combustion Technologies*) da Universidade de Zaragoza na Espanha e foram usados como tomada de decisão para escolha do conceito de atomização no novo bico injetor desenvolvido, visto que os estudos trazem um bico injetor do tipo Y muito semelhante ao utilizado pela UTE Pecém. Além disso, estes estudos foram utilizados para validar a modelagem numérica do escoamento bifásico nos canais internos dos bicos injetores e a quebra das gotas, como será visto mais adiante neste trabalho.

Ferreira et al., 2001 efetuaram uma caracterização detalhada de um atomizador com uma câmara de mistura interna. A análise incluiu o estudo do diâmetro das gotas produzidas no *spray* bem como a sua velocidade. Os testes incluíram água e óleo lubrificante. Os estudos demonstraram a capacidade de produção de *sprays* de gotas de reduzidas dimensões e uma

observável insensibilidade à viscosidade do líquido. Estudos comparativos com atomizadores de pressão permitiram verificar que a atomização é conseguida a baixa temperatura e a pressões reduzidas. O processo de atomização demonstrou ficar completado na vizinhança do orifício, ocorrendo de forma muito mais súbita quando comparado com um atomizador comercial do tipo Y. Uma comparação dos *sprays* produzidos pelos bicos injetores deste estudo já foi mostrada na Figura 1.2.

Considerando os mesmos bicos injetores, Barreras et al., 2006a realizaram uma investigação experimental comparativa da atomização dos bicos injetores utilizando água como líquido, onde sugeriram que o bico injetor com uma câmara de mistura interna gera uma chama estável, de coloração azul e mais curta, diferente de um atomizador comercial do tipo Y, o qual gera uma chama instável, amarela e alongada. Os autores mostraram que o projeto de um novo bico com câmara de mistura interna pode levar a significativas melhoras na eficiência de atomização assim como uma diminuição na vazão de combustível da ordem de 10%, se comparados os dois conceitos de injetores para as mesmas condições de operação. Em comparação dos resultados quanto à variação do SMD e espessura de filme líquido, os autores observaram que existe uma diferença significativa no comportamento da distribuição de gotas. Os valores mais baixos são obtidos para o bico injetor com câmara de mistura interna, mostrando que este injetor é mais eficiente.

Na sequência, Barreras et al., 2006b apresentaram um estudo com o intuito de entender o comportamento do escoamento bifásico dentro da câmara de mistura interna do bico injetor. Foi demonstrado que para certas condições de operação o fluido é bloqueado. Além disso, os autores observaram padrões de escoamento que acontecem no interior da câmara de mistura.

Ferreira et al., 2009a, 2009b investigaram configurações do injetor com câmara de mistura interna. Os trabalhos foram dedicados a determinar a magnitude dos principais parâmetros que produzem os melhores resultados para bicos de duplo fluido com câmara de mistura interna. O foco destes estudos foi a interação dos escoamentos de ar e líquido na câmara de mistura e seus efeitos no *spray* resultante. Para isso, foram realizadas experiências para diferentes diâmetros de canal central de ar e tamanhos de canais de líquido, bem como para várias condições de operação (vazões mássicas de ar e líquido), a fim de entender a influência das condições de escoamento na câmara de mistura interna no tamanho das

gotículas produzidas. Os estudos concluíram que, para todos os casos testados, o SMD diminui à medida que a vazão de ar de atomização aumenta. Foi observado que, quando o bico injetor trabalha em condições de bloqueio, há um diâmetro da entrada de ar de atomização que produz um menor SMD e que fora desse regime o SMD pode ser reduzido aumentando a vazão mássica de ar de atomização. Em observações das estruturas internas, os autores sugeriram que, no interior da câmara de mistura, a mistura é dominada por uma estrutura de escoamento em formato toroidal e que pelo seu funcionamento este bico é classificado como um bico injetor efervescente.

Por fim, Barroso et al., 2014 basearam-se nos experimentos anteriores para analisar o escoamento no bico injetor com câmara de mistura interna e propor correlações para descrever as condições de escoamento na câmara de mistura e nas características do *spray* final. Essas correlações podem ser usadas para futuros projetos de bicos injetores.

Os estudos citados até aqui contemplam apenas estudos laboratoriais experimentais da atomização de água. Em momento nenhum nestes estudos foram feitas análises do comportamento dos bicos injetores funcionando com diesel e nem mesmo a sua consequente combustão.

1.3.1 Modelagem Numérica de *Sprays*

Schmidt et al., 1999 apresentaram um estudo sobre o comportamento de um determinado fluido na saída do injetor centrífugo. A modelagem numérica foi baseada no conhecimento dos detalhes de escoamento do fluido no interior do injetor em combinação com a observação das características externas do *spray* formado após a passagem do mesmo fluido pelo dispositivo. Inicialmente, a velocidade do líquido na saída do injetor foi utilizada para a definição da espessura do filme líquido, em seguida foi modelada a desfragmentação do filme de folha líquida e a formação das gotas. O ângulo do cone líquido foi estimado com o emprego das imagens do *spray* fotografado durante os testes. Assim, na análise numérica foi utilizado o modelo denominado *Linearized Instability Sheet Atomization* (LISA). Este modelo é usado na modelagem de desenvolvimento dos *sprays* incluindo a consideração de fenômenos como: colisão, coalescência, desfragmentação e arrasto das gotas. Os resultados dos cálculos foram comparados com dados experimentais para dois injetores. Os cálculos das características do *spray* também foram comparados qualitativamente com as fotografias. A

combinação dos dados obtidos nos testes e cálculos numéricos foi utilizada para se obter o quadro completo da atomização e formação do *spray* através do injetor centrífugo. A validação do modelo foi feita através das observações experimentais, sendo estas: tamanho das gotas, comparação das fotografias e medidas de distribuição de fluxo de massa. A previsão do modelo numérico para o tamanho das gotas é favorável quando comparando com os resultados experimentais. Neste trabalho, o modelo LISA foi suficientemente desenvolvido para ser utilizado em simulações multidimensionais.

Balasubramanyam e Chen, 2009 apresentaram estudo das características do escoamento interno em um injetor centrífugo bipropelente. A técnica utilizada para aproximação foi a *Reynolds Averaged Navier-Stokes* (RANS). O método utilizado para capturar a interface gás-líquido, foi o modelo de *Volume of Fluid* (VOF). O objetivo deste trabalho foi prever a espessura do filme líquido e o ângulo de *spray* na saída do injetor, para serem usados em modelagem de atomização do *spray*. Para a simulação numérica foi utilizado o modelo axissimétrico em duas dimensões. Os resultados numéricos foram comparados com os dados experimentais, mostrando uma boa concordância para a previsão da espessura do filme e o ângulo de cone do *spray*.

Savonov, 2011 realizou uma investigação detalhada de injetores centrífugos utilizados para atomização de propelentes líquidos. Na primeira parte desse trabalho, o autor analisou as teorias aplicadas a cálculos analíticos das dimensões do injetor e do escoamento interno apresentada por vários autores. Na segunda parte do trabalho, o autor realizou uma investigação numérica utilizando o *software* Ansys CFX do escoamento multifásico interno do injetor. Foi aplicado o modelo de VOF junto com modelos de turbulência $k-\varepsilon$, *RNG $k-\varepsilon$* e *Reynolds Stress Model*. Em todos os casos tratados nesse trabalho, a simulação numérica mostrou ser mais precisa que a investigação através de cálculos analíticos, mostrando resultados mais confiáveis. Comparação das simulações com testes experimentais mostraram que os desvios da pressão nominal não passaram de 5%.

Rivas, 2015 estudou o escoamento no interior e exterior de um injetor centrífugo bipropelente através de simulação numérica e apresentou o desenvolvimento de um modelo matemático capaz de prever o SMD em função dos parâmetros obtidos no estudo do escoamento interno e parâmetros externos envolvidos no estudo da estabilidade do filme líquido e dos fenômenos de ruptura da folha de líquido. O SMD obtido pelo modelo

matemático foi comparado com os resultados obtidos através de equações empíricas, testes experimentais e simulação numérica. Para a simulação numérica, utilizou-se o *software* Ansys Fluent com a implementação do modelo VOF e o modelo de turbulência RNG $k-\epsilon$. O autor afirma que foi possível capturar os fenômenos que decorrem quando ambos estágios trabalham em simultâneo, tais como o arrasto do *spray* de combustível pelo *spray* de oxidante, sendo este fenômeno habitual nos injetores bipropelentes. A utilização do modelo VOF, foi de grande ajuda na obtenção da espessura do filme líquido; porém, apresentou algumas deficiências com respeito à medida do ângulo de *spray*, devido ao tamanho reduzido da zona de *spray* na malha do injetor bipropelente.

Nazeer et al., 2018 realizaram um estudo computacional com o objetivo de resolver o escoamento turbulento multifásico de diesel e ar nos canais internos de um atomizador tipo Y. Utilizaram a abordagem VOF com discretização explícita para rastrear a interface gás-líquido e modelaram a reconstrução geométrica pelo modelo CSF (*Continuum Surface Force*). O modelo LES (*Large Eddy Simulation*) foi adotado para a solução das escalas de turbulência. Os autores verificaram comportamentos do escoamento para várias vazões mássicas de ar e diesel, onde concluíram que a razão de gás/líquido é considerada um parâmetro apropriado para descrever as características do escoamento nos canais internos. Além disso, verificaram que a instabilidade inviscida do jato de óleo é amplificada pelo cisalhamento do jato de vapor de alta velocidade, levando a uma mistura turbulenta de remoinhos.

Hashiguchi et al., 2019 utilizaram simulação numérica através de um modelo VOF para comparar as características do comportamento da mistura bifásica de líquido e gás no interior de duas configurações de um bico injetor de mistura e investigação experimental para comparar as características do *spray* produzido. Comparou-se o bico injetor funcionando com escoamento reto de líquido (LSF – *Liquid Straight Flow*) e escoamento cruzado de líquido (LCF - *Liquid Cross Flow*). Na configuração LCF, o líquido é alimentado diretamente ao longo da linha central do atomizador e cruza com o escoamento de gás, enquanto no LSF o gás é alimentado no centro e cruza com o escoamento de líquido. As simulações foram realizadas no *software* Ansys Fluent através da implementação do modelo VOF e LES. Nas simulações os autores mostraram que, na porta de saída, a configuração LCF produz um filme líquido fino em torno da parede interna com um perfil de velocidade quase simétrico, enquanto a configuração LSF produz um filme líquido mais espesso com um perfil de

velocidade menos simétrico. A investigação do *spray* produzido mostrou que a configuração LCF produz um filme líquido mais uniforme e mais fino, resultando em gotas mais finas em comparação com o tipo LSF. Também foi observado que a taxa de escoamento de líquido na porta de saída varia amplamente e periodicamente, sendo essas flutuações rápidas. Por outro lado, a taxa de fluxo de gás permanece quase inalterada.

1.3.2 Abordagem Numérica para Combustão

No processo de combustão turbulenta sem pré-mistura, o combustível e o oxidante entram separadamente na câmara de combustão, onde se misturam e queimam durante a difusão contínua (exemplo: fornos industriais, motores a diesel e combustores tradicionais de turbinas a gás). A combustão turbulenta não-pré-misturada é frequentemente referida como combustão turbulenta e difusa ou combustão em chamas de difusão, uma vez que a difusão é o que controla o processo. O modelo de *flamelet* laminar de Peters, 1984, também conhecido pelo *Steady Laminar Flamelet Model* (SLFM), baseia-se na visão proposta por Williams, 1975 de que uma chama de difusão turbulenta consiste em um conjunto de *flamelet* que são esticados em um fluxo de reação turbulento. A teoria da existência de *flamelets* laminares em fluxos turbulentos foi validada analiticamente [Peters, 1983, 1984] e experimentalmente [Roberts e Moss, 1981; Drake, 1986].

Liew et al., 1984 foram os primeiros a aplicar o SLFM para modelar chamas turbulentas de difusão de jato de metano-ar. Empregando perfis de *flamelets* obtidos experimentalmente, eles mostraram que o modelo é bem-sucedido em prever a penetração de oxigênio observada através da zona de queima devido à temperatura local. No entanto, as concentrações de O_2 e CO foram super-previstas, levando à conclusão de que são necessárias alterações no modelo para explicar o processo pós-Flamelet, onde ocorre provável mistura parcial de reagentes. Haworth et al., 1988 e Lentini, 1994 aplicaram SLFM à chama de difusão de jato turbulento $CO/H_2/N_2$ e descobriram que a capacidade de previsão do modelo em relação à concentração de super-equilíbrio do radical OH é superior à do modelo de equilíbrio. No entanto, ambos os trabalhos mostraram que o SLFM prevê uma abordagem excessivamente rápida para o equilíbrio químico. Haworth et al., 1988 afirmaram que isso poderia ser resolvido considerando a variação temporal da taxa de dissipação escalar. Lentini, 1994 também aplicou o SLFM em casos de teste de chama de jato de metano-ar estudados

anteriormente por Liew et al., 1984. Seu trabalho mostrou que a inclusão de uma série de *flamelets* representando estados de queima (variando do armário o equilíbrio à condição de extinção) mais um *flamelet* adicional representando o estado extinto melhora a precisão dos escalares reativos, particularmente o CO, o que foi predito por Liew et al., 1984. Lentini e Puri, 1995 apoiaram ainda mais essa estratégia da biblioteca *flamelet* com a SLFM, estudando uma chama de difusão de clorometano-ar.

Uma aplicação do SLFM para estruturas de chamas relativamente complicadas, na forma de chamas estabilizadas por *bluff-body*, foi realizada por Hossain, 1999. O autor utilizou o modelo com uma gama de *flamelets*, semelhante as de Lentini, 1994, para estudar o desempenho em chamas estabilizadas com CO/H₂/N₂ e CH₄/H₂. Essas chamas operam em diferentes limites de *blow-off*, permitindo assim uma investigação sobre a capacidade do modelo de capturar efeitos extremos de taxa finita. Verificou-se que o SLFM resultou em boa concordância com os dados de chamas que operam longe da condição de *blow-off*. No entanto, o modelo não conseguiu prever a extinção localizada, experimentalmente observada nas chamas que são 70% e 90% próximas da condição de *blow-off*. Isso mostrou que no SLFM a abordagem de considerar a extinção da chama no critério de taxa de dissipação escalar média que excede o limite de extinção não é adequada e o uso de *flamelets* transitórias foi sugerido. A inadequação do SLFM para prever a extinção e re-ignição local também foi relatada por Ferreira, 2001, que estudou as chamas de difusão de metano-ar de Masri et al., 1988.

Rochaya, 2007 desenvolveu em sua tese um modelo numérico para combustão de escoamentos bifásicos de *sprays* de combustíveis líquidos no *software* Ansys Fluent. A primeira parte do estudo foi dedicada à investigação da estrutura do escoamento gerada por um injetor do tipo *swirl* para diferentes combustíveis. Na segunda parte, o autor avaliou o desempenho da ferramenta CFD na simulação deste tipo de problema e estudou meios de aperfeiçoar os resultados obtidos. Inicialmente foi realizado um experimento onde foram levantados os tamanhos de gota gerados pelo *spray* e os campos de velocidade e temperatura do escoamento a fim de obter dados iniciais para a simulação numérica em CFD e resultados experimentais para sua validação. A transferência de calor e massa resultante do processo de vaporização das gotas foi calculada através das correlações de Ranz-Marshall e para a combustão utilizou-se o modelo *flamelet* laminar com PDF (*Probability Density Function*)

integrado. O mecanismo de reação para o etanol considerado no estudo teve 56 espécies e 351 reações. Nas simulações foi observado um pico local de temperatura pronunciado que não apareceu nos experimentos. Este problema foi associado a falhas no modelo de combustão. Porém, outras características da combustão do *spray* de etanol foram reproduzidas com precisão como a temperatura na linha de centro do *spray*, que é de difícil predição por depender fortemente das condições iniciais de injeção do combustível. A influência do tamanho de gota também foi analisada e observou-se que gotas de menores diâmetros vaporizam mais rapidamente gerando uma região de mistura rica nas proximidades do injetor, diminuindo a temperatura de chama durante a combustão. Um aumento no tamanho das gotas faz com que estas passem sem vaporizar por uma zona primária onde sofrem um processo de quebra, porém não vaporizam resultando em uma mistura pobre na região do injetor, diminuindo consideravelmente a eficiência do processo. De forma geral o autor concluiu que o *software* Ansys Fluent reproduziu bem a combustão dos *sprays*, mas afirma que uma análise mais aprofundada dos modelos de combustão e da discretização do campo de escoamento das gotas para formação do *spray* deve ser realizada a fim de se obter maior precisão nos resultados.

Bekdemir, 2008 simulou a combustão convencional de *spray* de óleo diesel. O diesel é injetado sobre pressão na câmara de combustão formando o *spray*. As simulações numéricas foram realizadas no Ansys Fluent. O *spray* foi modelado pelo modelo de fase discreta (DPM – *Discrete Phase Model*) e a combustão através da biblioteca *flamelet* com PDF integrado. Os resultados numéricos obtidos não se aproximaram dos dados experimentais disponíveis para a simulação. O autor observou que o combustível auto-ignitou muito cedo e que a temperatura máxima atingida na combustão foi muito baixa. Estes problemas foram justificados pela associação da biblioteca *flamelet* e o PDF.

Zhu et al., 2011 modelaram a combustão de *spray* turbulento de metanol. Os resultados obtidos foram validados com dados experimentais disponíveis para a simulação. O metanol foi injetado na câmara de combustão já em forma de gotas e para geração do *spray* foi utilizado o DPM através do modelo de quebra primária de gotas LISA (*Linearized Instability Sheet Atomization*). Dados como densidade do número de gotas, SMD das gotas, campo de velocidades do escoamento relacionados ao *spray* foram levantados e por fim foi realizada uma análise da influência do termo fonte de variação da fração de mistura entre a

fase dispersa (gotas de metanol) e a fase contínua (ar) que surge devido ao processo de evaporação das gotas no processo de combustão. Para a modelagem da turbulência e da combustão foram considerados os modelos $k-\varepsilon$ e *flamelet* laminar com mecanismo de reação detalhado (32 espécies e 167 reações). Os autores mostraram que os resultados obtidos com e sem o termo fonte de variação da fração de mistura foram muito próximos e não houve diferença considerável no campo de escoamento da mistura entre a fase contínua e a fase discreta. A presença do termo fonte promoveu um aumento de temperatura de apenas 10 K com relação aos resultados sem o termo fonte, o que não afetou significativamente a estrutura e as características da chama. Já o campo de velocidades apresentou um desvio significativo frente aos resultados experimentais. Segundo os autores esta diferença é resultado de erros numéricos, pois foi observado que a interação entre as fases contínua e dispersa é superestimada na simulação do *spray* pelo DPM. Outras possíveis causas são a aceleração da fase contínua pelo *spray* e a expansão térmica que juntas geram altas velocidades tornando difícil a predição das componentes da velocidade da fase gasosa em regiões de alta concentração da fase dispersa.

Jenny et al., 2012 realizaram uma revisão bibliográfica abordando os principais conceitos e características da modelagem computacional da combustão de *sprays* turbulentos. Os autores discutem em seu trabalho a parte teórica associada aos modelos numéricos utilizados em simulações. O estudo é dividido em duas partes, onde a primeira trata das características da interação entre fases no *spray* turbulento, como por exemplo: distribuição, concentração, fração de mistura, diâmetro médio, evaporação e o processo de quebra de gotas. Já a segunda parte reúne informações sobre os tipos de abordagem numérica para turbulência e os modelos de combustão. O conteúdo do trabalho, por ser extenso, não é apresentado neste texto, porém é citado por ser uma importante base teórica para desenvolvimento da presente dissertação.

1.4 Objetivos

O objetivo deste trabalho é a proposição e análise, através de CFD, da operação de uma nova geometria de bico injetor de diesel, buscando subsídios que indiquem a possibilidade de troca do bico injetor atualmente utilizado por este novo.

Os objetivos específicos são:

- a) Propor um bico injetor que proporcione uma redução do consumo de combustível, diminuição da temperatura no *flame holder* e vantagens em sua construção para prevenir entupimentos nos canais internos;
- b) Comparar a capacidade de mistura entre fases e de produção de gotas dos bicos injetores;
- c) Comparar a combustão proporcionada pelos bicos injetores avaliando as estruturas de escoamento e chama;

1.5 Organização da Dissertação

Além deste primeiro Capítulo, onde foi apresentado as motivações para o trabalho e a revisão bibliográfica dos assuntos relevantes, a dissertação está organizada em outros 7 Capítulos que são descritos a seguir.

No Capítulo 2 é apresentado uma fundamentação sobre o processo de atomização e sobre atomizadores de dois fluidos.

No Capítulo 3 são apresentados os modelos matemáticos utilizado nas simulações, contemplando as equações governantes do escoamento, modelagem da turbulência, modelo VOF, modelagem do transporte de partícula, modelagem da combustão e modelagem da radiação térmica.

No Capítulo 4 é apresentado a modelagem da discretização numérica aplicada nas simulações. O Capítulo começa com uma descrição do Método dos Volumes Finitos e após isso é mostrado a estrutura numérica do código RANS utilizado no trabalho.

No Capítulo 5 são apresentados os domínios físicos e computacionais. Primeiramente são apresentadas as características do gerador de vapor e do queimador a ser modelado, mostrando as simplificações aplicadas na geometria para a representação computacional. Após isso são abordadas as malhas computacionais, mostrando a metodologia utilizada para avaliação e a efetiva aplicação da metodologia para os casos. Neste Capítulo também são mostradas as condições de contorno para cada caso.

No Capítulo 6 são mostradas as validações através de comparação dos modelos aplicados nas simulações e dados experimentais de literatura para o escoamento nos canais internos dos bicos injetores e da combustão.

No Capítulo 7 são apresentados e discutidos os resultados das simulações divididos em duas partes, primeiro é discutido o escoamento interno nos injetores e posteriormente a combustão proporcionada por cada bico injetor.

Por fim, no Capítulo 8 são apresentadas as conclusões do trabalho assim como as sugestões de continuação dos estudos.

2 ATOMIZAÇÃO

A atomização é o processo de transformação de líquidos em *sprays* ou nuvens de gotas em atmosfera gasosas, onde o principal objetivo é aumentar a área superficial das gotas e suas velocidades relativas na atmosfera oxidante, resultando em aumento da vaporização do combustível e das taxas de reações [Rink e Lefebvre, 1986; Lee e Lee; 2007].

Segundo Yule et al., 2002, a atomização é a ação de instabilização e de quebra de um filamento ou porção de líquido, ou seja, a ruptura da superfície do líquido contra as tensões superficiais e a dissipação de energia através de forças viscosas, transformando a corrente líquida em filme e ligamentos instáveis, gotas e finalmente gotículas.

A atomização pode ser entendida como um distúrbio causado pelas forças internas e externas sobre a tensão superficial. Em ambientes gasosos, os pequenos volumes líquidos tendem a tomar uma forma esférica, devido às forças de tensão superficial, uma vez que esta tem menor energia superficial. Por sua vez, as forças viscosas se opõem a qualquer mudança na geometria do sistema. Contrariamente, as forças aerodinâmicas agem sobre a superfície do líquido, promovendo sua ruptura. Quando a magnitude das forças aerodinâmicas supera a força da tensão superficial, ocorre a quebra do fluido líquido, gerando-se gotas e gotículas de diversos tamanhos. O conjunto destas gotas e gotículas formadas pela atomização é chamado de *spray* [Lefebvre, 1989].

O *spray* é uma dispersão de gotículas em movimento, resultante do processo de atomização, com quantidade de movimento o suficiente para penetrar no meio gasoso circundante. Segundo Lefebvre, 1989, o *spray* é geralmente considerado um sistema de gotas imerso em uma fase gasosa contínua.

Os dispositivos empregados para realizar o processo de atomização são chamados de atomizadores ou bicos injetores.

2.1 Atomizadores de Dois Fluidos (*twin-fluid*)

O princípio de atomização destes atomizadores está baseado na transferência de quantidade de movimento entre um fluido atomizador (auxiliar) e o líquido a ser atomizado. O fluido atomizador é normalmente um gás que possui alta velocidade, o qual é acelerado através de bocais e colocado em rota de colisão com o fluxo líquido. Como resultado da

interação das correntes, por efeito de pressão dinâmica do fluido atomizador e com o uso de uma geometria adequada, tem-se a geração de zonas de ruptura da tensão superficial, dando origem ao *spray* [Lefebvre, 1989; Liu, 2000; Yule et al., 2002, Chigier, 2003]. São atomizadores bastante usados em queimadores industriais, devido à disponibilidade de vapor ou ar comprimido como fluido auxiliar.

Existem basicamente dois tipos de atomizador de duplo fluido: *air-assist* e o *air-blast*. A principal diferença entre os dois está relacionada com a velocidade e quantidade de gás envolvido: o *air-assist* utiliza baixa quantidade de gás a elevadas velocidades, enquanto o *air-blast* utiliza elevadas quantidades de gás a velocidades relativamente mais baixas. Os atomizadores são designados como de mistura interna ou mistura externa em relação ao contato dos dois fluidos ocorrerem no interior ou exterior.

Os atomizadores *air-blast* têm muitas vantagens sobre os atomizadores de pressão em aplicações de combustão. Eles exigem menores pressões de injeção e produzem um *spray* mais fino. Além disso, como o processo de atomização garante uma mistura completa das gotas de combustível e do ar, o processo de combustão é caracterizado por baixa formação de fuligem, baixa radiação de chama e produtos de combustão limpos.

2.1.1 Injetores de Mistura Interna do Tipo Y

Os atomizadores do tipo Y são classificados como *air-assist*, onde a energia do gás de atomização é utilizada para a desintegração do líquido. Estes atomizadores, em configuração de multi-orifícios, têm sido utilizados amplamente em geradores de vapor, fornos industriais, pulverizadores agrícolas, secadores por *spray* e em pintura.

Mullinger e Chigier, 1974 foram os primeiros a publicar um trabalho experimental de maior relevância sobre o atomizador tipo Y. Eles estudaram a influência dos parâmetros geométricos e o processo de atomização utilizando óleos combustíveis. Após uma análise exaustiva, os autores estabeleceram as faixas ideais de operação para cada parâmetro.

A Figura 2.1 apresenta o esquema idealizado para o escoamento interno e externo ao canal de injeção proposto por Mullinger e Chigier, 1974. O esquema foi baseado em fotografias obtidas ao testar um modelo de injetor transparente utilizando água e ar atmosférico como líquido e gás de atomização, respectivamente.

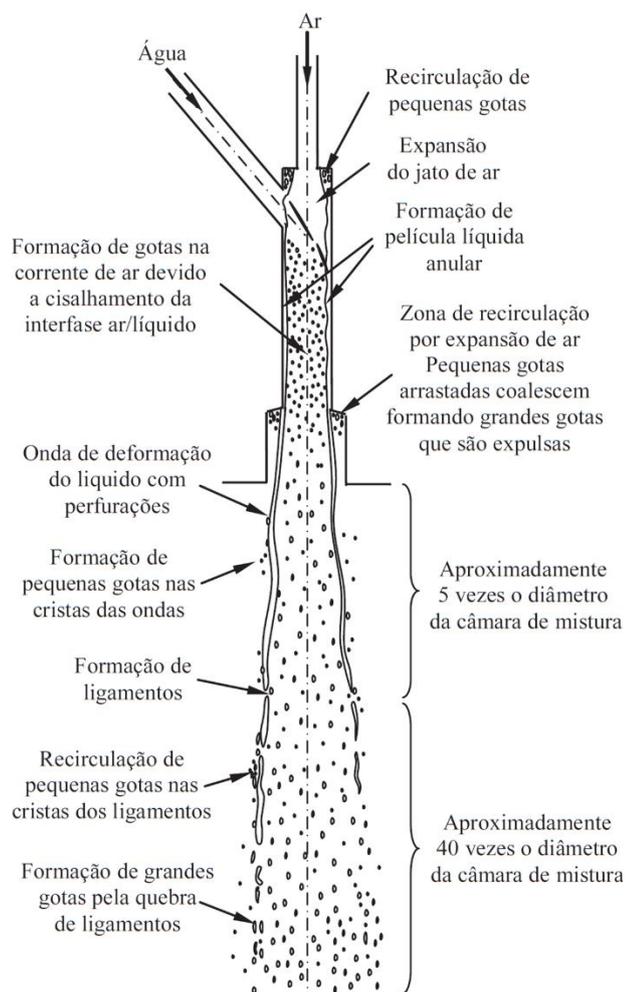


Figura 2.1: Esquema idealizado para o escoamento interno e externo em bicos injetores *twin-fluid* do tipo Y. [Adaptado de Mullinger e Chigier, 1974]

Nestes injetores, o ar de atomização entra seguindo a direção do eixo longitudinal do injetor à medida que o líquido ingressa lateralmente sob um ângulo com o eixo do injetor, formando uma junção do tipo Y, daí o nome do injetor. Ao entrar o ar na câmara de mistura com uma alta velocidade, ele se expande bruscamente e cria uma zona de baixa pressão, chamada de zona de recirculação, para onde é arrastada uma pequena quantidade de gotas de combustível que está entrando na câmara de mistura pelo duto lateral. A própria expansão do escoamento de ar recupera uma parte das gotas e devolve-as ao núcleo do escoamento. Idealmente, o encontro de ambos os fluxos de ar e combustível se dá em um ponto na câmara de mistura, gerando inicialmente uma zona de transição, onde parte do líquido em forma de película se ajusta na parede da câmara e a outra fração permanece dispersa no núcleo do escoamento. Esta última fração de líquido desintegra-se em pequenas gotículas devido às

forças de cisalhamento que aparecem na interface gás/líquido. Após a região de mistura, o processo de atomização torna-se muito complexo. O escoamento está caracterizado por fenômenos de transferência de quantidade de movimento do ar para o líquido e transferência de massa na interfase bifásica. Assim, gotas arrastadas pelo núcleo do escoamento coalescem e passam a engrossar a película líquida, de maneira que da superfície desta película é retirada uma quantidade de líquido em forma de gotas e levadas para fora do injetor, por ação das forças de cisalhamento. Na saída do injetor, a película líquida é fortemente instável, quebrando-se inicialmente em ligamentos por ação das forças de pressão e das forças aerodinâmicas. À jusante, os ligamentos rompem-se, gerando gotas de variados tamanhos, relativamente maiores que as arrastadas pelo núcleo, gerando o *spray*.

Graziadio et al., 1987 e Michele et al., 1991 realizaram estudos da atomização de diferentes emulsões de carvão com água (*Coal Water Fuel*) em um atomizador do tipo Y transparente. Os autores concluíram que a estrutura do escoamento interno no injetor é determinada muito mais pelos efeitos dinâmicos do que pelos efeitos viscosos. Além disso, constataram que os parâmetros de operação não influenciam somente a qualidade do *spray* gerado, como também o ângulo (pequena variação) e o surgimento de maiores gotas no interior.

Também utilizando um injetor tipo Y transparente, só que de seção quadrada, Song e Lee, 1996 simularam o processo de atomização utilizando água e ar para descrever os mecanismos envolvidos no escoamento e a produção de *spray*. Eles distinguiram três regiões diferentes no processo de formação das gotas, as quais são mostradas na Figura 2.2.

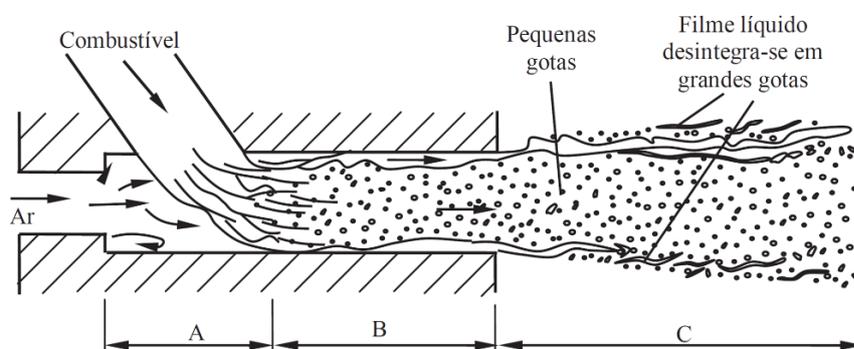


Figura 2.2: Ilustração esquemática do mecanismo de formação de gotas em um injetor do tipo Y. Na figura A é a região de colisão direta, B é a região de arraste e deposição de gotas e C é a região de desintegração da película líquida. [Adaptado de Song e Lee, 1996]

A região A é uma zona de colisão direta, onde as gotas são geradas por colisão entre o jato líquido e o ar de atomização. A região B é uma zona de arraste e deposição de gotas, onde se forma a película anular não uniforme e as forças de cisalhamento produzem novas gotas que são arrastadas para o núcleo. Nesta região também ocorre a coalescência de algumas gotas que se integram na película líquida. Na região C ocorre a desintegração do filme líquido, inicialmente em ligamentos e, em seguida, em grandes gotas.

2.1.2 Injetores Efervescentes

Os atomizadores efervescentes formam um grupo especial de dispositivos dentro dos de dois fluidos. Operam com um fluido auxiliar gasoso, o qual é misturado com o líquido em uma câmara de mistura a montante do orifício de descarga, formando um escoamento bifásico efervescente. Com a queda de pressão estática, através do orifício de descarga, o ar se expande rapidamente no líquido, gerando forças de bolha acima da tensão superficial. Esta perturbação se encarrega de quebrar o contínuo líquido, gerando gotículas. Estudos têm mostrado que se pode alcançar uma boa atomização a muito mais baixas pressões de injeção do líquido do que valores normais associados à atomização por outros injetores [Lefebvre et al., 1988]. A Figura 2.3 mostra um esquema simplificado de uma possível configuração do atomizador.

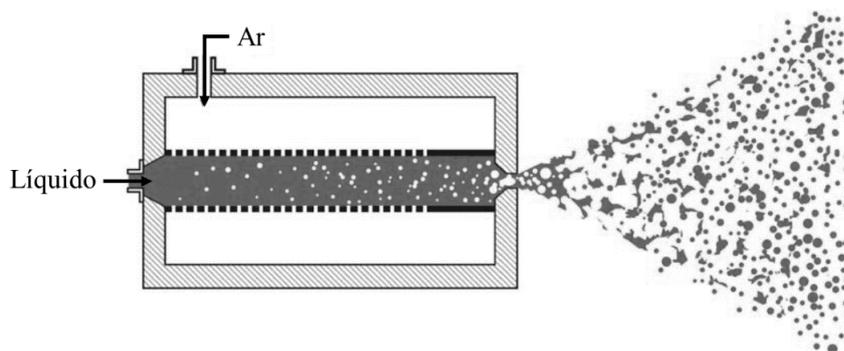


Figura 2.3: Esquema simplificado de um atomizador efervescente.

A eficiência dos atomizadores efervescentes (em termos de energia necessária para a atomização) é substancialmente mais alta do que as eficiências de pressão, rotativa e a maioria das formas de atomizadores de dois fluidos. Chawla, 1985 atribui o melhor desempenho dos

atomizadores de dois fluidos sobre os de um fluido à diferença na velocidade do som entre os meios monofásicos e bifásicos. Em um meio bifásico gás-líquido, a velocidade do som é ligeiramente menor que a de qualquer uma das fases individuais. O autor observa que a velocidade mínima do som em uma mistura de ar e água à temperatura e pressão padrão é de 20 a 30 m/s, enquanto para as fases individuais é 300 e 1500 m/s para ar e água, respectivamente.

Como um escoamento bifásico através de um bico injetor estrangula a uma velocidade significativamente menor do que aquela em que um escoamento monofásico estrangularia, este sofrerá um salto de pressão acentuado na saída do bico injetor, mesmo em velocidades de escoamento e pressões de injeção relativamente baixas, conforme ilustrado na Figura 2.4. A queda repentina de pressão na saída do injetor aprimora a qualidade da atomização, assim torna-se possível obter uma boa atomização mesmo com baixas vazões e pressões de injeção.

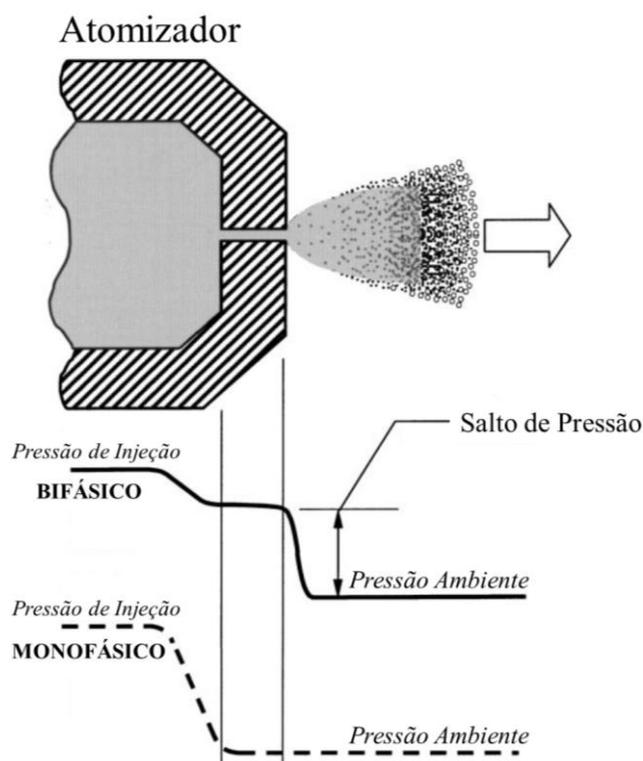


Figura 2.4: Salto de pressão no escoamento bifásico na saída do injetor. [Adaptado de Sovani et al., 2001]

A velocidade sônica mais baixa de uma mistura bifásica e o conseqüente salto de pressão na saída do atomizador é uma vantagem que a atomização efervescente compartilha

com outras técnicas de atomização de dois fluidos de mistura interna. A razão específica para o melhor desempenho dos atomizadores efervescentes em relação aos atomizadores convencionais de dois fluidos reside na estrutura de escoamento imediatamente a jusante do orifício de descarga. É essa estrutura a característica distintiva da atomização efervescente.

O princípio da atomização efervescente foi investigado experimentalmente por Roesler, 1988 e Roesler e Lefebvre, 1988, 1989 com o intuito de visualizar o escoamento bifásico no interior de um atomizador efervescente à medida que ele se aproxima do orifício de saída e do mecanismo de desintegração do líquido próximo ao bico injetor. Buckner e Sojka, 1991 e Santangelo e Sojka, 1995 também realizaram experimentos para visualizar o escoamento bifásico emitido pelo orifício de saída do atomizador. Essas investigações forneceram informações úteis sobre os princípios da atomização efervescente.

Diversos estudos experimentais detalhados foram realizados para determinar o desempenho e as características do *spray* de atomizadores efervescentes em várias condições de operação. Os resultados desses experimentos indicam que os atomizadores efervescentes apresentam as seguintes vantagens sobre atomizadores convencionais:

- Geram uma boa atomização com pressões de injeção inferiores aos exigidos com outros atomizadores [Lefebvre et al., 1988; Roesler e Lefebvre, 1989; Wang et al., 1989; Lefebvre, 1989];
- Para qualquer pressão de injeção dada, menores tamanhos de gotas são obtidos do que aqueles produzidos por métodos mais convencionais de atomização, como os injetores *air-assist* [Lefebvre et al., 1988; Roesler e Lefebvre, 1989; Wang et al., 1989; Lefebvre, 1989];
- Precisam de vazões de gás muito menores do que a maioria de outras formas de atomização com injetores de fluido duplo [Lefebvre et al., 1988; Roesler e Lefebvre, 1989; Wang et al., 1989; Lefebvre, 1989];
- Com uma vazão comparável, os diâmetros de orifício de saída e canais internos são maiores do que os de outros tipos de atomizadores, minimizando problemas de entupimento e facilitando a fabricação do atomizador [Lefebvre, 1989];

- Em aplicações de combustão, os atomizadores efervescentes produzem *sprays* que conduzem a uma redução das emissões de poluentes, devido à presença de ar (gás de atomização) no núcleo do *spray* [Lefebvre et al., 1988];
- O tamanho médio da gota é relativamente insensível à viscosidade do líquido, sendo que um único atomizador pode trabalhar com líquidos diferentes sem comprometer o desempenho [Buckner e Sojka, 1991; Sutherland et al., 1995];
- São dispositivos simples, robustos e confiáveis. Exigem pouca ou nenhuma manutenção e podem ser operados a baixo custo [Lefebvre, 1989].

Vários estudos sobre o comportamento do escoamento bifásico no interior desses atomizadores foram realizados. Roesler e Lefebvre, 1988, 1989 conduziram experimentos para visualizar como se aproxima o escoamento bifásico ao orifício de saída do injetor e o mecanismo de quebra do líquido na proximidade da saída do injetor. Os mecanismos de atomização efervescente foram discutidos com grandes detalhes por Sovani et al., 2001.

3 MODELO MATEMÁTICO

O ponto de partida para a modelagem numérica de escoamentos reativos turbulentos consiste na descrição matemática através de um conjunto de equações governantes. Para escoamentos reativos turbulentos, as equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento são suplementadas por aquelas para conservação de espécies químicas para formar as equações que governam. Além disso, a variação da densidade em relação à pressão, temperatura e composição de espécies químicas precisa ser contabilizada e a relação é estabelecida por meio de uma equação de estado. Nesta seção do Capítulo, essas equações, juntamente com as premissas impostas relevantes aos fluxos de interesse atual são apresentadas. A abordagem de simulação de turbulência é apresentada na Seção 3.2.

3.1 Equações Governantes

As equações que regem podem ser derivadas aplicando leis de conservação da física para massa, quantidade de movimento, energia e espécies químicas, para o escoamento de um fluido através de um volume de controle infinitesimal fixo no espaço. As equações são apresentadas aqui em uma notação cartesiana de tensor com soma implícita nos índices i e j .

3.1.1 Conservação da Massa

Embora a reação química possa resultar na produção e destruição de espécies individuais, no geral, a massa não é criada nem destruída. A aplicação desta lei física e, além disso, que a massa líquida através de uma superfície de controle pode ser transportada apenas por convecção, resulta na chamada equação de continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j) = 0 \quad (3.1)$$

onde ρ é a massa específica da mistura em $[\text{kg}/\text{m}^3]$ e U_j é a velocidade na direção j em $[\text{m}/\text{s}]$.

3.1.2 Conservação da Quantidade de Movimento

A conservação da quantidade de movimento é baseada na Segunda Lei do Movimento de Newton e é expressa pela Equação de Navier-Stokes:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_i U_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} \delta_{ij} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + S_M \quad (3.2)$$

onde p é a pressão estática em [Pa], δ_{ij} é a função delta de Kronecker, τ_{ij} é a tensão de cisalhamento da coordenada i em uma superfície cuja normal externa é na direção j em [Pa] e S_M é o termo fonte em [kg/(m².s²)], inserido para modelar o empuxo, a força de arrasto gerada pelo transporte de partículas e outros termos matemáticos gerados pelo modelo de turbulência. O modelo de Boussinesq foi empregado para representar a força de empuxo provocada pelas variações de densidade causada por variações de densidade. O fluido em fluxos turbulentos de reação é frequentemente considerado newtoniano e, portanto, a tensão de cisalhamento pode estar relacionada ao gradiente de velocidade:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial U_j}{\partial x_j} \right) \quad (3.3)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica em [N.s/m²].

3.1.3 Conservação das Espécies Químicas

Semelhante à conservação geral de massa, a conservação de massa de espécies químicas individuais (Y_α) pode ser derivada e é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_\alpha U_j Y_\alpha) = -\frac{\partial J_{\alpha j}}{\partial x_j} + \dot{\omega}_\alpha \quad (3.4)$$

onde ρ_α é a massa específica do componente fluido α na mistura em [kg/m³], $Y_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{\rho}$ é a fração mássica da espécie α em [kg/kg], $J_{\alpha j}$ é o fluxo de massa molecular da espécie α na

direção da coordenada j em $[\text{kg}/(\text{m}^2.\text{s})]$ e $\dot{\omega}_\alpha$ é a taxa de formação da espécie α por unidade de volume (termo fonte químico) em $[\text{kg}/(\text{m}^3.\text{s})]$.

Na combustão envolvendo várias espécies com pesos moleculares diferentes, o tratamento completo dos fluxos moleculares requer uma gama completa de coeficientes de difusão que caracterizam a difusão das espécies α em uma mistura envolvendo as espécies j , $j=1,2,3,\dots,N$. No entanto, em fluxos turbulentos de interesse prático, o número de turbulência de Reynolds é suficientemente alto para que o transporte molecular seja de importância secundária e a lei de difusão de Fick pode ser empregada [Libby e Williams, 1994]. Conseqüentemente:

$$J_{\alpha j} = -\rho_\alpha D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \quad (3.5)$$

onde D_α é a difusividade cinemática da espécie α em $[\text{m}^2/\text{s}]$.

Introduzindo a Equação (3.5) dentro da Equação (3.4) leva a:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_\alpha U_j Y_\alpha) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho_\alpha D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_\alpha \quad (3.6)$$

Esta equação se aplica a cada espécie e, portanto, na presença de N espécies, $N-1$ equações devem ser resolvidas considerando o fato de que:

$$\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1 \quad (3.7)$$

Entretanto, é altamente desejável utilizar frações de massa dos elementos, denotadas por Z_e , para um elemento definido por:

$$Z_e = \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha e} Y_\alpha \quad (3.8)$$

onde $m_{\alpha e}$ é a massa do elemento e presente em um quilograma de espécies α em [kg/kg]. Isso implica que para M número de elementos:

$$\sum_{e=1}^M Z_e = 1 \quad (3.9)$$

Como nas reações químicas os elementos são conservados, ao contrário das espécies, temos para cada elemento:

$$\sum_{e=1}^M m_{\alpha e} Z_e = 0 \quad (3.10)$$

Efetuada as operações na Equação(3.6), a equação de conservação para a fração de massa do elemento pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j Z_e) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{\alpha=1}^N \rho m_{\alpha e} D_{\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_j} \right) \quad (3.11)$$

A complexidade no termo da direita da equação é tratada assumindo-se um único coeficiente de difusão, $D_{\alpha}=D$, resultando em:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j Z_e) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Z_e}{\partial x_j} \right) \quad (3.12)$$

As Equações (3.11) e (3.12) são muito úteis em fluxos turbulentos de reação, pois eliminam a necessidade de avaliar o termo da fonte química que introduz grande complexidade. Além disso, ao introduzir uma fração de mistura escalar conservada Z , que é baseada na combinação linear de frações de massa elementar, o esforço computacional é reduzido à resolução de apenas uma equação:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j Z) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \quad (3.13)$$

3.1.4 Conservação da Energia

A conservação da energia pode ser derivada da Primeira Lei da Termodinâmica e, com fluxos de baixo número de Mach, é usual adotar a entalpia como variável energética:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j h) = \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_j} + \mu \sum_{\alpha}^{Nc} h_{\alpha} \left(\frac{1}{Sc_{\alpha}} + \frac{1}{Pr} \right) \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_j} \right] + \nabla \cdot \dot{Q}_{rad} \quad (3.14)$$

onde h é a entalpia específica da mistura em [J/kg], h_{α} é a da espécie α , Pr é o número de Prandtl, Sc_{α} é o número de Schmidt pertencente a espécie α e \dot{Q}_{rad} representa a perda de calor por radiação em [W/m³], o qual requer cálculo através de uma equação de transferência de calor radiativa resolvida em um submodelo de radiação que será discutido na Seção 3.6.

Assumindo que o número Mach característico do fluxo turbulento seja menor que a unidade, a energia cinética da mistura e a taxa de dissipação viscosa são negligenciadas. Além disso, considerando, difusividades iguais para todas as espécies, ($D_{\alpha}=D$ e $Sc_{\alpha}=Sc$) e número de Lewis (Sc/Pr) igual a unidade, a Equação (3.14) é simplificada a:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j h) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + \nabla \cdot \dot{Q}_{rad} \quad (3.15)$$

No caso de um escoamento adiabático, a Equação (3.15) se reduz a:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j h) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) \quad (3.16)$$

A partir da observação das Equações (3.13) e (3.16), fica claro que elas são idênticas. Portanto, sob as premissas consideradas acima, a complexidade do problema em escoamentos turbulentos com reações químicas é reduzida ainda mais, pois a solução apenas para a fração

da mistura e a introdução de uma relação funcional apropriada entre entalpia e fração da mistura seriam suficientes.

Em escoamentos reativos, a combustão influencia a dinâmica dos fluidos através da massa específica (assumindo baixo número de Mach onde flutuações da pressão são desprezíveis). Uma equação de estado é usada para calcular a massa específica, dada, para gás ideal, por:

$$\rho = \frac{p}{R_o T \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_{\alpha}}{W_{\alpha}}} \quad (3.17)$$

onde R_o é a constante universal dos gases perfeitos igual a 287,0530 [J/(kg.K)] e W_{α} é o peso molecular das espécies α em [mol/kg].

3.1.5 Visão Geral do Método de Simulação de Turbulência RANS

Atualmente, para configurações práticas complexas de fluxo, a técnica de simulação numérica mais viável é o *Reynolds-Averaged-Navier-Stokes* (RANS). A abordagem RANS é baseada na média das equações que governam ao longo do tempo (se o escoamento é estatisticamente estável) ou em um conjunto de médias (se o escoamento é estatisticamente instável). Portanto, o esforço numérico é reduzido à descrição de apenas um campo de fluxo médio enquanto todas as escalas de turbulência são modeladas. Se o escoamento médio for estável, as equações governantes serão desprovidas de derivada de tempo e, portanto, uma solução em estado estacionário pode ser obtida economicamente. Mesmo que o escoamento médio seja instável, o RANS fornece vantagem computacional, pois o tamanho do intervalo de tempo é determinado pela instabilidade global, em vez das escalas de tempo de turbulência. Geralmente, dois tipos de procedimentos de média são usados:

- a) Média de tempo convencional (Média de Reynolds);
- b) Média ponderada da densidade (Média de Favre).

O procedimento de média de Favre é altamente recomendado por Bilger, 1976, 1980 para todos os escoamentos turbulentos com variações significativas de densidade. Em escoamentos turbulentos em combustão com grandes variações de densidade, a média de

Reynolds leva a termos adicionais com flutuações de densidade. Modelar estes termos envolve uma complexidade considerável. A média de Favre, sendo uma abordagem de média ponderada em massa, evita termos que envolvam flutuações da densidade, levando a formas mais simples das equações governantes. No entanto, as equações médias de Favre ainda contêm termos não fechados que requerem a introdução de aproximações na forma de modelos de turbulência e combustão.

3.2 Modelagem da Turbulência

Na seção anterior, foi apontado que a simulação por RANS exige modelos para aproximar os termos não fechados no conjunto de equações governantes. Nesta seção, as equações que regem a forma de RANS e os modelos de turbulência RANS adotados no trabalho atual são apresentados.

3.2.1 Médias de Reynolds e Favre

Na decomposição de Reynolds, qualquer variável de fluxo ϕ pode ser escrita como a soma de uma média $\bar{\phi}$ e uma flutuação de ϕ' sobre a média:

$$\phi(x, t) = \bar{\phi}(x_i) + \phi'(x_i, t) \text{ com } \overline{\phi'}(x_i, t) = 0 \quad (3.18)$$

A média pode ser obtida a partir da média do tempo (no caso de escoamentos estatisticamente estáveis):

$$\bar{\phi}(x_i) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \phi(x_i, t) dt \quad (3.19)$$

ou de um conjunto mais geral de média:

$$\bar{\phi}(x_i, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \phi(x_i, t) \quad (3.20)$$

onde t é o tempo em [s], Δt é o intervalo de tempo em [s] e N representa o número de amostras do conjunto. A substituição da decomposição acima na forma contínua das equações governantes pelo subseqüente conjunto da média resulta nas equações governantes para a variável média do escoamento. Enquanto a média de qualquer termo linear simplesmente fornece o termo idêntico para a quantidade média, um termo não linear quadrático resulta no produto da média e um termo de covariância adicional que precisa ser modelado.

$$\overline{U\phi} = \bar{U} \bar{\phi} + \overline{U'\phi'} \quad (3.21)$$

Em escoamentos turbulentos com reações químicas, a densidade é sujeita a flutuação devido à liberação térmica de calor e a média de Reynolds induz dificuldades adicionais. Por exemplo, a média de Reynolds para a equação de conservação de massa produz:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{U}_j + \rho' U_j') = 0 \quad (3.22)$$

A correlação velocidade-densidade é uma complexidade adicional que envolve incerteza significativa em sua modelagem explícita. Portanto, é desejável evitar sua introdução adotando a média ponderada em massa ou a média de Favre. Na média de Favre, todos os valores instantâneos de velocidade e escalares (ϕ), exceto pressão e densidade, são decompostos em uma parte estável e outra flutuante como:

$$U_i = \frac{\overline{\rho U_i}}{\bar{\rho}} + U_i'' = \tilde{U}_i + U_i'' \quad , \quad \phi_i = \tilde{\phi}_i + \phi_i'' \quad (3.23)$$

A média de Favre é indicada por um til, enquanto a flutuação sobre a média de Favre é dada por apóstrofo duplo (`). Além disso, $\overline{\rho U_i''} = 0$ e $\overline{\rho \phi_i''} = 0$ enquanto $\overline{\phi_i''} \neq 0$ e $\overline{U_i''} \neq 0$.

A inclusão dessa decomposição na forma contínua das equações governantes com o subseqüente conjunto da média resulta nas equações em média de Favre para as quantidades médias do escoamento.

3.2.2 Equações Governantes em Média de Favre

- Conservação da massa:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j) = 0 \quad (3.24)$$

Esta equação é desprovida de termos que envolvem flutuações de densidade e, portanto, é formalmente idêntica à equação de continuidade com média de Reynolds para escoamentos com densidade constante e os resultados também são válidos para outras equações de conservação.

- Conservação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{U}_j) = -\frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} \delta_{ij} + \frac{\partial \tilde{\tau}_{ij}^{vis}}{\partial x_j} + \tilde{S}_M - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widetilde{U_i'' U_j''}) \quad (3.25)$$

onde o tensor viscoso $\tilde{\tau}_{ij}^{vis}$ para um fluido newtoniano e fluxo incompressível é dado por:

$$\tilde{\tau}_{ij}^{vis} = 2(\mu) \tilde{S}_{ij} \quad (3.26)$$

onde \tilde{S}_{ij} é o tensor de taxa de deformação em [1/s], dado por:

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.27)$$

- Conservação das espécies químicas:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}_\alpha \tilde{U}_j \tilde{Y}_\alpha) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho}_\alpha D_\alpha \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j} \right) + \tilde{\omega}_\alpha - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}_\alpha \widetilde{U_j'' Y_\alpha''}) \quad (3.28)$$

- Conservação da energia:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu_l}{Pr} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right] + \nabla \cdot \tilde{Q}_{rad} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widetilde{U_j'' h''}) \quad (3.29)$$

- Qualquer escalar conservado (exemplo: fração de mistura, Z):

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{Z}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\bar{\rho} D) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widetilde{U_j'' Z''}) \quad (3.30)$$

Nessas equações em médias de Favre, as seguintes quantidades desconhecidas precisam ser fechadas:

- Tensões de Reynolds $\bar{\rho} \widetilde{U_i'' U_j''}$:

Estes termos representam transporte turbulento e seu fechamento é aproximado através de um modelo de turbulência. As abordagens comuns de modelagem das tensões de Reynolds variam de um simples modelo $k-\varepsilon$ baseado em uma viscosidade turbulenta (*eddy viscosity*) linear a fechamentos complexos de segundo momento em que são resolvidas as equações de transporte para componentes individuais das tensões de Reynolds e a modelagem é deslocada para termos de maior ordem. O modelo $k-\varepsilon$ é bastante popular para aplicação prática devido ao rápido tempo de resposta e à precisão razoavelmente boa. No entanto, é incapaz de reproduzir com precisão o aumento ou supressão de componentes individuais das tensões turbulentas que ocorrem devido a uma variedade de fenômenos na combustão turbulenta. Atualmente, os fechamentos de segundo momento representam o nível mais simples no qual uma descrição mais detalhada e precisa do transporte turbulento pode ser alcançada no RANS.

- Fluxos escalares turbulentos $\bar{\rho}_\alpha \widetilde{U_j'' Y_\alpha''}$, $\bar{\rho} \widetilde{U_j'' h''}$ e $\bar{\rho} \widetilde{U_j'' Z''}$:

Estes termos representam o transporte turbulento de um escalar e geralmente são modelados com base na hipótese de difusão de gradiente e viscosidade turbulenta e são expressos como:

$$\bar{\rho}_\alpha \widetilde{U_j'' Y_\alpha''} = -\frac{\mu_t}{Pr_\alpha} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j}; \quad \bar{\rho} \widetilde{U_j'' h''} = -\frac{\mu_t}{Pr_h} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j}; \quad \bar{\rho} \widetilde{U_j'' Z''} = -\frac{\mu_t}{Sc_Z} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \quad (3.31)$$

onde μ_t é a viscosidade turbulenta *eddy* em [N.s/m²], estimada pelo modelo de turbulência, não sendo uma propriedade física do fluido mas sim do escoamento, representando uma média local do nível de turbulência, variando de ponto a ponto e de escoamento para escoamento, requerendo assim uma modelagem para sua determinação, Pr_α é o número de Prandtl turbulento correspondente para a espécie α , Pr_h é o número de Prandtl turbulento correspondente para a entalpia h e Sc_z é o número de Schmidt turbulento correspondente para a fração de mistura Z .

Essa abordagem é computacionalmente eficaz e, portanto, foi adotada no trabalho atual. Uma abordagem alternativa, porém computacionalmente custosa, de lidar com os fluxos turbulentos é empregar um fechamento de segundo momento, em que a equação de transporte para componentes individuais de fluxos turbulentos para cada escalar são resolvidas e os momentos de maior ordem são modelados.

- Termo fonte químico $\tilde{\omega}_\alpha$:

A determinação do termo médio da fonte química é um dos problemas centrais da modelagem de combustão turbulenta e é a principal motivação por trás do desenvolvimento de modelos de combustão turbulenta.

3.2.3 Modelo k - ε Padrão

O modelo de turbulência de duas equações k - ε foi originalmente desenvolvido por Jones e Launder, 1972 para fluxos de recirculação de densidade constante. No entanto, seu uso pode ser feito na reação de fluxos com densidade variável, simplesmente reformulando o modelo em termos de quantidades médias de Favre com a presunção inerente de que as flutuações de densidade são contabilizadas pela média. Essa abordagem foi discutida em detalhes por Jones e Whitelaw, 1982, Jones, 1994 e Kuo, 2005. Neste modelo, as tensões de Reynolds são consideradas linearmente relacionadas à taxa de deformação, portanto:

$$\bar{\rho} \widetilde{U_i'' U_j''} = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{\rho} \tilde{k} \quad (3.32)$$

onde \tilde{k} é a energia cinética turbulenta em [m²/s²].

As considerações de análise dimensional determinam que a viscosidade turbulenta μ_t pode ser dada pelo produto de uma escala de velocidade turbulenta $\sqrt{\tilde{k}}$ e uma escala de comprimento de turbulência $\tilde{k}^{3/2}/\tilde{\varepsilon}$, portanto:

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (3.33)$$

onde C_μ é uma constante do modelo de turbulência e $\tilde{\varepsilon}$ é a taxa na qual energia cinética turbulenta é dissipada em [m²/s³].

A energia cinética turbulenta \tilde{k} e a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta $\tilde{\varepsilon}$ são computadas a partir de suas respectivas equações de transporte, segundo as Equações (3.34) e (3.35).

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{k}) = \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right] + P_k - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{\varepsilon}) = \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_\varepsilon} \right) \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{P}_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}} \quad (3.35)$$

onde $C_{\varepsilon 1}$ e $C_{\varepsilon 2}$ são constantes empíricas adimensionais do modelo de turbulência; Pr_k e Pr_ε são o número de Prandtl para a energia cinética turbulenta e taxa de dissipação, respectivamente, e \tilde{P}_k é o termo que representa a taxa de produção de turbulência devido às forças viscosas em [kg/m.s³] e é dado pela Equação (3.36).

$$\tilde{P}_k = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_i} \quad (3.36)$$

Os valores padrões das constantes das Equações (3.34) e (3.35) são mostrados na Tabela 3.1. Essas constantes de modelagem são obtidas a partir da análise de fluxos simples de densidade constante e são otimizadas para lidar com grande variedade de fluxos.

A escolha do modelo de turbulência $k-\varepsilon$ para o presente trabalho baseia-se em trabalhos da literatura onde foi aplicado em conjunto com o método VOF (*Volume of Fluid*) para representar o escoamento bifásico de mistura no interior de bicos injetores [Hashiguchi et al., 2019; Wang et al., 2019; Rivas, 2015; Savonov, 2011].

Tabela 3.1: Constantes padrões do modelo $k-\varepsilon$. [Fonte: Launder e Sharma, 1974]

Constante	Valor
$C_{\varepsilon 1}$	1,44
$C_{\varepsilon 2}$	1,92
C_{μ}	0,09
Pr_k	1,0
Pr_{ε}	1,3

3.3 Método VOF (*Volume of Fluid*)

A formulação do modelo VOF implica no fato de que dois ou mais fluidos (fases) não são interpenetrantes, ou seja, permaneçam separados por uma interface bem definida, ao longo de todo domínio computacional, sem a presença de escoamento disperso. Para cada fase adicional que você adiciona ao seu modelo, uma variável é introduzida: a fração de volume da fase na célula computacional. Em cada volume de controle, a soma das frações volumétricas das fases é unitária.

Os campos para todas as variáveis e propriedades são compartilhados pelas fases e representam valores médios do volume, desde que a fração do volume de cada uma das fases seja conhecida em cada local. Desta forma as variáveis e propriedades termofísicas em qualquer célula é dada pela representação de uma fase ou mistura das fases dependendo do seu valor de fração volumétrica. Em outras palavras, se a q^n fração de volume do fluido na célula é denotada como α_q , são possíveis as três condições a seguir:

$$\alpha_q = \begin{cases} 0, & \text{a célula está vazia do fluido } q^n \\ 1, & \text{a célula está cheia do fluido } q^n \\ 0 < \alpha_q < 1, & \text{a célula contém ambos os fluidos (possui superfície)} \end{cases} \quad (3.37)$$

Com base no valor local de α_q , as propriedades e variáveis apropriadas serão atribuídas a cada volume de controle dentro do domínio.

O rastreamento das interfaces entre as fases é realizado pela solução de uma equação de transporte da fração volumétrica, denominada função coloração [Hirt e Nichols, 1981], de uma ou mais fases na interface. Para as q^n fases, a equação de advecção da fração volumétrica para cada fase, α_q , tem a seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) = 0 \quad (3.38)$$

onde ρ_q é a massa específica da fase q em [kg/m³] e \vec{v}_q é a velocidade da fase q em [m/s].

Em um escoamento bifásico, a Equação (3.28) não é resolvida para a fase primária, assim, a fração volumétrica da fase primária é calculada com base na seguinte restrição:

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1 \quad (3.39)$$

No método VOF, as propriedades que aparecem nas equações de transporte são determinadas pela presença das fases do componente em cada volume de controle. Em um sistema de duas fases, por exemplo, a densidade em cada célula é dada por:

$$\rho = \rho_{pri} + (\rho_{sec} - \rho_{pri})\alpha_{sec} \quad (3.40)$$

onde os subscritos *pri* e *sec* representam as fases primária e secundária, respectivamente, e α_s representa a fração volumétrica da fase secundária. Assim como as equações de conservação da massa e quantidade de movimento, a equação de conservação volumétrica das fases é transportada pelo campo de velocidade segundo a Equação (3.38).

Um dos grandes desafios do método VOF é a discretização da equação de advecção da fração volumétrica, Equação (3.38). Em esquemas de baixa ordem ocorre perda de massa, e, conseqüentemente, a fração volumétrica não representa a interface de forma adequada. Métodos de alta ordem são numericamente instáveis e resultam em oscilações numéricas.

Dessa maneira, são necessários esquemas de advecção que sejam conservativos. Ao longo dos anos, várias técnicas de advecção têm sido propostas e neste trabalho fez-se o uso do método *Piecewise Linear Interface Calculation* (PLIC) [Youngs, 1982].

Neste sentido, o método VOF consiste em duas etapas: reconstrução da interface e advecção da interface. O objetivo da reconstrução da interface utilizando o método PLIC é encontrar uma equação da reta que satisfaça a conservação da massa na malha Euleriana, portanto, a interface é representada por segmentos de retas, em cada célula do domínio computacional, como ilustra a Figura 3.1.

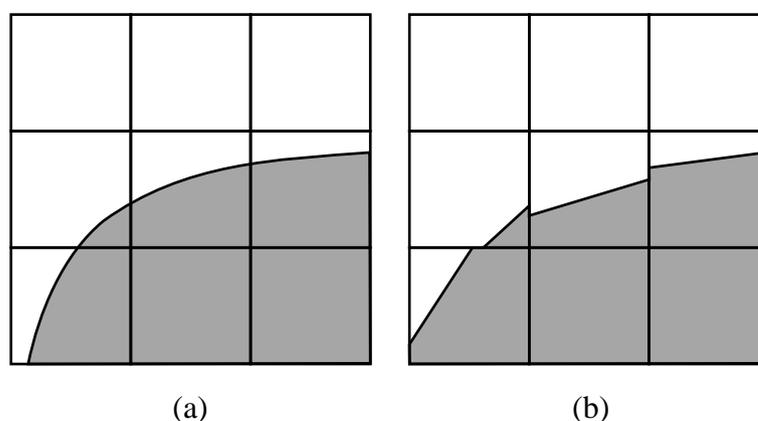


Figura 3.1: Ilustração da reconstrução da interface pelo método PLIC: (a) forma da interface real; (b) forma da interface representada pela reconstrução geométrica do método PLIC.

3.3.1 Tensão Superficial

A tensão superficial surge como resultado de forças atraentes entre moléculas em um fluido. Considere uma bolha de ar na água, por exemplo. Dentro da bolha, a força líquida em uma molécula devido a seus vizinhos é zero. Na superfície, no entanto, a força resultante é radialmente para dentro e o efeito combinado dos componentes radiais de força em toda a superfície esférica é fazer a superfície se contrair, aumentando assim a pressão no lado côncavo da superfície. A tensão superficial é uma força, atuando apenas na superfície, necessária para manter o equilíbrio nesses casos. Atua para equilibrar a força atrativa intermolecular radialmente para dentro com a força gradiente de pressão radialmente para fora através da superfície. Nas regiões onde dois fluidos são separados, mas um deles não está na

forma de bolhas esféricas, a tensão superficial atua para minimizar a energia livre, diminuindo a área da interface.

Os efeitos da tensão superficial são modelados pela adição de um termo fonte nas equações de Navier-Stokes. O modelo de tensão superficial utilizado neste trabalho é baseado no modelo *Continuum Surface Force* (CSF) de Brackbill et al., 1992, interpretando a tensão superficial como um efeito tridimensional contínuo em uma interface, e não como uma condição de valor limite na interface, ou seja, modelando a força de tensão superficial como uma força de volume concentrada na interface F_{CSF} em [N], em vez de uma força superficial:

$$F_{CSF} = (\sigma K \vec{\eta} - \nabla_{sup} \sigma) \delta_{sup} \quad (3.41)$$

onde ∇_{sup} é o operador gradiente de superfície, σ é o coeficiente de tensão superficial em [N/m], $\vec{\eta}$ é o vetor unitário normal à interface, K é a curvatura da interface em [m] e δ_{sup} é a função delta concentrada na interface, que está a zero de distância da interface, garantindo assim que a força de tensão superficial esteja ativa apenas na interface. Com as hipóteses do presente trabalho na utilização do modelo VOF, escoamento isotérmico e fluidos imiscíveis, o coeficiente da tensão superficial é constante ao longo de toda a interface, logo $\nabla_{sup} \sigma = 0$. No contexto do VOF, alguns termos da Equação (3.41) podem ser aproximados através da fração de volume, como $n = \nabla \alpha / |\nabla \alpha|$ e $\delta = |\nabla \alpha|$. Assim, a Equação (3.41) pode ser reescrita como:

$$F_{CSF} = \sigma K \nabla \alpha \quad (3.42)$$

Os efeitos da adesão à parede em interfaces fluidas em contato com limites rígidos em equilíbrio são considerados especificando um ângulo de contato que a interface faz com a parede através do fluido primário. O vetor normal da interface usado para os cálculos da curvatura e da força de tensão superficial deve atender o ângulo de contato da parede.

3.4 Modelagem do Transporte da Partícula

A modelagem de transporte de partículas é um tipo de modelo multifásico, no qual as partículas são rastreadas através do fluxo de maneira Lagrangeana, em vez de serem modeladas como uma fase Euleriana extra. A fase particulada completa é modelada por

apenas uma amostra de partículas individuais. O rastreamento é realizado através da formação de um conjunto de equações diferenciais ordinárias no tempo para cada partícula, consistindo em equações para posição, velocidade, temperatura e massas de espécies. Essas equações são então integradas usando um método de integração simples para calcular o comportamento das partículas à medida que elas atravessam o domínio do fluxo.

Na modelagem das partículas, algumas simplificações precisam ser assumidas:

- Partícula é tratada como um ponto de massa em movimento;
- Detalhes do escoamento em torno da partícula são negligenciados (exemplo: campo de escoamento perto da partícula, formação de vórtices, separação do escoamento e camada limite);
- Propriedades locais da fase dispersa são previstas a partir da média espacial das trajetórias de partículas que atravessam um certo volume de controle;
- Não é possível prever as trajetórias de todas as partículas físicas, por isso usa-se o conceito de trajetórias representativas de partículas.

3.4.1 Rastreamento Lagrangeano

A aplicação do rastreamento Lagrangeano envolve a integração de caminhos de partículas através do domínio discretizado. As partículas individuais são rastreadas a partir do ponto de injeção até que escapem do domínio ou algum critério de limite de integração seja atendido. Como neste trabalho as partículas são gotículas, o critério limite de integração é até que sejam totalmente evaporadas. Cada partícula é injetada, por sua vez, para obter uma média de todas as faixas de partículas e gerar termos de fonte para as equações de massa, momento e energia do fluido.

O deslocamento das partículas é calculado usando a integração Euler direta da velocidade das partículas ao longo do passo temporal δ_t em [s].

Como $(dx_p/dt)=U_p$, o deslocamento de partículas x_p em [m] é dado como:

$$x_p^n = x_p^0 + U_p^0 \delta_t \quad (3.43)$$

onde os sobrescritos 0 e n se referem a valores antigos e novos, respectivamente, o subscrito p se refere a partícula e U_p é a velocidade da partícula em [m/s]. Na integração direta, presume-se que a velocidade da partícula calculada no início do *timestep* prevaleça durante todo o passo. No final do passo temporal, a nova velocidade das partículas é calculada usando a solução analítica para a equação do momento das partículas:

$$m_p \frac{dU_p}{dt} = F_T \quad (3.44)$$

onde m_p é a massa da partícula em [kg] e F_T é a soma de todas as forças que atuam na partícula em [N].

A Equação (3.45) é um exemplo de uma equação de transporte genérica:

$$\frac{d\phi_p}{dx} = \frac{(\phi_f - \phi_p)}{\tau} + R \quad (3.45)$$

onde ϕ é uma variável transportada genérica, o subscrito f indica o valor da variável no fluido circundante, τ é um coeficiente de linearização e R é uma fonte não linear geral. A solução analítica da equação de transporte genérica acima pode ser escrita como:

$$\phi_p = \phi_f + (\phi_p^0 - \phi_f) \exp\left(-\frac{\delta_t}{\tau}\right) + \tau R \left(1 - \exp\left(-\frac{\delta_t}{\tau}\right)\right) \quad (3.46)$$

No cálculo de forças e valores para τ e R , muitas variáveis de fluido, como densidade, viscosidade e velocidade, são necessárias na posição da partícula. Essas variáveis são sempre obtidas com precisão calculando o elemento no qual a partícula está viajando, calculando a posição computacional dentro do elemento e usando as funções de forma subjacentes do algoritmo de discretização para interpolar dos vértices para a posição da partícula.

3.4.1.1 Transferência Entre Fases Através do Termo Fonte

Assim como o fluido afeta o comportamento das partículas através de forças e, por exemplo, transferência de calor por convecção, há uma influência contrária da partícula no

fluido. Este efeito é denominado como acoplamento entre fases. Se o fluido pode influenciar trajetórias, mas as partículas não afetam o fluido, a interação é denominada acoplamento unidirecional. Se as partículas também afetam o comportamento do fluido, a interação é denominada acoplamento bidirecional.

A previsão de fluxo das duas fases nos sistemas acoplados unidirecionais é relativamente direta. O campo de fluxo de fluido pode ser calculado independentemente das trajetórias de partículas. O acoplamento unidirecional pode ser uma aproximação aceitável em fluxos com baixas cargas de fase dispersa, onde as partículas têm uma influência desprezível no fluxo de fluido.

O acoplamento bidirecional, utilizado neste trabalho, requer que os termos da fonte de partículas sejam incluídos nas equações do momento do fluido. As fontes de momento podem ser devidas a forças de dispersão turbulentas ou arrasto. Os termos da fonte de partículas são gerados para cada partícula à medida que são rastreados pelo fluxo. As fontes de partículas são aplicadas no volume de controle em que a partícula se encontra durante o *timestep*.

As fontes de partículas para as equações do momento do fluido são obtidas através da resolução de equações de transporte para as fontes. A equação genérica para fontes de partículas é:

$$\frac{dS_p}{dt} = C_s \phi_p + R_s \quad (3.47)$$

onde $C_s \phi_p$ são as contribuições das partículas que são lineares na variável solução e R_s contém todas as outras contribuições, incluindo quando apropriado um termo de transferência de massa $-(dm_p/dt)\phi_p$. A Equação (3.47) tem a mesma forma que o transporte geral de partículas e é resolvida da mesma maneira descrita anteriormente. O termo fonte da partícula, S_p , a ser adicionada à fase contínua é então multiplicado pela vazão numérica da partícula.

Os termos fontes das partículas são recalculados toda vez que as partículas são injetadas, estes são então retidos na memória para que possam ser aplicados sempre que os coeficientes de fluido forem calculados. Assim, podem ser aplicados mesmo que as partículas não tenham sido injetadas no cálculo do fluxo atual.

3.4.2 Transferência de Momento

Considere uma partícula discreta viajando em um meio fluido contínuo. As forças que atuam na partícula que afetam a aceleração das partículas são devidas à diferença de velocidade entre a partícula e o fluido, bem como ao deslocamento do fluido pela partícula. A equação de movimento para tal partícula foi derivada por Basset, Boussinesq e Oseen, sendo chamada Equação de Basset-Boussinesq-Oseen (BBO), para um referencial rotativo [Brennen, 2005]:

$$m_p \frac{dU_p}{dt} = F_D + F_B + F_P \quad (3.48)$$

onde F_D é a força de arrasto atuando na partícula, F_B é a força de flutuação devido à gravidade e F_P é a força do gradiente de pressão, aplicada na partícula devido ao gradiente de pressão no fluido ao redor da partícula causado pela aceleração do fluido, todas em [N]. Na Equação (3.48) já foram desconsiderados os termos do lado direito da equação referentes a forças devido à rotação do domínio, força de massa virtual e a força de Basset ou termo histórico.

A força de arrasto aerodinâmico atuando em uma partícula, F_D , é proporcional à velocidade de escorregamento, U_s , entre a partícula e a fase do fluido:

$$F_D = \frac{1}{2} C_D \rho_f A_f |U_f - U_p| \quad (3.49)$$

onde C_D é o coeficiente de arrasto, introduzido para explicar os resultados experimentais do arrasto viscoso de uma esfera cilíndrica, f e p se referem ao fluido circundante e a partícula, respectivamente, A_f é a área da seção transversal efetiva das partículas em [m²].

A força de flutuação, F_B , é a força sobre uma partícula imersa em um fluido. A força é igual ao peso do fluido deslocado e é dada por:

$$F_B = m_p \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p} \right) \vec{g} = \frac{\pi}{6} d_p^3 (\rho_p - \rho_f) \vec{g} \quad (3.50)$$

onde d_p é o diâmetro da partícula em [m] e \vec{g} é o vetor gravidade igual a $9,81 \text{ m/s}^2$.

A força do gradiente de pressão, F_p , resulta do gradiente de pressão do fluido ao redor da partícula e é definida como:

$$F_p = -\frac{m_p}{\rho_f} \nabla p \quad (3.51)$$

3.4.2.1 Turbulência no Rastreamento de Partículas

O cálculo da velocidade instantânea do fluido, U_f na Equação (3.49), depende do regime de escoamento e do tipo de rastreamento de partículas desejado (média ou com dispersão turbulenta). Em escoamentos laminares ou em escoamentos onde o rastreamento médio de partículas é calculado, U_f é igual a velocidade média local do fluido, \bar{U}_f , circundando a partícula. O caminho de uma partícula é determinístico, ou seja, existe um caminho único para uma partícula injetada em um determinado local no fluxo.

No rastreamento turbulento, a velocidade instantânea do fluido é decomposta em componentes médios \bar{U}_f e flutuantes U_f'' . Agora, as trajetórias das partículas não são determinísticas e duas partículas idênticas, injetadas em um único ponto, em momentos diferentes, podem seguir trajetórias separadas devido à natureza aleatória da velocidade instantânea do fluido. É a componente flutuante da velocidade do fluido que causa a dispersão de partículas em um fluxo turbulento.

O modelo de dispersão turbulenta de partículas, que é usado devido a Gosman e Ioannides, 1981, assume que uma partícula está sempre dentro de um único redemoinho turbulento. Cada redemoinho tem uma velocidade flutuante característica U_f'' , vida útil τ_r em [s] e comprimento l_r em [m]. Quando uma partícula entra no redemoinho, a velocidade flutuante desse redemoinho é adicionada à velocidade média local do fluido para obter a velocidade instantânea do fluido. Assume-se que prevaleça a velocidade turbulenta do fluido, U_f'' , desde que o tempo de interação partícula/redemoinho seja menor que a vida útil do redemoinho e o deslocamento da partícula em relação a este seja menor que o comprimento do redemoinho. Se qualquer uma destas condições forem excedidas, a partícula é assumida como entrando num novo redemoinho, com as novas características U_f'' , τ_r e l_r .

A velocidade turbulenta do fluido U_f'' , o comprimento do redemoinho l_r e a vida útil τ_r são calculados com base nas propriedades de turbulência local do fluxo segundo as Equações (3.52), (3.53) e (3.54), em média de Favre:

$$\tilde{U}_f'' = \Gamma \left(\frac{2\tilde{k}}{3} \right)^{1/2} \quad (3.52)$$

$$l_r = \frac{C_\mu^{3/4} \tilde{k}^{3/2}}{\tilde{\varepsilon}} \quad (3.53)$$

$$\tau_r = l_r \left(\frac{2\tilde{k}}{3} \right)^{-1/2} \quad (3.54)$$

onde Γ é um número aleatório normalmente distribuído, que explica a aleatoriedade da turbulência sobre um valor médio. Devido a essa aleatoriedade, cada componente de velocidade flutuante pode ter um valor diferente em cada redemoinho. O fator $C_\mu^{3/4}$ foi escolhido para relacionar a escala de comprimento característico com o comprimento de dissipação por redemoinho [Hinze, 1975].

3.4.3 Transferência de Calor e de Massa

3.4.3.1 Transferência de Calor

A taxa de mudança de temperatura é governada por três processos físicos: transferência de calor por convecção, transferência de calor latente associada à transferência de massa e transferência de calor por radiação.

A transferência de calor por convecção Q_C , em [W], é dada por:

$$Q_C = \pi d_p \kappa_t Nu (T_f - T_p) \quad (3.55)$$

onde κ_t é a condutividade térmica do fluido em [W/(m.K)], Nu é o número de Nusselt, obtido pela correção de Ranz-Marshall [Ranz e Marshall, 1952] e mostrado na Equação (3.56), T_f e T_p é a temperatura do gás circundante e da partícula em [K], respectivamente.

$$Nu = 2 + 0.6 Re^{0.5} \left(\mu \frac{C_p}{\kappa_t} \right)^{1/3} \quad (3.56)$$

onde Re é o número de Reynolds e C_p é o calor específico do gás em [J/(kg.K)].

Para casos incluindo reações multifásicas, a transferência de calor por convecção tem uma correção de sopro com base na taxa de transferência de massa da partícula:

$$Q_c = Q_c \zeta \frac{e^{-\zeta}}{1 - e^{-\zeta}} \quad (3.57)$$

onde o coeficiente de correção ζ é dado por:

$$\zeta = C_p \frac{\left| \frac{dm_p}{dt} \right|}{\pi d_p \kappa_t Nu} \quad (3.58)$$

onde $\frac{dm_p}{dt}$ representa a taxa de transferência de massa total da partícula em [kg/s].

A transferência de calor associada a transferência de massa Q_M , em [W], é dada por:

$$Q_M = \sum \frac{dm_c}{dt} L_V \quad (3.59)$$

onde a soma é feita sobre todos os componentes da partícula para a qual está ocorrendo transferência de calor. O calor latente de vaporização, L_V , em [J/kg], depende da temperatura, e é obtido de informações do líquido e seu vapor.

A transferência de calor radiativa Q_R , em [W], para a partícula é dada por:

$$Q_R = \varepsilon_p \pi d_p^2 (\pi I_p - \sigma n^2 T_p^4) \quad (3.60)$$

onde ε_p é a emissividade da partícula (considerada como igual a 1 neste trabalho), I_p é a intensidade da radiação na superfície da partícula no local da partícula em [W/(m².sr)], σ é a constante de Stefan-Boltzmann igual a 5,67x10⁻⁸ W/(m².K⁴) e n é o índice de refração do fluido.

A taxa de mudança de temperatura para a partícula é então obtida de:

$$\sum (m_c C_p) \frac{dT}{dt} = Q_C + Q_M + Q_R \quad (3.61)$$

onde m_c é a massa do constituinte na partícula em [kg]. Nesta equação, a soma é feita sobre todos os componentes da partícula.

3.4.3.2 Modelo de Evaporação

O modelo de evaporação de líquidos é um modelo para partículas com transferência de calor e massa. O modelo usa duas correlações de transferência de massa, dependendo de a gota estar acima ou abaixo do ponto de ebulição.

O ponto de ebulição é determinado através de uma equação de Antoine (equação de pressão de vapor que descreve a relação entre pressão de vapor e temperatura para componentes puros, a qual, correlaciona a pressão do vapor em função da temperatura usando três coeficientes) que é fornecida por:

$$p_{vap} = p_{esc} \exp\left(A - \frac{B}{T_p + C}\right) \quad (3.62)$$

onde p_{vap} é a pressão de vapor em [Pa], p_{esc} é a escala de pressão usada para dimensionar as unidades para a pressão de vapor em [Pa], A é a constante de estado de referência de Antoine, B é o coeficiente de entalpia de Antoine e C é o coeficiente de temperatura de Antoine. Com isso, a gotícula está ebulindo se a pressão de vapor for maior que a pressão do gás ambiente.

Quando a gotícula está na temperatura do ponto de ebulição, a transferência de massa é dominada por efeitos de transferência de calor e é dada por:

$$\frac{dm_p}{dt} = - \frac{Q_C + Q_R}{L_V} \quad (3.63)$$

Quando a temperatura da gotícula está abaixo da temperatura do ponto de ebulição, a transferência de massa é dada por:

$$\frac{dm_p}{dt} = \pi d_p \rho_p D_f Sh \frac{W_{vap}}{W_g} \ln \left(\frac{1 - X_S^V}{1 - X_{vap}^V} \right) \quad (3.64)$$

onde D_f é a difusividade da fração de massa do componente contínuo em [m²/s], W_{vap} e W_g são os pesos moleculares do vapor e da mistura na fase contínua em [kg/mol], respectivamente, X_S^V é a fração molecular de vapor de equilíbrio do componente de evaporação na superfície da gota, X_{vap}^V é a fração molar do componente de evaporação na fase gasosa e Sh é o número de Sherwood, dado por:

$$Sh = 2 + 0,6 Re^{0,5} Sc^{1/3} \quad (3.65)$$

3.4.4 Modelo de Quebra Primária (Atomizador) – LISA

A principal tarefa dos modelos de rompimento primário (ou atomizador) é determinar as condições iniciais das partículas que saem do bico de injeção.

O modelo LISA (*Linearized Instability Sheet Atomization*) é capaz de simular os efeitos do rompimento primário em atomizadores de turbilhão de pressão, conforme descrito por Senecal et al., 1999. O modelo inclui os efeitos do gás circundante, tensão superficial e viscosidade do líquido no processo de crescimento das ondas.

No modelo LISA, a transição do fluxo interno do injetor para a pulverização totalmente desenvolvida pode ser dividida em três etapas: formação de filme, rompimento da folha e atomização. Um esboço de como se pensa que este processo ocorre é mostrado na Figura 3.2.

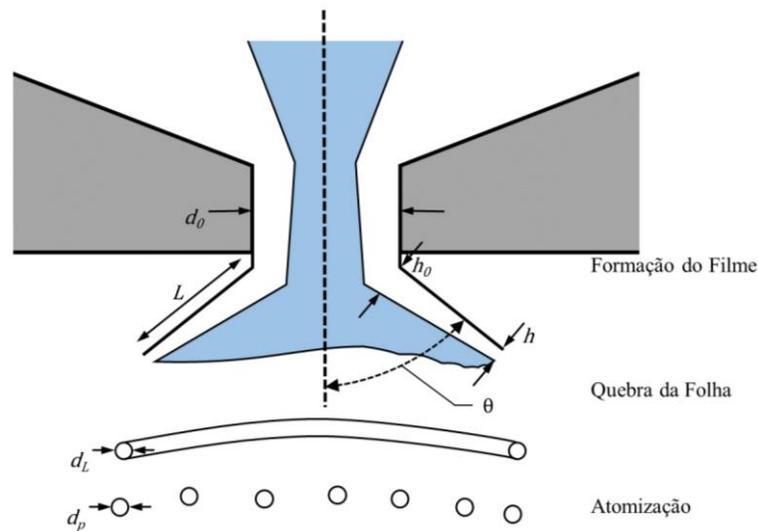


Figura 3.2: Esboço da transição do injetor interno para o *spray* externo (processo de atomização).
[Adaptado de Senecal et al., 1999]

O processo começa dentro do injetor, onde o líquido é direcionado para uma câmara de turbulência. O movimento na câmara força o líquido contra as paredes. Quando o filme sai do injetor como uma folha de líquido livre, a força das paredes não está mais presente. Consequentemente, a velocidade tangencial do líquido se torna radial. À medida que a distância radial da linha central a folha aumenta, a rotação diminui conforme indicado pela conservação do momento angular. A trajetória se aproxima de uma linha reta, cujo ângulo da linha central é determinado pela razão da velocidade tangencial para a velocidade axial. Além disso, devido à conservação da massa, a folha afina à medida que avança.

A interação entre o ar e a folha de líquido não é bem compreendida. É geralmente aceito que uma instabilidade aerodinâmica faz com que a folha se quebre. A análise matemática abaixo pressupõe que as ondas Kelvin-Helmholtz crescem na folha e eventualmente quebram o líquido em ligamentos. Supõe-se então que os ligamentos se dividam em gotas devido à instabilidade varicosa. Depois que o líquido forma gotículas, o comportamento do *spray* é determinado por arraste, colisão, coalescência e quebra secundária.

3.4.4.1 Formação do Filme

O movimento do líquido dentro do injetor cria um núcleo de ar rodeado por um filme líquido, como mostrado na Figura 3.2. A espessura deste filme em [m], h_0 , está relacionada à taxa de fluxo de massa pela Equação (3.66).

$$\dot{m}_l = \pi \rho_l u_{inj} h_0 (d_0 - h_0) \quad (3.66)$$

onde \dot{m}_l é a vazão mássica de líquido em [kg/s], ρ_l é a massa específica do líquido em [kg/m³], u_{inj} é a componente axial da velocidade na saída do injetor em [m/s] e d_0 é o diâmetro do orifício de saída do bico em [m]. Essa quantidade depende dos detalhes internos do injetor e é difícil de calcular a partir dos primeiros princípios. Para isso, a abordagem de Han et al., 1997 é usada. Presume-se que a velocidade total, U_{inj} em [m/s], esteja relacionada à pressão do injetor pela seguinte relação:

$$U_{inj} = k_v \sqrt{\frac{2 \Delta p_{inj}}{\rho_l}} \quad (3.67)$$

onde Δp_{inj} é a diferença de pressão no injetor em [Pa] e k_v é o coeficiente de descarga do injetor.

O problema agora é como determinar o valor de k_v . Han et al., 1997 usaram uma correlação para k_v de Lefebvre, 1989 que não foi considerada útil no trabalho atual. Essa correlação às vezes previa valores do coeficiente de velocidade maior que um valor unitário. Lefebvre, 1989 observou que k_v é uma função do projeto do injetor e da pressão da injeção. Optamos por usar um valor de 0,7. Este valor pode ser alcançado observando que a formação do filme a partir do orifício de injeção pode ser considerada como bocal. A Equação (3.67) é, então, uma expressão para o coeficiente de descarga para a formação do filme, assumindo que a maioria da queda de pressão através do injetor ocorra nos canais que levam ao orifício de injeção. O coeficiente de descarga para bocais monofásicos, com cantos de entrada afiados e uma razão “*length/diameter*” de 4, é tipicamente 0,78 ou menos [Lichtarowicz, 1965]. Se houver cavitação, o coeficiente de descarga pode ser tão baixo quanto 0,61. Portanto, 0,78 deve ser um limite superior prático para k_v , a redução de 10% para permitir outras perdas de momento no injetor fornece uma estimativa de 0,7.

Além disso, existem alguns limites físicos em k_v . O valor de k_v deve ser menor que a unidade pela conservação de energia. Além disso, k_v deve ser grande o suficiente para permitir fluxo de massa suficiente. Para garantir que o tamanho do núcleo de ar não seja negativo, a seguinte expressão é usada para k_v :

$$k_v = \max \left(0,7 ; \frac{4 \dot{m}_l}{\pi d_0^2 \rho_l \cos(\theta)} \sqrt{\frac{\rho_l}{2 \Delta p_{inj}}} \right) \quad (3.68)$$

onde θ é o ângulo do *spray* em [°].

Supondo que Δp_{inj} seja conhecido, a Equação (3.67) pode ser usada para calcular U_{inj} . Uma vez determinado U_{inj} , u_{inj} é calculado segundo:

$$u_{inj} = U_{inj} \cos(\theta) \quad (3.69)$$

A componente tangencial da velocidade é assumida igual a componente da velocidade radial da folha de líquido mais a jusante da saída do bico. A componente axial da velocidade é assumida como uma constante.

Para o cálculo do ângulo do *spray* é adotada a Equação (3.70) proposta por Hiroyasu e Arai, 1990 que leva em considerações algumas características do bico injetor:

$$2\theta = 83,5 \left(\frac{l_0}{d_0} \right)^{-0,22} \left(\frac{d_0}{d_{sack}} \right)^{0,15} \left(\frac{\rho_g}{\rho_l} \right)^{0,26} \quad (3.70)$$

onde l_0 é o comprimento característico do injetor em [m], d_{sack} é o diâmetro da “*sack chamber*” em [m] e ρ_g é a massa específica do gás circundante em [kg/m³].

3.4.4.2 Rompimento da Folha e Atomização

Depois que o filme sai do bico injetor, ele fica sujeito a instabilidades aerodinâmicas que o fazem se romper em ligamentos. O presente modelo inclui os efeitos do gás circundante, viscosidade do líquido e tensão superficial na ruptura da folha de líquido. Detalhes do desenvolvimento teórico do modelo são dados em Senecal et al., 1999 e são apenas brevemente apresentados aqui.

O modelo pressupõe que uma folha líquida bidimensional, viscosa e incompressível de espessura $2h$ se mova com velocidade U através de um meio gasoso, em repouso, inviscido e incompressível. O líquido e o gás circundante têm massa específica ρ_l e ρ_g , respectivamente, e a viscosidade do líquido é μ_l . Na presente formulação, é utilizado um sistema de coordenadas

que se move com a folha e um espectro de distúrbios infinitesimais, dado em termos de amplitude da onda η em [m], segundo a Equação (3.71), são impostos ao movimento inicialmente estável, produzindo velocidades e pressões flutuantes para o líquido e o gás (u_1, v_1, p_1 para o líquido; u_2, v_2, p_2 para o gás).

$$\eta = \eta_0 \exp(ikx + \omega t) \quad (3.71)$$

onde η_0 é a amplitude inicial da onda em [m], $k=(2\pi)/\lambda$ é o número da onda em $[m^{-1}]$, onde λ é o comprimento de onda da onda de perturbação em [m], x é a longitude da onda no meio em [m] e $\omega = \omega_r + i\omega_i$ é a taxa de crescimento complexa em $[s^{-1}]$, onde a parte real ω_r denota a frequência de perturbação e a parte imaginária ω_i denota a taxa de crescimento da onda de perturbação. A perturbação mais instável tem o maior valor de ω_r , denotado por Ω no presente trabalho, e é considerado responsável pela quebra da folha. Assim, é desejável obter uma relação de dispersão $\omega=\omega(k)$ a partir da qual a perturbação mais instável pode ser deduzida.

Squire, 1953, Li e Tankin, 1991 e Hagerty e Shea, 1955 mostraram que existem duas soluções, ou modos, que satisfazem as equações de governo líquidas sujeitas às condições de contorno nas interfaces superior e inferior. Para a primeira solução, chamada ondas antissimétricas ou senoidais (*Sinusoidal Waves*), as ondas nas interfaces superior e inferior estão exatamente em fase. Por outro lado, para ondas simétricas (*Varicose Waves*), as ondas são π radianos fora de fase. Os dois tipos de ondas são mostrados na Figura 3.3.

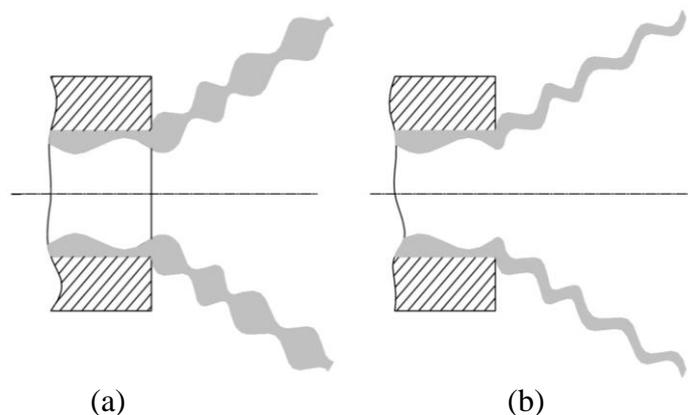


Figura 3.3: Esquemático de (a) onda simétrica (*Varicose Wave*) e (b) onda antissimétrica ou senoidais (*Sinusoidal Wave*).

Foi demonstrado por vários autores (por exemplo, Squire, 1953, Rangel e Sirignano, 1991 e Senecal et al., 1999) que ondas antissimétricas dominam o crescimento de ondas simétricas para baixas velocidades e baixas relações de densidade gás/líquido. Além disso, pode ser demonstrado que ambos os modos se tornam indistinguíveis para fluxos de alta velocidade [Senecal et al., 1998]. Como resultado, a presente discussão se concentra no crescimento de ondas antissimétricas na folha de líquido.

Como derivado por Senecal et al., 1998, a relação de dispersão para ondas antissimétricas é dada por:

$$\omega^2[\tanh(kh) + Q] + [4 v_1 k^2 \tanh(kh) + 2 i Q k U] + 4 v_1^2 k^4 \tanh(kh) - 4 v_1^2 k^3 \ell \tanh(\ell h) - Q U^2 k^2 + \frac{\sigma k^3}{\rho_l} = 0 \quad (3.72)$$

onde $Q = \rho_g / \rho_l$ é a razão de densidade gás líquido e σ é o coeficiente de tensão superficial em [N/m].

Para fornecer uma relação de dispersão viscosa simplificada é feito uma análise de ordem de magnitude na Equação (3.72) usando valores típicos de K_s e Ω_s (apresentados adiante no texto) da solução inviscida descrita por Senecal et al., 1998, mostrando que os termos de segunda ordem na viscosidade podem ser negligenciados em comparação com os outros termos. Assim, com essa simplificação, a taxa de crescimento é dada por:

$$\omega_r = -\frac{2 v_1 k^2 \tanh(kh)}{\tanh(kh) + Q} + \frac{\sqrt{4 v_1^2 k^4 \tanh^2(kh) - Q^2 U^2 k^2 - [\tanh(kh) + Q](-Q U^2 k^2 + \sigma k^3 / \rho_l)}}{\tanh(kh) + Q} \quad (3.73)$$

Para ondas longas no limite de $Q \ll kh$, a Equação (3.73) reduz para:

$$\omega_r = -2 v_1 k^2 + \sqrt{4 v_1^2 k^4 + \frac{Q U^2 k}{h} - \frac{\sigma k^2}{\rho_l h}} \quad (3.74)$$

A Equação (3.74) é semelhante à expressão de Dombrowski e Johns, 1963, mas com os coeficientes corretos para os termos viscosos (a expressão de Dombrowski e John pode ser obtida dividindo-se cada um dos termos viscosos na Equação (3.74) por quatro).

Se forem assumidas ondas curtas para folhas de alta velocidade e $Q \ll 1$, a Equação (3.73) se reduz para:

$$\omega_r = -2 v_1 k^2 + \sqrt{4 v_1^2 k^4 + Q U^2 k^2 - \frac{\sigma k^3}{\rho_l}} \quad (3.75)$$

O mecanismo físico de desintegração de folha proposto por Dombrowski e Johns, 1963 é adotado para prever os tamanhos de gota produzidos no processo de quebra primária. Presume-se que os ligamentos se formem a partir do processo de rompimento da folha quando as ondas instáveis atingirem uma amplitude crítica. Como a taxa de crescimento das ondas curtas é independente da espessura da folha, o início da formação do ligamento ou comprimento de ruptura pode ser formulado com base em uma analogia com o comprimento de ruptura dos jatos de líquido cilíndricos (por exemplo, Reitz e Bracco, 1982). Se a perturbação da superfície atingir um valor de η_b na ruptura, um tempo de separação τ_s , em [s], pode ser avaliado através de:

$$\eta_b = \eta_0 \exp(\Omega_s \tau_s) \Rightarrow \tau_s = \frac{1}{\Omega_s} \ln\left(\frac{\eta_b}{\eta_0}\right) \quad (3.76)$$

onde Ω_s é a taxa máxima de crescimento [s^{-1}], é encontrada através da Equação (3.75). Assim, a folha se romperá e os ligamentos serão formados no comprimento L em [m] dado por:

$$L = V \tau_s = \frac{V}{\Omega_s} \ln\left(\frac{\eta_b}{\eta_0}\right) \quad (3.77)$$

onde $\ln\left(\frac{\eta_b}{\eta_0}\right)$ é uma constante empírica com valor igual a 12 baseado no estudo de Dombrowski e Hooper, 1962. Note que V na Equação (3.77) é a velocidade absoluta da folha

de líquido em [m/s], enquanto que U na Equação (3.75) é a velocidade relativa entre o líquido e o gás em [m/s].

Presume-se que os ligamentos se formem a partir dos fragmentos da folha no ponto de ruptura (dado pela Equação (3.77)) e seu diâmetro d_L em [m] pode ser obtido a partir de um balanço de massa.

Para o caso de ondas curtas, assume-se que os ligamentos são formados a partir de rasgos na folha uma vez por comprimento de onda, o diâmetro resultante é dado por:

$$d_L = \sqrt{\frac{f_s h}{K_s}} \quad (3.78)$$

onde f_s é o fator de ligamento de onda curta, assumido como tendo valor de 16. O número da onda correspondente a máxima taxa de crescimento, K_s , é calculado pela solução da Equação (3.75).

Por outro lado, para o crescimento de ondas longas, assume-se que os ligamentos são formados a partir de rasgos na folha duas vezes por comprimento de onda, o diâmetro resultante é dado por:

$$d_L = \sqrt{\frac{f_l h}{K_s}} \quad (3.79)$$

onde f_l é o fator de ligamento de onda longa, assumido como tendo valor de 8. K_s agora é calculado por:

$$K_s = \frac{\rho_g U^2}{2 \sigma} \quad (3.80)$$

Como os ligamentos são orientados transversalmente à direção da vazão da folha, presume-se que o gás circundante tenha pouco efeito em sua ruptura e a tensão superficial seja responsável pela desestabilização. Além disso, o efeito da viscosidade do líquido é mover as

ondas mais instáveis para comprimentos de onda maiores sem alterar a faixa de instabilidade, que é dada por $kd_L/2 < 1$ para o regime de ruptura de Rayleigh, 1879. Assume-se aqui, como no trabalho de Dombrowski e Johns, 1963, que a ruptura ocorre quando a amplitude das ondas instáveis é igual ao raio de um ligamento, assim, uma gota será formada por comprimento de onda. Um balanço de massa fornece:

$$d_p^3 = \frac{3\pi d_L^2}{K_L} \quad (3.81)$$

Para um tamanho de gota d_p onde K_L é determinado por:

$$K_L d_L = \left[\frac{1}{2} + \frac{3\mu_l}{2(\rho_l \sigma d_L)^{1/2}} \right]^{-1/2} \quad (3.82)$$

que é o resultado de Weber para o número de ondas correspondente à taxa máxima de crescimento para a ruptura de uma coluna cilíndrica de líquido viscoso [Weber, 1931]. Substituindo a Equação (3.82) na Equação (3.81) temos o diâmetro da gota que é formado a partir dos ligamentos:

$$d_p = f_T d_L (1 + 3 Oh)^{1/6} \quad (3.83)$$

onde f_T é o fator de tamanho do diâmetro da gota, com valor definido de 1,88, e Oh é o número de Ohnesorge da partícula, definido como:

$$Oh = \frac{\sqrt{We}}{Re} = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \sigma d_p}} \quad (3.84)$$

onde We é o número de Weber com base na metade da espessura do filme e na densidade do gás e Re é o número de Reynolds com base na velocidade de escorregamento.

3.4.5 Modelo de Quebra Secundária – Reitz e Dawkar

A quebra de um jato líquido em gotículas é causada por uma combinação de diferentes mecanismos: turbulência na fase líquida, implosão de bolhas de cavitação e forças aerodinâmicas externas que atuam no jato líquido. Dependendo dos parâmetros de injeção, como a velocidade relativa entre líquido e gás, as densidades de líquido e gás e a viscosidade do líquido e a tensão superficial, a contribuição de cada um dos mecanismos acima para a quebra do *spray* varia.

Os regimes de separação geralmente são classificados em termos de números sem dimensão: Número de Weber e Número de Ohnesorge conforme as Equações (3.85) e (3.84), respectivamente:

$$We = \frac{\rho_g U_s^2 d_p}{\sigma} \quad (3.85)$$

Se uma gota é exposta a um fluxo de gás, uma deformação significativa começa com um número de unidade Weber. Acima de um determinado valor do número de Weber, a deformação das gotículas leva à ruptura. Normalmente, os regimes de separação são observados são os mostrados na Tabela 3.2.

Tabela 3.2: Regimes de quebra relacionados com o número de Werber. [Fonte: Reitz e Diwakar, 1987]

Regime de Rompimento	Número de Weber
<i>Vibrational</i>	$We < 12$
<i>Bag</i>	$12 < We < 50$
<i>Bag-and-Stamen</i>	$50 < We < 100$
<i>Sheet Stripping</i>	$100 < We < 350$
<i>Catastrophic</i>	$350 < We$

O modelo de Reitz e Diwakar, 1987, considerado neste trabalho, distingue dois regimes de rompimento: “*Bag Breakup*” e “*Stripping Breakup*”. A separação ocorre se um número Weber crítico da partícula tiver sido excedido. Independente do regime de separação,

supõe-se que, durante a separação, a seguinte relação descreva a redução do raio das partículas:

$$\frac{dr_p^0}{dt} = \frac{-(r_p^0 - r_p^n)}{t_{br}} \quad (3.86)$$

onde r_p^0 é o raio da gota antes do rompimento em [m], r_p^n é o novo raio da gota estável em [m] e t_{br} é o tempo de rompimento característico em [s]. Os valores para r_{est} e t_{br} são calculados para cada regime.

Para o regime *Bag Breakup* ($We > We_{crit}$):

$$t_{br} = C_1 \sqrt{\frac{\rho_l r_p^{03}}{2 \sigma}} \quad (3.87)$$

$$r_p^n = \frac{We_{crit} \sigma}{\rho_g U_s^2} \quad (3.88)$$

Para o regime *Stripping Breakup* ($We/\sqrt{Re} > C_{s1}$):

$$t_{br} = C_2 \frac{r_p^0}{U_s} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (3.89)$$

$$r_p^n = \frac{2 C_{s1}^2 \sigma^2}{\rho_g^2 U_s^3 \nu_g} \quad (3.90)$$

onde ν_g é a viscosidade cinemática do gás circundante em [m²/s].

As constantes do modelo C_1 , C_2 , We_{crit} e C_{s1} têm seus respectivos valores assumidos mostrados na Tabela 3.3.

Tabela 3.3: Constantes do modelo de quebra de Reitz e Diwakar e seus valores assumidos. [Fonte: Reitz e Diwakar, 1987]

Constante	Valor	Nome
C_1	π	Fator de tempo para <i>Bag Breakup</i>
C_2	20	Fator de tempo para <i>Stripping Breakup</i>
We_{crit}	6	Número de Weber crítico para <i>Bag Breakup</i>
C_{s1}	0,5	Fator do número de Weber para <i>Stripping Breakup</i>

3.5 Modelagem da Combustão

A abordagem direta da modelagem da combustão é encontrar um mecanismo cinético químico adequado para o combustível sob investigação, resolver as equações de transporte para todas as espécies no mecanismo e modelar o termo médio da fonte química. No entanto, um mecanismo químico realista pode envolver dezenas de espécies e várias centenas de reações elementares, mesmo para um simples hidrocarboneto combustível, como metano, por exemplo. Além disso, se for o interesse prever com precisão o NOx, a contabilização de todas as vias de reação possíveis se tornará uma necessidade e o mecanismo geral poderá ser reduzido apenas em uma extensão limitada. A resolução do grande número de equações de transporte envolvidas nesse caso, mesmo em RANS, não é viável. Outra preocupação é a de encontrar um modelo adequado para o termo da fonte química média ou filtrada, que é, em princípio, uma função não linear arbitrária das variáveis escalares. Portanto, é necessário que um modelo de combustão resolva os dois problemas com um método preciso, ainda que computacionalmente eficiente.

Para combustão não pré-misturada, os modelos baseados em fração de mistura escalar conservada oferecem uma descrição eficaz da química. O papel da fração da mistura na combustão não pré-misturada é discutido na Seção 3.5.1 como um prelúdio para o modelo clássico de *flamelet* laminar estável, discutido na Seção 3.5.2.

3.5.1 Abordagem pela Fração de Mistura Escalar Conservada

Foi mostrado na Seção 3.1 que, em uma reação química, as frações de massa do elemento são conservadas e suas equações são desprovidas do termo de fonte química. E sob

a suposição do número de Lewis unitário, difusividade e condições adiabáticas iguais, a entalpia também é conservada e sua equação (Equação (3.16)) assume uma forma idêntica à da fração mássica do elemento (Equação (3.12)). Esses escalares conservados na reação química podem ser representados por um único escalar normalizado: a fração de mistura, Z .

Para uma combustão não pré-misturada de oxidante e combustível, a fração de mistura é simplesmente a fração de massa da corrente de combustível local, com um valor de unidade na corrente de combustível e zero na corrente do oxidante. Uma relação entre fração de mistura e variáveis escalares reativas (frações mássicas de espécies, temperatura etc.) pode ser especificada por meio de modelos termoquímicos e informações completas sobre o estado químico podem ser obtidas a um custo computacional significativamente reduzido. Isso forma a base da abordagem da fração de mistura escalar conservada.

3.5.1.1 Modelo para Química de Sistemas

Os modelos usados para estabelecer a relação entre o estado químico e a fração de mistura são baseados no pressuposto geral da química rápida, condição em que a cinética química é infinitamente rápida em comparação com outros processos no escoamento. O mais simples dos modelos é o modelo *Flame Sheet* (também conhecido como limite de Burke-Schumann), em que a química é descrita por uma reação irreversível em uma única etapa e as variáveis escalares reativas são determinadas diretamente a partir da estequiometria da reação, sem taxa de reação ou informações sobre equilíbrio químico requeridos.

O modelo *Flame Sheet* requer um esforço mínimo de cálculo, mas limita-se à previsão de apenas espécies principais da reação de etapa única. Ele não fornece informações sobre espécies intermediárias ou efeitos de dissociação, resultando frequentemente em uma previsão excessiva nas temperaturas da chama. O modelo de química de equilíbrio assume que a química é rápida o suficiente para que o equilíbrio químico sempre exista no nível molecular. As variáveis escalares reativas são expressas em função da fração da mistura usando a minimização da energia livre de Gibbs. Este modelo oferece a vantagem de prever espécies intermediárias, mesmo sem o conhecimento de dados detalhados da taxa cinética química. Em cada um desses modelos, as variáveis escalares reativas são expressas apenas em função da fração de mistura:

$$\phi = \phi(Z); \phi = \rho, T, Y_\alpha \quad (3.91)$$

Em escoamentos turbulentos, a relação instantânea entre a fração de mistura e os escalares reativos é não linear devido às flutuações. Portanto, as variáveis escalares médias não podem ser obtidas pela relação da Equação (3.91)(3.92) através simples substituição de uma fração de mistura média \tilde{Z} , ao invés de Z . Para isso, é introduzida uma Função de Densidade de Probabilidade (PDF – *Probability Density Function*) de forma presumida $P(Z)$, e as variáveis escalares reativas médias no campo turbulento são obtidas a partir de:

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \phi(Z)P(Z)dZ \quad (3.92)$$

3.5.2 Modelo de Flamelet Laminar Estável

O modelo *flamelet* laminar é considerado uma versão sem equilíbrio do limite clássico de Burke-Schumann [Peters, 1984, 2000], descrevendo a interação da química com a turbulência, aproximando-se do limite de Burke-Schumann assintoticamente, no limite de reações rápidas (grande número de Damköhler). Linan, 1961 foi o primeiro a incorporar os efeitos de não equilíbrio em chamas de difusão analisando a estrutura interna da fina chama laminar usando uma descrição assintótica com um alto número de Damköhler como parâmetro de expansão. Neste modelo, os estados químicos de equilíbrio, que são obtidos exclusivamente a partir da termoquímica, são substituídos por soluções de equações unidimensionais, estáveis e de reação-difusão, denominadas equações de *flamelet*. Estas soluções representam as *flamelets* de difusão laminar.

O modelo presume que a combustão ocorra em chapas finas com estrutura interna chamada *flamelet* de difusão laminar. A chama turbulenta em si é tratada como um conjunto dessas *flamelets*, localmente unidimensionais, embutidas no campo de escoamento turbulento, como mostra a Figura 3.4 [Bray e Peters, 1994; Peters, 1984, 1986, 2000; Peters e Donnerhack, 1981].

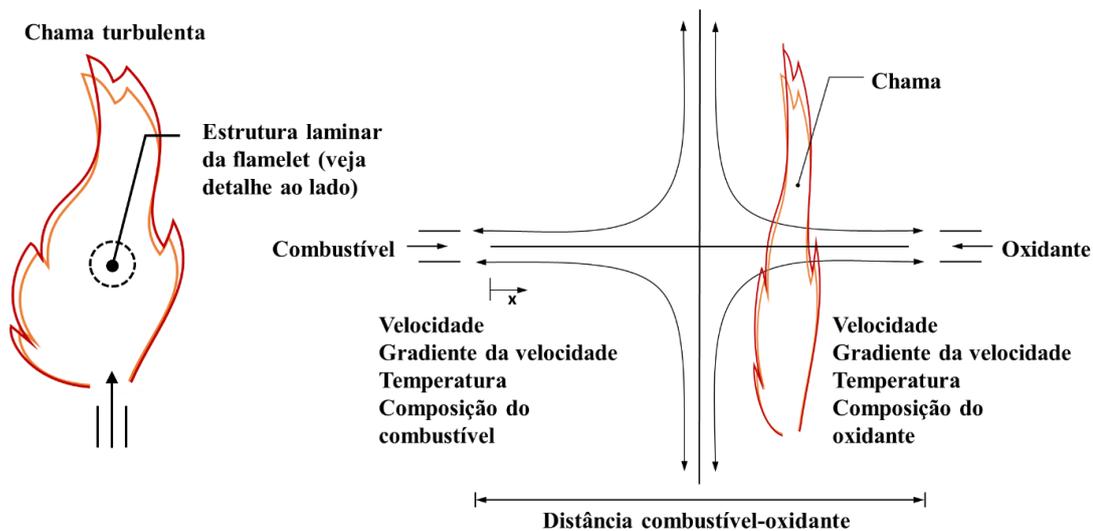


Figura 3.4: Demonstrativo de *flamelet* de difusão de contrafluxo laminar.

Um tipo de chama laminar comum usada para representar um *flamelet* em um escoamento turbulento é a chama de difusão de contrafluxo (Figura 3.4). Essa geometria consiste em jatos axissimétricos de combustível e oxidante opostos. À medida que a distância entre os jatos é diminuída e/ou a velocidade dos jatos aumenta, a chama é tensionada e se afasta do equilíbrio químico até que seja finalmente extinta. A fração mássica das espécies e campo de temperatura podem ser medidos em experimentos, ou, mais comumente, calculados. Para o último, existe uma solução auto semelhante, e as equações de governo podem ser simplificadas para uma ao longo do eixo dos jatos de combustível e oxidante, onde cálculos químicos complexos podem ser executados de maneira acessível.

Na chama laminar de contrafluxo, a fração de mistura diminui da unidade no jato de combustível para zero no jato oxidante. Se a fração mássica das espécies e a temperatura ao longo do eixo são mapeadas do espaço físico para o espaço da fração da mistura elas podem ser descritas unicamente por dois parâmetros: a fração de mistura e a taxa de deformação (ou, equivalentemente, a dissipação escalar, χ , que representa totalmente a influência do campo de escoamento turbulento na estrutura do *flamelet*). Portanto, variáveis escalares reativas médias turbulentas podem ser calculadas integrando as *flamelets* laminares com o PDF conjunto da fração de mistura e taxa de dissipação escalar, eliminando a necessidade de resolver pequenas escalas químicas de tempo e comprimento em cálculos de escoamento turbulento, tornando o esforço numérico bastante econômico.

Essa redução da química complexa para duas variáveis permite que os cálculos da *flamelet* sejam pré-processados e armazenados em tabelas de consulta. Ao pré-processar a química, os custos computacionais são reduzidos consideravelmente.

As equações de equilíbrio, métodos de solução e cálculos de amostra da chama de difusão laminar de contrafluxo podem ser encontrados em várias referências. Revisões e análises abrangentes são apresentadas em Bray e Peters, 1994 e Dixon-Lewis, 1990.

3.5.2.1 Equações de *Flamelet*

As equações de *flamelet* foram derivadas por Peters, 1984 para descrever a estrutura difusiva reativa nas proximidades da superfície da chama em função da fração da mistura.

A base dessa modelagem, é que, sob um certo conjunto de suposições simplificadoras, o estado termoquímico instantâneo do fluido está relacionado a uma quantidade escalar conservada, conhecida como fração de mistura, Z , que pode ser escrita em termos das frações de massas elementares como [Peters, 1984; Sivathanu e Faeth, 1990]:

$$Z = \frac{Z_C}{Y_{C,1}} = 1 - \frac{Z_O}{Y_{O,2}} \quad (3.93)$$

onde Z_C e Z_O se referem as frações mássicas de combustível e oxidante na mistura não reagente, respectivamente, e $Y_{C,1}$ e $Y_{O,2}$ são as frações mássicas de combustível e oxidante, respectivamente, onde 1 indica corrente de combustível e 2 representa corrente de oxidante.

A derivação das equações é baseada em duas etapas. Na primeira etapa, é introduzida uma transformação coordenada, aplicada na superfície da chama. Isso é ilustrado na Figura 3.5 para uma chama de difusão de jato turbulento de duas alimentações.

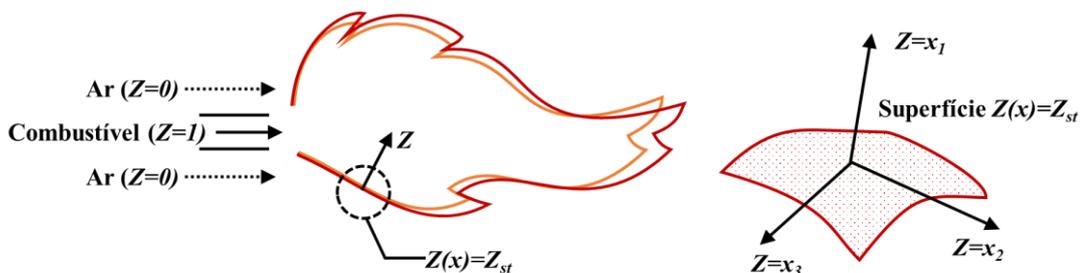


Figura 3.5: Superfície de mistura estequiométrica em um chama de difusão turbulenta. Na imagem, o subíndice *st* significa estequiométrico.

Uma chama pode ser vista como um conjunto de estruturas unidimensionais finas, localmente incorporadas no campo de escoamento turbulento. Cada elemento da frente da chama pode então ser visto como uma pequena chama laminar, chamada *flamelet* (POINSOT e VEYNANTE, 2001; LIBBY e WILLIAMS, 1994). Fisicamente, a estrutura da chama é considerada localmente unidimensional e depende apenas da coordenada normal da frente da chama.

Uma equação de campo para a fração de mistura, responsável por determinar a superfície da chama, pode ser obtida pela soma de todas as equações de conservação de espécies e é dada (assumindo que a difusividade seja igual e o número de Lewis seja unitário):

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j Z) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \quad (3.94)$$

Embora a suposição de difusividades iguais seja problemática para fluxos laminares, é geralmente aceitável para fluxos turbulentos, onde a convecção turbulenta supera a difusão molecular. Os termos fontes das reações químicas nas equações das espécies são cancelados, uma vez que os elementos são conservados em reações químicas, e, portanto, a fração de mistura é uma quantidade conservada.

A solução da equação para a fração da mistura fornece conhecimento sobre sua distribuição em função do espaço (x), a partir de agora, a superfície da chama definida como a superfície da fração da mistura estequiométrica, Z_{st} , pode ser obtida definindo-se:

$$Z(x) = Z_{st} \quad (3.95)$$

A combustão ocorre essencialmente nas proximidades desta superfície e essa camada fina com a região de mistura inerte circundante é denominada de *flamelet* de difusão laminar. Um sistema de coordenadas ortogonais é anexado a essa superfície estequiométrica (Figura 3.5), de modo que Z seja normal a superfície enquanto as duas coordenadas tangenciais se encontram dentro da superfície.

A transformação das coordenadas (x_1, x_2, x_3) para (Z_1, Z_2, Z_3) é então implementada nas equações de balanço instantâneas para espécies e temperatura. A coordenada x_1 , definida

como localmente normal para a superfície da chama, é substituída por uma nova variável independente Z , enquanto as coordenadas tangenciais x_2 e x_3 são as mesmas que as novas coordenadas Z_2 e Z_3 , respectivamente.

Na segunda etapa, as simplificações das equações são feitas considerando que as derivadas dos escalares reativos nas direções tangenciais são desprezíveis em comparação com as da direção normal ou Z . Isso se baseia no argumento clássico da camada limite para camadas finas. Como a temperatura, por exemplo, é quase constante ao longo da superfície da chama, $Z(x) = Z_{st}$, espera-se que os gradientes ao longo da superfície sejam pequenos em comparação com os normais a ela. Argumento semelhante é apresentado também para as concentrações de espécies químicas. Para um número unitário de Lewis, as equações da *flamelet* para espécies e energia são então expressas como, respectivamente:

$$\rho \frac{\chi}{2} \left(\frac{\partial^2 Y_\alpha}{\partial Z^2} \right) + \dot{\omega}_\alpha = 0 \quad (3.96)$$

$$\rho \frac{\chi}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} \right) = \frac{1}{c_p} \sum_{\alpha=1}^N h_\alpha \dot{\omega}_\alpha + \frac{\dot{Q}_{rad}}{c_p} \quad (3.97)$$

onde χ é a taxa de dissipação escalar instantânea em [s^{-1}], T é a temperatura em [K] e c_p é o calor específico em [kJ/(kg.K)].

A taxa de dissipação escalar desempenha um papel importante nos modelos de *flamelets* para combustão não pré-misturada. Pode ser interpretada como uma escala de tempo de difusão inversa e representa a influência do campo de fluxo na estrutura da chama local, incorporando implicitamente a influência da advecção e difusão normal na superfície da mistura estequiométrica, sendo determinada pela Equação (3.98).

$$\chi = 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_j} \right)^2 \quad (3.98)$$

Para resolver as equações de *flamelet*, a dependência funcional da taxa de dissipação escalar da fração da mistura é modelada de acordo com Peters, 1984, considerando a configuração da chama da difusão do contrafluxo laminar.

Na modelagem *flamelet* estável, é assumida uma queima quase estável e, portanto, as derivadas do tempo são negligenciadas nas equações do *flamelet*. No entanto, eles desempenham um papel importante [Mauss et al., 1990] durante transições rápidas entre estados totalmente queimados e extintos, que ocorrem durante a extinção e re-ignição e são retidos no caso de modelagem instável de *flamelets*.

3.5.2.2 Estatística da Fração de Mistura e da Taxa de Dissipação Escalar

As soluções das equações *flamelet* fornecem a estrutura termoquímica de uma chama em função da fração da mistura e da taxa de dissipação escalar. Em princípio, tanto a fração da mistura quanto a taxa de dissipação escalar são quantidades flutuantes e sua distribuição estatística precisa ser considerada para avaliação dos momentos estatísticos dos escalares reativos no fluxo turbulento. Desde que a articulação Favre PDF $\tilde{P}(Z, \chi_{st})$ seja conhecida e as equações constantes do *flamelet* sejam resolvidas para obter escalares reativos ϕ em função de Z e χ_{st} , os valores médios de Favre de ϕ podem ser obtidos de acordo com:

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \int_0^\infty \phi(Z; \chi_{st}) \tilde{P}(Z; \chi_{st}) d\chi_{st} dZ \quad (3.99)$$

No presente trabalho, a articulação PDF é modelada assumindo a independência estatística entre Z e χ_{st} presumindo a forma de PDFs como:

$$\tilde{P}(Z, \chi_{st}) = \tilde{P}(Z) \tilde{P}(\chi_{st}) \quad (3.100)$$

O formato da PDF mais amplamente difundido, e utilizado neste trabalho, *Beta*-PDF [Peters, 1984; Bray e Peters, 1994], possuindo a vantagem de que seus parâmetros podem ser relacionados algebricamente a fração de mistura, obtida da solução em CFD. Portanto, a forma de $\tilde{P}(Z)$ se presume ser o de uma função beta (*β -function*) dada pela Equação (3.101):

$$\tilde{P}(Z) = \frac{Z^{a-1}(1-Z)^{b-1}}{\int_0^1 Z^{a-1}(1-Z)^{b-1} dZ} \quad (3.101)$$

onde os coeficientes a e b são dados por:

$$a = \tilde{Z} \left[\frac{\tilde{Z}(1-\tilde{Z})}{\tilde{Z}^{n_2}} - 1 \right] \quad (3.102)$$

$$b = (1-\tilde{Z}) \left[\frac{\tilde{Z}(1-\tilde{Z})}{\tilde{Z}^{n_2}} - 1 \right] \quad (3.103)$$

A fração de mistura média, \tilde{Z} , e sua variância, \tilde{Z}^{n_2} , são obtidas de suas respectivas equações de transporte, respectivamente:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{Z}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right] \quad (3.104)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{Z}^{n_2}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{Z}^{n_2}}{\partial x_j} \right] + 2 \frac{\mu_t}{Sc_t} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2 + \bar{\rho} \tilde{\chi} \quad (3.105)$$

onde Sc_t é o número de Schmidt turbulento, assumindo valor de 0,9.

A taxa de dissipação escalar média, $\tilde{\chi}$, é obtida relacionando-a com as flutuações escalares médias, \tilde{Z}^{n_2} , e com a escala de tempo turbulento médio, $\tilde{\varepsilon}/\tilde{k}$, [Jones e Whitelaw, 1982]:

$$\tilde{\chi} = 2 \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{Z}^{n_2} \quad (3.106)$$

a qual inclui os efeitos de tensão, bem como as flutuações das frações de mistura.

A composição média do fluido é calculada em função da fração média da mistura, da variação da fração da mistura e da taxa de dissipação escalar por pesquisa em bibliotecas *flamelets* através de:

$$\tilde{Y}_\alpha = \tilde{Y}_\alpha(\tilde{Z}, \tilde{Z}^{\prime 2}, \tilde{\chi}_{st}) = \int_0^1 Y_\alpha(Z, \tilde{\chi}_{st}) \cdot \tilde{P}(Z) dZ \quad (3.107)$$

A integração sobre a função PDF não é realizada durante o cálculo CFD, mas é refletida na biblioteca do *flamelet*, ou seja, o CFD consulta os valores pré-integrados da biblioteca.

Para reduzir consumo computacional, as equações do *flamelet* são resolvidas apenas para a região onde ocorre a combustão, sendo essa região determinada pelo valor local da fração da mistura.

3.5.2.3 Biblioteca *Flamelet*

Para um caso de equilíbrio, a fração de mistura, a temperatura média, a densidade e a fração de espécies são funções de \tilde{Z} e $\tilde{Z}^{\prime 2}$ somente. Um tempo computacional significativo pode ser economizado computando essas integrais uma vez, armazenando-as em uma tabela de consulta e recuperando-as durante a simulação. Desta forma, o solucionador CFD procura os valores pré-integrados na chamada biblioteca *flamelet*.

É importante ressaltar que, como a PDF é uma função apenas dos dois primeiros momentos \tilde{Z} e $\tilde{Z}^{\prime 2}$, dada a previsão do solucionador de \tilde{Z} e $\tilde{Z}^{\prime 2}$ em cada ponto do campo de escoamento, a forma assumida do PDF pode ser calculada e usada como função de ponderação para determinar os valores médios das frações de massa das espécies, densidade e temperatura usando a Equação (3.100).

A Figura 3.6 ilustra um exemplo do conceito de tabelas de consulta geradas para um sistema de fração de mistura única. Dado o valor previsto do solucionador CFD para \tilde{Z} e $\tilde{Z}^{\prime 2}$ em um ponto do escoamento no domínio, o valor médio das frações de massa, densidade ou temperatura nesse ponto podem ser obtidos por interpolação na tabela.

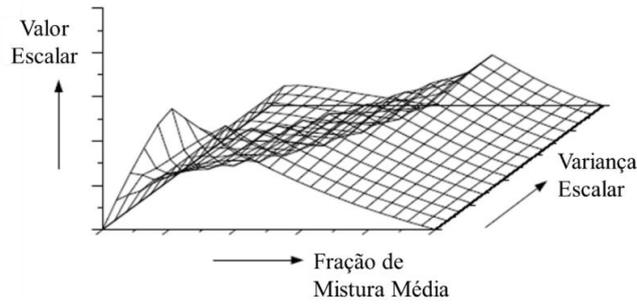


Figura 3.6: Exemplo de representação visual de uma tabela de consulta para o valor escalar (valor médio das frações mássicas, densidade ou temperatura) como função da fração média da mistura e da variância da fração de mistura. [Fonte: Ansys INC, 2020]

A biblioteca *flamelet* utilizada neste trabalho fornece as frações mássicas das espécies Y_α em função da fração de mistura, variância da fração de mistura e taxa de dissipação escalar, da Equação (3.107).

O código para geração da biblioteca *flamelet* utilizado neste trabalho é o *Representative Interactive Flamelet* (RIF) proposto originalmente por Pitsch et al., 1996, chamado no ANSYS CFX de CFX-RIF *code* [Barths et al., 1998a, 1998b; Pitsch et al., 1996; Pitsch e Peters, 1998].

A ideia principal do modelo RIF é resolver as equações de *flamelet* de maneira acoplada às equações governantes do escoamento, conforme mostrado na Figura 3.7. O código CFD fornece parâmetros do ponto do campo de fluxo local para o código *flamelet*. As equações *flamelet* são resolvidas com base nesses parâmetros e a biblioteca *flamelet* retorna as frações mássicas das espécies. Na biblioteca *flamelet*, para cada ponto, apenas a fração da mistura varia, a taxa de dissipação escalar é fixa. Por isso, foram geradas combinações para diversos valores (dentro de uma determinada faixa) de taxa de dissipação escalar.

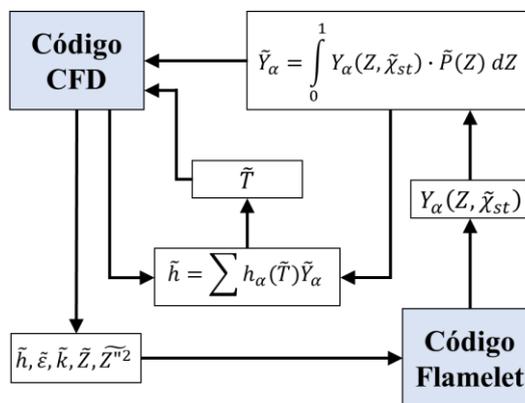


Figura 3.7: Acoplamento entre o código CFD e o código *flamelet* do conceito de RIF.

A biblioteca *flamelet* foi gerada com 100 pontos no espaço da fração de mistura e 10 etapas da variação da fração de mistura normalizada. Para a taxa de dissipação escalar, foram 20 etapas, com valor mínimo de 1×10^{-2} [s^{-1}] e máximo de 10 [s^{-1}]. Esses valores são padrões do *software* e considerados suficientes para a maioria dos problemas [Ansys, 2020]. Além disso, foi gerada para condição de pressão atmosférica, temperatura do combustível e oxidante 300 [K] e 600 [K], respectivamente.

Mesmo com essa afirmação foi realizado um teste com 3 tamanhos de bibliotecas, a padrão (citada acima), uma no tamanho máximo permitido pelo *software* e outra intermediária. O teste foi realizado na mesma situação experimental a qual será feita a validação da combustão na Seção 6.2. Os resultados de temperatura comparados apontaram para uma diferença máxima de temperatura de 1,13%, na média a diferença é de 0,27%. Portanto, como as diferenças são pequenas, optou-se por utilizar os valores padrões do *software* por proporcionarem menor custo computacional.

Para representar o diesel combustível, foi adotado um combustível substituto 100% n-decano ($C_{10}H_{22}$) [Reitd et al., 1977]. O mecanismo químico utilizado é o único disponível no *software* Ansys CFX e compreende 883 reações elementares entre 120 espécies químicas.

3.6 Modelagem da Radiação Térmica

O efeito da radiação pode ser detectado em diversas situações, entretanto, sua importância é elevada quando os níveis de temperatura absoluta dos corpos e meios são mais altos [Siegel e Howell, 2002]. Desta forma, processos como a combustão em fornalhas e câmaras de combustão, que ocorrem a altas temperaturas, dependem fortemente da transferência radiativa, logo seu entendimento é de fundamental importância.

A radiação é afetada por diversos fatores e entre os mais significativos apresentam-se as condições de superfície, características direcionais, e o meio pelo qual a radiação é propagada. Os meios que possuem a capacidade de interferir na radiação são denominados meios participantes e toma-se como exemplo a atmosfera rica em H_2O e CO_2 , produtos da combustão de hidrocarbonetos.

A simulação numérica é crucial para analisar a transferência radiativa em aplicações reais, pois as soluções analíticas existem apenas para casos simples devido à complexidade matemática da equação da transferência radiativa e a configurações complexas dos problemas.

No entanto, a simulação numérica da transferência radiativa em meios participantes geralmente consome tempo e requer um esforço computacional considerável devido à complexidade e alta dimensionalidade do processo, que contém dimensões adicionais de uma frequência e duas dimensões angulares além das três dimensões espaciais comuns.

Com isso, muitos esforços foram dedicados para desenvolver métodos eficazes para a análise da transferência radiativa em meios participantes. Geralmente, os métodos podem ser classificados em dois grupos: o primeiro grupo é baseado em simulação estocástica, que inclui várias implementações do Método Monte Carlo (MCM – *Monte Carlo Method*) [Howell, 1968; Farmer e Howell, 1994; Siegel e Howell, 2002], o Método DESOR [Zhou e Cheng, 2004]; o segundo grupo são os métodos determinísticos, como o Método de Harmônicas Esféricas (ou aproximação PN) [Mengüç e Viskanta, 1985; Larsen et al., 2002], Método das Ordenadas Discretas (DOM – *Discrete Ordinate Method*) [Carlson e Lathrop, 1965; Fiveland, 1988; Coelho, 2002^a], Método dos Volumes Finitos (FVM – *Finite Volume Method*) [Raithby e Chui, 1990; Chai e Lee, 1994; Murthy e Mathur, 1998; Asllanaj e Fumeron, 2010], Método dos Elementos Finitos (FEM – *Finite Element Method*) [Kisselev et al., 1994], Método do Elemento de Radiação [Maruyama, 1993], Método dos Elementos Espectrais [Zhao e Liu, 2006], Métodos Espectrais [Li et al., 2008] e Métodos Sem Malha [Sadat, 2006; Liu e Tan, 2007], para citar alguns.

Portanto, são diversos os modelos de radiação térmica disponíveis na literatura, com diferentes níveis de detalhamento do fenômeno físico, ficando por conta de o pesquisador determinar o balanço desejado entre refinamento dos resultados e disponibilidade de tempo e recursos computacionais. Quando consideradas a emissão e a absorção radiativa do meio participante, uma Equação de Transferência Radiativa (RTE – *Radiative Transfer Equation*) deverá ser resolvida no espectro e no espaço para que possa ser determinada a taxa de transferência de calor devida a radiação térmica \tilde{Q}_{rad} na equação da conservação da energia (Equação (3.29)). Na Seção 3.6.1, a seguir, é apresentada uma revisão da RTE.

Neste trabalho utilizou-se o DTRM como modelo de transferência de calor por radiação, sendo apresentado na Seção 3.6.2.

3.6.1 Equação da Transferência Radiativa – RTE

A Equação da Transferência Radiativa é uma equação integral–diferencial de primeira ordem que governa a propagação da radiação em meios participantes com índice de refração uniforme (feixe de luz se propaga através de linhas retas). É responsável por descrever o equilíbrio geral do transporte de energia radiativa no meio, levando em consideração as principais interações de atenuação e aumento pelos processos de absorção, dispersão (espalhamento) e emissão de radiação [Howell et al., 2016; Modest, 2013].

A descrição de fótons da luz é usada, pois é comumente aplicada à derivação fenomenológica do RTE. Note-se que a luz é de fato onda eletromagnética e a descrição rigorosa da transferência radiativa deve ser baseada nas equações de Maxwell.

Existem muitas formas variantes da RTE, podendo ser formulada sob diferentes sistemas de coordenadas e mostrada em diferentes formas para facilitar a solução de problemas específicos. A coordenada no caminho do raio é o sistema de coordenadas natural para transferência de luz. Nesta, a RTE é formulada na coordenada unidimensional do caminho do raio Lagrangeano primeiro. A forma Lagrangeana da RTE é a mais clara fisicamente, na forma matemática mais simples e considerada a formulação mais geral.

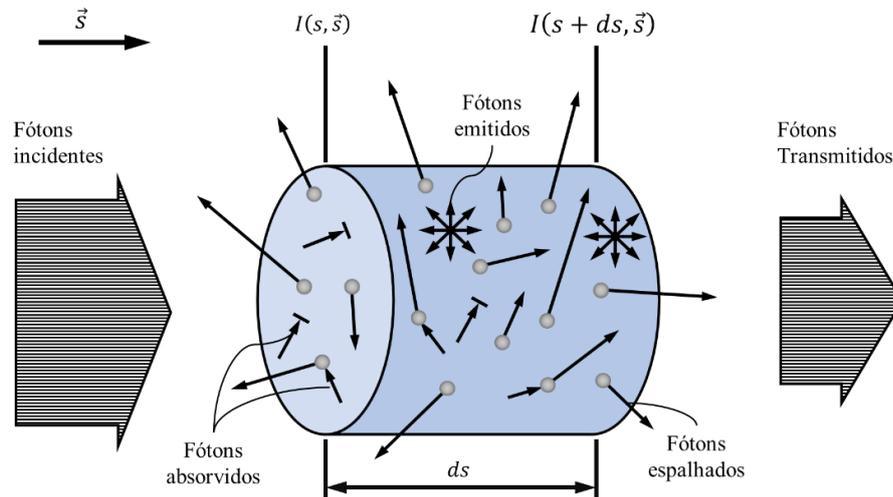


Figura 3.8: Esquema do transporte de luz (fótons) no meio participante. O feixe de fótons é atenuado pela absorção e espalhamento e aumentado pelos processos de emissão e espalhamento.

Um volume de controle em forma de cilindro ao longo do caminho do raio entre s e $s+ds$ é considerado como mostrado na Figura 3.8. Um feixe de luz entra na superfície

esquerda em s e sai em $s+ds$. A superfície final do cilindro é perpendicular à direção de transferência de raios \vec{s} com uma área de dA . A intensidade radiativa ao longo da direção do caminho do raio pode ser expressa como $I_\lambda(s, \vec{s})$. No mesmo local, a intensidade radiativa de qualquer outra direção $\vec{\Omega}$ pode ser expressa como $I_\lambda(s, \vec{\Omega})$. Quando o feixe de luz (fótons) se move da localização s para $s+ds$, o balanço da potência radiativa espectral Q_λ em [W], pode ser expresso da seguinte maneira:

$$\Delta Q_\lambda = \underbrace{(\Delta Q_{\lambda,abs} + \Delta Q_{\lambda,ate-esp})}_{\text{Atenuação}} + \underbrace{(\Delta Q_{\lambda,emit} + \Delta Q_{\lambda,aum-esp})}_{\text{Aumento}} \quad (3.108)$$

onde ΔQ_λ é a variação da potência radiativa espectral ao longo do caminho do raio diferencial ds , que, por definição, pode ser calculado como:

$$\Delta Q_\lambda = [I_\lambda(s + ds, \vec{s}) - I_\lambda(s, \vec{s})] dAd\Omega \quad (3.109)$$

onde $d\Omega$ é o ângulo sólido diferencial em [sr].

Na Equação (3.108), os quatro termos do lado direito da equação representam as contribuições dos mecanismos básicos de interação no meio participante, onde $\Delta Q_{\lambda,abs}$ é a absorção, $\Delta Q_{\lambda,aum-esp}$ e $\Delta Q_{\lambda,ate-esp}$ são o espalhamento, aumentando e atenuando, respectivamente, e $\Delta Q_{\lambda,emit}$ é o processo de emissão, todos são dados em [W]. O processo de absorção transfere a energia radiativa para a energia cinética dos transportadores de calor (por exemplo, elétrons), que apenas atenuam a energia radiativa. O processo de emissão térmica apenas aumenta a potência radiativa. Quanto ao processo de espalhamento, ele pode atenuar e aumentar a potência radiativa, dependendo se o espalhamento do feixe de luz atual $I_\lambda(s, \vec{s})$ se dá para outras direções, por exemplo, o processo de espalhamento saindo ($\Delta Q_{\lambda,ate-esp}$) de outra direção $I_\lambda(s, \vec{\Omega})$ para a direção de transferência atual \vec{s} .

A potência radiativa atenuada no volume de controle é proporcional à potência radiativa incidente, que para os processos de absorção e dispersão pode ser estabelecida respectivamente como:

$$\Delta Q_{\lambda,abs} = -\kappa_{abs,\lambda} I_{\lambda}(s, \vec{s}) ds dA d\Omega \quad (3.110)$$

$$\Delta Q_{\lambda,ate-esp} = -\kappa_{esp,\lambda} I_{\lambda}(s, \vec{s}) ds dA d\Omega \quad (3.111)$$

onde $\kappa_{abs,\lambda}$ e $\kappa_{esp,\lambda}$ são os coeficientes de absorção e espalhamento em $[m^{-1}]$, respectivamente. A radiação emitida no volume de controle é estabelecida com base na intensidade radiativa do corpo negro conforme:

$$\Delta Q_{\lambda,emit} = \kappa_{abs,\lambda} I_{cn,\lambda}[T(s)] ds dA d\Omega \quad (3.112)$$

na qual a lei de radiação térmica de Kirchhoff é aplicada, $\kappa_{abs,\lambda} ds$ pode ser visto como a emissividade da camada de meio com espessura ds , $I_{cn,\lambda}$ é a intensidade radiativa espectral do corpo negro em $[W/(m^2.sr.\mu m)]$. Para um corpo negro em um meio transparente com índice de refração n_{λ} , $I_{cn,\lambda}$ é calculado a partir de [Modest, 2013]:

$$I_{cn,\lambda} = \frac{2\hbar c^2 n_{\lambda}^2}{\lambda_v^5 (e^{\hbar c/\lambda k_B T} - 1)} \quad (3.113)$$

onde \hbar é a constante de Planck com valor de $6,626.10^{-34}$ [J.s], c é a velocidade da luz no vácuo com valor de $1,998.10^8$ [m/s], λ_v é o comprimento de onda do vácuo em [m] e k_B é a constante de Boltzmann com valor de $1,3807.10^{-23}$ [J/K].

O processo de espalhamento geralmente muda a direção dos fótons incidentes. Essa redistribuição angular de fótons incidentes pelo processo de espalhamento é descrita pela função de fase de espalhamento, que expressa a razão de potência radiativa espalhada para cada direção por ângulo sólido. Por definição, a função de fase de espalhamento $\Phi_{\lambda}(\cos \Theta)$ [sr^{-1}] deve satisfazer a conservação de energia de espalhamento, que é frequentemente chamada de relação de normalização e escrita como:

$$\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi_{\lambda}(\cos \Theta) d\Omega = 1 \quad (3.114)$$

onde $\cos \theta = \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}$ é o cosseno entre o ângulo incidente $\vec{\Omega}'$ e a direção do espalhamento $\vec{\Omega}$.

Para um feixe de luz com intensidade radiativa $I_\lambda(\vec{\Omega}', s)$ incidente em um volume de controle diferencial com volume dV , a potência total dispersa no volume de controle é $\kappa_{esp,\lambda} I_\lambda(\vec{\Omega}', s) dV d\Omega'$ de acordo com a Equação (3.111). O aumento total da potência radiativa por espalhamento de todas as direções pode ser calculado pela integração como:

$$\Delta Q_{\lambda,aum-esp} = \frac{\kappa_{esp,\lambda}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(s, \vec{\Omega}') \Phi_\lambda(\vec{\Omega}' \cdot \vec{s}) d\Omega' ds dA d\Omega \quad (3.115)$$

Por substituição das Equações (3.110), (3.111), (3.112) e (3.115) na Equação (3.108) a forma Lagrangeana da RTE é obtida:

$$\begin{aligned} \frac{dI_\lambda(s, \vec{s})}{ds} + (\kappa_{abs,\lambda} + \kappa_{esp,\lambda}) I_\lambda(s, \vec{s}) \\ = \kappa_{abs,\lambda} I_{cn,\lambda}[T(s)] + \frac{\kappa_{esp,\lambda}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(s, \vec{\Omega}') \Phi_\lambda(\vec{\Omega}' \cdot \vec{s}) d\Omega' \end{aligned} \quad (3.116)$$

3.6.2 Modelo de Transferência de Calor por Radiação – DTRM

O método DTRM (*Discrete Transfer Radiation Model* – Modelo de Transferência Discreta de Radiação) é baseado no rastreamento no domínio de raios representativos disparados a partir de superfícies delimitadoras (limites do domínio), onde a variação da intensidade é calculada ao longo do percurso do raio. A técnica foi desenvolvida por Shah, 1979 e depende da discretização da equação de transferência ao longo dos raios. O caminho ao longo de um raio é discretizado usando as seções formadas a partir da quebra do caminho nos limites do elemento. As quantidades físicas em cada elemento são consideradas uniformes.

A RTE é resolvida ao longo de cada raio e isso rastreia a mudança na intensidade da radiação ao longo do caminho do raio de um elemento limite para o outro. Quando se leva em conta o espalhamento, este é considerado isotrópico, permitindo a simplificação da Equação (3.116) por:

$$\begin{aligned} \frac{dI_\lambda(s, \vec{s})}{ds} = & -(\kappa_{abs,\lambda} + \kappa_{esp,\lambda})I_\lambda(s, \vec{s}) + \kappa_{abs,\lambda}I_{cn,\lambda}[T(s)] \\ & + \frac{\kappa_{esp,\lambda}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(s, \vec{\Omega}') d\Omega' + \dot{S}_{rad} \end{aligned} \quad (3.117)$$

onde \dot{S}_{rad} é o termo fonte da radiação em [W/m³].

No presente trabalho, os termos ligados ao espalhamento na Equação (3.117) são desconsiderados devido ao fato de estarem ligados diretamente ao tamanho de cada gota, o que necessitaria de uma relação do tamanho de gota com o espalhamento e pelo espectro de tamanho de gotas geradas pela atomização ser grande essa tarefa se torna difícil. Além do mais, as gotas sofrem evaporação rapidamente, não tendo um tempo de “vida” longo.

Para cada elemento de contorno, um hemisfério radiante é dividido em um número finito de ângulos sólidos e a intensidade através de um determinado ângulo sólido é representada por um único raio que é, na verdade, o principal pressuposto do modelo. O valor padrão do *software* para a discretização do ângulo sólido é de 8 ângulos discretos, neste trabalho, a fim de tornar a solução mais precisa, foram discretizado 32 ângulos discretos.

Esses raios devem ser traçados através do domínio da mesma maneira que os fótons seriam rastreados no modelo de Monte Carlo. Portanto, a descrição do modelo para Monte Carlo e Transferência Discreta é idêntica.

Para que os resultados sejam precisos, os elementos devem ser escolhidos para que o campo de radiação seja razoavelmente homogêneo dentro deles. Isso significa, por exemplo, que eles devem ser pequenos o suficiente para que a profundidade óptica de dispersão seja menor que a unidade em cada elemento.

3.6.3 Modelo Espectral de Gás Cinza – GC

O modelo espectral de Gás Cinza (GC) pressupõe que todas as quantidades de radiação são quase uniformes em todo o espectro; conseqüentemente, a intensidade de radiação é a mesma para todas as frequências. Portanto, a dependência da frequência na Equação (3.116) é eliminada, ficando a equação na seguinte forma, desconsiderando o espalhamento de radiação:

$$\frac{dI(s, \vec{s})}{ds} = -\kappa_{abs}I(s, \vec{s}) + \kappa_{abs}I_{cn}[T(s)] \quad (3.118)$$

O coeficiente de absorção, κ_{abs} , é prescrito para cada gás participante em separado. Para uma mistura de gases, o coeficiente de absorção total da mistura é dado pela soma dos coeficientes de absorção dos gases individuais, conforme:

$$\kappa_{abs,mg} = \sum_{g=1} p_g \kappa_{abs,g} \quad (3.119)$$

onde $\kappa_{abs,mg}$ é o coeficiente de absorção da mistura gasosa em $[m^{-1}]$ e p é a pressão parcial.

Este modelo é um dos mais simples e apresenta limitações, já que para uma espécie química gasosa o coeficiente de absorção sofre grande variação, em função do comprimento de onda. Entretanto trata-se de um modelo muito difundido que pode ser útil em várias aplicações de engenharia, além de que reduz significativamente o esforço computacional requerido. Vanz, 2017 e Taylor e Foster, 1974 verificaram bons resultados do método em comparação com outros modelos espectrais.

4 DISCRETIZAÇÃO NUMÉRICA

Soluções analíticas para as equações de Navier-Stokes existem apenas para os escoamentos mais simples sob condições ideais. Para obter soluções para escoamentos reais, uma abordagem numérica deve ser adotada, na qual as equações são substituídas por aproximações algébricas que podem ser resolvidas usando um método numérico.

Todas as equações de transporte apresentadas na modelagem matemática são resolvidas neste trabalho em regime permanente pelo Método dos Volumes Finitos (FVM – *Finite Volume Method*) através do software comercial ANSYS CFX 2019 R2. O FVM realiza um balanço de conservação da propriedade para cada volume de controle da malha computacional para obter a correspondente equação discreta, satisfazendo a conservação da propriedade a nível dos volumes de controle elementares.

No presente Capítulo, uma breve descrição do FVM foi apresentada na Seção 4.1. Na Seção 4.2, apresenta-se a estrutura numérica do código computacional RANS.

O critério de convergência adotado para a solução das simulações numéricas foi o RMS (*Root Mean Square* – Raiz Quadrática Média) o qual visa obter valores normalizados dos resíduos das equações. Estes resíduos são uma medida da dissimilaridade local de cada equação do volume de controle conservativo. Para as simulações numéricas computacionais, estabeleceu-se o valor de 10^{-6} para todos resíduos das variáveis transportadas.

Todas as simulações apresentadas neste trabalho foram feitas em uma *Workstation* equipada com 2 processadores Intel Xeon Gold 6138 com 20 núcleos físicos cada (totalizando 40 núcleos físicos), com frequência base de 2,0 GHz e frequência máxima de 3,7 GHz e 27,5 MB de *cache*. O computador possui 128 GB de memória RAM ECC com frequência de 2400 MHz.

4.1 Método dos Volumes Finitos

A discretização do método de volumes finitos de Patankar, 1980 envolve dividir o domínio contínuo em células discretas ou volumes finitos. As equações que regem o escoamento turbulento com reações químicas são numericamente integradas em cada volume, resultando em um conjunto de equações algébricas acopladas, cuja solução é uma aproximação à solução das equações contínuas em um conjunto de pontos ou nós discretos.

Cada célula ou volume finito constitui um nó e a solução calculada para cada nó é considerada representativa da solução dentro da célula.

A Figura 4.1 mostra o posicionamento relativo dos nós para escalares, componentes de velocidade u e v em uma malha escalonada. A extensão para três dimensões usa a mesma estrutura na direção z , com a adição do componente de velocidade w . Todas as variáveis escalares, incluindo a pressão, são avaliadas no nó de uma célula escalar, como por exemplo o ponto P nesta figura. Os componentes de velocidade são avaliados nos pontos de malha escalonados que se encontram no centroide das faces da célula escalar. O escalonamento da velocidade evita previsões fisicamente não realistas para campos de pressão oscilantes. Além disso, como as velocidades são geradas nas faces das células escalares, ele tem a vantagem adicional de evitar a interpolação de velocidades nos cálculos de transporte escalar.

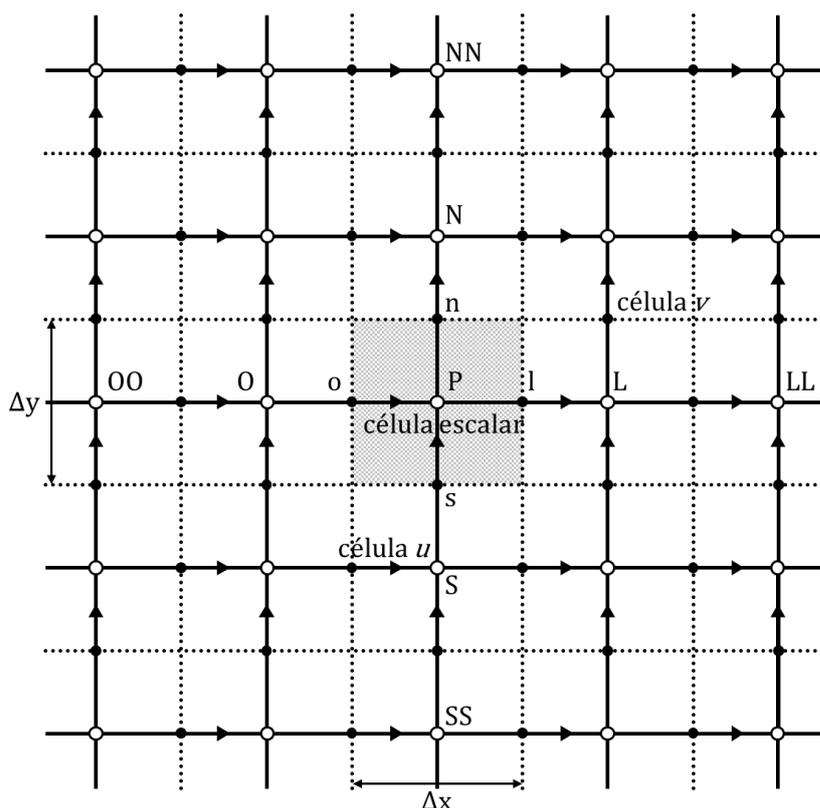


Figura 4.1: Posicionamento da malha escalonada e dos nós em duas dimensões. Círculos indicam nós escalares, setas horizontais indicam a componente de velocidade u e setas verticais indicam a componente de velocidade v . Exemplos de u , v e célula escalar são mostrados.

As equações governantes do escoamento turbulento com reações químicas em média de Favre ou filtradas, apresentadas anteriormente, apresentam mesma estrutura com termos semelhantes e, portanto, podem ser representadas por uma equação de transporte genérica:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{\phi}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j} \right) + \tilde{S}_\phi \quad (4.1)$$

onde $\tilde{\phi}$ representa qualquer variável transportada, Γ_ϕ é o coeficiente de difusão e \tilde{S}_ϕ é o termo fonte.

Integrando a Equação (4.1) sobre um volume de controle V , delimitado por uma superfície S e empregando o Teorema da Divergência de Gauss para converter integrais de volume envolvendo operadores de divergência e gradiente em integrais de superfície gera a seguinte forma:

$$\int_S \bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{\phi} dS_j = \int_S \Gamma_\phi \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j} dS_j + \int_V \tilde{S}_\phi dV \quad (4.2)$$

O vetor da área de superfície diferencial dS tem uma magnitude igual à área do elemento de superfície e direção correspondente à direção da normal externa para o elemento. Na Equação (4.2), o termo no lado esquerdo corresponde ao fluxo convectivo, o primeiro termo do lado direito é o fluxo difusivo e o último termo à direita corresponde à geração ou destruição da variável ϕ dentro do volume de controle, chamado de termo fonte. A discretização espacial envolve aproximar as integrais de volume e superfície nesta equação e aplicar a aproximação a cada célula para obter um conjunto de equações algébricas simultâneas em ϕ .

Na Figura 4.1, um exemplo de uma célula escalar P para a qual as integrais devem ser calculadas e seus vizinhos (indicados por L, O, N, S) e a um nível de distância dos vizinhos (indicados por LL, OO, NN e SS) foram mostrados no espaço bidimensional. A extensão dessa estrutura para três dimensões foi mostrada na Figura 4.2. A rotulagem dos vizinhos usa a seguinte convenção: Leste (L), Norte (N) e Acima (A) correspondem às direções x , y e z positivas respectivamente e Oeste (O), Sul (S) e Baixo (B) correspondem às direções

negativas x , y e z , respectivamente. As letras minúsculas l , n , e , s etc. referem-se aos pontos no centroide das respectivas faces da célula.

Para simplificar a notação, a formulação de fluxos é dada para uma face específica, como a face Leste ou Norte, e todos os resultados podem ser aplicados de maneira semelhante a outras faces.

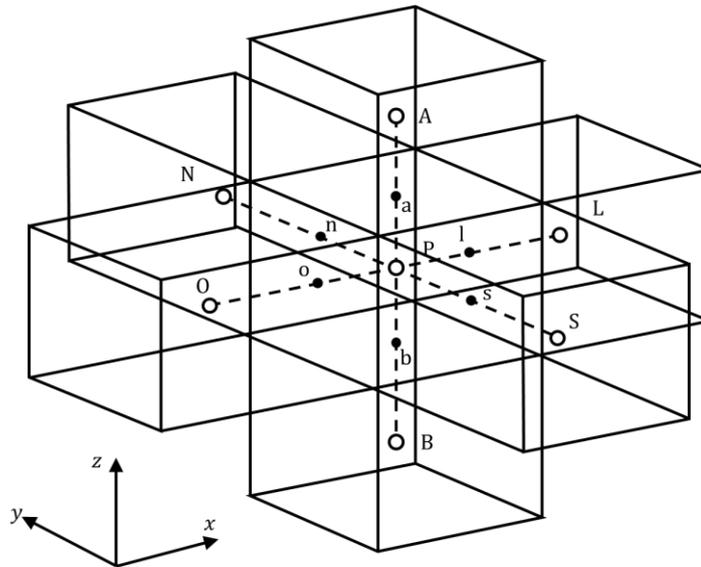


Figura 4.2: Célula de volume finito e sua vizinhança em três dimensões.

Muitas aproximações discretas desenvolvidas para CFD são baseadas em aproximações de expansão em série de funções contínuas (como a série de Taylor). A precisão da ordem da aproximação é determinada pelo expoente no espaçamento da malha ou no fator de tempo do maior termo na parte truncada da expansão em série, que é o primeiro termo excluído da aproximação. Aumentar a precisão da ordem de uma aproximação geralmente implica que os erros sejam reduzidos mais rapidamente com o refinamento do tamanho da malha ou do intervalo de tempo. Infelizmente, além de aumentar a carga computacional, as aproximações de alta ordem também são geralmente menos robustas (isto é, menos numericamente estáveis) do que suas contrapartes de baixa ordem. O ANSYS CFX usa aproximações precisas de segunda ordem, tanto quanto possível.

4.2 Estrutura Numérica do RANS

Para cálculos RANS em regime permanente, a equação genérica de transporte integrada sobre um volume de controle é dada pela Equação (4.1). Portanto, é necessário ter

em conta apenas a discretização espacial dos termos advectivos, difusivos e fontes em cada uma das equações que governam o problema. Como todas as escalas de turbulência são modeladas em RANS, a conversão da Equação (4.1) em uma forma algébrica linear simples necessita de equações de transporte adicionais, exigidas pelo modelo de turbulência. O modelo $k-\varepsilon$ adotado neste trabalho requer a solução de duas equações adicionais, uma para a energia cinética turbulenta e outra para sua taxa de dissipação. Essas quantidades são armazenadas nos nós escalares na malha escalonada (Figura 4.1).

O termo de advecção requer que os valores dos pontos de integração sejam aproximados em termos seus valores nodais. Neste trabalho adotou-se o Esquema de Alta Resolução (*High Resolution Scheme*) como função de forma para essa aproximação. A metodologia é baseada nos princípios de limite usados por Barth e Jespersen, 1989. Nesta abordagem, é alcançada uma precisão de ordem superior nas faces das células através de uma expansão em série de Taylor da solução centrada na célula sobre o centroide da célula.

Para avaliar as derivadas especiais para os termos de difusão, os gradientes da função de forma foram avaliados no local real de cada ponto de integração, ou seja, foi utilizada a interpolação tri-linear verdadeira.

Assim como os termos de difusão, a função de forma utilizada para interpolar a pressão pode ser avaliada no local real de cada ponto de integração, ou seja, interpolação tri-linear verdadeira.

4.2.1 Acoplamento Pressão-Velocidade

Nas equações do momento acoplado, o gradiente de pressão aparece como uma variável desconhecida. Em escoamentos com reações químicas compressíveis, a equação de continuidade pode ser usada como uma equação de transporte para densidade, enquanto uma equação de energia pode ser usada como uma equação de transporte para temperatura e pressão, podendo então ser obtida a partir da densidade e temperatura usando a equação de estado. No entanto, em problemas de escoamentos com reações químicas incompressíveis, não há equação para a pressão, pois a densidade por definição é independente da pressão e é apenas uma função da temperatura. Nesse caso, o acoplamento entre pressão e velocidade introduz uma restrição na solução do campo de escoamento. Desde que um campo de pressão correto seja aplicado nas equações de momento, o campo de velocidade resultante deve

satisfazer a continuidade. Esse problema geralmente é superado com a adoção de uma estratégia de solução iterativa.

Solucionadores segregados empregam uma estratégia de solução onde as equações de momento são resolvidas primeiro, usando uma pressão calculada, e é obtida uma equação para a correção da pressão [Patankar, 1980]. Devido à natureza de “adivinhar e corrigir” do sistema linear, normalmente é necessário grande número de iterações, além da necessidade de selecionar criteriosamente os parâmetros de relaxamento para as variáveis.

O ANSYS CFX usa a estratégia de um solucionador acoplado, baseado no trabalho de Rhie e Chow, 1982 e modificado por Majumdar, 1988 para remover a dependência da solução em regime estacionário no intervalo de tempo, que resolve as equações hidrodinâmicas (para u, v, w, p) como um sistema único. Para problemas em regime estacionário, o intervalo de tempo se comporta como um “parâmetro de aceleração”, com o fim de orientar as soluções aproximadas de maneira fisicamente baseada em uma solução em regime estacionário. Isso reduz o número de iterações necessárias para a convergência em regime estacionário ou para calcular a solução para cada etapa do tempo em uma análise transiente.

4.2.2 Solução das Equações RANS

A sequência de operações envolvidas no algoritmo de solução é a seguinte:

1. Estimativa inicial para todas as variáveis;
2. Resolve as equações discretizadas da conservação da quantidade de movimento;
3. Resolve as frações volumétricas (somente no modelo VOF);
4. Resolve a radiação térmica;
5. Resolve a equação de conservação da energia;
6. Resolve as equações de transporte do modelo de turbulência e calcula a viscosidade turbulenta;
7. Resolve outras equações escalares (relevante ao modelo de combustão);
 - a. Resolve a equação de transporte para a fração de mistura média;
 - b. Resolve a equação de transporte para a variação da fração de mistura;
8. Resolve a fração mássica média das espécies;

- a. Computa a taxa de dissipação escalar média a partir da equação do modelo;
 - b. A partir do valor conhecido de fração de mistura média, sua variância normalizada e a taxa de dissipação escalar média, faz a leitura da biblioteca de consulta *flamelet* pré-integrada para obter os valores de fração mássica das espécies através de interpolação de dados;
 - c. Calcula as frações mássicas média das espécies através do PDF;
9. Atualiza as propriedades do fluido na equação da energia;
 10. Resolve as partículas completamente acopladas;

Após, redefine as condições iniciais com os novos valores e repete da etapa 2 a 10 até que atinja a convergência.

A solução de cada conjunto de equações presentes no modelo computacional consiste em duas operações numéricas intensivas, sendo elas:

- a) Geração do coeficiente: equações não-lineares são linearizadas e inseridas na matriz solução;
- b) Solução da equação: as equações lineares são resolvidas utilizando o Método *Algebraic Multigrid*.

4.2.3 Método Algebraic Multigrid

O ANSYS CFX usa um método *Multigrid* para acelerar a convergência do solucionador calculando correções em uma série de níveis de malhas grosseiras. O uso do método *Multigrid* pode reduzir bastante o número de iterações e o tempo de CPU necessário para obter uma solução convergente, principalmente quando o modelo contém muitos volumes de controle.

O método *Multigrid* envolve a realização de iterações iniciais em uma malha fina e depois em iterações virtuais progressivamente mais grosseiras. Os resultados são transferidos de volta da malha mais grossa para a malha fina original.

Do ponto de vista numérico, a abordagem *Multigrid* oferece uma vantagem significativa. Para um determinado tamanho de malha, os solucionadores iterativos são eficientes apenas na redução de erros com comprimento de onda da ordem do espaçamento da

malha. Portanto, enquanto erros de comprimento de onda mais curtos desaparecem rapidamente, erros com comprimentos de onda mais longos, da ordem do tamanho do domínio, podem levar um tempo extremamente longo para desaparecer. O método *Multigrid* contorna esse problema usando uma série de malhas grossas, de forma que erros de comprimento de onda mais longos apareçam como erros mais curtos em relação ao espaçamento da malha.

Esse algoritmo é chamado de Método *Algebraic Multigrid* (AMM – *Algebraic Multigrid Method*) [Raw, 1996] porque as equações de nível aproximado são geradas sem o uso de qualquer geometria ou re-discretização nos níveis aproximados. A vantagem é que nenhuma malha grossa precisa ser construída ou armazenada, e nenhum fluxo ou termos de origem precisam ser avaliados nos níveis grosseiros.

O AMM forma um sistema de equações discretas para uma malha mais grosseira, somando as equações da malha fina, o que resulta em um aumento virtual do espaçamento da malha durante o curso das iterações. Em seguida, a malha é refinada para obter uma solução precisa.

As equações para a malha grosseira podem ser criadas unindo os volumes de controle da malha original de forma a criar volumes de controle maiores, isso é demonstrado na Figura 4.3.

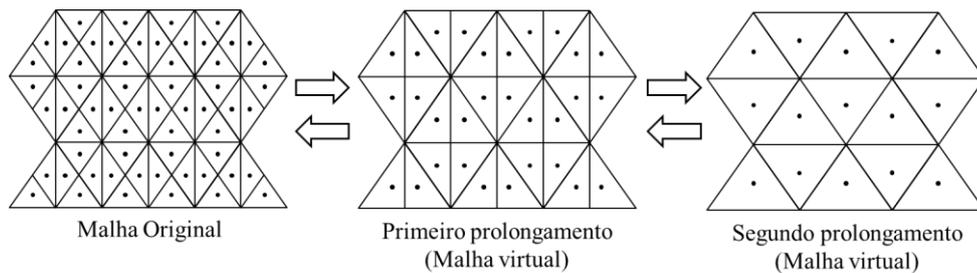


Figura 4.3: Prolongamentos aplicados na malha original do Método *Algebraic Multigrid*, mostrando exemplos de malhas virtuais mais grosseiras.

5 MODELO FÍSICO E DOMÍNIO COMPUTACIONAL

O presente trabalho trata de modelar a queima de diesel gerada por injetores usados para ignitar o carvão em partidas dos geradores de vapor da Usina Termoeletrica da Energias de Portugal (EDP) situada no complexo portuario de Pecém/CE no Brasil. A Usina é composta de 2 geradores de vapor idênticos, produzindo, em carga nominal, 360 MWe cada.

Um esquemático do gerador de vapor e seus equipamentos é mostrado na Figura 5.1. O gerador de vapor possui 49,9 m de altura, com uma câmara de combustão de seção retangular de 16,6 x 13,2 m. É equipado com 24 queimadores de carvão Doosan Babcock Mark-III distribuídos igualmente em 4 fileiras, sendo 2 fileiras na parede frontal e 2 na parede traseira. Opera com condição de queima sub-estequiométrica na região de combustão, completando a combustão com 12 jatos de OFA (*Over-Fire Air*) situados logo acima desta região. Em condições nominais de produção, o gerador de vapor consome 135 ton/h de carvão.

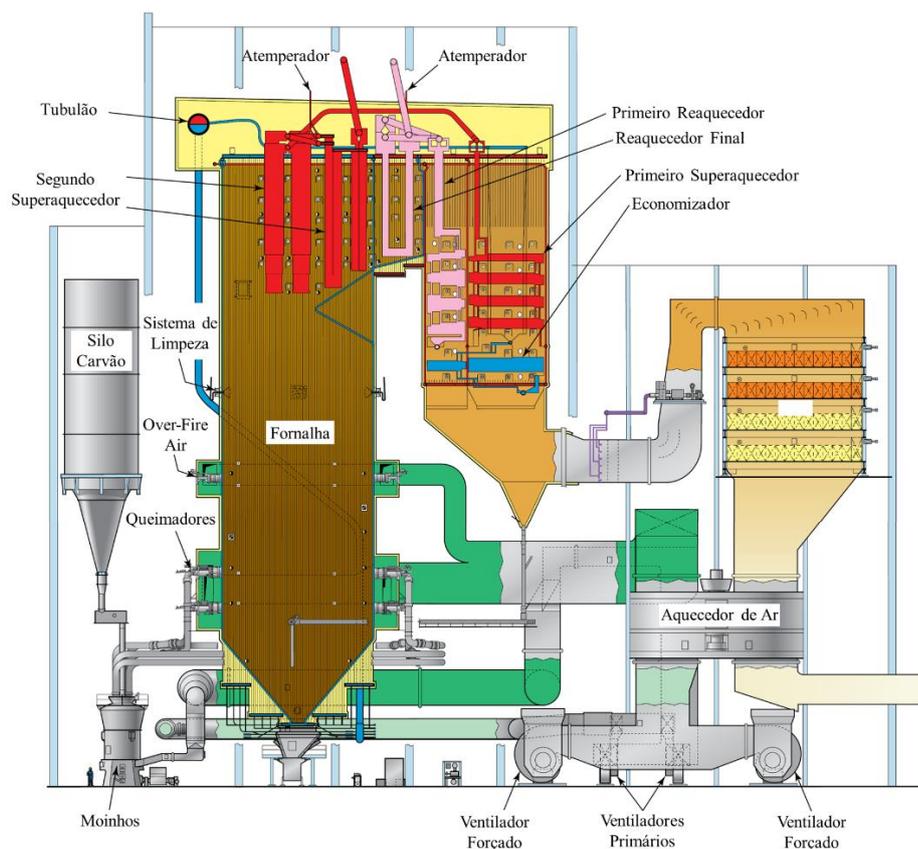


Figura 5.1: Esquemático do gerador de vapor da Usina e seus principais equipamentos.

carvão pulverizado modernos operam tipicamente perto de 15% de excesso de ar em plena carga sendo essa porcentagem aumentada à medida que a carga é reduzida. O excesso de ar é necessário para garantir a combustão completa em sistemas práticos devido a deficiências no equilíbrio ar-combustível e variações imprevisíveis na qualidade do carvão. Acionamentos de motores de velocidade variável nos ventiladores forçados são usados para regular o fluxo de ar. A quantidade de ar terciário para cada queimador é controlada por um disco deslizante no barril do queimador, chamado de *dampers*. O mesmo ocorre no ar secundário, onde um disco deslizante fraciona o ar entre secundário e terciário, sendo geralmente fracionado 70% de ar para a entrada terciária e 30% para a entrada secundária. Aquecedores de ar transferem o calor dos gases de combustão para o ar, aumentando a temperatura para cerca de 316 C°. O fluxo de ar é medido a jusante dos aquecedores de ar e depois conduzido às caixas de ar que envolvem os queimadores. *swirlers* (detalhes 1 e 2 na Figura 5.2) são responsáveis por dar o movimento rotacional (quantificado como número de *swirl*) ao fluxo de ar terciário e secundário. Redemoinho moderado produz uma pluma de chama bem moldada. Um número de *swirl* inadequado resulta em instabilidade da chama (por exemplo, um número de *swirl* excessivo pode achatá-la contra a parede e causar escória localizada e danos ao queimador).

Com o movimento de *swirl*, o ar que deixa o queimador tem componentes de velocidade tangencial, radial e axial. Gradientes de pressão axial e radial se formam no escoamento a jusante da saída do queimador, com menor pressão no centro da região de saída. À medida que o redemoinho aumenta, os gradientes de pressão também aumentam. Isso faz com que o escoamento inverta e viaje ao longo do eixo da chama em direção à zona de baixa pressão. Um padrão de recirculação é gerado perto do queimador.

O queimador utilizado na Usina (Mark-III) é classificado pela Doosan Babcock como um queimador de registro duplo por oferecer duas zonas de ar, cada uma controlada separadamente, posicionadas axialmente em torno da entrada de carvão. Queimadores de duplo registro foram desenvolvidos para proporcionar uma chama estável, com um núcleo rico em combustível e gradualmente concluindo a mistura a jusante, com isso proporcionando uma redução nas emissões de NO_x. A primeira utilização de queimadores de registro duplo pela empresa foi em 1973 e alcançou uma redução de 50% dos níveis de NO_x em relação aos queimadores anteriores [Babcock & Wilcox Company, 2015].

Maiores detalhes geométricos do queimador, junto com suas principais dimensões, são mostrados na Figura 5.3, destacando as principais dimensões do queimador e o detalhe do *flame holder*.

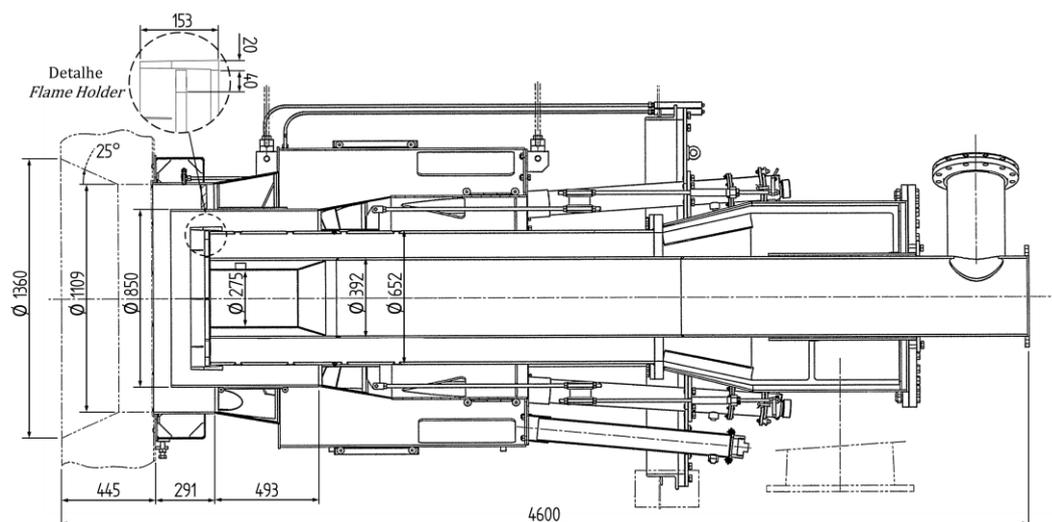


Figura 5.3: Detalhes geométricos do queimador com detalhe para o *flame holder*.

Ignitores operando com diesel são utilizados para iniciar a combustão quando se introduz pela primeira vez o carvão no queimador e durante um desligamento normal do queimador. Outra utilização dos ignitores é para sustentar a combustão quando a chama de carvão está instável. Após o acendimento da chama de carvão pelo diesel, o queimador mantém uma chama estável usando o calor da combustão do carvão para inflamar o carvão pulverizado recebido. O sistema de queima de diesel é mostrado na Figura 5.4.

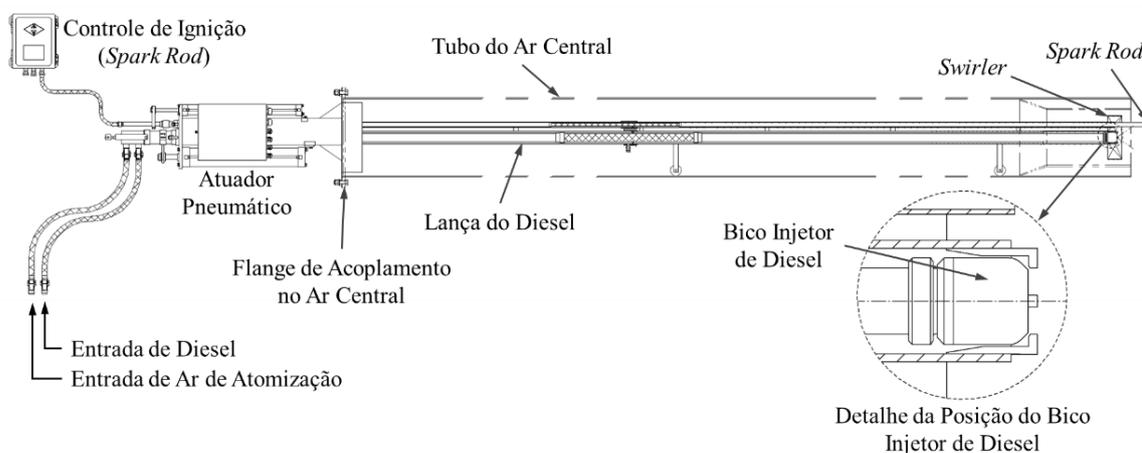


Figura 5.4: Sistema de queima de diesel para ignição do carvão.

O sistema é composto por uma lança, posicionada ao centro do tubo do ar central, responsável por levar diesel e ar de atomização (em correntes separadas) até o bico injetor de diesel, posicionado na ponta desta lança. O sistema ainda conta com um controle de ignição via *spark rod*, responsável pela centelha para ignitar o diesel, e com um atuador pneumático, responsável por movimentar a lança axialmente. Um *swirler* posicionado na ponta da lança é responsável por causar o movimento de *swirl* no Ar Central. Na Figura 5.5 é mostrada uma foto da frente do queimador equipado com a lança do diesel na saída para a fornalha, mostrando o bico injetor de diesel, o *spark rod* e o *swirler* do Ar Central.

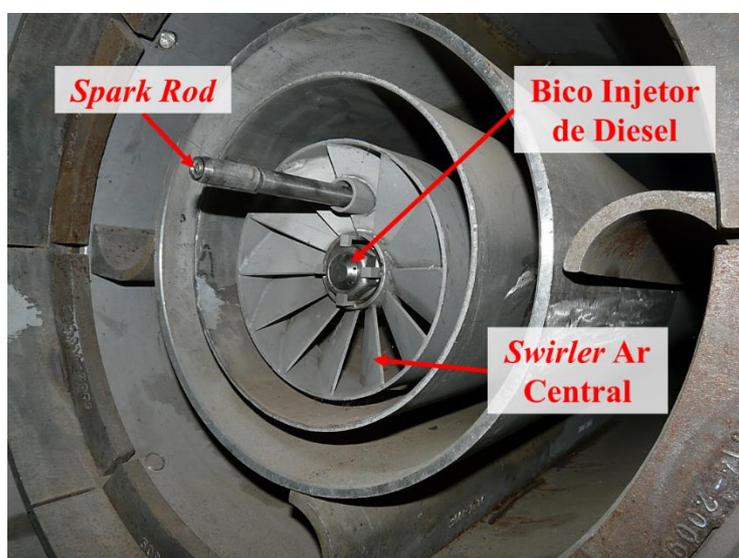


Figura 5.5: Foto da frente do queimador equipado com a sistema de ignição a diesel.

O diesel deve ser atomizado na fornalha como uma névoa fina e dispersa na corrente de ar de combustão, esse é o papel do bico injetor, o qual é acoplado na ponta da lança como mostrado na Figura 5.4. A atomização adequada é importante para uma combustão eficiente e emissões reduzidas de particulados. A qualidade da atomização é medida em termos de tamanho de gota, por exemplo, uma atomização de alta qualidade ocorre quando as gotículas de combustível são pequenas, produzindo altas relações superfície-volume e, assim, expondo mais superfície ao ar de combustão. Um meio conveniente de expressar e comparar a qualidade da atomização produzida por atomizadores é o Diâmetro Médio de Sauter (SMD – *Sauter Mean Diameter*), sendo definido como a razão do volume médio das gotículas de óleo

sobre a área média da superfície, expressa em $[\mu\text{m}]$. Quanto menor o SMD, melhor a atomização.

O bico injetor utilizado na planta é do tipo Y (nomeado neste trabalho como Bico Injetor Y), composto por múltiplos canais internos separados conectados a entradas independentes de ar e diesel que se acoplam em um único canal pouco antes da descarga, promovendo a mistura ar-diesel. Na Figura 5.6 é mostrada uma imagem do Bico Injetor Y utilizado na planta, com vista em corte (a), vista dos canais de entrada de ar de atomização e diesel (b) e vista dos canais de saída da mistura para a fornalha (c). As dimensões do bico injetor são mostradas na Figura 5.7.

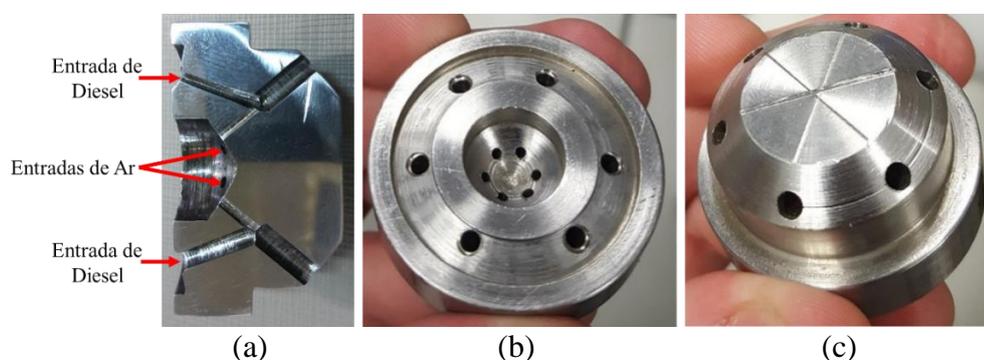


Figura 5.6: Bico injetor utilizado na Usina tipo Y: (a) em um corte central para visualização dos canais internos de ar e diesel e rebarbas da usinagem; (b) vista dos orifícios por onde entram ar e diesel; (c) vista dos orifícios de saída do bico.

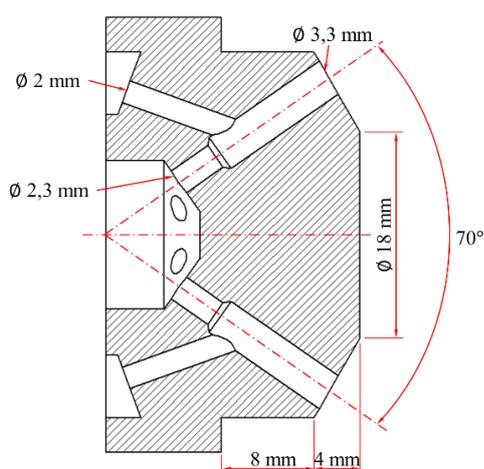


Figura 5.7: Dimensões do Bico Injetor Y.

O bico possui 6 dutos com entradas de ar com 2,3 mm de diâmetro cada e 6 dutos com entrada de diesel com 3,3 mm de diâmetro cada. Cada conjunto de dutos (ar + diesel) é ligado a uma única saída, portanto, possui 6 orifícios de saída cada uma com 3,3 mm de diâmetro.

Um novo bico injetor de diesel foi proposto para substituir do tipo Y utilizado na Usina. O dimensionamento da proposta foi feito com base nos trabalhos de Barreras et al. (2006a; 2006b) e Ferreira et al. (2009a; 2009b) e mais detalhes geométricos são mostrados no Apêndice A. O novo bico injetor é formado por duas peças: uma externa (*Outer Part*) e outra interna (*Inner Part*), as quais são mostradas na Figura 5.8.

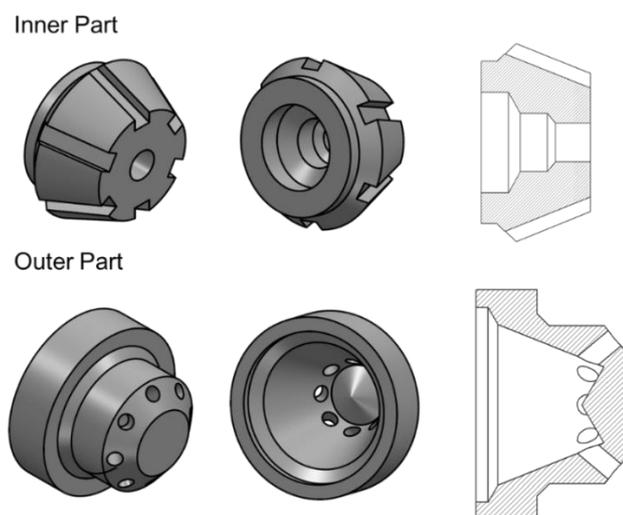


Figura 5.8: Detalhes das duas peças que formam o novo bico injetor.

A peça externa é cônica e oca, projetada para receber a peça interna. Possui 8 orifícios de saída cilíndricos com um diâmetro de 3,3 mm cada. A peça interna possui formato de cone truncado com 6 ranhuras de seção transversal retangular alinhadas axialmente ao eixo de simetria, com razão largura-altura 3x2mm, por onde óleo combustível flui. O orifício central possui diâmetro de 5 mm (diâmetro do orifício de entrada na câmara de mistura) e é responsável por fornecer ar à câmara de mistura interna.

Quando as peças são montadas, forma-se um corpo com uma câmara de mistura interna (*Internal Mixing Chamber*) responsável por fazer a mistura de ar e diesel, por isso, é chamado de Bico Injetor IMCA (*Internal Mixing Chamber Atomizer*). A Figura 5.9 mostra detalhes dessa câmara em uma montagem em corte de ambas as peças. Observa-se que a peça

interna possui 14 mm de lateral, originando uma cavidade da câmara de mistura interna de 6,91 mm.

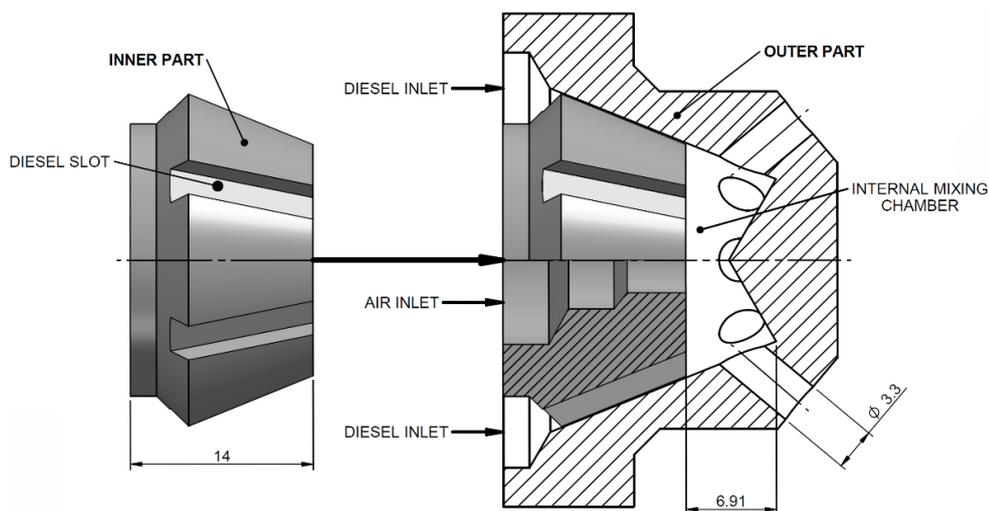


Figura 5.9: Detalhe da montagem do novo bico injetor formando a câmara de mistura interna. Na imagem, todas as unidades estão em milímetros.

O novo projeto IMCA pode ser classificado como injetor tipo efervescente [Barreras et al., 2006], pois a súbita expansão do ar comprimido no líquido na câmara de mistura interna induz a produção de pequenas bolhas de ar que são incorporadas no líquido combustível. Essa perturbação causa a quebra do filme líquido, gerando pequenas gotículas de combustível. Esta configuração geométrica induz a formação de uma estrutura de escoamento girando em formato toroidal na câmara de mistura, aumentando o tempo de residência da mistura na câmara, melhorando a interação do escoamento bifásico e ajudando na formação e inclusão de bolhas de ar no líquido.

A Figura 5.10 mostra o novo bico injetor usinado, o qual foi instalado na Usina no final de 2019 para testes de operação. Como vantagem adicional deste novo bico IMCA, tem-se o fato de ser desmontável, facilitando sua limpeza e manutenção, evitando problemas de usinagem mal executada e entupimentos devido à carbonização do combustível nos canais internos do bico injetor.



Figura 5.10: Bico Injetor IMCA fabricado: (a) vista da peça externa; (b) vista da peça interna; (c) vista superior do bico injetor; (d) vista inferior da peça externa mostrando detalhes na parte interna do encaixe e da câmara de mistura; (e) vista inferior da peça interna; (f) vista inferior do bico injetor montado mostrando o encaixe das peças.

5.1 Domínios e Malhas Computacionais

Neste trabalho, a investigação sobre o processo de injeção e queima de diesel é dividida em 2 avaliações: escoamento multifásico no interior dos canais dos injetores e avaliação da combustão produzida pelos bicos injetores. Portanto, nesta seção apresenta-se o método de análise das malhas e, após, são apresentados e discutidos os domínios computacionais com suas respectivas considerações e condições de contorno.

Nem todos os detalhes geométricos podem ser considerados para simulação devido a limitações computacionais, portanto, simplificações foram feitas respeitando-se sempre que não causem interferências significantes nos resultados.

5.1.1 Metodologia para Análise das Malhas

A malha computacional para todos os domínios em estudo foi gerada no *software* ICEM CFD, programa integrante do pacote ANSYS. Para cada domínio fez-se um estudo de qualidade de malha seguindo a metodologia proposta por Roache, 1994, o qual sugeriu um Índice de Convergência de Malha (GCI - *Grid Convergence Index*) para fornecer uma

maneira consistente de relatar os resultados dos estudos de convergência de malha e fornecer uma faixa de erro na convergência da solução. O GCI pode ser calculado usando dois níveis de malha, no entanto, três níveis são recomendados para estimar com precisão a ordem de convergência e verificar se as soluções estão dentro da faixa assintótica de convergência.

Uma análise numérica consistente fornecerá um resultado que se aproxima do resultado real à medida que a resolução da grade se aproxima de zero. Assim, as equações discretizadas abordarão a solução das equações reais. Uma questão significativa em cálculos numéricos é o nível de resolução de malha apropriado. Essa é uma função das condições de escoamento, tipo de análise, geometria e outras variáveis. Com frequência, inicia-se com uma resolução de malha, em seguida, realiza-se uma série de refinamentos para avaliar seu efeito na solução. Isso é conhecido como um estudo de refinamento de malha.

O GCI é uma estimativa da porcentagem em que o valor calculado está longe do valor do valor numérico assintótico. Indica uma faixa de erro em que distância a solução está do valor assintótico e quanto a solução mudaria com um refinamento adicional da grade. Um pequeno valor de GCI indica que o cálculo está dentro da faixa assintótica. Ainda pode haver erro entre esse valor assintótico e a verdadeira solução física para as equações.

O GCI para as malhas 1 e 2 é dado por:

$$GCI_{12} = \frac{F_S |\varepsilon_{12}|}{(r^{p_3} - 1)} \quad (5.1)$$

sendo F_S o fator de segurança, recomendado por Roache, 1994 o valor de 1,25 para comparações com três malhas. O erro relativo ε_{12} é definido como:

$$\varepsilon_{12} = \frac{f_2 - f_1}{f_1} \quad (5.2)$$

onde f_1 é a solução obtida para a malha mais grosseira, e f_2 a solução para a malha intermediária. Analogamente, é possível determinar o índice de convergência de malha GCI_{23} , empregando-se as Equações (5.1) e (5.2). Na Equação (5.1) p_3 é a ordem de convergência, a

qual pode ser diretamente obtida a partir de três soluções usando um fator de refinamento da malha r constante por:

$$p_3 = \frac{\ln \left(\frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1} \right)}{\ln r} \quad (5.3)$$

No presente trabalho adotou-se um fator de refinamento de malha igual a 2.

Após a determinação dos índices de convergência de malha, pode-se verificar a convergência da solução para a faixa assintótica através de:

$$x = \frac{GCI_{23}}{r^p GCI_{12}} \quad (5.4)$$

Se o resultado da Equação (5.4) for próximo a um, indicam que as soluções estão dentro da faixa assintótica de convergência.

5.1.2 Escoamento Multifásico Interno nos Bicos Injetores

Para a análise do escoamento interno nos injetores a geometria considerada compreende os canais internos e cavidades de cada bico injetor, ou seja, regiões onde flui ar, diesel ou uma mistura dos dois. As entradas de ar e diesel são consideradas como a superfície onde há a divisão da lança com o bico injetor, assim, a saída é considerada os orifícios onde a mistura deixa o bico injetor e entra na fornalha. A Figura 5.11 apresenta as geometrias modeladas para ambos os injetores.

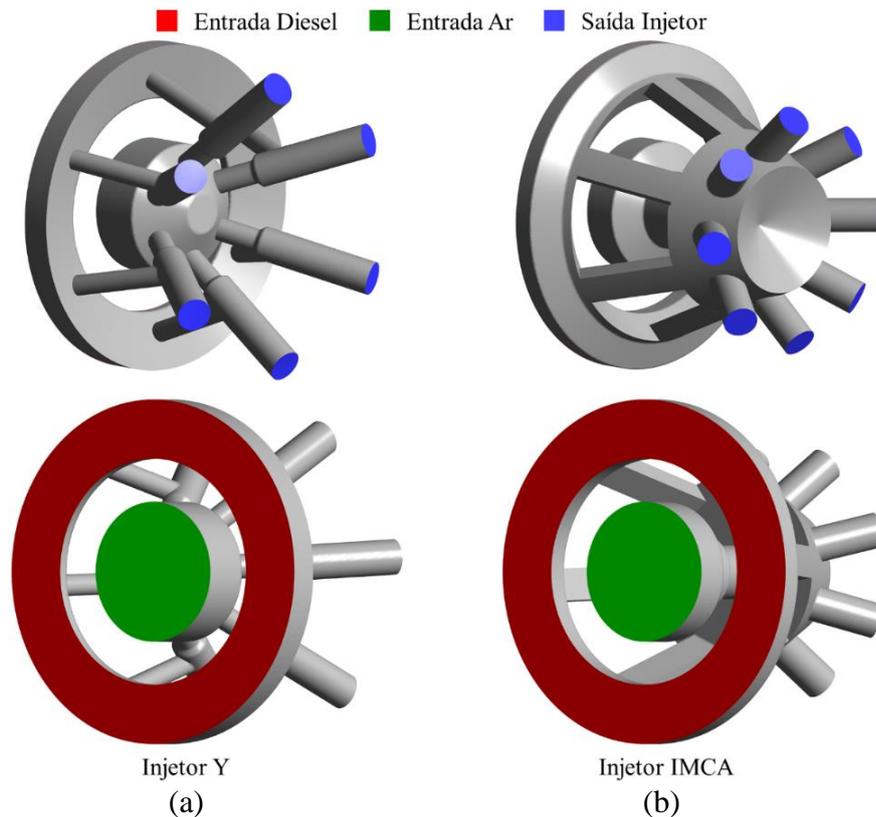


Figura 5.11: Domínio computacional considerado para simulação, representando os canais internos dos bicos injetores. Cores representam as entradas de diesel e ar (vermelho e verde, respectivamente) e os orifícios de saída do bico injetor (azul): (a) Bico Injetor Y; (b) Bico Injetor IMCA.

5.1.2.1 Condições de Contorno

A fim de conduzir as simulações, foram selecionadas a partir dos dados de operação da planta algumas informações relevantes para se prescrever as condições de contorno do problema. Para ambos os casos são consideradas as mesmas condições de operação. Com esta escolha espera-se obter dados importantes dos escoamentos internos, como características dos jatos e principalmente dados de vazão em cada bico injetor. A Tabela 5.1 apresenta os dados de operação adotados nas simulações.

Na Tabela 5.2 são apresentados alguns dados referentes aos modelos implementados para as simulações.

Tabela 5.1: Condições de contorno para o estudo do escoamento interno nos bicos injetores.

Dado	Valor
Pressão do ar de atomização ¹	4,50 bar
Pressão do diesel ¹	3,75 bar
Massa específica diesel	726,53 kg/m ³
Tensão superficial diesel	23,83 mN/m

¹Na planta, as pressões são medidas na linha, antes de chegar na lança. As pressões informadas na tabela se referem a pressões na entrada do bico injetor (final da lança), portanto, são menores do que as medidas por já terem os valores de perda de carga descontados.

Tabela 5.2: Parâmetros prescritos no *setup* das simulações do escoamento interno.

Método de simulação	Modelo VOF [Hirt e Nichols, 1981; Youngs, 1982]
Abordagem	Euler-Euler
Esquema multifásico	Modelo não homogêneo
Análise numérica	Método explícito
Fluido primário	Diesel
Modelo de ar	Peng-Robinson [Peng e Robinson, 1976]

A intensidade de turbulência, I , adotada nas entradas foi de 5% e a razão de viscosidades, μ_i/μ , 10. Com isso, a energia cinética turbulenta (k) pode ser calculada com a seguinte equação:

$$k = \frac{3}{2} I^2 U^2 \quad (5.5)$$

onde U é a velocidade em [m/s]. A dissipação turbulenta, ε , é calculada pela Equação (3.33).

O modelo de simulação utilizado para representar o comportamento do escoamento multifásico no interior dos bicos injetores foi o modelo VOF, descrito na Seção 3.3. O modelo não homogêneo, também chamado de modelo de transferência entre fluidos, foi adotado devido às grandes diferenças de velocidades entre as fases, portanto, cada fase possui campo de solução separado e as quantidades transportadas interagem através de termos de transferência entre fases. O esquema explícito foi adotado em recorrência da simulação ser em

estado regime permanente. O fluido primário sempre deve ser a fase líquida, neste caso, o diesel. Para representar o comportamento do ar de atomização em função do escoamento, utilizou-se o modelo de ar real de Peng-Robinson [Peng e Robinson, 1976].

5.1.2.2 Estudo de Malha

A malha computacional foi gerada com o método OCTREE [Meagher, 1980] com implementação de volumes tetraédricos e prismáticos, sendo que os prismas foram utilizados somente nas paredes. Detalhes das malhas para cada bico injetor são mostrados na Tabela 5.3.

Tabela 5.3: Detalhes da quantidade da quantidade de volume em cada malha.

Malhas	Tipo dos Volumes	Quantidade de Volumes		Tamanho Máximo Volumes [mm]
		Y	IMCA	
1	Tetraédricos	2.018.898	3.278.871	0.25
	Prismáticos	727.860	932.578	
	Total	2.746.758	4.211.449	
2	Tetraédricos	3.893.316	6.271.372	0.2
	Prismáticos	1.138.065	1.440.736	
	Total	5.031.381	7.712.108	
3	Tetraédricos	9.217.567	14.723.797	0.15
	Prismáticos	2.012.772	2.592.469	
	Total	11.230.339	17.316.266	

Volumes tetraédricos não possuem capacidade de captar os efeitos de camada limite com precisão, por isso, 6 camadas de volumes prismáticos foram gerados nas superfícies, com a primeira camada tendo altura de 0,025 [mm] e razão de crescimento de 1,2, onde a altura do prisma de uma camada específica é calculada por $H_C=0,025 \cdot 1,2^{(\text{camada}-1)}$ e a altura total em cada camada é calculada por $H_T=0,025 \cdot (1-1,2^{\text{camada}})/(1-1,2)$.

As malhas foram geradas para se ter uma razão de volumes de 2 vezes, ou seja, a cada refinamento se aumenta 2 vezes o número de volumes. Nem sempre é possível obter uma quantidade de volumes exatamente 2 vezes maior devido à malha não ter um padrão, como acontece em malhas estruturadas. Lembrando que, neste caso, essa razão aplicou-se apenas para os volumes tetraédricos, e os prismas foram mantidos a uma altura fixa.

Deve-se observar aqui que o tamanho dos volumes prismáticos (altura) para as 3 malhas avaliadas para cada bico injetor foi fixo, a maior quantidade de volumes prismáticos para cada refinamento é devido à menor razão de aspecto para cada refinamento, razão esta controlada, neste caso, pelo tamanho global máximo dos volumes da malha.

Na Tabela 5.4 são apresentados os dados médios de velocidade e densidade do ar de atomização nos orifícios de saída dos bicos injetores obtidos nas simulações para as três malhas geradas. Escolheu-se os dados de velocidade e densidade do ar por reunirem características importantes dos modelos, por exemplo, a velocidade contém características importantes da transferência de quantidade de movimento entre as fases do escoamento, enquanto a densidade do ar, por ser função da pressão, contém informação importante do comportamento da pressão.

Tabela 5.4: Dados médios de velocidade e densidade do ar de atomização nos orifícios de saída dos bicos injetores obtidos nas simulações para as três malhas geradas.

Malha	Velocidade [m/s]		Densidade Ar [kg/m³]	
	Y	IMCA	Y	IMCA
1	120,358	84,786	8,302	8,291
2	121,000	84,648	8,294	8,285
3	125,217	83,580	8,286	8,279

A Tabela 5.5 apresenta os valores do cálculo do GCI e o teste de convergência do método para os dados apresentados na Tabela 5.4.

Tabela 5.5: GCI e convergência do método calculados para os dados médios de velocidade e densidade do ar de atomização nos orifícios de saída dos bicos injetores para as três malhas geradas.

	Velocidade		Densidade Ar	
	Y	IMCA	Y	IMCA
GCI_{12} [%]	0,119	0,399	1,129	0,608
GCI_{23} [%]	0,782	0,197	1,248	0,513
x	0,995	1,002	1,000	1,000

De acordo com os resultados da Tabela 5.5, é possível concluir que ambos os GCI para os dois bicos injetores apresentam valores de precisão aceitáveis para o estudo, além disso, o valor de x é muito próximo a 1, indicando que os resultados estão dentro da faixa assintótica. Diante disso, a malha escolhida para representação dos resultados foi a 3, motivada pela maior quantidade de elementos e assim mostrar resultados mais “suavizados”.

5.1.3 Combustão Produzida pelos Bicos Injetores

Para a análise da combustão produzida pelos bicos injetores a geometria considerada consiste em um único queimador Doosan Babcock Mark III acoplado a uma câmara de combustão hipotética. Foi optado por essa escolha visto que a avaliação com a geometria completa da fornalha não seria possível computacionalmente devido ao número de volumes de controles para a malha que seriam necessários para captar os fenômenos de interesse.

Na geometria do queimador também foram feitas simplificações. Na Figura 5.12 é indicado no queimador a parte que foi considerada como domínio para as simulações.

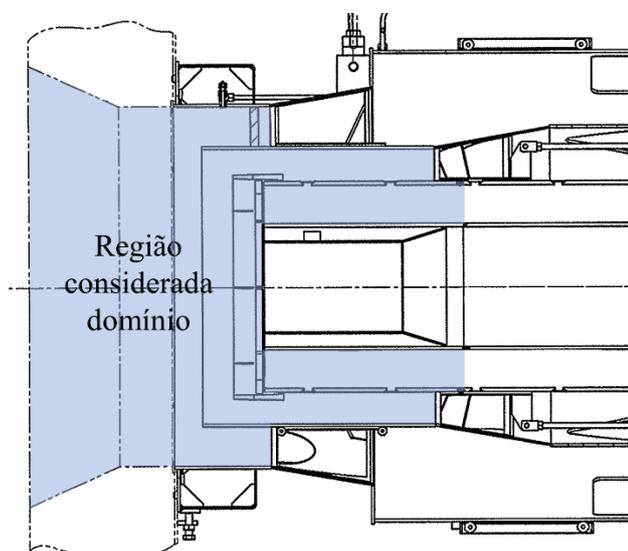


Figura 5.12: Região do queimador considerada como domínio para as simulações. A região em azul indica a região considerada como domínio.

Como pode ser visto na Figura 5.12, as entradas de ar terciário e secundário no domínio considerado não levam em consideração os *swilers*. Optou-se por descrever o movimento rotacional que os *swilers* induzem através de uma equação algébrica para o

Número de *swirl*, deduzida por Sheen et al., 1996 e mostrada na Equação (5.6), a qual leva em conta detalhes geométricos do *swiler*. Na equação, assume-se que a massa específica e velocidade axial sejam constantes. Isso faz com que seja eliminada a necessidade de uma grande concentração de volumes de controle nessa área para captar os efeitos da geração do movimento.

$$S = \frac{\dot{m}^2}{2\pi^2 \rho (R_2^2 - R_1^2) \rho U^2 \int_{R_1}^{R_2} r dr} \left[\frac{1}{1 - \frac{z b}{2\pi R_1} \cos \beta} \left(\frac{\tan \beta}{1 + \tan \beta \tan(\pi/z)} \right) \right] \quad (5.6)$$

onde \dot{m} é a vazão mássica de ar em [kg/s], R_1 e R_2 são os raios externos e interno em [m], respectivamente, U é a velocidade axial em [m/s], r é o raio em [m], z é o número de palhetas guias, b é a espessura das palhetas em [m] e β é o ângulo das palhetas com relação a posição radial em [°].

Para relacionar a velocidade axial e tangencial com o número de *swirl* foi utilizada a seguinte relação:

$$S = \frac{2}{U(R_2 + R_1)} \frac{\int_{R_1}^{R_2} W(r) r^2 dr}{\int_{R_1}^{R_2} r dr} \quad (5.7)$$

onde $W(r) = \omega \cdot r$ é a velocidade tangencial em [m/s] e ω é a velocidade angular em [rad/s].

Substituindo a expressão para a velocidade tangencial na Equação (5.7) e resolvendo as integrais, temos:

$$S = \frac{R_2^2 + R_1^2}{R_2 + R_1} \frac{\omega}{U} \quad (5.8)$$

O bico injetor de diesel localizado no centro do queimador, como pode ser visto na Figura 5.13 foi considerado apenas como orifícios de entrada, onde as simulações do escoamento nos canais internos são responsáveis por gerar as condições de contorno.

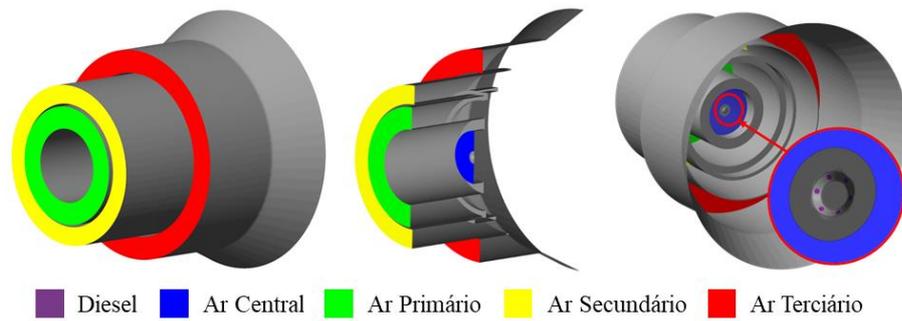


Figura 5.13: Geometria considerada do queimador com as cores indicando as entradas e detalhe do bico injetor de diesel (na figura, bico injetor Y).

Por questões computacionais já mencionadas, o queimador é acoplado a uma câmara de combustão cilíndrica hipotética com 5 m de diâmetro e 11 m de comprimento, dimensionada com base na potência do queimador, para a realização das simulações de combustão. Na Figura 5.14 é mostrada uma imagem do queimador acoplado na câmara de combustão.

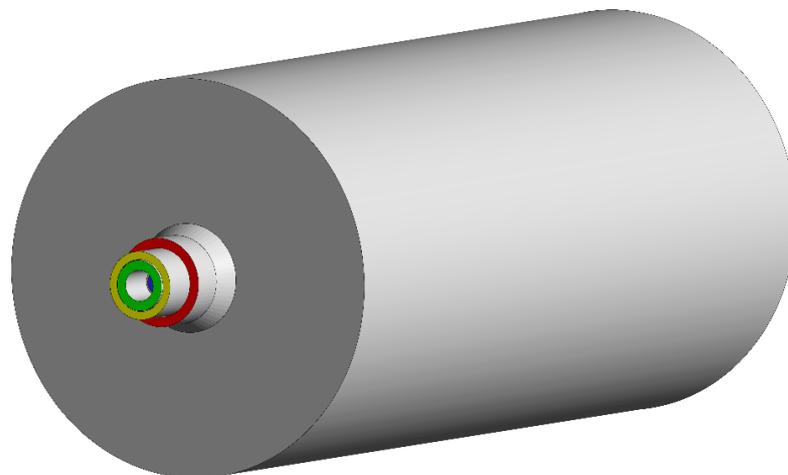


Figura 5.14: Domínio computacional considerado no estudo mostrando a câmara de combustão equipada com o queimador.

5.1.3.1 Condições de Contorno

As condições de contorno para a combustão dividem-se em duas partes: condições de contorno sobre os orifícios do bico injetor de diesel e sobre as demais entradas do queimador principal (ar central, primário, secundário e terciário) mostradas na Tabela 5.6.

As condições de contorno aplicadas nos orifícios dos bicos injetores são consequências dos resultados obtidos nas simulações do escoamento interno em cada um dos bicos injetores e são discutidos na Seção 7.1, onde os resultados são debatidos. Os resultados das simulações que são adotados como condição de contorno são: vazão mássica de ar de atomização e diesel, velocidade de ar e diesel, energia cinética turbulenta, dissipação turbulenta e espessura de filme líquido.

Tabela 5.6: Condições de contorno para as entradas do queimador principal.

	Ar Central	Ar Primário	Ar Secundário	Ar Terciário
Número de <i>swirl</i> ¹	0,60	0,00	0,60	0,45
Velocidade axial [m/s] ²	15,67	23,32	32,30	41,89
Velocidade angular [rad/s] ²	80,18	0,00	50,72	37,61
Temperatura [K]	300,00	300,00	300,00	300,00

¹Calculado pela Equação (5.6); ²Calculados pela Equação (5.8).

A intensidade de turbulência, I , adotada em todas as entradas foi de 5% e a razão de viscosidades, μ/μ , 10, exceto para os orifícios do bico injetor de diesel, onde a turbulência é resultado das simulações internas do bico injetor.

As paredes da câmara e do queimador foram modeladas como resistências térmicas, com valor de 0,109 [m².K/W] para ambas. Assumiu-se emissividade igual a 1 nas paredes da câmara e igual a 0,85 nas paredes do queimador. A temperatura local do fluido nas entradas e saída é considerada para levar em consideração a condição de contorno para a energia radiativa.

Condição de contorno de restrição da pressão média sobre toda a saída foi adotada. Isso permite que o perfil de pressão na saída varie com base nas influências a montante, enquanto restringe a pressão média no valor de 1 [atm].

Na Tabela 5.7 são apresentados alguns dados referentes aos modelos implementados para as simulações.

Tabela 5.7: Parâmetros prescritos no *setup* das simulações de combustão.

Método multifásico	Euler-Lagrange
Quebra primária das gotas	LISA [Senecal et al., 1999]
Quebra secundária das gotas	Reitz e Diwakar, 1987
Transferência de calor gotas	Ranz Marshall [Ranz e Marshall, 1952]
Combustão	PDF- <i>Flamelet</i> [Peters, 1984]
Acoplamento gotas	Totalmente acopladas (acoplamento 2 vias)

Adotou-se uma metodologia Euler-Lagrange para representar o escoamento multifásico, sendo Euler para a fase contínua e Lagrange para a fase de partículas, neste caso, gotas. Como modelo de quebra primária utilizou-se o modelo LISA, e quebra secundária Reitz e Diwakar. Transferência de calor das gotas utilizou-se a correção proposta por Ranz Marshall. O modelo de combustão considerado foi o PDF-*Flamelet*, descrito na Seção 3.5.

5.1.3.2 Estudo de Malha

Para esta avaliação, a malha computacional foi gerada de maneira separada para a câmara de combustão e para o queimador e posteriormente mescladas dentro do *software* ICEM.

No queimador, utilizou-se uma malha gerada com o método OCTREE (MEAGHER, 1980) com a implementação de volumes tetraédricos e prismáticos, sendo os prismáticos gerados somente nas paredes para captar efeitos da camada limite. Para a malha computacional para a câmara de combustão foi utilizada uma malha estruturada, onde no centro encontram-se os volumes mais refinados. Neste procedimento, a saída do queimador e entrada da câmara de combustão são modeladas como interfaces, sendo a saída do queimador considerada como entrada da câmara de combustão.

Como as duas malhas são geradas separadamente, é necessário fazer a mesclagem das duas malhas nas interfaces. O procedimento de mesclar malhas permite mesclar partes desconectadas da malha se dois ou mais domínios forem carregados e os nós não correspondem na interface entre eles. A mesclagem corresponderá aos nós para que a conectividade um a um seja mantida em todo o domínio mesclado. A Figura 5.15 mostra um exemplo de um antes e depois do processo de mesclagem feito neste trabalho.

Ambos os queimadores acoplados com o bico injetor de diesel compartilham a mesma malha da câmara de combustão, porém, devido às diferenças no bico injetor cada um possui uma malha. As avaliações sobre a malha são feitas para o bico injetor Y após selecionada a malha para o estudo, as configurações são replicadas para a malha do bico injetor IMCA.

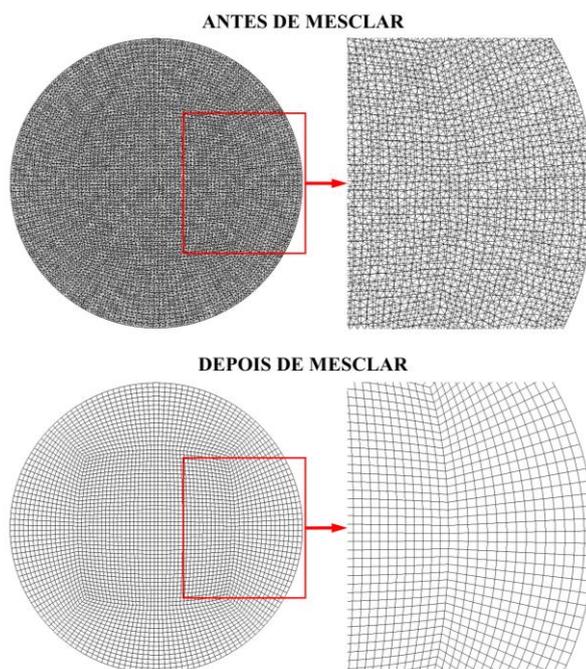


Figura 5.15: Exemplo da mesclagem das duas superfícies da malha.

Nos orifícios do bico injetor, devido ao diâmetro ser pequeno em relação aos elementos globais da malha podendo resultar em erro se elementos grandes surgirem nessa região, resolveu-se manter o tamanho dos elementos em 0,3 mm para todas as malhas. Neste local também foi usado uma razão de crescimento de volumes tetraédricos para promover um crescimento suavizado dos elementos. Outro local em que os elementos são refinados é na região do *flame holder* pois este possui papel importante no escoamento, aqui os elementos possuem 50% do tamanho dos elementos globais da malha.

Nas paredes do queimador foram geradas 8 camadas de volumes prismáticos, tendo a primeira camada altura de 0,1 [mm] e razão de crescimento de 1,2, onde a altura do prisma de uma camada específica é calculada por $H_C=0,1 \cdot 1,2^{(\text{camada}-1)}$ e a altura total em cada camada é calculada por $H_T=0,1 \cdot (1-1,2^{\text{camada}})/(1-1,2)$. Nas 3 malhas as configurações dos volumes prismáticos não foram alteradas.

A Tabela 5.8 apresenta detalhes sobre as 3 malhas utilizadas no estudo.

Tabela 5.8: Detalhes da quantidade de volumes em cada malha.

Malhas	Tipo dos Volumes	Quantidade de Volumes		
		Queimador	Câmara	Total
1	Tetraédricos	3.585.213		
	Prismáticos	1.334.524		
	Total	4.919.737	1.528.788	6.448.525
2	Tetraédricos	6.913.854		
	Prismáticos	1.597.358		
	Total	8.511.212	2.475.759	10.986.971
3	Tetraédricos	13.882.124		
	Prismáticos	1.737.319		
	Total	15.619.443	4.543.767	20.163.210

Como comentado na análise da malha do escoamento interno no bico injetor, as malhas foram geradas para se ter uma razão de elementos de 2 vezes, ou seja, a cada refinamento se aumenta 2 vezes o número de elementos. Nem sempre é possível obter uma quantidade de elemento exatamente 2 vezes maior devido à malha não ter um padrão, como acontece em malhas estruturadas. Lembrando que, neste caso, essa razão aplicou-se apenas para os volumes tetraédricos, e os prismas foram mantidos a uma altura fixa. Salienta-se novamente que a maior quantidade de volumes prismáticos para cada refinamento é devido à menor razão de aspecto controlada pelo tamanho global máximo dos volumes de malha.

Na Tabela 5.4 são apresentados os dados médios de velocidade e densidade do ar de atomização nos orifícios de saída dos bicos injetores obtidos nas simulações para as três malhas geradas. Escolheu-se os dados de velocidade e densidade do ar por reunirem características importantes dos modelos, por exemplo, a velocidade contém características importantes da transferência de quantidade de movimento entre as fases do escoamento, enquanto a densidade do ar, por ser função da pressão, contém informação importante do comportamento da pressão.

Para a avaliação utilizou-se dados médios na saída da câmara de combustão de temperatura, velocidade e fração mássica de CO₂, os quais estão mostrados na Tabela 5.9.

Tabela 5.9: Dados médios de temperatura, velocidade e fração mássica de CO₂ na saída da câmara de combustão obtidos nas simulações de combustão do bico injetor Y para as três malhas avaliadas.

Malha	Temperatura [K]	Velocidade [m/s]	Fração mássica CO ₂ [kg/kg] x10 ⁻³
1	770,385	4,718	17,400
2	770,683	4,733	18,379
3	771,068	4,750	19,954

A Tabela 5.10 apresenta os valores do cálculo do GCI e o teste de convergência do método para os dados das simulações.

Tabela 5.10: GCI e convergência do método calculados para os dados médios de velocidade e densidade do ar de atomização nos orifícios de saída dos bicos injetores para as três malhas geradas.

	Temperatura	Velocidade	Fração mássica CO ₂
GCI_{12} [%]	0,166	1,462	11,521
GCI_{23} [%]	0,214	1,834	17,563
x	1,000	0,997	0,947

De acordo com os resultados da Tabela 5.10, é possível concluir o teste de GCI apresentam valores de precisão aceitáveis para o estudo, além disso, o valor de x é muito próximo a 1, indicando que os resultados estão dentro da faixa assintótica. Diante disso, a malha escolhida para representação dos resultados foi a 2, motivada pelo custo computacional ser inferior a malha 3. Com isso, gerou-se a malha para o bico injetor IMCA, a qual contém 7.024.518 volumes tetraédricos e 1.599.298 volumes prismáticos, totalizando 8.623.816 volumes.

6 VALIDAÇÕES

Segundo o *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, 1998 a validação é definida como “processo para determinar o grau que um modelo é uma representação do mundo real a partir da perspectiva dos usos pretendidos do modelo”.

Como o papel principal do CFD na engenharia é servir como uma ferramenta de alta fidelidade para design e análise, é essencial desenvolver um processo sistemático, racional e acessível de validação de código aplicável a uma ampla variedade de aplicações de engenharia. O processo utilizado neste trabalho está representado na Figura 6.1. O método de medir a precisão da representação do mundo real é feito através da comparação dos resultados das simulações de CFD com dados experimentais. Isso não implica que todos os dados experimentais tenham alta precisão, pois possuem erros de polarização e erros aleatórios.

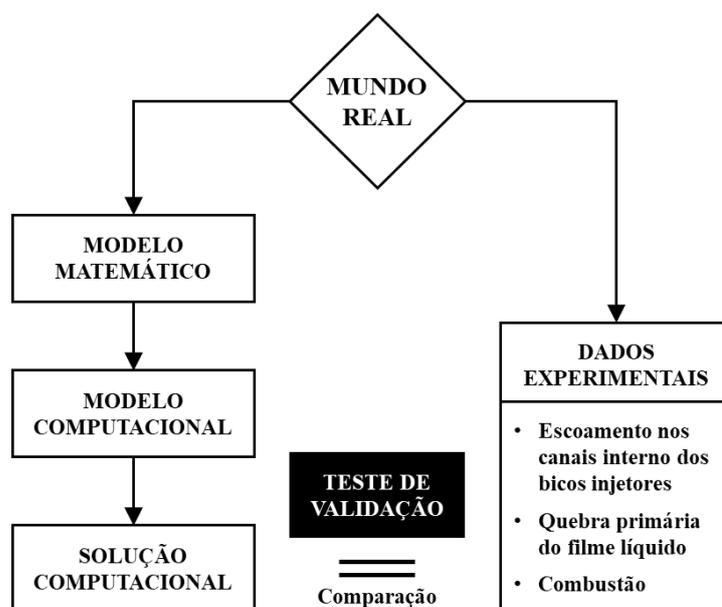


Figura 6.1: Procedimento de validação utilizado neste trabalho.

Como mostra a Figura 6.1, os modelos aplicados neste trabalho são confrontados com dados experimentais em três avaliações distintas, as quais, seguem neste Capítulo.

6.1 Escoamento nos Canais Internos dos Bicos Injetores e Quebra do Filme de Líquido em Gotas

Para a validação da simulação do escoamento nos canais internos do bico injetor utilizou-se dados dos trabalhos de Barreras et al., 2006a, 2006b, Ferreira et al., 2009a, 2009b e Barroso et al., 2014.

Barreras et al., 2006a realizaram um estudo experimental focado na caracterização do comportamento de dois modelos de atomizadores industriais de duplo fluido com múltiplos canais. Alguns dos parâmetros selecionados para o estudo foram o SMD, vazões mássicas de ar de atomização e líquido e pressões nas linhas. O líquido utilizado nos experimentos foi água. Os bicos injetores testados foram: um nomeado tipo Y comercial e outro com uma câmara de mistura interna. As geometrias de ambos os bicos injetores são semelhantes aos focos deste trabalho, porém possuem dimensões diferentes além de alguns detalhes construtivos. As dimensões desses bicos injetores são mostradas em detalhes na Figura 6.2.

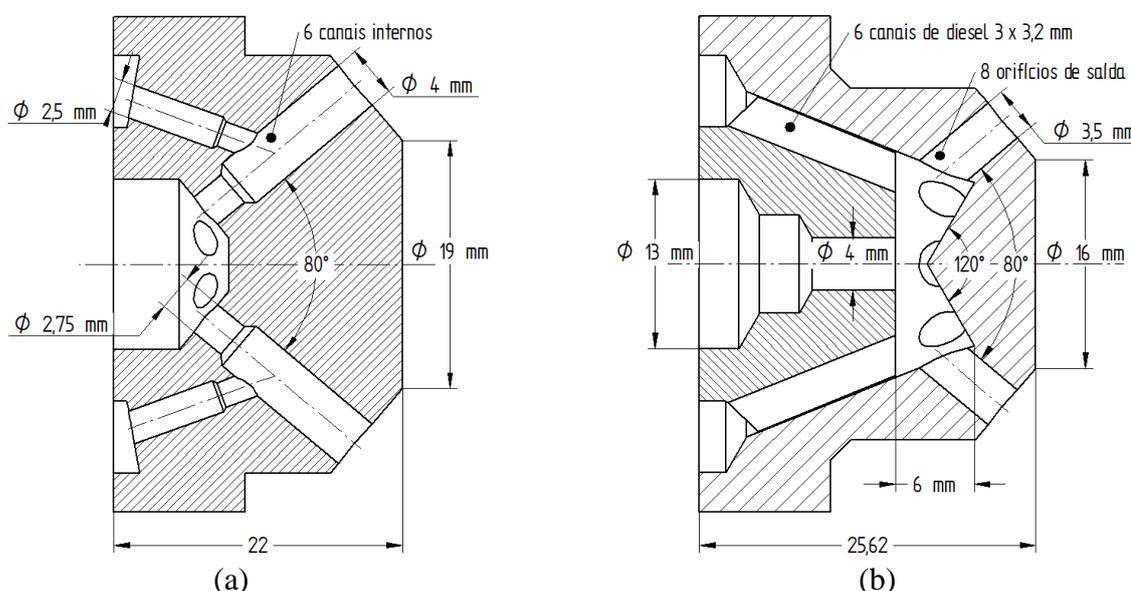


Figura 6.2: Desenho em corte central dos bicos injetores de Barreras et al., 2006a mostrando suas principais dimensões: (a) bico injetor tipo Y; (b) bico injetor com câmara de mistura interna.

O bico injetor tipo Y comercial, Figura 6.2-a, trata-se de um bico injetor com 6 canais independentes, onde ar e água se misturam pouco antes da saída do bico injetor, promovendo a mistura bifásica. O bico injetor com o conceito de câmara de mistura interna, Figura 6.2-b, é

formado por duas peças, onde ar de atomização entra por um único orifício central e água entra por 6 ranhuras de tamanho 3 x 3,2 mm. A mistura bifásica ocorre dentro da câmara de mistura e somente após a mistura sai por 8 orifícios de saída.

O estudo realizado por Barreras et al., 2006b veio em sequência com o intuito de compreender o comportamento do escoamento bifásico dentro da câmara de mistura interna do bico injetor. Foram realizados experimentos para diferentes diâmetros do canal central de ar e para várias vazões de ar e líquido. Os padrões de escoamento na câmara de mistura foram visualizados experimentalmente usando fluorescência induzida por laser e uma câmera de alta velocidade em um dispositivo ampliador.

Na mesma linha de estudos, Ferreira et al., 2009a, 2009b investigaram configurações do injetor com câmara de mistura interna. Os trabalhos foram dedicados a determinar a magnitude dos principais parâmetros que produzem os melhores resultados para bicos de duplo fluido com uma câmara de mistura interna. O foco destes estudos foi a interação dos fluxos de ar e líquido na câmara de mistura e seus efeitos no *spray* resultante. Para isso, foram realizadas experiências para diferentes diâmetros de canal central de ar e tamanhos de canais de líquido, bem como para várias condições experimentais (vazões mássicas de ar e líquido), a fim de entender a influência das condições de escoamento na câmara de mistura interna no tamanho das gotículas produzidas.

Por fim, Barroso et al., 2014 basearam-se nos experimentos anteriores para analisar o escoamento no bico injetor com câmara de mistura interna e propor correlações para descrever as condições de escoamento na câmara de mistura e nas características do *spray* final.

Devido à complexidade da captura de dados experimentais do escoamento nos canais internos dos bicos injetores, optou-se por duas formas de validação dos resultados: na primeira comparam-se o padrão do escoamento de um caso do bico injetor com câmara de mistura com o experimental de Barreras et al., 2006b e Ferreira et al., 2009b; na segunda comparam-se os dados experimentais e obtidos nas simulações de velocidade de saída da água e espessura de filme líquido nos orifícios de saída dos bicos injetores. Os dados obtidos nas simulações do escoamento bifásico nos canais internos dos bicos injetores também servem como condições de contorno para as simulações da quebra primária, discutidas adiante.

Desta forma, as condições de contorno consideradas são mostradas na Tabela 6.1.

Tabela 6.1: Condições de contorno das simulações do escoamento nos canais internos dos bicos injetores. [Fonte: Barreras et al., 2006a]

Caso	Vazão de água [kg/h]	Vazão de ar [kg/h]	Tipo Y		Câmara de mistura	
			Pressão ar [bar]	Pressão água [bar]	Pressão ar [bar]	Pressão água [bar]
1	950	52	2,9	1,1	3,4	1,6
2	950	100	3,3	2,3	4,9	3,2
3	950	120	3,5	2,8	5,4	3,9
4	950	160	3,8	4,0	6,3	5,2

Os estudos realizados por Barreras et al., 2006b e Ferreira et al., 2009b sugerem que quando uma vazão de ar é alta, a grande energia cinética do jato de ar causa a formação de um cilindro de ar no centro da câmara, e seus limites agem como um escudo, como pode ser visto no detalhe “a” da Figura 6.3. Quando esse jato colide com a base cônica ele é desviado, causando um destacamento do líquido dessa superfície, detalhe “b” da Figura 6.3.

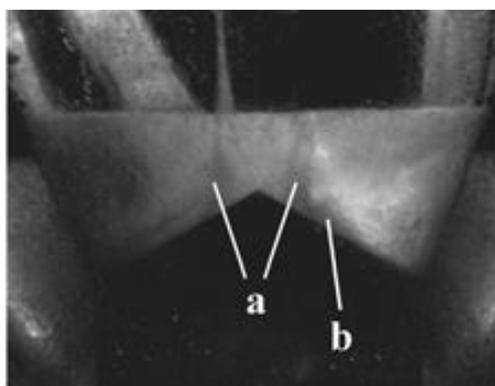


Figura 6.3: Fotografia mostrando o comportamento do escoamento bifásico no interior da câmara de mistura. Na imagem “a” é o cilindro formado pelo escoamento de ar e “b” é a colisão do jato de ar com a base cônica. [Fonte: Barreras et al., 2006b]

Na Figura 6.4, o efeito discutido acima da interação ar-água é claramente observado. Na imagem, o cilindro causado pela corrente de ar fica perfeitamente visível, bem como seu impacto na base cônica. Essa condição também é responsável pela formação de outro vórtice na parte direita da câmara que surge pelo desprendimento do líquido.

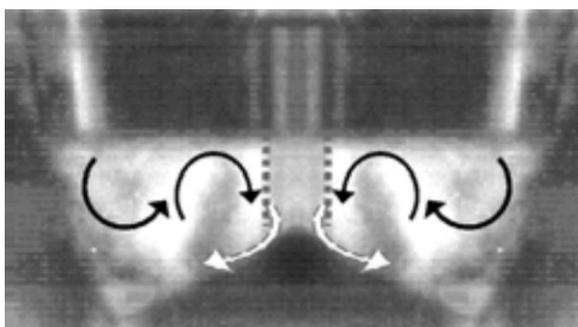


Figura 6.4: Fotografia mostrando as estruturas formadas devido ao comportamento do escoamento no interior da câmara de mistura. [Fonte: Barreras et al. 2006b]

A análise da evolução do comportamento do escoamento bifásico no interior da câmara, tanto em imagens estáticas quanto em filmagens, revela a presença de estruturas em forma de vórtices girando em direção ao centro do bico. Analisando o bico injetor inteiro, o caminho do escoamento bifásico pode ser explicado por uma estrutura toroidal que preenche a câmara de mistura, como é mostrado um esquema na Figura 6.5. O sentido de rotação da estrutura toroidal é consequência da maior quantidade de movimento do ar comparado à água, portanto, acredita-se que o surgimento dessa estrutura se deva a esse motivo.

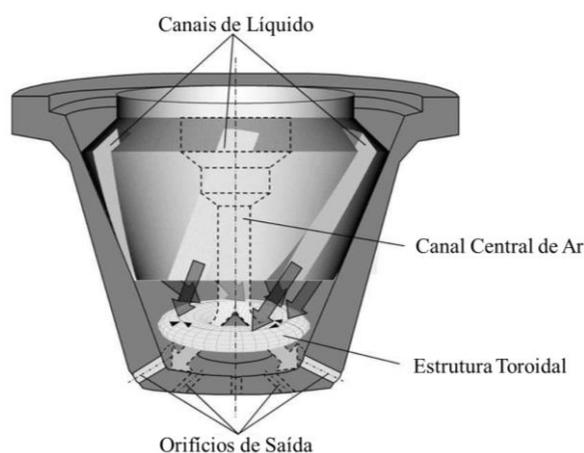


Figura 6.5: Esboço da formação de uma estrutura toroidal pela interação de fluxo bifásico na câmara de mistura no interior do bico injetor. [Adaptado de Ferreira et al. 2009b]

Na Figura 6.6 são mostrados resultados do campo de velocidade (a) e vetores de velocidade (b) em um plano central ao bico injetor da simulação do Caso 2. A malha computacional utilizada para a avaliação dos bicos injetores segue o mesmo padrão das malhas geradas para os bicos injetores foco deste trabalho, descrita na Seção 5.1.2.

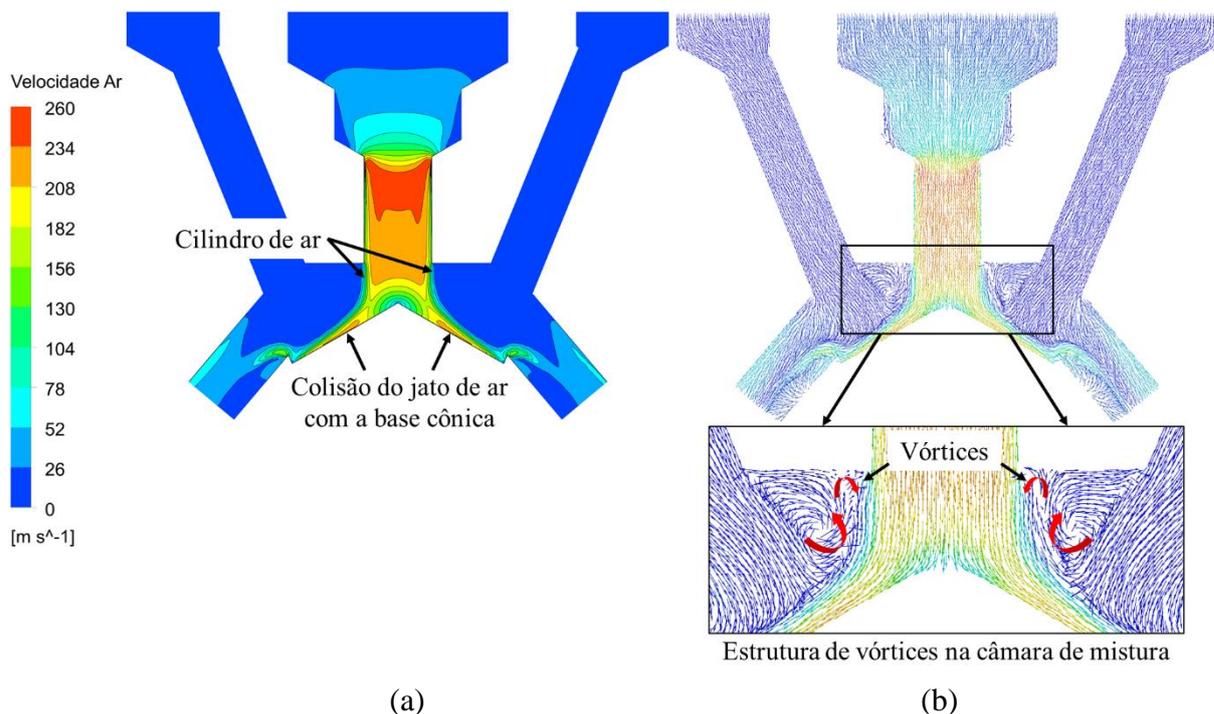


Figura 6.6: Resultados da simulação do Caso 2 do bico injetor com a câmara de mistura interna: (a) campo de velocidades no plano central do bico injetor com indicação do local de colisão do jato de ar com a base cônica; (b) vetores de velocidade no plano central do bico injetor mostrando a estruturas de vórtices no interior da câmara de combustão.

É possível observar na Figura 6.6 que as estruturas descritas por Barreras et al., 2006b e Ferreira et al., 2009b, mostradas na Figura 6.3 e Figura 6.4, estão presentes nos resultados da simulação, mostrando que o modelo foi capaz de captar esses fenômenos. Da mesma forma, na Figura 6.7 apresenta-se as linhas de corrente do escoamento de água (a) e de ar (b). Aqui pode-se ver claramente as regiões de formação de vórtices assim como a estrutura toroidal que se forma no interior da câmara de mistura, principalmente na corrente de água, confirmando as afirmações de Ferreira et al., 2009b.

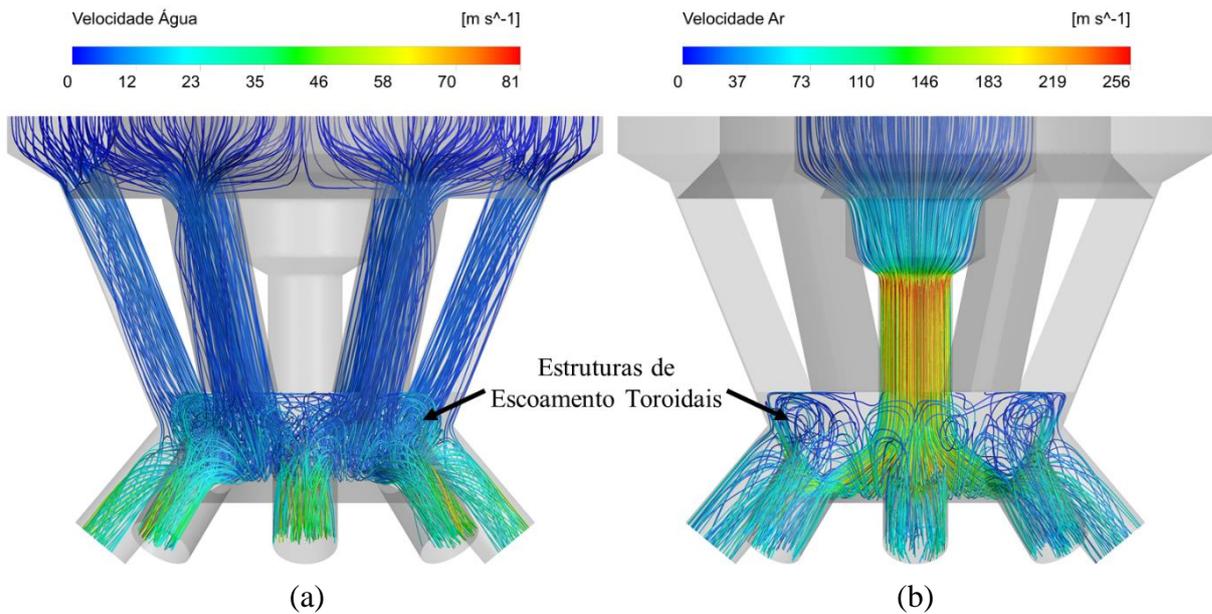


Figura 6.7: Resultado da simulação do Caso 2 para linhas de corrente do escoamento com cores indicando velocidade no bico injetor com câmara de mistura interna: (a) linhas de corrente do escoamento de água; (b) linhas de corrente do escoamento de ar.

É importante salientar que todas os casos simulados apresentam o mesmo comportamento por terem vazões mássicas de ar consideravelmente altas.

Uma comparação dos valores de velocidade do escoamento de água, medidos nos orifícios de saída dos bicos injetores, entre os valores experimentais de Barreras et al., 2006a e os obtidos nas simulações deste trabalho é mostrada na Tabela 6.2, da mesma forma, na Tabela 6.3 são comparados os valores da espessura de filme líquido nos orifícios de saída dos bicos injetores.

Tabela 6.2: Velocidade da água medida nos orifícios de saída dos bicos injetores para os 4 casos do experimental de Barreras et al., 2006a e simuladas neste trabalho.

Caso	Velocidade Água		Velocidade Água	
	Bico Y [m/s]		Bico Câmara Mistura [m/s]	
	Barreras et al., 2006a	Simulado	Barreras et al., 2006a	Simulado
1	22,83	20,19	26,58	23,42
2	26,89	31,16	30,36	32,82
3	27,88	32,29	33,56	34,37
4	28,74	34,98	36,25	37,12

Tabela 6.3: Espessura de Filme Líquido medida nos orifícios de saída dos bicos injetores para os 4 casos do experimental de Barreras et al., 2006a e simuladas neste trabalho.

Caso	Espessura de Filme Líquido Bico Y [mm]		Espessura de Filme Líquido Bico Câmara Mistura [mm]	
	Barreras et al., 2006a	Simulado	Barreras et al., 2006a	Simulado
	1	0,160	0,144	0,117
2	0,135	0,135	0,102	0,095
3	0,130	0,131	0,092	0,091
4	0,126	0,123	0,085	0,084

É possível notar que as diferenças apresentadas na Tabela 6.2 e Tabela 6.3 são pequenas, confirmando a precisão do modelo simulado.

Deve-se notar que, embora nos experimentos os canais de líquido sejam inclinados em 20° para induzir uma rotação da estrutura toroidal em torno de um eixo vertical, aumentando o tempo de permanência da mistura na câmara interna, foi mostrado por Ferreira et al., 2009a que o efeito desse movimento no SMD é insignificante, provavelmente devido ao curto tempo de permanência real do fluxo bifásico dentro da câmara. Por isso nas simulações não se considerou essa inclinação. Pode-se concluir neste ponto que a cavidade atua como uma câmara de mistura e não como uma câmara de turbilhão. O vórtice aprimora a mistura gás-líquido, entendendo por este conceito que o grau de mistura entre os dois fluidos é maior quando se forma um escoamento bifásico borbulhante homogêneo com bolhas de tamanhos menores. Nesse sentido, pode-se dizer que esse bico opera mais como um atomizador efervescente do que como um bico injetor do tipo Y, com jato de ar.

Para validar a quebra do filme líquido, gerado pelos bicos injetores, em gotas, utilizou-se resultados das simulações do escoamento nos canais internos como condição de contorno. Os dados de vazão e pressão são mostrados na Tabela 6.1, na Tabela 6.2 são mostrados os dados de velocidade do líquido e na Tabela 6.3 foram mostrados os dados de espessura de filme. Além desses dados, utilizou-se também dados de turbulência, os quais são apresentados na Tabela 6.4.

Tabela 6.4: Dados médios de turbulência nos orifícios de saída dos bicos injetores resultados das simulações.

Caso	Bico Injetor Y		Bico Injetor Câmara de Mistura	
	Energia Cinética Turbulenta	Dissipação de Turbulência	Energia Cinética Turbulenta	Dissipação de Turbulência
	[m ² /s ²]	[m ² /s ³] x10 ⁷	[m ² /s ²]	[m ² /s ³] x10 ⁷
1	76,741	0,359	92,839	0,498
2	239,568	4,121	171,502	1,085
3	248,584	4,685	203,682	1,308
4	256,549	4,909	219,199	1,449

Foi considerado um domínio hipotético para estas simulações, mostrado na Figura 6.8, onde a entrada de água e ar representa apenas um orifício de cada bico injetor com o intuito de ir ao encontro das condições experimentais dos artigos de Barreras et al., 2006a e Ferreira et al., 2009a, 2009b. As gotas foram rastreadas através de uma abordagem Lagrangeana, em um escoamento não reativo, isotérmico e em regime permanente. Utilizou-se o modelo LISA para representar a quebra primária das gotas. O número de gotas rastreadas na simulação foi de 10 mil.

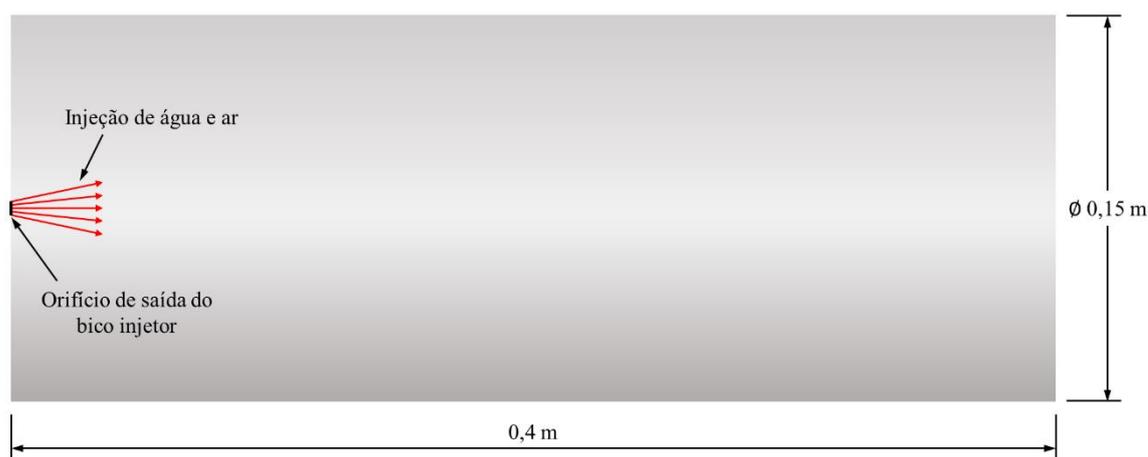


Figura 6.8: Domínio hipotético criado para simulação da quebra primária das gotas.

A malha computacional considerada neste estudo é uma malha estruturada possuindo 245 divisões longitudinais, 54 divisões radiais e 152 divisões no perímetro, totalizando

aproximadamente 2,2 milhões de volumes de controle. Refinamento extra foi dado na região de injeção da água e ar.

A qualidade do *spray* foi determinada a partir do SMD. O local de medição dos experimentais está localizado a 42 diâmetros a jusante do orifício de saída do bico injetor e tem um diâmetro de medição de 9 mm.

Valores do SMD como função da vazão de ar de atomização do experimento de Ferreira et al., 2009 e do modelo simulado no presente trabalho para o bico injetor tipo Y e o com câmara de mistura interna são mostrados na Figura 6.9.

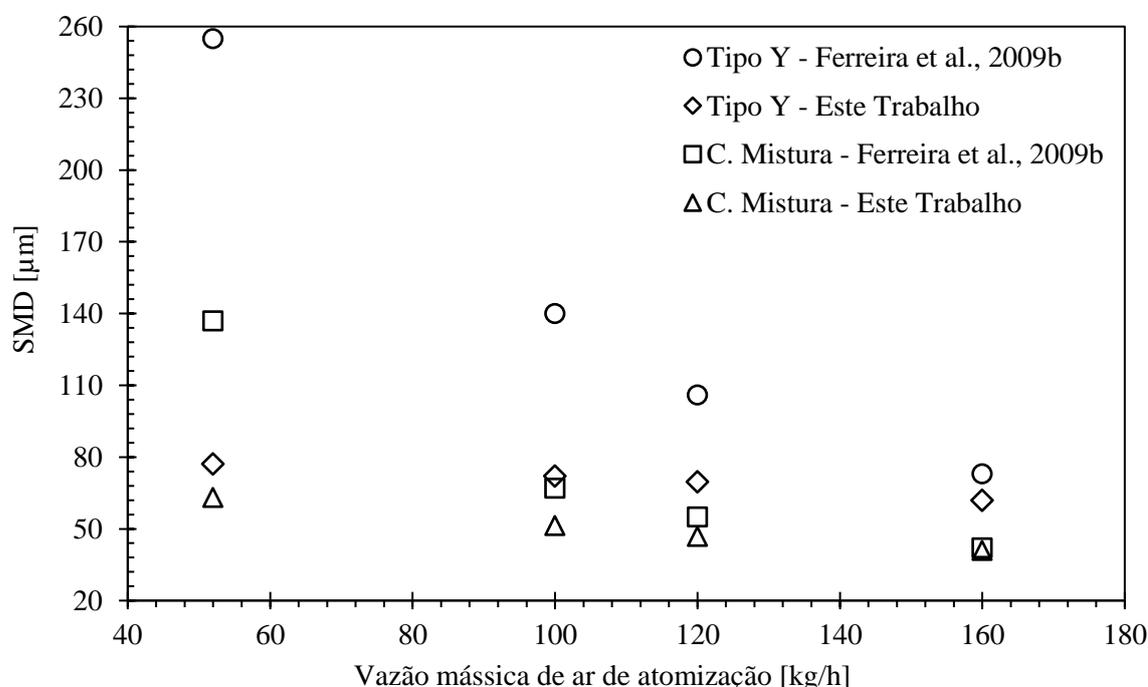


Figura 6.9: Comparação dos valores experimentais de Ferreira et al., 2009b e resultados obtidos nas simulações do SMD em função da vazão mássica de ar de atomização medido 42 diâmetros a jusante da saída do bico injetor para os dois bicos injetores. Na legenda da imagem “C. Mistura” se refere ao bico injetor com câmara de mistura.

Analisando a Figura 6.9 é possível observar que os valores do SMD de ambos os bicos injetores tiveram grande erro para baixas vazões mássicas de ar de atomização. À medida que a proporção de ar de atomização é aumentada, os valores de SMD tendem a ficarem mais próximos, por exemplo, para uma vazão de ar de 160 kg/h os valores encontrados do SMD

para o bico injetor tipo Y apresentam 17,5% de erro enquanto que para o bico injetor com câmara de mistura apresenta apenas 2,6% de erro.

Embora os dois bicos injetores foco deste estudo trabalhem com vazão mássica de ar de atomização superior a 140 kg/h, zona onde a formulação apresentou uma melhor concordância, optou-se por fazer uma calibração do modelo para correção no tamanho de gota produzida pelo modelo para garantir maior precisão em toda a faixa de vazões.

No contexto de simulações de CFD, calibração é definida pelo *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, 1998 como “processo de ajuste de parâmetros da modelagem numérica no modelo computacional com o objetivo de melhorar a concordância com os dados experimentais”. Portanto, a ideia foi encontrar uma equação que represente a proporção da diferença entre o valor simulado e o experimental em função da vazão de ar de atomização. Dessa forma, pode-se adicionar essa equação na forma de um novo fator multiplicando o lado direito da Equação (3.83), chamado de fator de correção de tamanho de gota. As equações foram traçadas para os dois bicos injetores, sendo apresentadas na Figura 6.10.

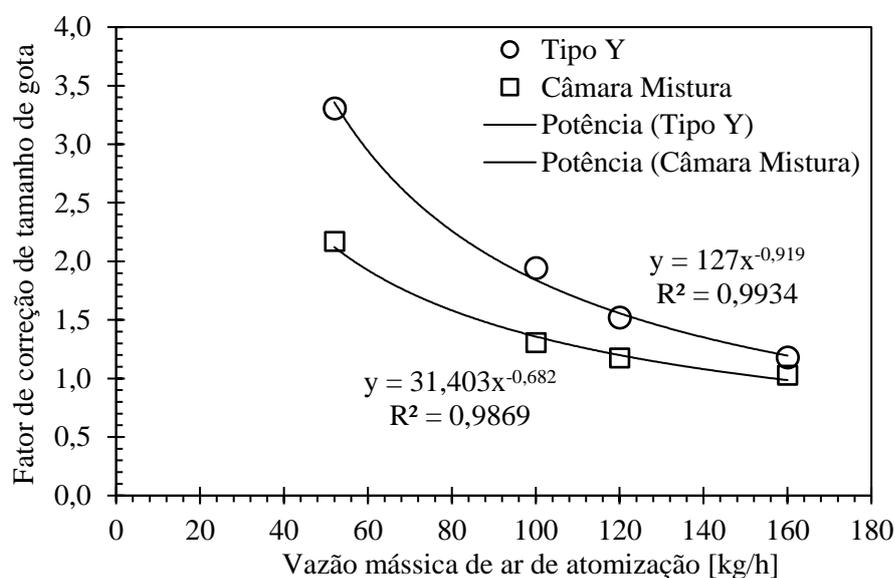


Figura 6.10: Equações para o fator de correção de tamanho de gota em função da vazão mássica de ar de atomização.

As equações resultantes para o cálculo do fator de correção de gota para o bico injetor tipo Y e o com câmara de mistura interna, respectivamente, são:

$$y = 127x^{-0,919} \quad (6.1)$$

$$y = 31,403x^{-0,682} \quad (6.2)$$

Nas Equações (6.1) e (6.2) y é o fator de correção de tamanho de gota e x é a vazão mássica de ar de atomização.

Inserindo as equações no *software* e simulando novamente os 4 casos obteve-se os resultados mostrados na Figura 6.11. É possível ver claramente que todos os resultados são muito próximos aos experimentais, tendo erros desprezíveis.

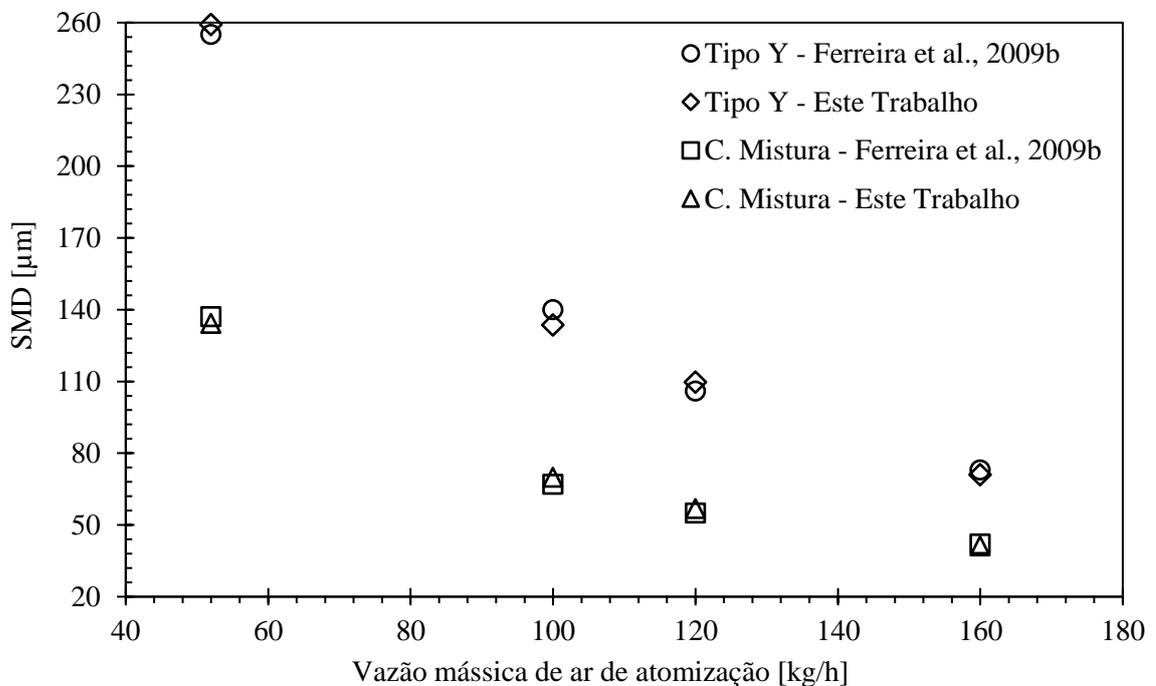


Figura 6.11: Comparação dos valores experimentais de Ferreira et al., 2009b e resultados obtidos nas simulações considerando o fator de correção de tamanho de gota do SMD em função da vazão mássica de ar de atomização medido 42 diâmetros a jusante da saída do bico injetor para os dois bicos injetores. Na legenda da imagem “C. Mistura” se refere ao bico injetor com câmara de mistura.

6.2 Validação Combustão

Para a validação da simulação da combustão de diesel, utilizou-se os dados do trabalho de Young et al., 1994.

O objetivo principal do trabalho de Young et al., 1994 foi o desenvolvimento de um banco de dados para modelagem e previsão computacional. Mapas detalhados para as três principais propriedades escalares – fração volumétrica de fuligem, temperatura e fração de mistura – foram construídos para chamas turbulentas de jatos de querosene pré-evaporado, queimando em uma junta a uma corrente de ar, confinada em uma câmara cilíndrica de vidro de borossilicato com acesso óptico, o que permite a operação com pressão elevada. A temperatura foi medida por um termopar de fio fino com diâmetro de 50 μm incorporando-se uma correção referente a radiação média, baseada na troca com o tubo de borossilicato a uma temperatura de parede assumida de 600 K.

As distribuições da fração de mistura foram determinadas por amostragem por microsonda e análise espectrométrica de massa. Amostras da mistura local foram retiradas da chama através de um orifício de 0,5 mm para um tubo de quartzo, onde foram misturadas com oxigênio adicional e reagiram sobre um catalisador de platina aquecido. Todo o carbono da amostra ingerida foi oxidado e em CO_2 . A fração da mistura foi inferida a partir da razão de massa de CO_2 para N_2 , medida em um pequeno espectrômetro de massa quadruplo.

Os autores ainda mostram dados relativos à fração volumétrica de fuligem, contudo, neste trabalho não foi implementado nenhum modelo para tratar a fuligem, sendo assim não considerada como parâmetro de comparação para a validação do presente modelo de combustão.

A chama turbulenta está contida dentro de um tubo de vidro borossilicato de 155 mm de diâmetro, montado em um vaso de pressão projetado para suportar uma pressão de trabalho de 17,5 bar. O queimador compreende um bico com orifício cilíndrico de 1,5 mm de diâmetro, rodeado por uma fenda anular coaxial de 0,25mm de largura. O jato do queimador pode ser deslocado verticalmente dentro do vaso de pressão, permitindo acesso a aproximadamente 450 mm da altura da chama. Todas as posições em relação ao diâmetro do tubo de vidro de borossilicato são acessíveis pela sonda de amostragem e o termopar. O domínio computacional considerado no estudo é mostrado na Figura 6.12. A malha computacional gerada para o estudo é uma malha estruturada composta por 4,2 milhões de volumes de controle hexaédricos.

O querosene é pré-vaporizado em uma pré-câmara de latão, aquecida por resistências térmicas, na qual combustível é pulverizado através de um bico resfriado a água de 0,5mm de

diâmetro. A pré-câmara é mantida a uma temperatura de 800 K e o vapor de querosene evaporado é descarregado a uma temperatura de 600 K. Embora os dados de Young et al., 1994 tratem de uma chama de querosene, e não de diesel, é uma prática comum em modelagem numérica da sua combustão modelar o querosene como *n*-decano. Por esse motivo essa escolha foi tomada neste trabalho.

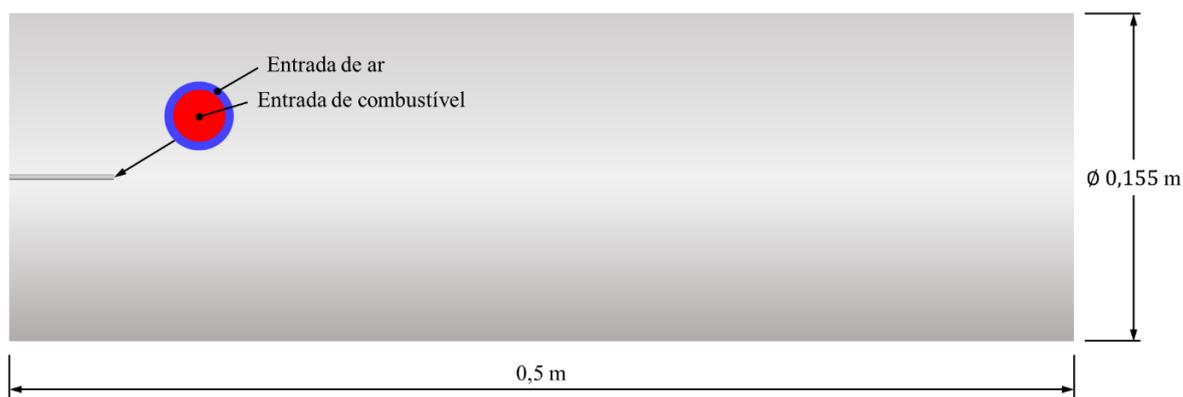


Figura 6.12: Domínio computacional representando a câmara de combustão do estudo de Young et al., 1994.

As condições de contorno utilizadas para a simulação se encontram na Tabela 6.5.

Tabela 6.5: Condições de contorno para simulação de validação da combustão. [Fonte: Young et al., 1994]

Dado	Valor
Pressão na câmara	1 bar
Vazão mássica de combustível	8 g/min
Temperatura do combustível	598 K
Velocidade do ar no orifício anular	0,23 m/s

As distribuições de velocidade e temperatura foram avaliadas em duas posições na câmara de combustão, a 205 mm e 300 mm do ponto de injeção. A distribuição é dada em função da coordenada radial. As comparações dos resultados da simulação com o modelo do presente trabalho com os dados experimentais de Young et al., 1994 são mostradas na Figura 6.13 para a posição de 205 mm e na Figura 6.14 para a posição de 300 mm. Para melhor observação, as variáveis são normalizadas conforme dados mostrados nas figuras.

Analisando os gráficos, nota-se que as maiores divergências de temperatura ocorreram na região de pico, enquanto as maiores divergências para a fração de mistura se dão no centro da câmara para ambas as posições avaliadas. O comportamento de ambas as variáveis obtidas pela simulação é coerente com o comportamento dos dados experimentais, mostrando a eficácia da modelagem para representar a combustão.

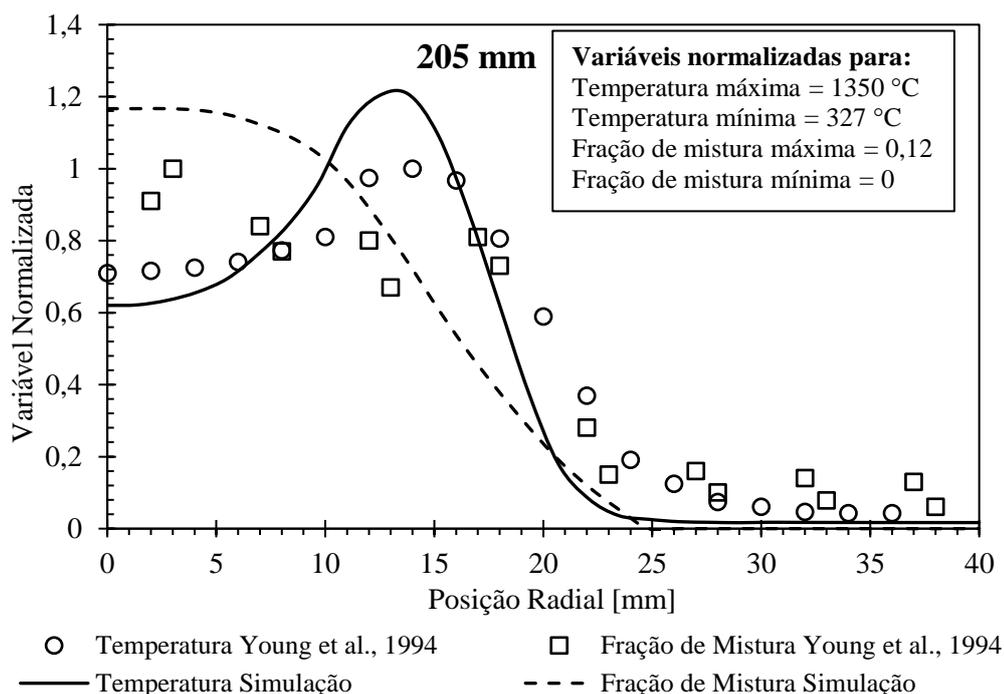


Figura 6.13: Comparação dos valores experimentais de Young et al., 1994 e resultados obtidos por simulação da temperatura e fração de mistura normalizados ao longo de uma linha radial a 205 mm de distância do ponto de injeção.

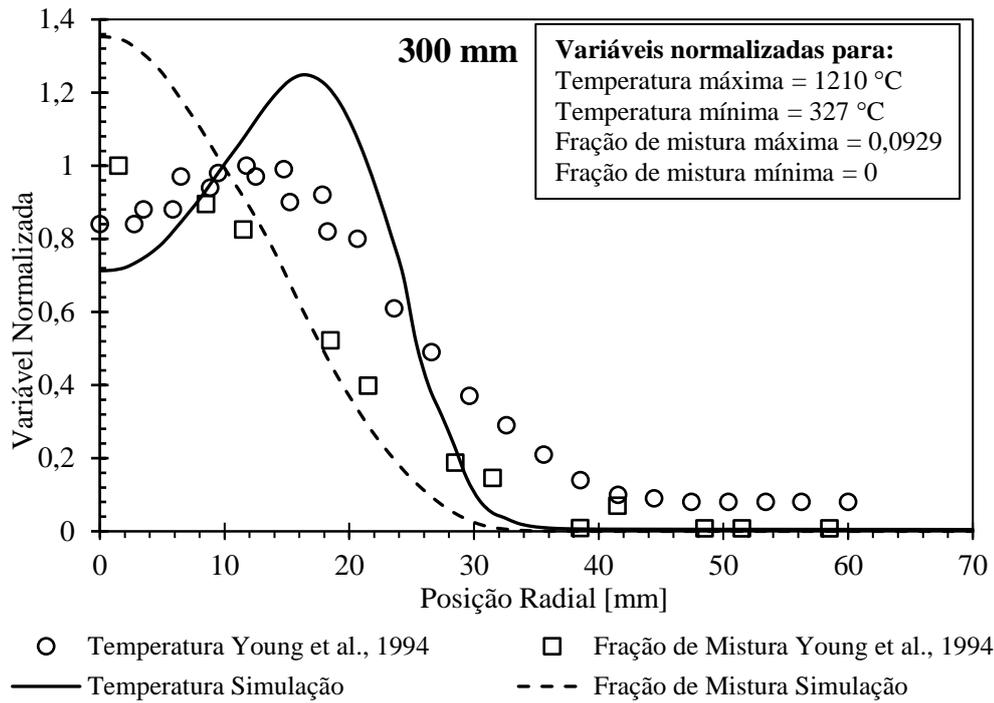


Figura 6.14: Comparação dos valores experimentais de Young et al., 1994 e resultados obtidos por simulação da temperatura e fração de mistura normalizados ao longo de uma linha radial a 300 mm de distância do ponto de injeção.

7 RESULTADOS

Nesta seção apresenta-se os resultados obtidos por meio das simulações numéricas. Na Seção 7.1 são relatados os resultados para as simulações do escoamento multifásico nos orifícios internos dos bicos injetores. Na Seção 7.2 são relatados os resultados da combustão dos *sprays* gerados pelos bicos injetores.

7.1 Escoamento Multifásico Interno nos Bicos Injetores

A Tabela 7.1 apresenta alguns dados médios nos orifícios de saída dos bicos injetores. Estes dados foram adotados como condições de entrada para a avaliação da combustão proporcionada por ambos os bicos injetores. Infelizmente não foi possível realizar a simulação num mesmo domínio considerando-se o escoamento interno e externo (numa câmara de combustão) dos bicos, pois a capacidade computacional para isto excedia a capacidade instalada.

Tabela 7.1: Dados nos orifícios de saída dos bicos injetores obtidos nas simulações.

Dado	Injetor Y	Injetor IMCA
Vazão mássica diesel [kg/s]	0,273	0,251
Vazão mássica ar [kg/s]	0,048	0,040
Velocidade diesel saída [m/s]	43,821	53,126
Velocidade ar saída [m/s]	126,294	88,152
Espessura de filme líquido [mm]	0,138	0,078
Fração volumétrica média de diesel na saída ¹	0,689	0,485
Energia cinética turbulenta saída do diesel [J/kg]	10,151	38,333
Energia cinética turbulenta saída do ar [J/kg]	151,169	175,417
Dissipação turbulenta do diesel [m ² /s ³]	0,665x10 ⁶	1,037x10 ⁶
Dissipação turbulenta do ar [m ² /s ³]	1,280x10 ⁷	1,362x10 ⁷

¹Média efetuada sobre a fração mássica.

Em função das características geométricas de cada bico injetor, as quais oferecem diferentes perdas de carga, verifica-se para o bico injetor IMCA uma redução de vazão tanto

de ar como de diesel. Com relação a vazão de diesel, tem-se uma redução de 0,273 kg/s do bico tipo Y para 0,251 kg/s no bico IMCA, representando em uma redução no consumo de diesel de 9%. Para a vazão de ar de atomização, tem-se uma redução de 16%. A redução na proporção ar/combustível altera as condições de queima, avaliadas mais a frente, na sequência do estudo.

Citando como exemplo, pode-se avaliar uma partida da unidade UG2 da Usina Termoeletrica de Pecém, que aconteceu no dia 28 de junho de 2018 e durou das 17:29 até 23:45 horas. Para traçar essa partida foram coletados dados do sistema com intervalo de 2 minutos e então feitos os cálculos da vazão de diesel com os valores de vazões da Tabela 7.1 para os dois bicos injetores. Nesse caso, se a unidade estivesse operando com o atual bico injetor, teria gastado um total de 29,56 m³ de diesel, se estivesse operando com o novo bico injetor IMCA teria gastado 27,18 m³ de diesel, representando uma economia total de 2380 litros de diesel.

A redução da velocidade média de ar na saída para o bico IMCA é explicada pelo fato de que maior quantidade de movimento é transferida do ar para o diesel, e por esse motivo se observa uma maior velocidade do diesel na saída no bico IMCA. Isso indica que a interação ar/combustível foi maior, proporcionando maiores instabilidades aerodinâmicas no diesel, que contribuirá para a quebra mais eficiente do filme em gotas. Esse é um dos motivos também para a energia cinética turbulenta ser maior na saída do bico IMCA.

Observa-se também uma menor fração de diesel na saída para o caso do bico IMCA. Esse é um importante dado, pois significa que a mistura ar/combustível está mais homogênea, estabelecendo que a expansão do ar após a saída do bico afetará mais o filme diesel, o que também indica melhora na condição de quebra do filme em gotas.

A seguir, apresentam-se algumas imagens em planos de corte sobre os bicos com a distribuição de algumas propriedades importantes do escoamento, ajudando a entender melhor os motivos das diferenças dos resultados mostrados na Tabela 7.1.

A Figura 7.1 apresenta um campo de distribuição de pressão em um plano de corte central para ambos os bicos injetores.

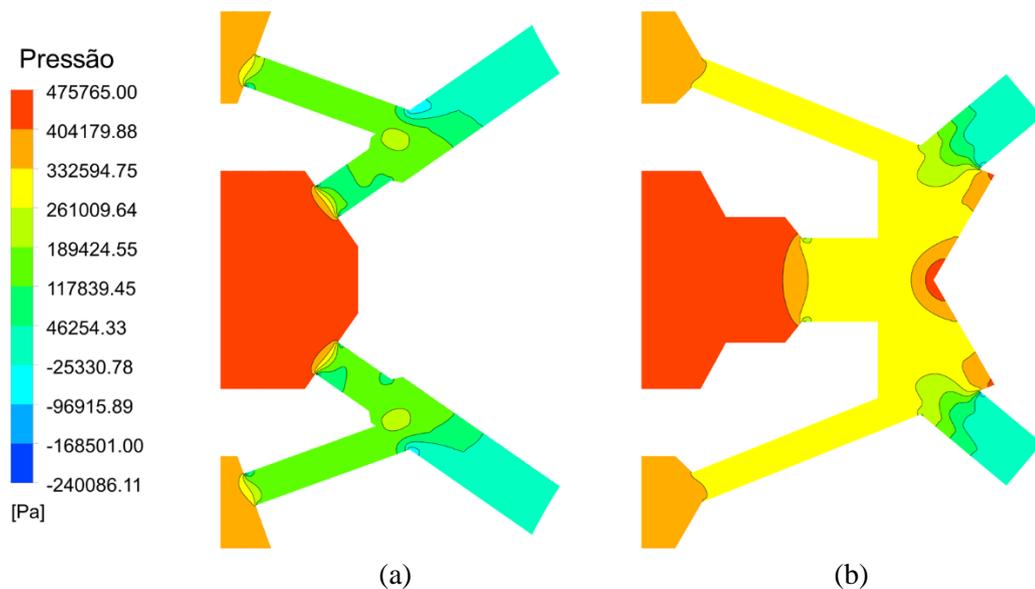


Figura 7.1: Campo de distribuição de pressão em um plano de corte central aos bicos injetores: (a) bico injetor Y; (b) bico injetor IMCA.

Observa-se no bico IMCA como a expansão do ar acontece de forma mais rápida, contribuindo para uma melhor homogeneização das pressões nos orifícios de saída, homogeneizando também as características dos jatos de saída, bem como garantindo uma melhor uniformidade na distribuição de vazão entre os orifícios de saída.

A Figura 7.2 apresenta o resultado para as linhas de corrente do escoamento de ar no interior dos bicos injetores relacionando a escala de velocidades com a velocidade do ar. A Figura 7.3 apresenta o resultado para as linhas de corrente do escoamento de diesel no interior dos bicos injetores relacionando a escala de velocidades com a velocidade do diesel.

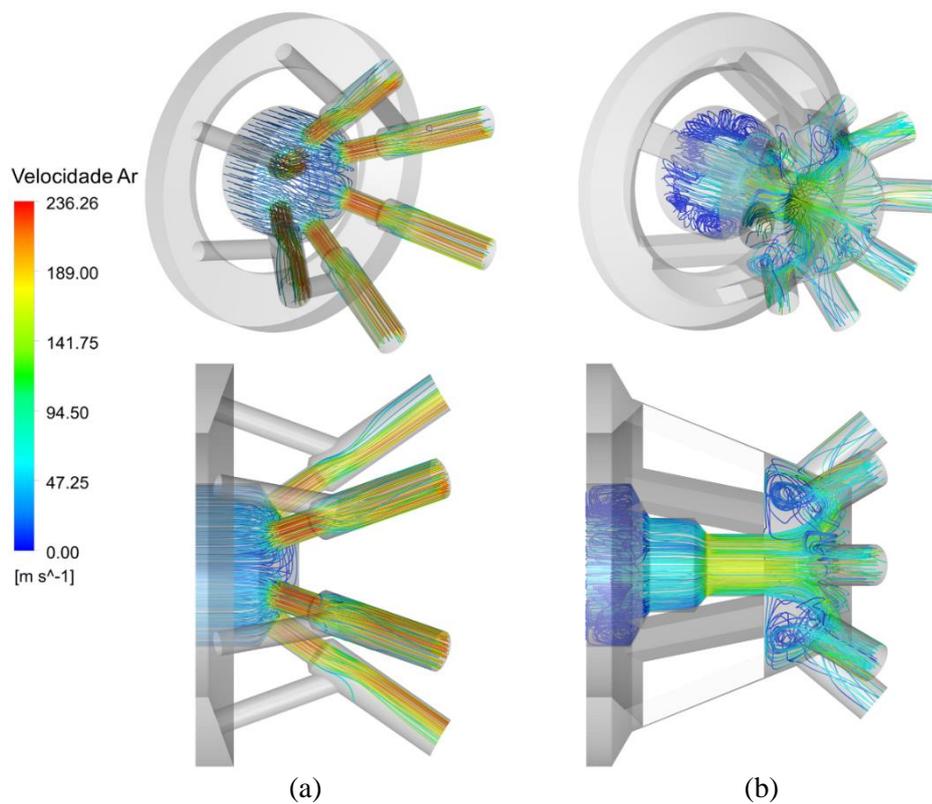


Figura 7.2: Linhas de corrente do escoamento de ar no interior dos injetores com cores indicando magnitude da velocidade do ar: (a) bico injetor Y; (b) bico injetor IMCA.

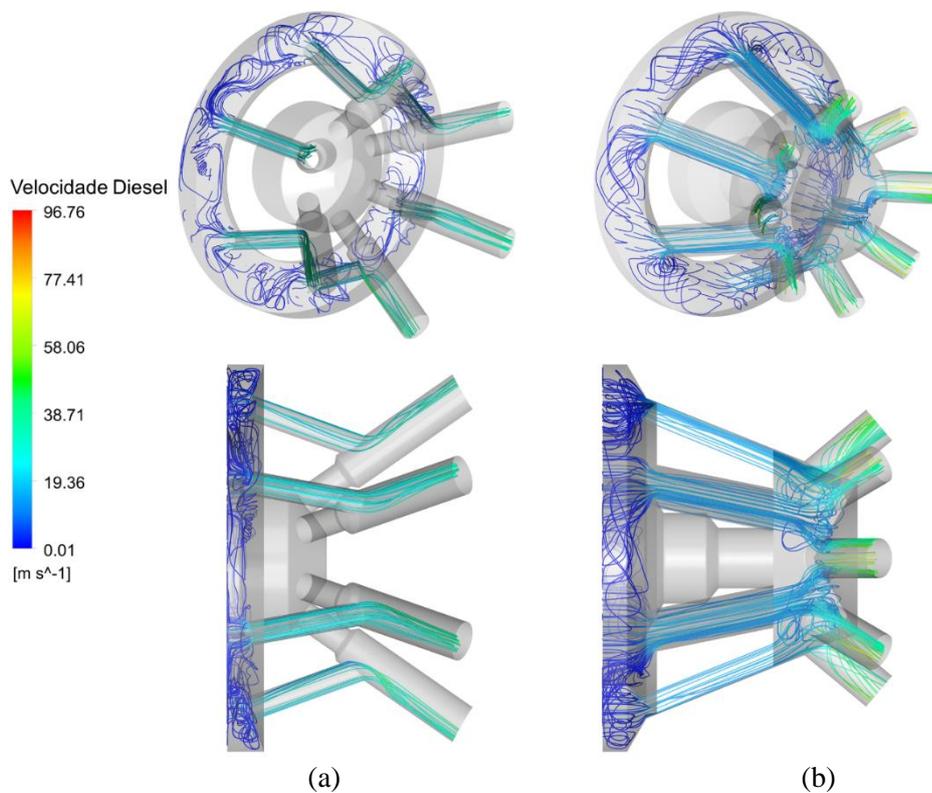


Figura 7.3: Linhas de corrente do escoamento de diesel no interior dos injetores com cores indicando magnitude da velocidade do diesel: (a) bico injetor Y; (b) bico injetor IMCA.

Observa-se que a câmara de mistura tem maior capacidade para misturar o ar e o diesel, alterando as condições dos jatos de saída, tais como espessura do filme líquido e, como consequência, da quebra deste filme e a formação das gotas.

Com relação as velocidades do diesel, constata-se que o bico IMCA proporciona maiores arrastos e, por consequência, maiores velocidades de saída de diesel, promovendo uma injeção de líquido na câmara de combustão com maior energia cinética, o que promove uma quebra do filme líquido em gotas menores, alterando as condições de queima, facilitando a vaporização das gotas e a combustão.

A Figura 7.4 apresenta campos de velocidade e campos de vetores velocidade para ambos os bicos no mesmo plano de corte da Figura 7.1. Na Figura 7.5 é mostrada a distribuição de velocidade nos orifícios de saída dos bicos injetores.

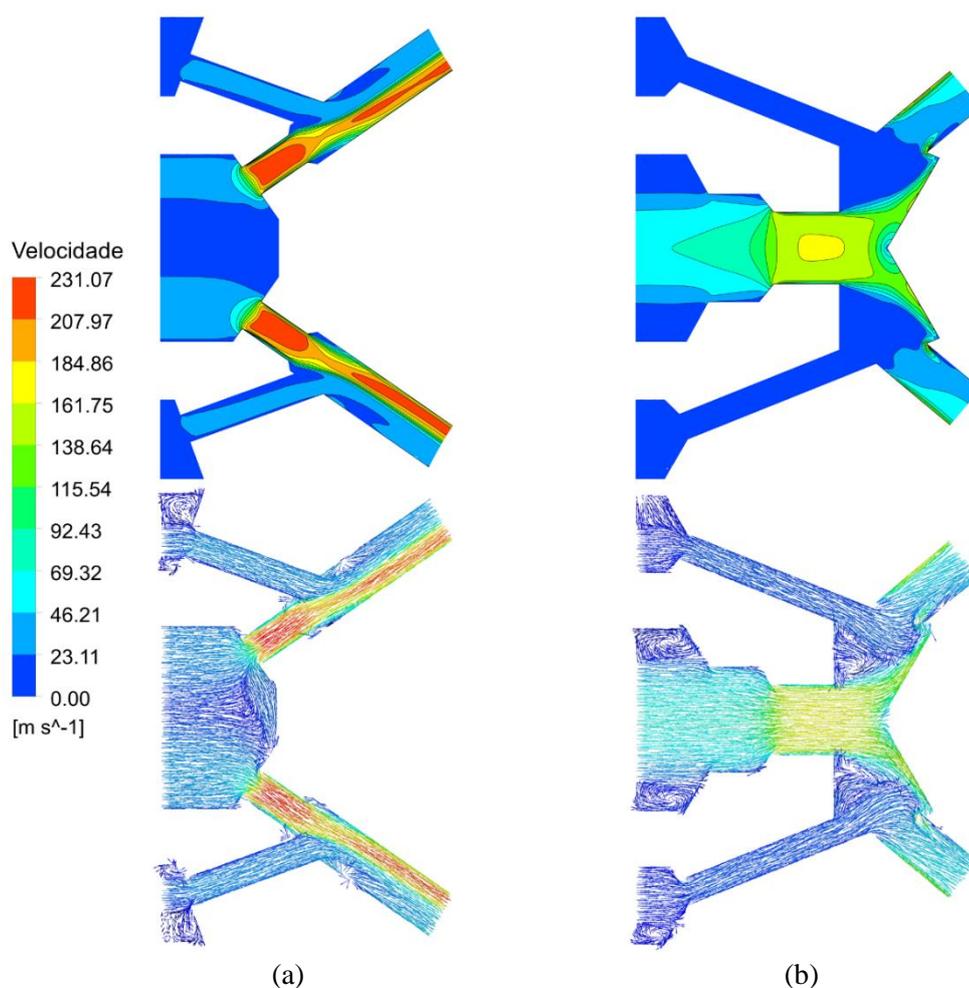


Figura 7.4: Campo de velocidade (em cima) e vetores (em baixo) em um plano central aos injetores: (a) bico injetor Y; (b) bico injetor IMCA.

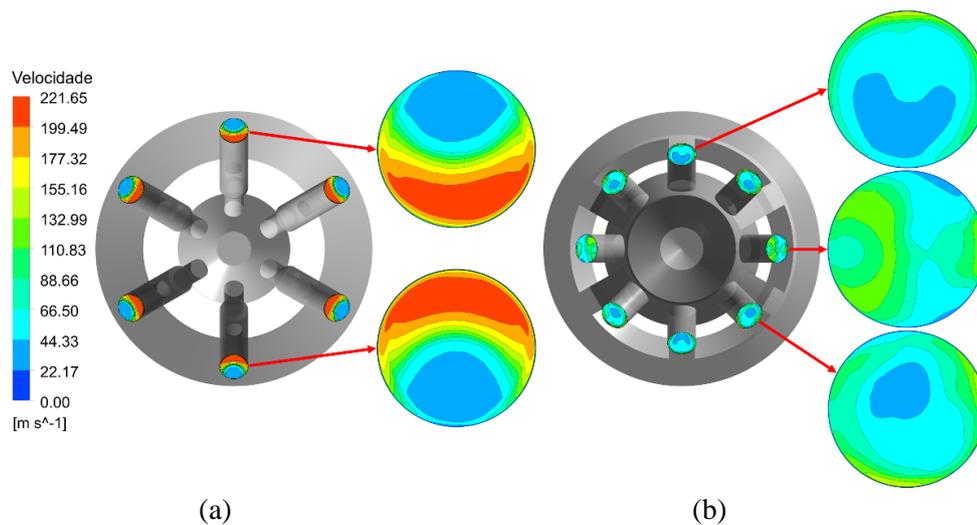


Figura 7.5: Distribuição da velocidade nos orifícios de saída do injetor: (a) bico injetor Y; (b) bico injetor IMCA.

As Figura 7.6 e Figura 7.7 apresentam resultados da fração volumétrica de diesel no plano em corte já apresentado e em detalhes nos orifícios de saída.

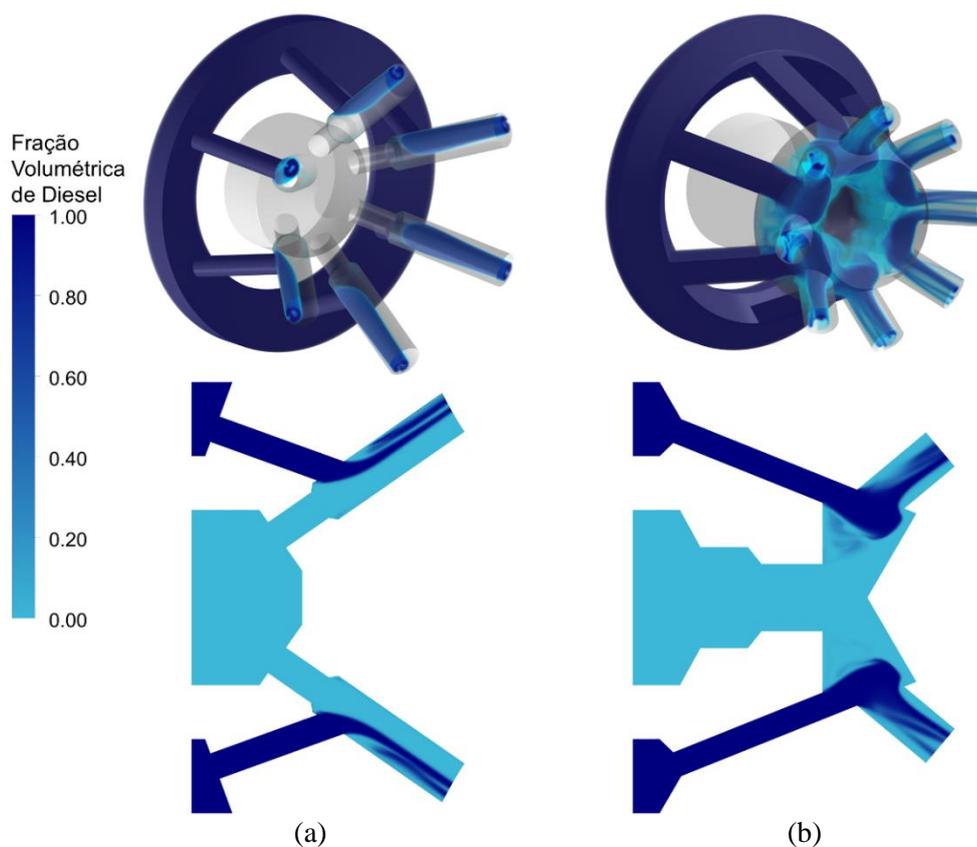


Figura 7.6: Campo de fração de volume de diesel em vista isométrica (em cima) e em um plano no central aos injetores (em baixo): (a) bico injetor Y; (b) bico injetor IMCA.

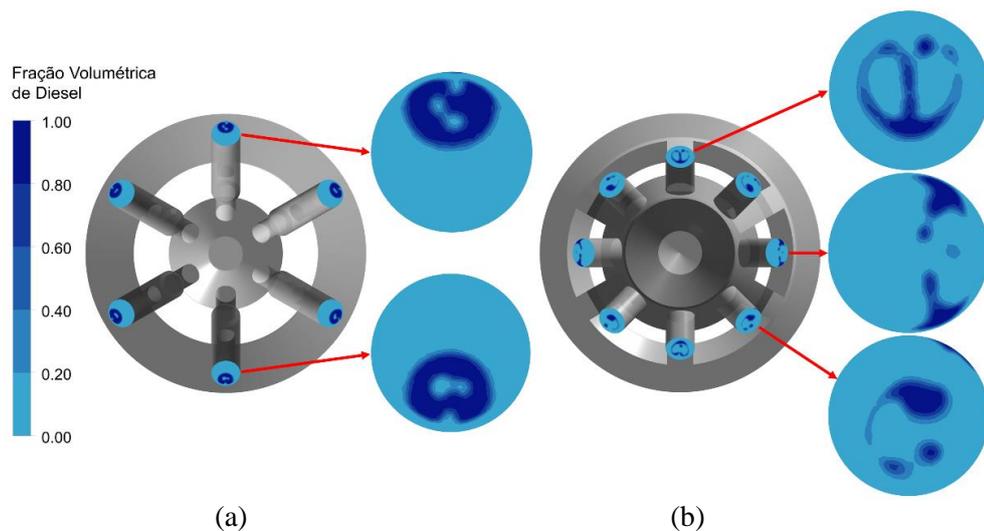


Figura 7.7: Distribuição da fração volumétrica de diesel nos orifícios de saída do injetor: (a) bico injetor Y; (b) bico injetor IMCA.

Analisando as Figura 7.4 e Figura 7.6, verifica-se que a câmara de mistura do bico IMCA produz uma melhor homogeneização das velocidades entre as fases e das frações de cada fase em toda a sua extensão. Aqui fica claro que a capacidade de mistura do bico IMCA é largamente maior que o atualmente utilizado pela Usina de Pecém (bico injetor Y). Neste, há claramente uma separação onde o ar pressiona o diesel contra a parede do canal interno de saída do injetor, com isso, ar passa “abaixo” do fluxo de diesel em alta velocidade, não promovendo uma mistura eficiente entre as fases e arrasto do diesel.

Nas Figura 7.5 e Figura 7.7 é verificado como esse comportamento afeta as velocidades na saída do injetor, causando altos gradientes entre as fases. Pode ser visto claramente que o bico IMCA tem capacidade de mistura das fases muito maior que o bico Y, resultando em velocidades e fração volumétrica mais homogêneas entre as fases.

7.2 Combustão do *Spray* Gerado pelos Bicos Injetores

A Figura 7.8 apresenta os resultados para o campo de vetores velocidades para ambos os bicos injetores em um plano de corte sobre a linha de centro do queimador.

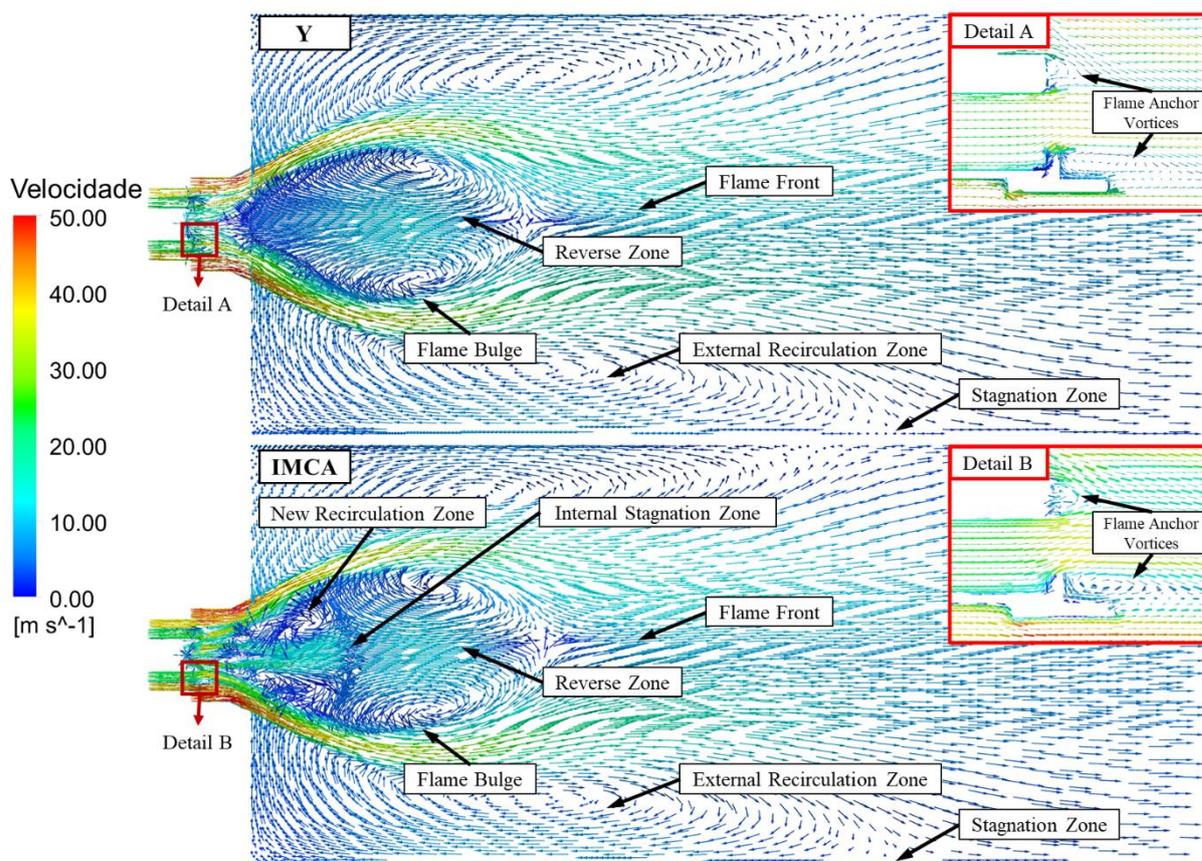


Figura 7.8: Vetores de velocidade em um plano central na câmara de combustão para os dois injetores com cores indicando velocidade. Na imagem são identificadas zonas características desse tipo de chama, mostrando também um detalhe em zoom dos vórtices de ancoragem de chama.

Verifica-se que os resultados obtidos para ambos os bicos injetores apresentam regiões características deste tipo de queimador e que as diferenças entre eles são bastante sutis, com pequenas variações de formato das diferentes estruturas identificadas na figura. A alteração mais significativa no padrão do escoamento entre os dois bicos encontra-se no ar de atomização, enquanto no bico Y ele tende a seguir o padrão do escoamento do ar central, no IMCA não ocorre o mesmo. Essa alteração induz uma nova zona de recirculação, indicada na Figura 7.8 como “*New Recirculation Zone*”. Para observar melhor as diferenças é mostrado na Figura 7.9 a distribuição de velocidade axial (componente u) em um plano central e na Figura 7.10 são mostradas as linhas de corrente do escoamento do ar de atomização e o ar central promovido pelos dois bicos injetores.

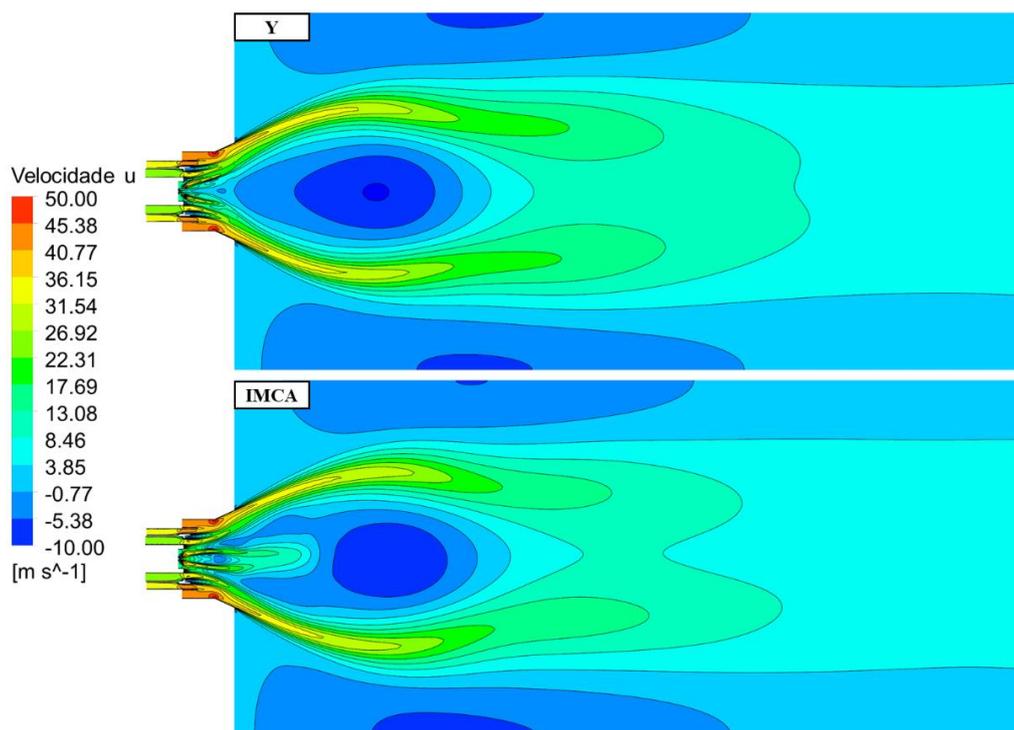


Figura 7.9: Campo de velocidade axial do escoamento em um plano central a câmara de combustão para os dois injetores.

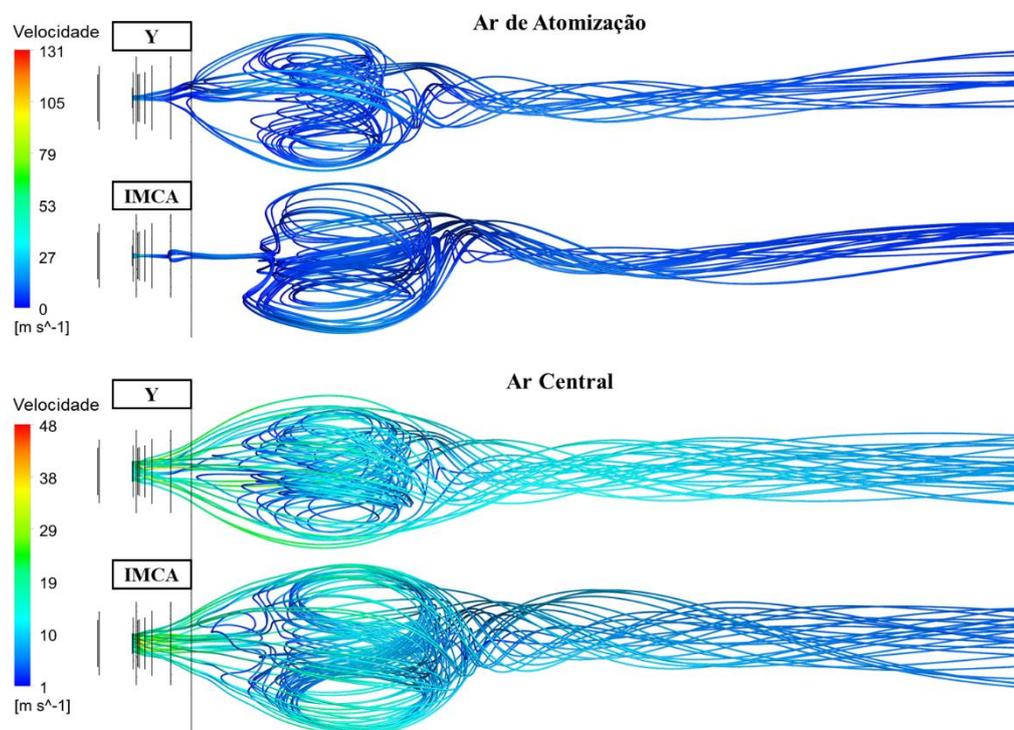


Figura 7.10: Linhas de corrente mostrando o comportamento do escoamento do ar de atomização (ar que é injetado no bico, junto com o diesel) e o ar central para os dois injetores. O escoamento de ar primário, secundário e terciário não sofreram alterações com a mudança de bico.

Observando a Figura 7.9 e Figura 7.10 fica mais evidente as diferenças entre os jatos de entrada proporcionados pelos dois bicos injetores, apresentando como consequência duas estruturas distintas de escoamento.

Verifica-se que o comportamento do ar de atomização é o principal responsável pelas alterações dos padrões para os dois bicos injetores. Enquanto no bico Y ele tende a seguir o caminho percorrido pelo ar central, no bico IMCA ele segue uma linha central. O principal motivo para que o novo bico IMCA funcione dessa forma, é para conseguir minimizar as altas temperaturas no interior do queimador e na região de saída, responsável por deformações em sua estrutura. Esse padrão do escoamento do ar de atomização faz o papel de levar as altas temperaturas mais a jusante do queimador, e as concentra na região de maior necessidade para a boa ignição do carvão. É possível observar também, que o diferente comportamento do ar de atomização influencia também a região de recirculação interna, nomeada na Figura 7.8 como “*Reverse Zone*”, fazendo com que a posição do vórtice de ancoragem dessa região seja deslocada a jusante.

Em ordem, para avaliar as afirmações quanto a temperatura, é apresentado na Figura 7.11 num plano central os resultados do campo de temperatura para os dois injetores.

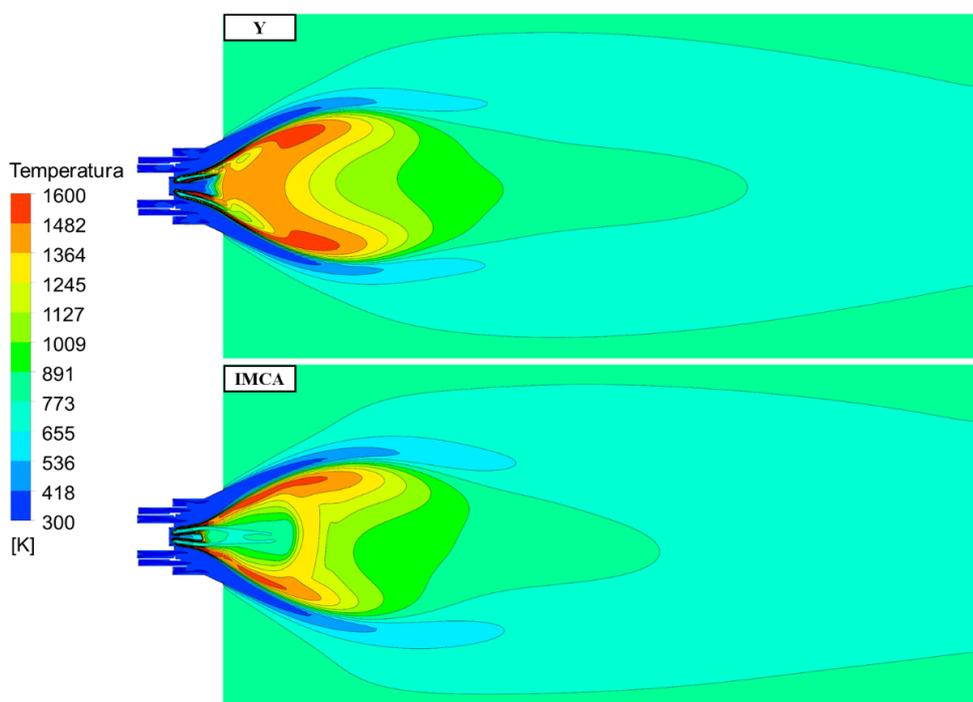


Figura 7.11: Campo de temperatura em um plano central a câmara de combustão para os injetores.

Verifica-se que o pressuposto de que o padrão de escoamento do ar de atomização minimizaria as temperaturas no interior do queimador é válido. De fato, nota-se que as altas temperaturas existentes no bico Y no interior do queimador e na região logo à frente do queimador foram controladas. Essa altas temperaturas foram relatadas pela Usina de Pecém como causadoras de aquecimento excessivo das partes de metal do queimador, causando deformação e necessidade de manutenção.

A fim de avaliar as temperaturas nas paredes do queimador, apresenta-se na Figura 7.12 o campo de temperaturas nas paredes do queimador e na Figura 7.13 são mostradas em maiores detalhes as temperaturas no *flame holder* do ar primário.

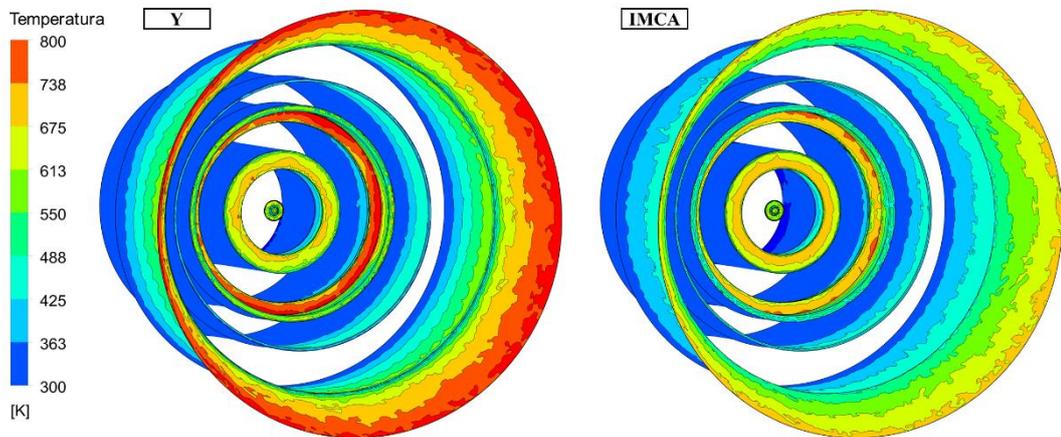


Figura 7.12: Temperatura nas paredes do queimador em vista isométrica.

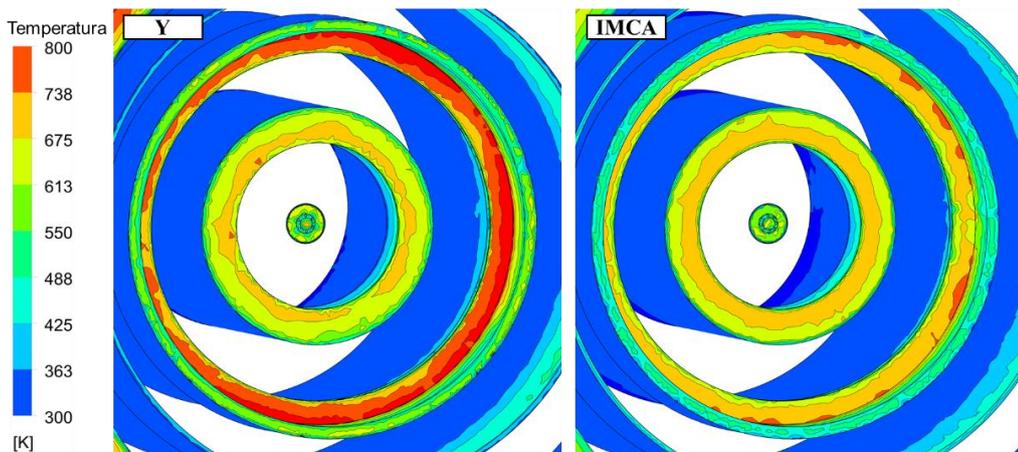


Figura 7.13: Detalhe da temperatura no *flame holder*.

Temperaturas maiores de 800 K foram atingidas nas paredes do queimador quando utilizado o bico Y. Essas altas temperaturas acontecem principalmente no *flame holder* do ar primário. Quando utilizado o bico IMCA, as temperaturas caem ao longo de toda a extensão do *flame holder*. Com isso, utilizando-se o bico injetor IMCA, tem-se controle da deformação causada pelo excesso de temperatura, diminuindo também as manutenções no queimador.

Para fins de verificação da eficiência de queima, avaliam-se agora as principais espécies químicas envolvidas no processo de combustão do diesel nos queimadores operando com os dois bicos injetores. Na Figura 7.14 tem-se a distribuição de frações mássicas de oxigênio, O₂, sobre o plano central. Embora o consumo de oxigênio do ar de atomização seja alto no bico IMCA, indicando que poderia haver uma combustão antecipada, a quantidade de ar de atomização não é a suficiente para promover a oxidação completa do combustível. Isso também explica o fato existir uma maior temperatura na região de estagnação interna, indicada como “*Internal Stagnation Zone*” na Figura 7.8, onde oxigênio vindo do ar central encontra combustível vapor não oxidado pelo ar de atomização e entra em combustão. Portanto, embora o ar de atomização cause uma oxidação parcial do combustível mais próximo do bico, isso não aumenta de forma significativa as temperaturas nessa região, como visto na Figura 7.11, assim, a principal função do ar de atomização é direcionar o diesel para que seja queimado em regiões de interesse e afastar a zona de recirculação interna de perto do queimador, fazendo com que as altas temperaturas sejam afastadas e direcionadas para as bordas, onde há o interesse de ignitar o carvão.

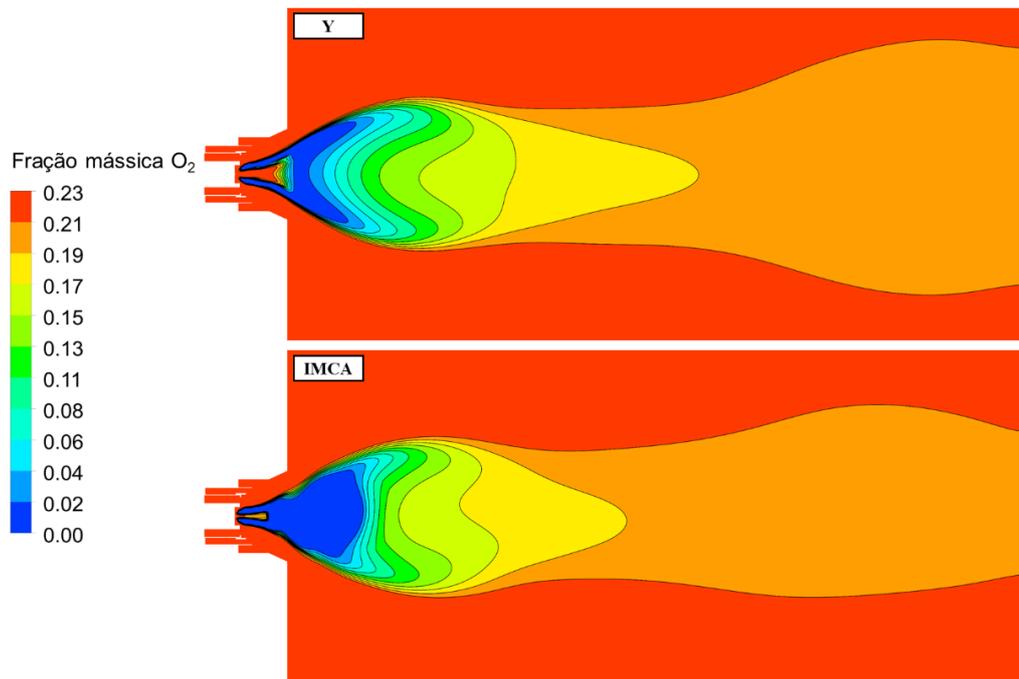


Figura 7.14: Campo de O₂ em um em um plano central a câmara de combustão para os dois injetores.

A fim de comprovar esta afirmação, na Figura 7.15 apresenta-se neste mesmo plano o campo de frações mássicas de OH, um radical produto da combustão parcial do hidrogênio do combustível, e que pode melhor identificar zonas de reação química e possíveis ineficiências de queima. Observa-se que oxigênio do ar de atomização é consumido rapidamente em uma região curta, e após isso a reação cessa e volta a acontecer na zona de estagnação interna, validando as afirmações anteriores. Ainda na Figura 7.15, verifica-se que em ambos os casos se tem ao longo da chama uma queima completa dessa componente. Para o caso do bico IMCA esta queima ocorre numa região mais curta. Acredita-se que isto seja uma consequência das diferenças do *spray* em cada caso, sendo que o bico tipo IMCA forma filmes mais finos e mais homogêneos o que resulta em gotas menores e mais bem distribuídas, produzindo uma queima mais rápida.

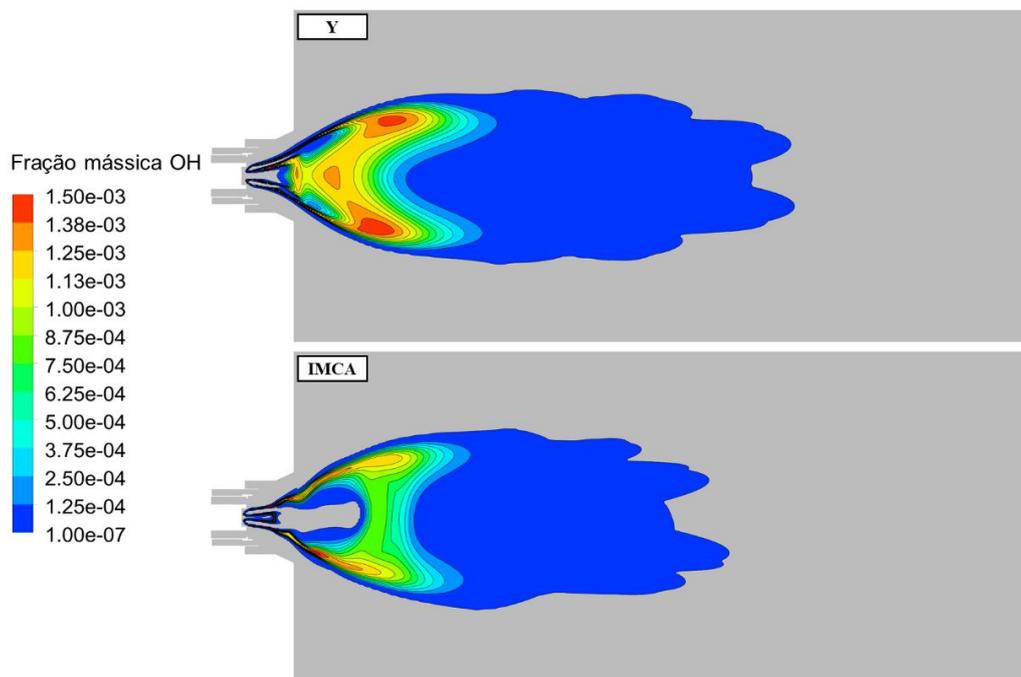


Figura 7.15: Campo de OH em um plano central a câmara de combustão para os dois injetores.

A Figura 7.16 apresenta neste mesmo plano as frações mássicas de outro importante componente da reação química, o monóxido de carbono, CO.

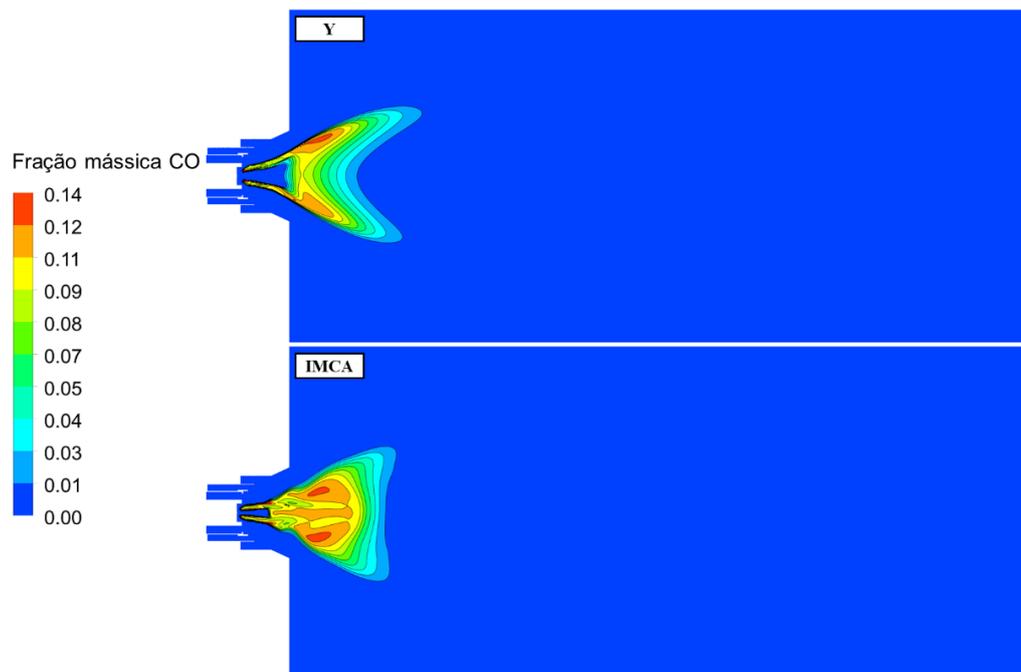


Figura 7.16: Campo de CO em um plano central a câmara de combustão para os dois bicos.

Verifica-se que ambos os bicos promovem campos de frações de CO distintos, principalmente na região de queima (zona da chama). Para o bico tipo IMCA tem-se as maiores concentrações de CO mais ao centro dos jatos de entrada, enquanto para o bico tipo Y as maiores concentrações ficam mais na periferia dos jatos. No entanto, em ambos os casos se percebe que esta espécie também é consumida praticamente na sua totalidade ao longo da chama.

A Figura 7.17 apresenta o campo da fração mássica de dióxido de carbono, CO_2 , sobre o mesmo plano axial em corte das figuras anteriores. Verifica-se também uma diferença entre os dois casos, como resultado das condições de chamas diferentes promovidas por ambos os injetores.

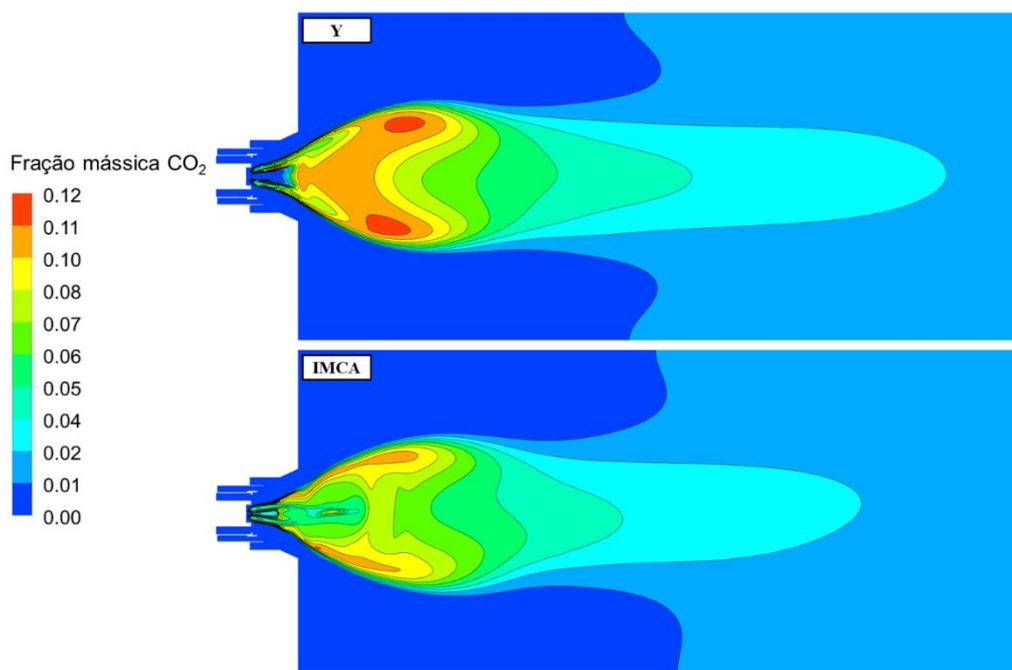


Figura 7.17: Campo de CO_2 em um em um plano central a câmara de combustão para os dois injetores.

A fim de verificar o comportamento dos jatos formados pelos bicos injetores, na Figura 7.18 apresentam-se resultados da injeção e diâmetro de gotas promovidas por ambos os bicos. Verifica-se que as gotas formadas pelo bico injetor Y são maiores que as gotas produzidas pelo bico tipo IMCA, o que faz com que levem maior tempo para serem evaporadas completamente, percorrendo um caminho maior. O diâmetro das primeiras gotas

após o rompimento do filme foi de 61 μm e 50 μm para os bicos injetores tipo Y e IMCA, respectivamente.

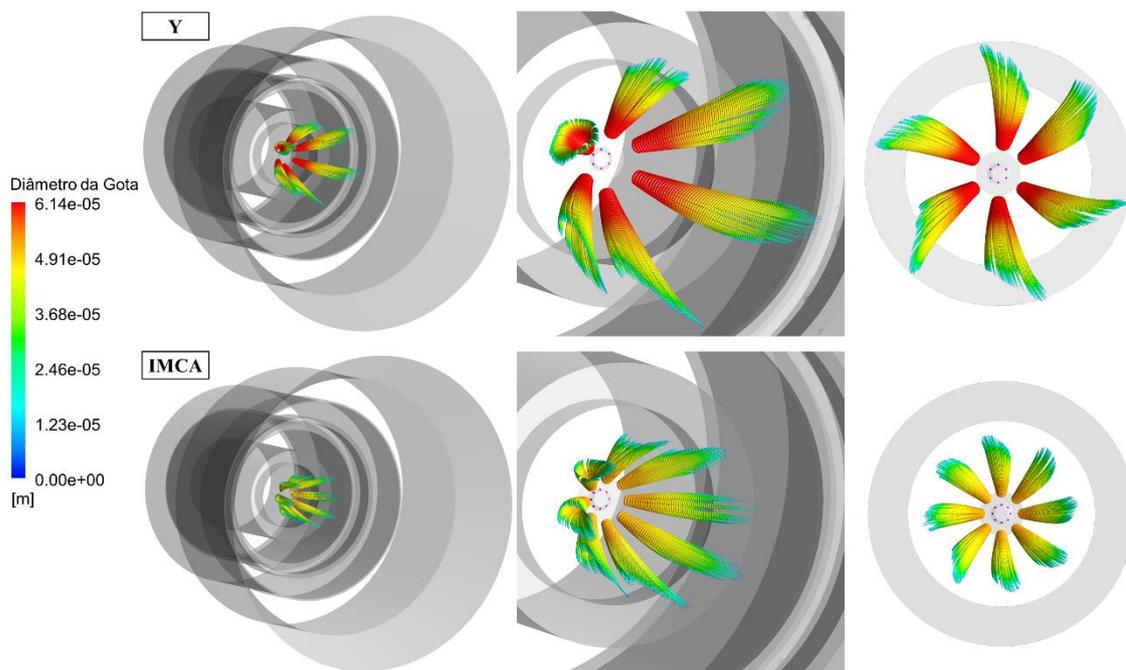


Figura 7.18: Comportamento do *spray* gerado pelos bicos injetores com cores indicando o diâmetro das gotas de diesel em 3 vistas para ambos os bicos injetores.

As Figura 7.19, Figura 7.20 e Figura 7.21 apresentam em maiores detalhes o comportamento de variáveis ao longo do caminho percorrido pelas gotas até sua completa evaporação. A Figura 7.19 mostra o comportamento da temperatura e do diâmetro das gotas para os dois bicos.

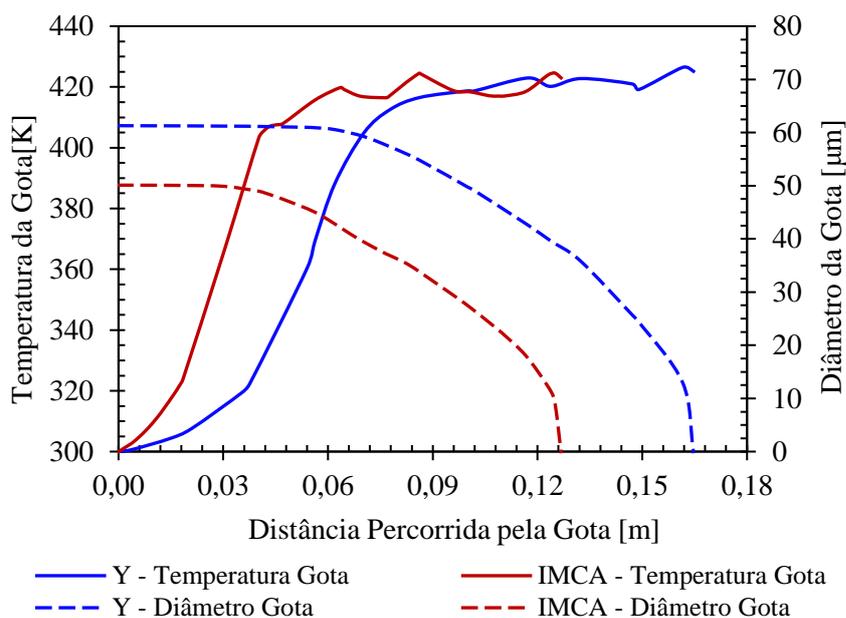


Figura 7.19: Comportamento da temperatura e diâmetro da gota ao longo do caminho de uma partícula para ambos os casos.

Verifica-se que as gotas menores produzidas pelo bico tipo IMCA aumentaram de temperatura mais rapidamente, apresentando uma taxa de aquecimento cerca de 1,5 vezes maior que as gotas do bico Y. Pode ser observado que as gotas geradas pelo bico injetor Y evaporam-se totalmente em 16,46 cm, enquanto as gotas geradas pelo bico injetor IMCA levam 12,67 cm. Devido a isso, a energia absorvida pelas gotas do bico Y é maior, resultando em uma temperatura um pouco superior. Isso também se deve ao fato de que, por percorrerem um caminho maior no bico Y, as gotas entram em regiões de temperatura mais altas. Os diâmetros médios ocasionados pela quebra primária do filme líquido são de 62 μm e 50 μm para os bicos tipo Y e IMCA, respectivamente, o que representa um diâmetro de gota 19% menor para o injetor IMCA.

Nas Figura 7.20 e Figura 7.21, são mostrados os gráficos do comportamento de CO, O₂, vapor de diesel e temperatura ao longo do caminho percorrido pelas gotas de diesel pelos bicos tipo Y e IMCA, respectivamente.

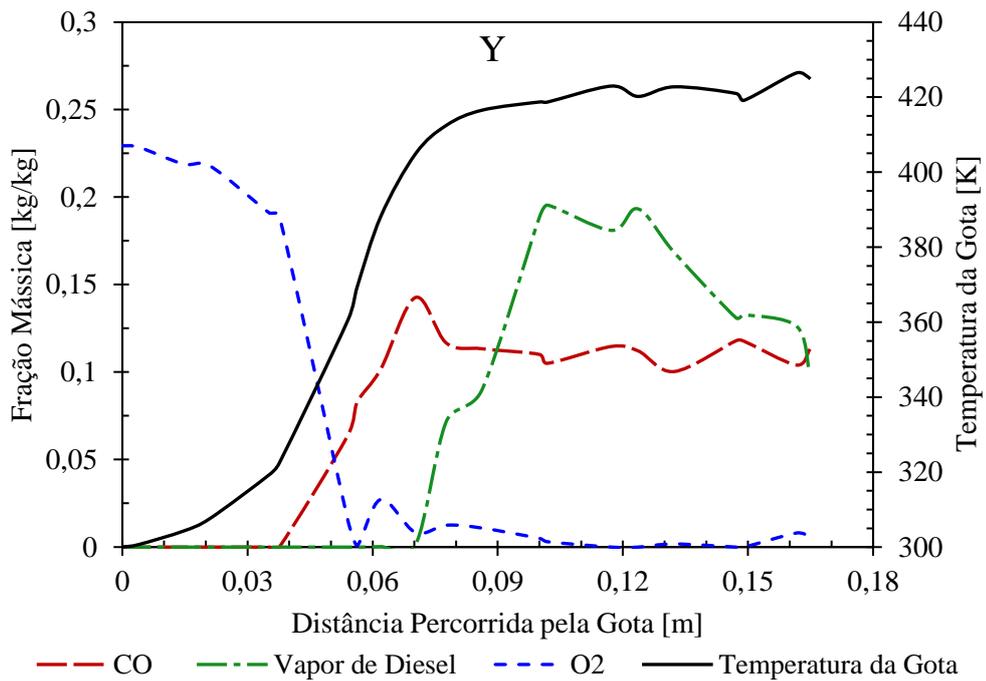


Figura 7.20: Comportamento das frações mássicas e temperatura ao longo do caminho de uma gota para o bico injetor Y.

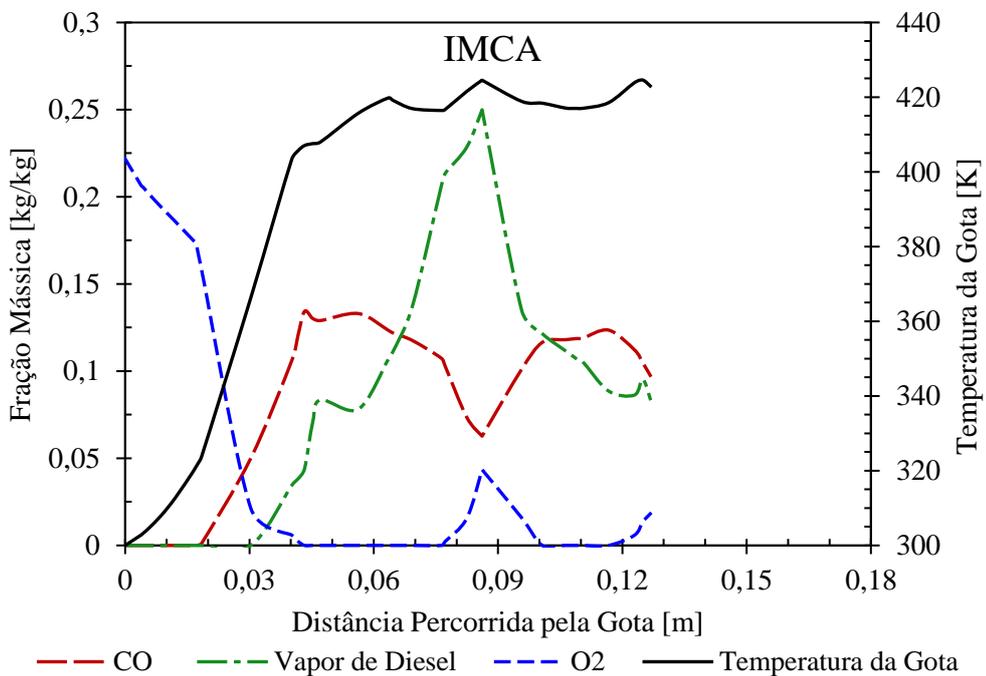


Figura 7.21: Comportamento das frações mássicas e temperatura ao longo do caminho de uma gota para o bico injetor IMCA.

Através da análise dos gráficos, observa-se que as gotas maiores produzidas pelo bico Y levam mais tempo para evaporar, seguindo um caminho maior, comportamento também

observado nos resultados da Figura 7.19. As altas taxas de evaporação do diesel no bico IMCA são devidas à maior superfície efetiva área das gotículas em contato com o meio ambiente, devido ao fato de que tamanhos menores de gotículas levam a um número maior de gotículas, aumentando assim a área de superfície total das gotas. Deve-se se observar, que com o aumento da área de superfície total das gotas, a radiação incidente sobre as gotas também aumenta e contribui para que a taxa de aquecimento seja maior.

A produção de CO no bico IMCA começa mais perto do injetor devido as taxas mais altas de oxidação das gotículas de combustível, influenciada pela maior área superficial e pelo comportamento diferente da corrente de ar de atomização, debatida anteriormente. Verifica-se que há um aumento da taxa de aquecimento das gotas quando CO começa a ser produzido. Verifica-se também que o vapor de diesel aumenta de concentração somente após o oxigênio ao redor da gota ser praticamente todo consumido.

O que se conclui é que durante a trajetória das gotas os primeiros vapores de diesel produzidos sofrem reações de forma muito rápida, fato constatado pela redução abrupta do oxigênio e aumento da produção de CO, sendo que o vapor tem seu aumento quando não há oxigênio disponível para que ocorra a oxidação. Entre os dois casos verifica-se que estes efeitos ocorrem em distâncias distintas para o percurso das gotas, como consequência dos seus diferentes tamanhos e massas, e que as gotas produzidas pelo bico IMCA tem de forma mais antecipada estes efeitos, justamente por terem uma taxa de aquecimento maior. Também se constata que as gotas geradas pelo bico tipo Y percorrem maiores distâncias antes de serem evaporadas.

Outro fator importante a ser considerado nestas chamadas relaciona-se a energia emitida por radiação térmica. A Tabela 7.2, apresenta dados de radiação obtidos dos resultados das simulações entre os dois bicos.

Tabela 7.2: Dados de radiação obtidos dos resultados das simulações.

Dado	Y	IMCA	Redução %
Radiação incidente na parede da câmara [kW/m ²]	90,19	88,32	2,1
Radiação incidente na saída [kW/m ²]	77,39	74,67	3,6
Radiação emitida [MW]	20,81	19,52	6,6

Verifica-se que a radiação incidente na parede da câmara é de 90,19 [kW/m²] para bico tipo Y e que este valor tem uma redução de 2,1%, sendo 88,32 [kW/m²] para o bico tipo IMCA, o que significa uma redução pequena. Considerando que o bico IMCA tem uma redução de vazão de combustível de 9%, observa-se que a radiação total emitida pela chama teve uma redução de apenas 6,6%, o que indica que melhoras significativas na eficiência de combustão. Se considerarmos que com a redução de 9% da vazão de diesel a chama emitiria 9% menos radiação, o valor que de radiação emitido pela chama seria de 18,94 MW. Portanto, em uma comparação direta, pode ser dito que a chama gerada pelo bico IMCA teve uma eficiência 3% superior em comparação com que se esperava da redução de 9% de combustível.

A fim de comparar globalmente os efeitos produzidos pelos dois bicos injetores, alguns dados são comparados na região de saída da câmara de combustão. Assim, a Tabela 7.3, apresenta dados das frações mássicas de três radicais na saída da câmara de combustão obtidos das simulações.

Tabela 7.3: Dados na saída da câmara de combustão obtidos dos resultados das simulações.

Espécies na saída	Y	IMCA	Redução %
CO [ppm]	$4,68 \cdot 10^{-6}$	$2,86 \cdot 10^{-6}$	38,88
OH [ppm]	$2,33 \cdot 10^{-3}$	$1,71 \cdot 10^{-3}$	26,61
HO ₂ [ppm]	$1,38 \cdot 10^{-3}$	$1,03 \cdot 10^{-3}$	25,26

Verifica-se que, embora as diferenças entre as frações destas espécies químicas na saída do domínio sejam valores muito pequenos, a presença desses radicais indica que a combustão não foi totalmente completa. Portanto, as reduções da concentração desses radicais no bico injetor IMCA indicam uma melhor combustão.

O bico injetor IMCA já foi fabricado sob a supervisão da equipe de engenharia da EDP e já está em fase de testes de operação no gerador de vapor da Usina. A Figura 7.22 mostra a operação de combustão do bico injetor IMCA e o Y.

Bico Injetor IMCA

Bico injetor projetado neste trabalho

Bico Injetor Y

Bico injetor utilizado por Pecém



Figura 7.22: Foto comparativa da operação de combustão do bico injetor IMCA (proposto) e o bico injetor Y (utilizado até então pela Usina).

Segundo relatos da equipe técnica, apresenta um bom desempenho na ignição do carvão, não ocasionando problemas frequentemente constatados em testes de outros bicos injetores comerciais, como, por exemplo, não acendimento e/ou extinção da chama (relatos da equipe técnica da Usina).

8 CONCLUSÕES

A proposição e análise de uma nova geometria de bico injetor de diesel foram elaborados neste trabalho. Comparou-se através de CFD o comportamento do escoamento interno multifásico e a consequente combustão proporcionada pela nova geometria e a atualmente utilizada em Pecém. Modelos detalhados para o escoamento turbulento multifásico interno e para combustão, incluindo neste a quebra do filme líquido em gotas, sua evaporação, combustão e previsão da transferência de calor radiativa, foram aplicados no trabalho. Malhas para ambas as análises foram avaliadas e a validação das modelagens a partir da comparação com dados experimentais da literatura também foram conduzidas com sucesso, indicando que os modelos adotados são capazes de prever a operação destes injetores.

O bico injetor proposto IMCA possui vantagens quanto a sua construção pelo fato de ser desmontável, facilitando sua limpeza e manutenção, evitando problemas de falhas de usinagem e entupimentos devido a carbonização do combustível nos canais internos do bico injetor, como ocorre no bico injetor Y.

Os bicos possuem diferenças significantes no modo de funcionamento. No bico injetor Y não há uma mistura eficiente entre as fases ar e diesel, fazendo com que haja uma separação visível entre as fases, onde o diesel saí do injetor com baixa velocidade e ar a alta velocidade.

Já o bico injetor proposto IMCA tem uma capacidade de mistura de fases maior devido a expansão do ar ocorrer de forma mais intensa na câmara de mistura. Isso proporciona uma melhor homogeneização das pressões, velocidades e frações das fases nos orifícios de saída do bico injetor, além de causar um maior arrasto na fase diesel no seu interior, contribuindo para o aumento da velocidade do diesel na saída. Isso promove uma injeção de diesel na câmara de combustão com maior energia cinética, contribuindo para a quebra do filme de líquido em gotas menores, facilitando a evaporação das gotas e combustão. Uma redução de 9% de vazão foi observada no bico injetor IMCA em comparação com ao bico injetor Y para mesmas condições de operação. Também foi observado que as gotas geradas pela quebra do filme líquido foram 19% menores no bico injetor IMCA.

Alterações no padrão de escoamento foram observadas. Essas diferenças foram devido ao comportamento do ar de atomização, o qual no bico injetor IMCA tem papel de levar as altas temperaturas mais a jusante do queimador, com isso diminuindo as altas temperaturas que o bico injetor Y causava no *flame holder* do ar primário do queimador principal e, por sua vez, deformações decorrentes. Com isso, tem-se diminuição da manutenção no queimador com substituição de partes deformadas.

A chama gerada pelo bico injetor IMCA apresentou uma melhora de 3% na sua eficiência de queima e os principais radicais não queimados avaliados na saída da câmara de combustão foram reduzidos em cerca de 30%, em média.

O bico injetor IMCA proposto neste trabalho está em fase de testes de operação no gerador de vapor da Usina, segundo a equipe técnica apresenta um bom desempenho na combustão, não ocasionando problemas constatados em testes com outros bicos injetores comerciais.

Diante disso, conclui-se que a substituição do atual bico injetor Y pela nova geometria proposta neste trabalho IMCA é uma alternativa que trará benefícios para a usina.

8.1 Sugestões de Continuação do Trabalho

Além dos estudos conduzidos neste trabalho, fica como sugestão a condução dos seguintes estudos complementares:

- a) Avaliação do comportamento dos bicos injetores em diferentes condições de operação;
- b) Realização da análise dos escoamentos para ambos os bicos injetores considerando um domínio integrado, formado pelo escoamento interno e externo. Isso pode ser possível com a utilização de modelos de transição *VOF-to-DPM* (*Discrete Phase Model*). O Ansys CFX não contempla esses modelos;
- c) Avaliar a operação dos bicos injetores conjuntamente com a combustão do carvão a fim de verificar sua eficácia na manutenção da estabilidade da chama e a interação entre as queimas.
- d) Avaliar outras possíveis causas de entupimentos e mal funcionamento do sistema de diesel, tais como diesel de baixa qualidade, com impurezas e velho.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Aggarwal, S. K. A review of Spray Ignition Phenomena: Present Status and Future Research. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 24, p. 565-600, 1998.

American Institute of Aeronautics and Astronautics. Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations. **AIAA**, 1998.

ANEEL. Agência Nacional de Energia Elétrica. **Balanco Energético Nacional (BEN)**, 2018.

Annamalai, K. e Ryan, W. Interactive Processes in Gasification and Combustion – II. Isolated Carbon, Coal and Porous Char Particles. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 19, p. 383–446, 1993.

Ansys Inc. User's guide - **CFX Solver Theory**, 2020.

Asllanaj, F. E Fumeron, S. Modified finite volume method applied to radiative transfer in 2D complex geometries and graded index media. **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 111, p. 274-279, 2010.

Babcock & Wilcox Company. **Steam – It's Generation and Use**. Gregory L. Tomei, Charlotte, USA, 42nd ed., 2015.

Balasubramanyam, M. E Chen, C. P. Numerical Design Studies on Internal Flow Characteristics of LOX/CH₄ Swirl Injector. **45th AIAA/ASME/SAE/ASEE**, Denver, Colorado, 2009.

Barreras, F.; Lozano, A.; Barroso, J. e Lincheta, E. Experimental Characterization of Industrial Twin-Fluid Atomizers. **Atomization and Sprays**, v. 16, p. 127-145, 2006a.

Barreras, F.; Lozano, A.; Ferreira, G. e Lincheta, E. Study of the Internal Flow Conditions on the Behavior of Twin-Fluid Nozzles with Internal Mixing Chamber. 10th International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, **ILASS**, Kyoto, Japan, 2006b.

Barroso, J.; Lozano, A.; Barreras, F. e Lincheta, E. Analysis and prediction of the spray produced by an internal mixing chamber twin-fluid nozzle. **Fuel Processing Technology**, v. 128, p. 1-9, 2014.

Barth, T.J. e Jespersion, D.C. The Design and Application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes. **27th Aerospace Sciences Meeting**, Reno, USA, 1989.

Barths, H.; Peters, N.; Brehm, N.; Mack A.; Pfitzner, M. e Smiljanowski, V. Simulation of pollutant formation in a gas turbine combustor using unsteady flamelets. **27th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute**, v. 27, p. 1841–1847, 1998b.

Barths, H; Antoni, C. e Peters, N. Three-Dimensional Simulation of Pollutant Formation in a DI-Diesel Engine Using Multiple Interactive Flamelets. SAE International Fall Fuels and Lubricants Meeting and Exhibition, **Journal of Fuels and Lubricants**, v. 107, p. 987-997, 1998a.

Berlement, A.; Grancher, M. S. e Gouesbet, G. On the Lagrangian Simulation of Turbulence Influence on Droplet Evaporation. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 34, p. 2805–12, 1991.

Bekdemir. C. Numerical modeling of diesel Spray formation and combustion. **4th European Combustion Meeting**, Vienna, Austria, p. 1-6, 2008.

Brackbill, J.; Kothe, D. e Zemach, C. A continuum method for modeling surface tension. **Journal of Computational Physics**, v. 100, p. 335-354, 1992.

Brackbill, J.U; Kothe; D.B. e Zemach, C. A Continuum Method for Modelling Surface Tension. **Journal of Computational Physics**, v. 100, p. 335-354, 1992.

Bray, K. N. e Peters, N. Laminar Flamelets in Turbulent Flames. **Turbulent Reacting Flows**, p. 63-114, 1994.

Brennen, C. E. **Fundamentals of Multiphase Flow**. Cambridge University Press, 2005.

Buckner, H. N. e Sojka, P. E. Effervescent Atomization of High Viscosity Fluids, Part I: Newtonian Liquids. **Atomization and Sprays**, v. 1, p. 239-252, 1991.

Carlson, B. G. e Lathrop, K. D. Transport theory: the method of discrete ordinates. In: **Computational Methods in Reactor Physics**. Gordon and Breach, New York, p. 171-270, 1965.

Carvalho, M. G.; Farias, T. e Fontes, P. Predicting Radiative Heat Transfer in Absorbing, Emitting and Scattering Media Using the Discrete Transfer Method. **ASME HTD**, v. 160, p. 17-26, 1991.

Chai, J. C. e Lee, H. S. Finite-Volume Method for Radiation Heat Transfer. **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 8, p. 419-425, 1994.

Chawla, J. B. Atomization of Liquids Employing the Low Sonic Velocity in Liquid/Gas mixtures, **3rd International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems**, p. 1-7, 1985.

Chigier, N. The Atomization and Burning of Liquid Fuel Sprays. **Energy and Combustion Science**, Progress in Energy and Combustion Science, v. 2, p. 97-114, 1976.

Chigier, N. Recent Advances in Spray Science. **9th International Conference on Liquid Atomization and Sprays Systems**, Sorrento, Italy, 2003.

Chiu, H. H. e Liu, T. M. Group Combustion of Liquid Droplets. **Combustion Science and Technology**, v. 17, p. 127-142, 1997.

Clift, R; Grace, J. e Weber, M. Bubbles, Drops and Particles. **Academic Press**, New York, 1978.

Coelho, P. J. Bounded Skew High-Order Resolution Schemes for the Discrete Ordinates Method. **Journal of Computational Physics**, v. 175, p. 412-437, 2002.

Dixon-Lewis, G. Structure of Laminar Flames. In 23rd Symposium (International) on Combustion. **The Combustion Institute**, v. 23, p. 305-324, 1990.

Drake, C. Stretched Laminar Flamelet Analysis of Turbulent H₂ and CO/H₂/N₂ Diffusion Flames. **Twenty-first Symposium (International) on Combustion**, The Combustion Institute, v. 21, p. 1579-1589, 1986.

Dombrowski, N. e Hooper, O. C. The effect of ambient density on drop formation in sprays. **Chemical Engineering Science**. v. 17, p. 291-305, 1962.

Dombrowski, N. e Johns, W. R. The aerodynamic instability and disintegration of viscous liquid sheets. **Chemical Engineering Science**, v. 18, p. 203-214, 1963.

Eslamian, M. e Ashgriz, N. Modeling of Particle Formation by Spray Pyrolysis using Droplet Internal Circulation. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 33, p. 863–871, 2006.

Exxon Mobil Corporation. **Sustainability Report**, 2018.

Faeth, G. M. Current Status of Droplet and Liquid Combustion. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 3, p. 199-224, 1977.

Farmer, J. T. e Howell, J. R. Monte Carlo prediction of radiative heat transfer in inhomogeneous, anisotropic, nongray media. **Journal of Thermophys and Heat Transfer**, v. 8, p. 133-139, 1994.

Ferreira, J. C. Steady and Transient Flamelet Modelling of Turbulent Non-Premixed Combustion. **Progress in Computational Fluid Dynamics**, v. 1, p. 29-42, 2001.

Ferreira, G.; Barreras, F.; Lozano, A. e García, J. A. Effect of the Inner Two-Phase Flow on the Performance of an Industrial Twin-Fluid Nozzle with an Internal Mixing Chamber. **Atomization and Sprays**, v. 19, p. 873-884, 2009b.

Ferreira, G.; García, J. A.; Barreras, F.; Lozano, A. e Lincheta, E. Design optimization of twin-fluid atomizers with an internal mixing chamber for heavy fuels oils. **Fuel Processing Technology**, v. 90, p. 270-278, 2009a.

Ferreira, M. E. C.; Teixeira, J. C. F.; Bates, C. J. e Bowen, P. J. Detailed Investigation of the Influence of Fluid Viscosity on the Performance Characteristics of Plain-Orifice Effervescent Atomizers. **Atomization and Sprays**, v. 11, p. 107-124, 2001.

Fiveland, W. A. Three-dimensional radiative heat-transfer solutions by the discrete-ordinates method. **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 2, p. 309-316, 1988.

Graziadio, M.; Andreussi, P.; Tognotti, L. e Zanelli, S. Atomization of coal-water fuels by pneumatic internal mixing nozzle. **Atomization and Spray Technology**, v. 3, p. 187-208, 1987.

Godsave, G. A. E. Studies of the Combustion of Drops in a Fuel Spray - the Burning of Single Drops of Fuel. **Fourth Symposium (International) on Combustion**, The Combustion Institute, v. 4, p. 818-830, 1954.

Gokalp, I.; Chauveau, C.; Simon, O. e Chesneau, X. Mass Transfer from Liquid Fuel Droplets in Turbulent Flow. **Combust and Flame**, v. 89, p. 286-98, 1992.

Gosman, A. D. e Ioannides, E. Aspects of Computer Simulation of Liquid Fuelled Combustors. **19th Aerospace Sciences Meeting**, St. Louis, USA, 1981.

Hagerty, W. W. e Shea, J. F. A Study of the Stability of Plane Fluid Sheets. **Journal of Applied Mechanics**, v. 22, p. 509-514, 1955.

Han, Z.; Perrish, S.; Farrell, P. V. e Reitz R. D. Modeling Atomization Processes of Pressure-Swirl Hollow-Cone Fuel Sprays. **Atomization and Sprays**, v. 7, p. 663-684, 1997.

Haworth, D. C.; Drake, M. C. e Blint, R. J. Stretched Laminar Flamelet Modeling of a Turbulent Jet Diffusion Flame. **Combustion Science and Technology**, v. 60, p. 287-318, 1988.

Hashiguchi, K.; Yamane, F.; Fujii, H.; Sato, K. e Nishida, K. Development of Internal-Mixing Twin-Fluid Atomizer with Multiple Exit Ports for Heavy Oil-Fired Boilers. **Atomization and Sprays**, v. 29, p. 161-176, 2019.

Hinze, J. O., **Turbulence**. McGraw-Hill, New York, USA, 1975.

Hiroyasu, H. e Arai M. Structures of Fuel Sprays in Diesel Engines, **SAE International**, v. 99, p. 1050-1061, 1990.

Hirt, C. e Nichols, B. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. **Journal of Computational Physics**, v. 39, p. 201-225, 1981.

Hossain, M. CFD Modelling of Turbulent Non-Premixed Combustion. PhD Thesis, Loughborough University, UK, 1999.

Hottel, H. C. e Hawthorne, W. R. Diffusion in Laminar Flame Jets. **Third Symposium (International) on Combustion, Flame and Explosive Phenomena**, The Combustion Institute, v. 3, p. 254-266, 1949.

Howell, J. R. Application of Monte Carlo to heat transfer problems. **Advances in Heat Transfer**, v. 5, p. 1-54, 1968.

IEA. International Energy Agency. **Key World Energy Statistics**, p. 6, 2018.

Ingebo, R. D. e Foster, H. H. Drop-Size Distribution for Crosscurrent Breakup of Liquid Jets in Airstreams. **NACA Technical Note No. 4087**, 1957.

IPCC. Climate Change 2014: Mitigation of Climate Change. Intergovernmental Panel on Climate Change Forth. **Assessment Report**, 2018.

Jenny, P.; Roekaerts, D. e Beishuizen, N. Modeling of turbulent dilute spray combustion. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 38, p. 846–887, 2012.

Jones, W. P. Turbulence Modelling and Numerical Solution Methods for Variable Density and Combusting Flows. **Turbulent Reacting Flows**, In P. A. Libby and F. A. Williams (Eds.), Chapter 6, p. 309-368, 1994.

Jones, W. P. e Launder, B. E. The prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence. **International Journal of Heat Mass Transfer**, v. 15, p. 301-314, 1972.

Jones, W. P. e Whitelaw, J. H. Calculation Methods for Reacting Turbulent Flows: A Review. **Combustion and Flame**, v. 48, p. 1-26, 1982.

Kisselev, V. B.; Roberti, L. e Perona, G. An application of the finite element method to the solution of the radiative transfer equation. **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 51, p. 603-614, 1994.

Kumagai, S. e Isoda, H. Combustion of Fuel Droplets in a Falling Chamber. **Sixth Symposium (Int.) on Combustion**, The Combustion Institute, v. 6, p. 726–731, 1957.

Kuo, K. K. **Principles of Combustion**. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, 2 ed., 2005.

Larsen, E. W.; Thommes, G.; Klar, A.; Seaid, M. e Gotz, T. Simplified PN Approximations to the Equations of Radiative Heat Transfer and Applications. **Journal of Computational Physics**, v. 183, p. 652-675, 2002.

Launder, B. E. e Sharma, B. I. Application of the Energy-Dissipation Model of Turbulence to the Calculation of Flow Near a Spinning Disc. **Letters in Heat and Mass Transfer**, v. 1, p. 131-138, 1974.

Law, C. K. A Model for the Combustion of Oil/Water Emulsion Droplets. **Combustion Science Technology**, v. 17, p. 29–38, 1977.

Law, C. K. Asymptotic Theory for Ignition and Extinction in Droplet Burning. **Combustion and Flame**, v. 24, p. 89–98, 1975.

Law, C. K. Recent Advances in Droplet Vaporization and Combustion. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 8, p. 171-201, 1982.

Law, C. K. Unsteady droplet combustion with droplet heating. **Combustion and Flame**, v. 26, p. 17–22, 1976.

Lee, H. H. e Lee, C. H. Characterization of the flow field and stratification effects of fuel spray in a visualization engine used DPIV and entropy analysis. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 31, p. 579-592, 2007.

Lefebvre, A. H.; Wang, X. F. e Martin, C. A. Spray Characteristics of Aerated-Liquid Pressure Atomizers, **Journal of Propulsion and Power**, v. 4, p. 293-298, 1988

Lefebvre, A. H. **Atomization and Sprays**. New York: Hemisphere, 1989.

Lefebvre, A. H. Twin-fluid Atomization: Factors Influencing Mean Drop Size. **Atomization and Spray**, v. 2, p. 101-119, 1992.

Lentini, D. Assessment of the Stretched Laminar Flamelet Approach for NonPremixed Turbulent Combustion. **Combustion Science and Technology**, v. 100, p. 95-122, 1994.

Lentini, D. e Puri, I. K. Stretched Laminar Flamelet Modeling of Turbulent Chloromethane-Air Nonpremixed Jet Flames. **Combustion and Flame**, v. 103, p. 328-338, 1995.

Li, B. W.; Sun, Y. S. e Yu, Y. Iterative and direct Chebyshev collocation spectral methods for one-dimensional radiative heat transfer. **International Journal of Heat Mass Transfer**, v. 51, p. 5887-5894, 2008.

Li, X. e Tankin, R. S. On the Temporal Instability of a Two-Dimensional Viscous Liquid Sheet. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 226, p. 425-443, 1991.

Libby, P. A. e Williams, F. A. (Ed) Fundamental Aspects and Review. **Turbulent Reacting Flows**, London: Academic Press, Chapter 1, p. 1-61, 1994.

Libby, P. A. e Williams, F. A. (Ed.) **Turbulent Reacting Flows**. New York-London, 1 ed., 1994.

Lichtarowicz, A. K.; Duggins, R. K. e Markland, E. Discharge Coefficients for Incompressible Non-Cavitating Flow Through Long Orifices. **Journal of Mechanical Engineering Science**, v. 7, p. 210-219, 1965.

Liew, S. K.; Bray, K. N. C. e Moss, J. B. A Stretched Laminar Flamelet Model of Turbulent Nonpremixed Combustion. **Combustion and Flame**, v. 56, 199-213, 1984.

Linan, A. On the internal structure of laminar diffusion flames. Technical note. **Instituto Nacional del Tecnologia Aeronáutica**, Madrid – Spain, 1961.

Lincheta, E.; Barroso, J.; Suárez, J.; Barreras, F. e Lozano, A. Performance of Internal Mixing Air-Assisted Nozzles for Heavy Fuel Oil Burners. **ILASS-Europe**, 2002.

Liu, L. H. e Tan, J. Y. Least-squares collocation meshless approach for radiative heat transfer in absorbing and scattering media. **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v.103, p. 545-557, 2007.

Liu, H. Science and Engineering of Droplets: Fundamentals and Applications. **William Andrew Publishing**, New York, 2000.

Majumdar, S. Role of Underrelaxation in Momentum Interpolation for Calculation of Flow with Nonstaggered Grids. **Numerical Heat Transfer**, v. 13, p. 125-132, 1988.

Mansour, M. e Chen, Y-C. Stability Characteristics and Flame Structure of Low Swirl Burner. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 32, p. 1390–1395, 2008.

Masri, A. R.; Bilger, R. W. e Dibble, R. W. Turbulent NonPremixed Flames of Methane Near Extinction: Probability Density Functions. **Combustion and Flame**, v. 73, p. 261-285, 1988.

Maruyama, S. Radiation Heat Transfer Between Arbitrary Three-Dimensional Bodies with Specular and Diffuse Surfaces. **Numerical Heat Transfer**, v. 24, p. 181-196, 1993.

Mauss, F.; Keller, D. e Peters, N. A Lagrangian Simulation of Flamelet Extinction and Re-Ignition in Turbulent Jet Diffusion Flames. 23rd Symposium (International) on Combustion. **The Combustion Institute**, v. 23, p. 693-698. 1990.

Meagher, D. Octree Encoding: A New Technique for the Representation, Manipulation and Display of Arbitrary 3-D Objects by Computer. **Technical Reporter**, Rensselaer Polytechnic Institute, Image Processing Laboratory, 1980.

Mengüç, M. P. e Viskanta, R. Radiative transfer in three-dimensional rectangular enclosures containing inhomogeneous, anisotropically scattering media. **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 33, p. 533-549, 1985.

Michele, G.; Graziadio, M.; Morelli, F. e Novelli, G. Characterization of the spray structure of a large scale HFO atomizer. **International Conference on Liquid Atomization and Sprays Systems**, Gaithersburg, USA, p. 779-786, 1991.

Modest, M. F. **Radiative heat transfer**. Academic Press, New York, 3rd ed., 2013.

Mullinger, P. J. e Chigier, N. A. The Design and Performance of Internal Mixing Multijet Twin Fluid Atomizers. **Journal of The Institute of Fuel**, v. 47, p 251-261, 1974.

Murthy, J. Y. e Mathur, S. R. Finite Volume Method for Radiative Heat Transfer Using Unstructured Meshes. **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 12, p. 313-321, 1998.

Nasr, H. e Ahmadi, G. The Effect of Two-Way Coupling and Inter-Particle Collisions on Turbulence Modulation in a Vertical Channel Flow. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, v. 28, p 1507–1517, 2007.

Naterer, G. F.; Milanez, M. e Vennb, G. On the Lagrangian/Eulerian modeling of dispersed droplet inertia: Internal circulation transition. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 291, p. 577–584, 2005.

Nazeer, Y. H.; Ehmman, M.; Agraniotis, M.; Koukouvinis, F. e Gavaises, M. Internal Flow Characteristics of Internally Mixing Twin-Fluid ‘Y’ Type Atomizer. **14th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, ICLASS**, Chicago, USA, 2018.

Nukyama, S. E. e Tanasawa, Y. An Experiment on the Atomization of Liquid by Means of an Air Stream. **Transactions of the American Society of Mechanical Engineers**. (Japan), v. 4, 1939.

Peng, D. Y. e Robinson, D. B. A New Two-Constant Equation of State. **Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals**, v. 15, p. 59-64, 1976.

Peskin, R. L.; Polymeropoulos, C. E. e Yeh, P. S. Results from a Theoretical Study of Fuel Drop Ignition and Extinction. **American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal**, v. 5, p. 2173–2178, 1967.

Peskin, R. L. e Wise, H. A. Theory for Ignition and Deflagration of Fuel Drops. **American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal**, v. 4 (9), p. 1646–1650, 1966.

Peters, N. Local Quenching Due to Flame Stretch and Non-Premixed Turbulent Combustion. **Combustion Science and Technology**, v. 30, p. 1-17, 1984.

Peters, N. Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Combustion. **Progress in Energy Combustion Science**, v. 10, p. 319-339, 1984.

Peters, N. Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion. In 21st Symposium (International) on Combustion. **The Combustion Institute**, v.21, p. 1231-1250, 1986.

Peters, N. **Turbulent Combustion**. Cambridge Monographs on Mechanics – Cambridge University, 2000.

Peters, N. e Donnerhack, S. Structure and Similarity of Nitric Oxide Production in Turbulent Diffusion Flames. In 18th Symposium (International) on Combustion, **The Combustion Institute**, v. 18, p. 33-42, 1981.

Pitsch, H.; Barths, H. e Peters, N. Three-Dimensional Modeling of NO_x and Soot Formation in DI-Diesel Engines Using Detailed Chemistry Based on the Interactive Flamelet Approach. SAE International Fall Fuels and Lubricants Meeting and Exhibition, **Journal of Fuels and Lubricants**, v. 105, 1996.

Pitsch, H.; Cha, C. M. e Fedotov, S. Flamelet Modelling of Non-Premixed Turbulent Combustion with Local Extinction and Re-Ignition. **Combustion Theory and Modelling**. v. 7, p. 317-332, 2003.

Pitsch, H. e Peters, N. A Consistent Flamelet Formulation for Non-Premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects. **Combustion and Flame**, v. 114, p. 26-40, 1998.

Poinsot, T. e Veynate, D. **Theoretical and Numerical Combustion**. R.T Edwards, 1 ed., 2001.

Pope, S. B. A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flow. **Combustion Science and Technology**, v. 25, p. 159-174, 1981.

Pope, S. B. Pdf methods for turbulent reactive flows. **Progress in Energy Combustion Science**, v. 11, p. 119-192, 1985.

Pope, S. B. Probability Distributions of Scalars in Turbulent Shear Flow. **Turbulent Shear Flows**, v. 2, p. 7-16, 1979.

Prakash, S. e Sirignano, W. A. Liquid Fuel Droplet Heating with Internal Circulation. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 21, p. 885–895, 1978.

Prakash, S. e Sirignano, W. A. Theory of Convective Droplet Vaporization with Unsteady Heat Transfer in the Circulating Liquid Phase. **International Journal of Heat and Mass Transfer**; v. 23, p. 253–268, 1980.

Raithby, G. D.; Chui, E. H. A finite-volume method for predicting a radiant heat transfer in enclosures with participating media. **Journal of Heat Transfer**, v. 112, p. 415-423, 1990.

Rangel, R. H. e Sirignano, W. A. The linear and nonlinear shear instability of a fluid sheet. **Physics of Fluids A Fluid Dynamics**, v. 3, p. 2392-2400, 1991.

Ranz, W. E. e Marshall, W. R. Evaporation from drops. **Chemical Engineering Progress**, v. 48, p. 141-146, 1952.

Raw; M. J. Robustness of Coupled Algebraic Multigrid for the Navier-Stokes Equations. 34th Aerospace and Sciences Meeting and Exhibit, **AIAA Meeting Papers**, Reno, USA, v. 34, 1996.

Rayleigh, L. On the instability of jets. **Proceedings of the London Mathematical Society**. v. 10, p. 4-13, 1879.

Reitz, R. D. e Bracco, F. V. Mechanism of Atomization of a Liquid Jet. **Physics of Fluids**, v. 25, p. 1730-1742, 1982.

Reitz, R. D. e Diwakar, R. Structure of High-Pressure Fuel Sprays. **SAE Technical Paper**, 1987.

Rhie, C.M. e Chow, W. L. A Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Isolated Airfoil with Trailing Edge Separation. **3rd Joint Thermophysics, Fluids, Plasma and Heat Transfer Conference**, St. Louis, USA, 1982.

Rink, K. K. e Lefebvre, H. A. Influence of drop size and combustion operating condition on pollutant emissions. **Society of Automotive Engineers**, 1987.

Rivas, J. R. R.; **Modelo Matemático e Simulação Numérica da Atomização de Líquidos em Injetores Centrífugos de Uso Aeroespacial**. Tese – Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, SP–Brasil, 2015.

Roesler, T. C. e Lefebvre, A. H. Photographic Studies on Aerated-liquid Atomization, Combustion Fundamentals and Applications. **Proceedings of the Meeting of the Central States Section of the Combustion Institute**, Indianapolis, USA, 1988.

Roesler, T. C. e Lefebvre, A. H. Studies on aerated-liquid atomization. **International Journal Turbo Jet Engines**, v. 6, p. 221-230, 1989.

Roesler, T. C. **An Experimental Study of Aerated-Liquid Atomization**. PhD thesis, Purdue University, USA, 1988.

Roache, P. J. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. **Journal of the Energy Institute**, v. 116, p. 116-150, 1994.

Roberts, P. T. e Moss, J. B. A Wrinkled Flame Interpretation of The Open Turbulent Diffusion Flame. **Eighteenth Symposium (International) on Combustion**, The Combustion Institute, 1981.

Rochaya, D. **Numerical simulation of spray combustion using bio-mass derived liquid fuels**. PhD thesis, Cranfield, 2007.

Rosin, P. E. e Rammler, E. The Laws Governing the Fineness of Powdered Coal. **Institute of Fuel**, v. 7, p. 29, 1933.

Sadat, H. On the use of a meshless method for solving radiative transfer with the discrete ordinates formulations. **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 101, p. 263-268, 2006.

Santangelo, P. J.; Sojka, P. E. A Holographic Investigation of the Near-nozzle Structure of an Effervescent Atomizer Produced Spray. **Atomization and Sprays**, v. 5, p. 137-155, 1995.

Savonov, R. I. **Análise Numérica e Teórica de Injetores Tipo “Swirl” Empregados em Motores-Foguete a Propelente Líquido**. Tese – Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA), São José dos Campos, SP–Brasil, 2011.

Sazhin, S. S. Advanced Models of Fuel Droplet Heating and Evaporation. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 32, p. 162–214, 2006.

Schmidt, D. P.; Nouar, I.; Senecal, P. K.; Rutland, C.; Martin, J. K.; Reitz, R. e Hoffman, J. A. D. Pressure-swirl atomization in the near field. **SAE International**, v. 108, p. 471-484, 1999.

Senecal, P. K.; Schmidt, D. P.; Nouar, I.; Rutland, C. J.; Reitz, R. D. e Corradin, M. L. Modeling High-Speed Viscous Liquid Sheet Atomization. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 25, p. 1073-1097, 1999.

Shah, N. G. **New method of computation of radiant heat transfer in combustion chambers**, Ph.D. Thesis, University of London, Mech. Eng. Dept., Imperial College, 1979.

Sheen, H. J.; Chen, W. J.; Jeng, S. Y. e Huang, W. L. Correlation of Swirl Number for a Radial-Type Swirl Generator. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 12, p. 444-451, 1996.

Siegel, R. e Howell, J. R. Thermal Radiation Heat Transfer. **Taylor & Francis**, New York-London, 4 ed., 2002.

Sirignano, W. A. Computational Spray Combustion in Numerical Modeling in Combustion. **Chung TJ, Hemisphere**, 1983.

Sirignano, W. A. Fuel Droplet Vaporization and Spray Combustion Theory. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 9, p. 291-322, 1984.

Sirignano, W. A. Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays. **Cambridge University Press**, 1 ed., 1999.

Sivathanu, Y. R. e Faeth, G. M. Generalized State Relationships for Scalar Properties in Non-Premixed Hydrocarbon/Air Flames. **Combustion and Flame**, v. 82, p. 211-230, 1990.

Sivathanu, Y. R. e Faeth, G. M. Generalized State Relationships for Scalar Properties in Non-Premixed Hydrocarbon/Air Flames. **Combustion and Flame**, v. 82, p. 211–230, 1990.

Song, S. H. e Lee, S. Y. Study of atomization mechanism of gas/liquid mixtures flowing through Y-Jet atomizers. **Atomization and Sprays**, v. 6, p. 193-209, 1996.

Sovani, S. D.; Sojka, P. E. e Lefebvre, A. H. Effervescent atomization, **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 27, p. 483-521, 2001.

Spalding, D. B. The Combustion of Liquid Fuels. **Fourth International Symposium on Combustion**, The Combustion Institute, v. 4, p. 847-864, 1954.

Squire, H. B. Investigation of the Instability of a Moving Liquid Film. **British Journal of Applied Physics**, v. 4, p. 167-169, 1953.

Sutherland J. J.; Panchagnula, M. V.; Sojka, P. E.; Plesniak, M. W. e Gore, J, P.; Effervescent Atomization at Low Air-Liquid Ratios. **8th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems**, p. 74-77, 1995.

Sutherland, J. J.; Sojka, P. E. e Plesniak, M. W. Ligament Controlled Effervescent Atomization. **Atomization and Sprays**, v. 7, p. 383-406, 1997.

Taylor, P. B. e Foster, P. J. The Total Emissivities of Luminous and Non-Luminous Flames, **Journal of Heat Transfer**, v. 17, p. 1591-1605, 1974.

Vanz, R. **Análise Computacional do Efeito da Transferência de Calor Radiativa na Oxi-combustão de Carvão Russo em uma Instalação de Ensaio de Combustão de 0,5 MW**. Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões – Campus de Erechim, URI, RS–Brasil, 2017.

Wang, X. F.; Chin, J. S. e Lefebvre, A. H. Influence of Gas Injector Geometry on Atomization Performance of Aerated-Liquid Nozzles. **International Journal Turbo Jet Engines**, v. 6, p. 271-280, 1989.

Wang, P.; Zhang, K. e Liu, R.; Influence of air supply pressure on atomization characteristics and dust-suppression efficiency of internal-mixing air-assisted atomizing nozzle. **Powder Technology**, v. 335, p. 393-407, 2019.

Weber, C. On the breakdown of a fluid jet. **Z.A.M.P.**, v. 11, p. 136-159, 1931.

Williams, A. Combustion of Droplets of Liquid Fuels: a Review. **Combustion and Flame**, v. 21, p. 1-31, 1973.

Williams, F. A. Recent Advances in Theoretical Descriptions of Turbulent Diffusion Flames. **Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows**, p. 189-208, 1975.

Young, K. J.; Stewart, C. D. e Moss, J. B. Soot Formation in Turbulent Nonpremixed Kerosine-Air Flames Burning at Elevated Pressure: Experimental Measurement. 25th Symposium (International) on Combustion, **The Combustion Institute**, v. 25, p. 609-617, 1994.

Youngs, D. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. **Numerical Methods for Fluid Dynamics**, v. 24, p. 273-285, 1982.

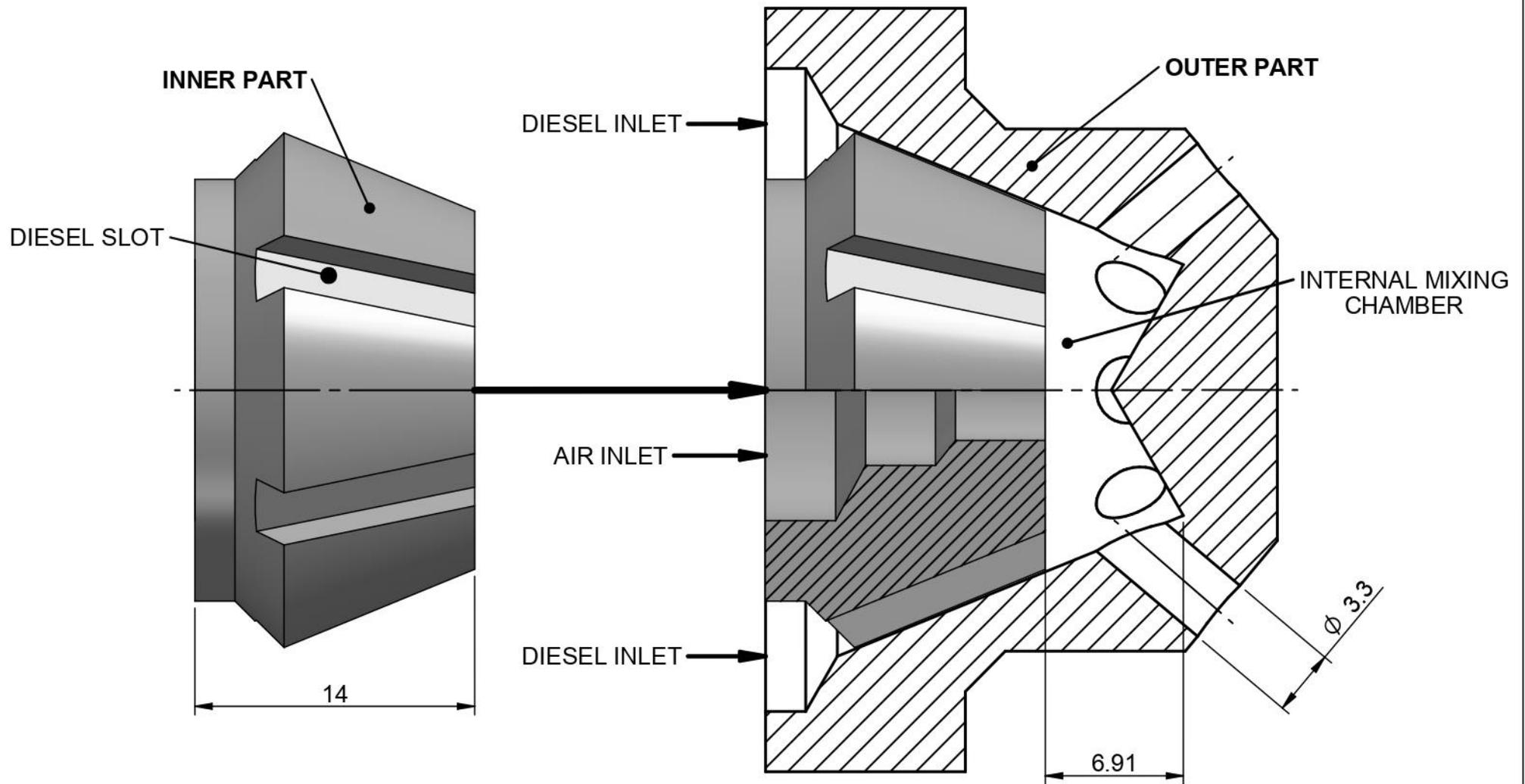
Yule, A. J.; Nasr, G. G. e Bending, L. *Industrial Sprays and Atomization: Design, Analysis and Applications*. **Springer-Verlag**, London, 2002.

Zhao, J. M. e Liu, L. H. Least-Squares Spectral Element Method for Radiative Heat Transfer in Semitransparent Media. **Numerical Heat Transfer**, v. 50, p. 473-489, 2006

Zhou, H. C. e Cheng, Q. The DRESOR method for the solution of the radiative transfer equation in gray plane-parallel media. In: **Proceedings of the Fourth International Symposium on Radiative Transfer**, Istanbul, Turkey, v. 4, p. 181-190, 2004.

Zhu, S.; Roerkaerts, D. e Meer, T. Van Der. Numerical simulation of a turbulent methanol spray flame using the Euler-Lagrange method and the steady laminar flamelet model. **7th Mediterranean Combustion Symposium**, Sardinia, Italy, p. 1–12, 2011.

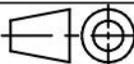
APÊNDICE A – DETALHAMENTO BICO INJETOR PROPOSTO

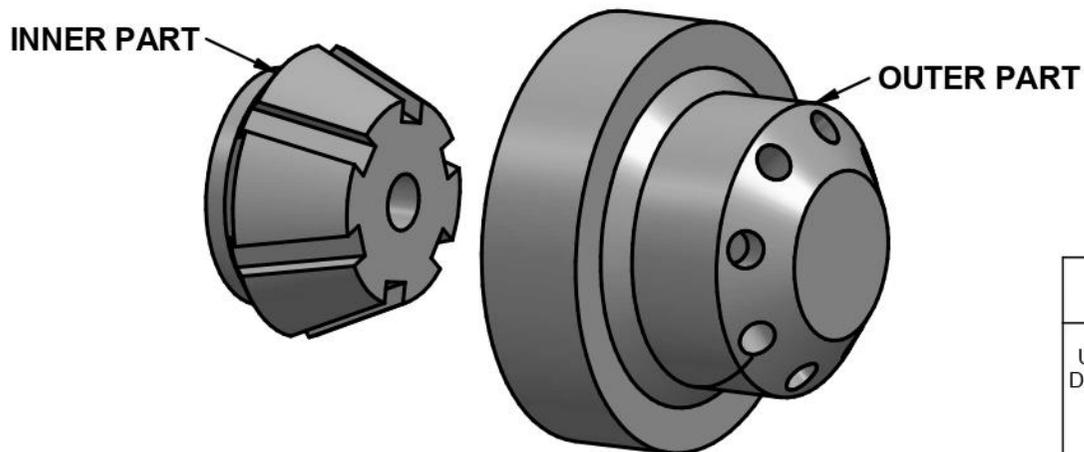
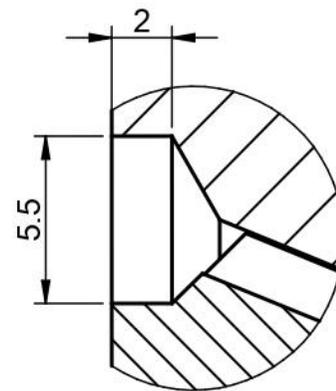
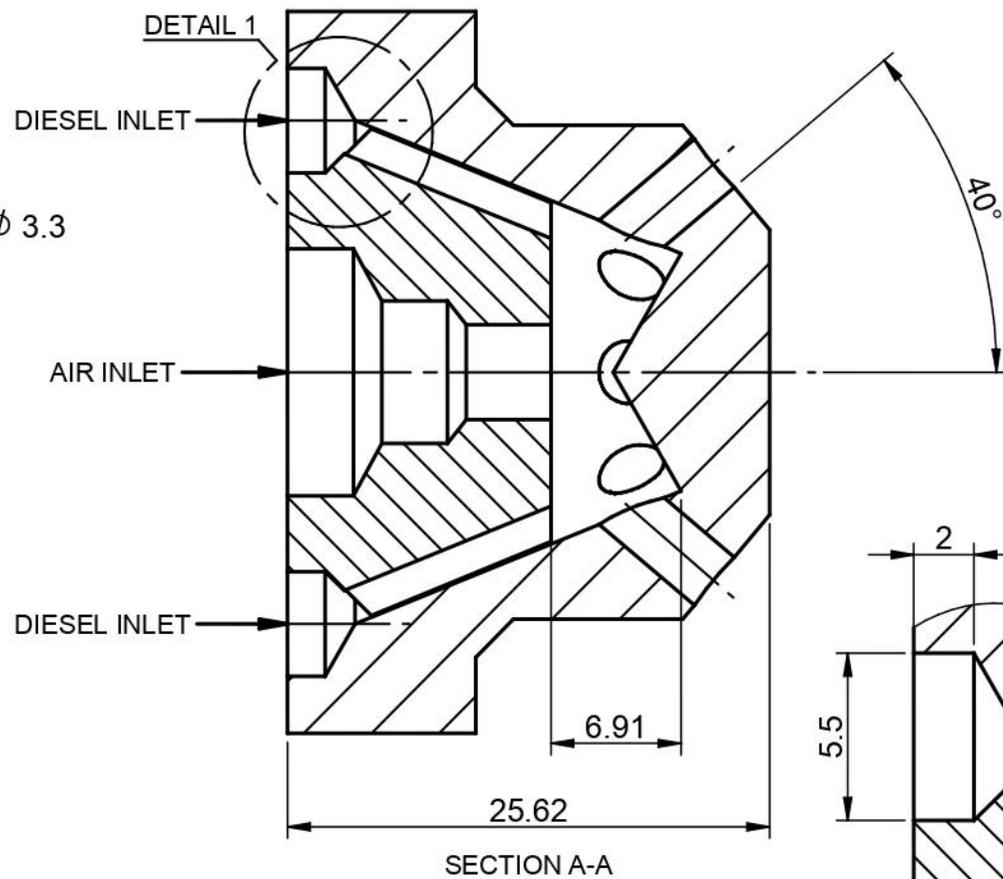
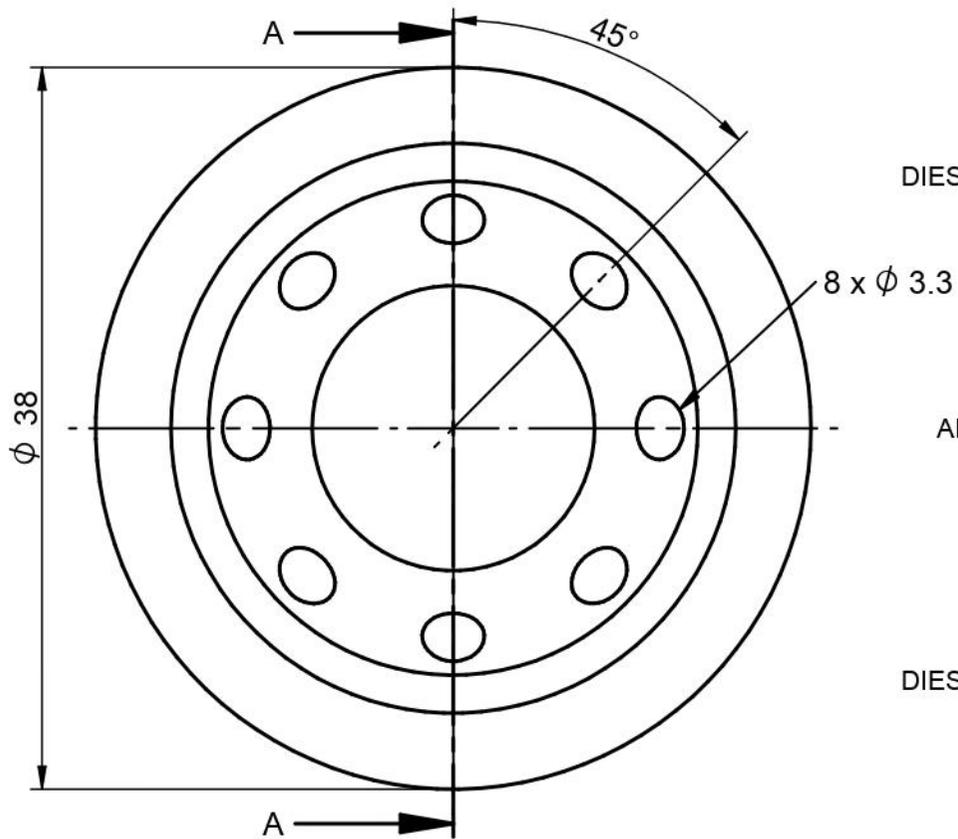


NEW NOZZLE PECEM

New nozzle consists of two parts, Outer Part and Inner Part. When assembled, they form a body with an internal mixing chamber. Outer Part is a conical hollow piece designed to receive the Inner Part, with 8 cylindrical outlet holes with a diameter of 3.3 mm. Inner Part has a truncated-cone shape with 6 slots of rectangular cross-section with width-to-height ratio 3x2 mm, through which fuel oil flows, and a 5 mm diameter central orifice that supplies air to the internal mixing chamber. internal. Inner Part height is 14 mm, allowing an internal height of the mixing chamber of 6.91 mm.

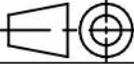
Both parts must be positioned correctly and bolted to the lance. The force exerted by tightening the lance nut holds the nozzle in position.

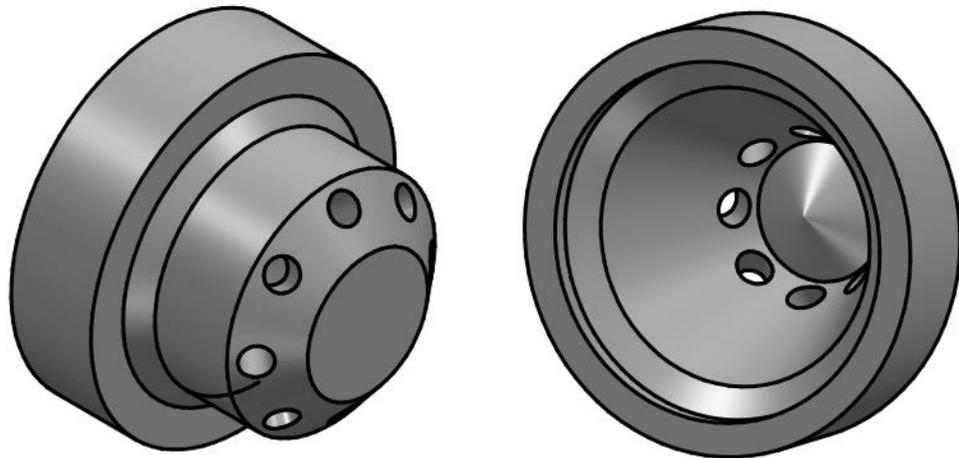
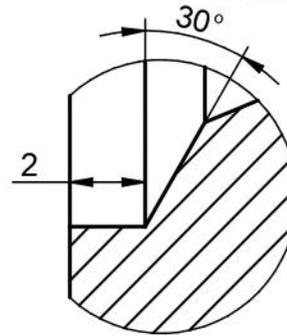
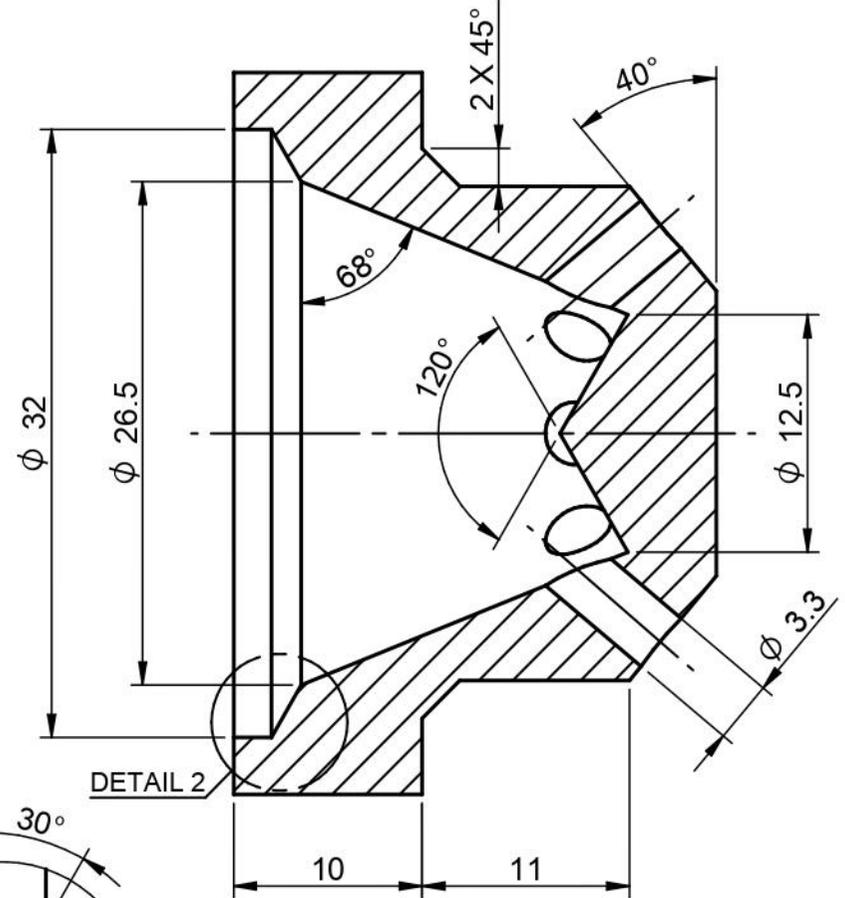
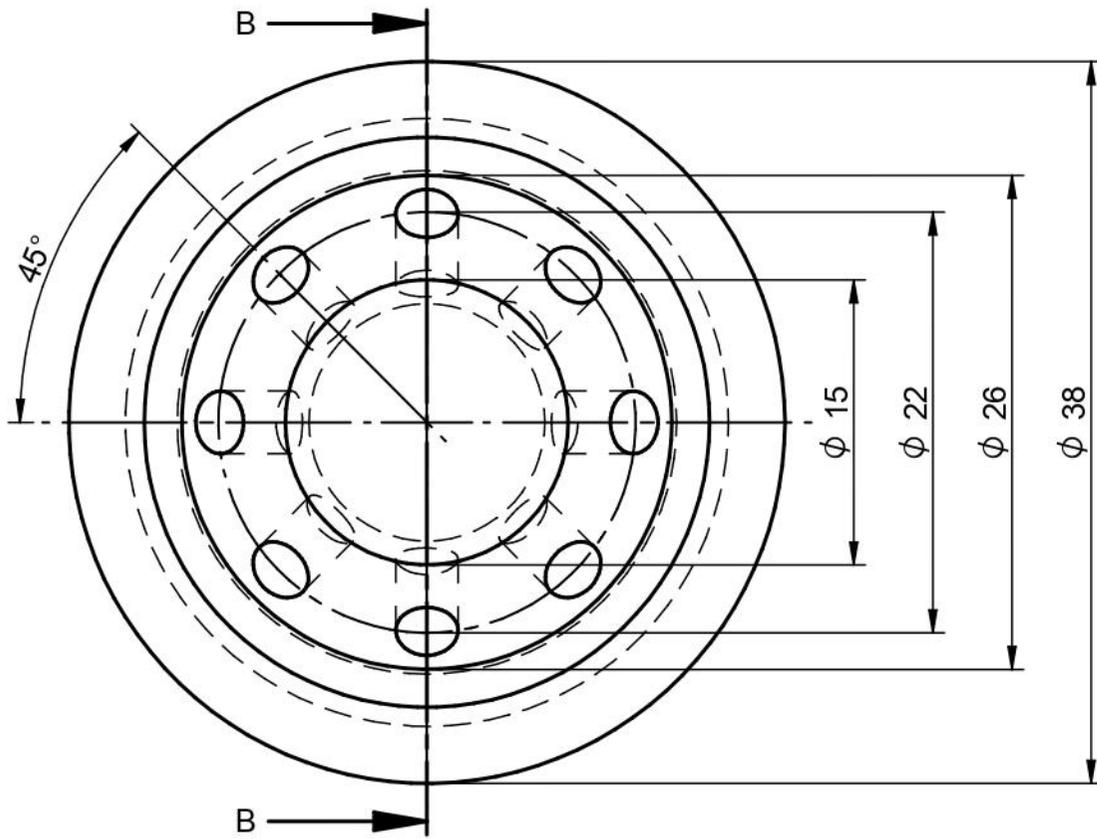
PROJECTION FIRST ANGLE 	 LETA Laboratório de Ensaios Térmicos e Aerodinâmicos		THIS DESIGN IS THE PROPERTY OF LETA & IS ONLY ALLOWED TO BE USED BY EXPRESS PERMISSION & LICENCE FROM LETA
	DRAWING TITLE NEW NOZZLE PRESENTATION		
	PROJECT SMART PECÉM	DRAWN RAUL VANZ	DATE 10/03/19
	FILE NAME: NEW_NOZZLE_DETAILS_10022019.dft		
UNLESS OTHERWISE SPECIFIED DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS ANGLES $\pm 0.2^\circ$ 2 PL ± 0.02	SCALE: 1:3.5	ORIGINAL SIZE: A4	SHEET 1 OF 4




LETA
 Laboratório de Ensaios
 Térmicos e Aerodinâmicos

THIS DESIGN IS THE PROPERTY OF LETA & IS ONLY ALLOWED TO BE USED BY EXPRESS PERMISSION & LICENCE FROM LETA

PROJECTION FIRST ANGLE 	DRAWING TITLE NEW NOZZLE ASSEMBLY		
	PROJECT SMART PECÉM	DRAWN RAUL VANZ	DATE 10/03/19
UNLESS OTHERWISE SPECIFIED DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS ANGLES $\pm 0.2^\circ$ 2 PL ± 0.02			
FILE NAME: NEW_NOZZLE_DETAILS_10022019.dft		SCALE: 1:2.5	ORIGINAL SIZE: A4
		SHEET 2 OF 4	



DETAIL 2
SCALE: 5:1

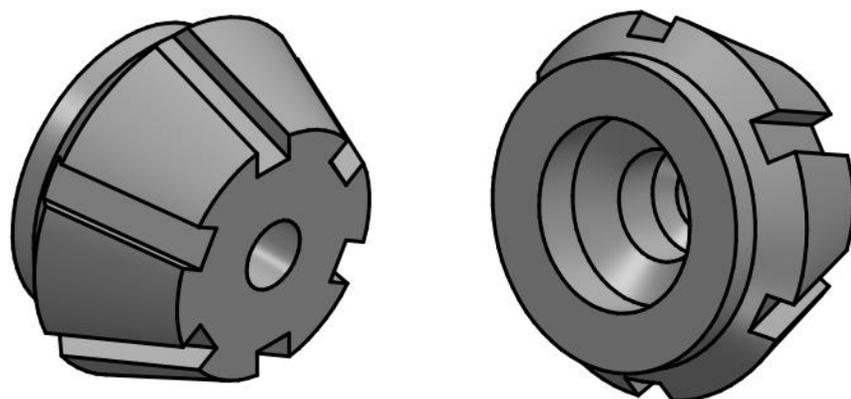
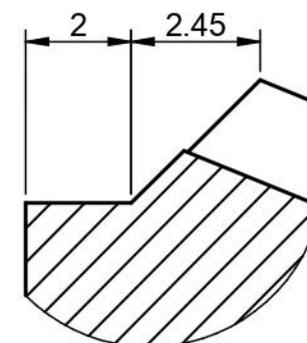
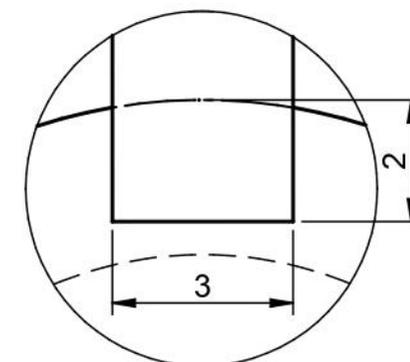
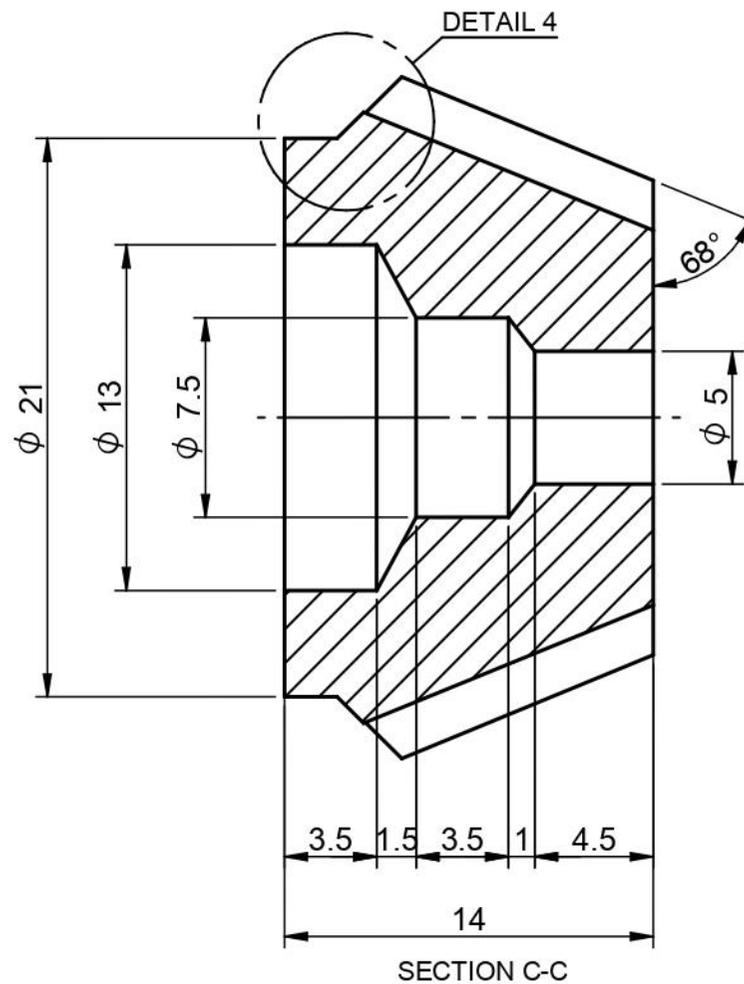
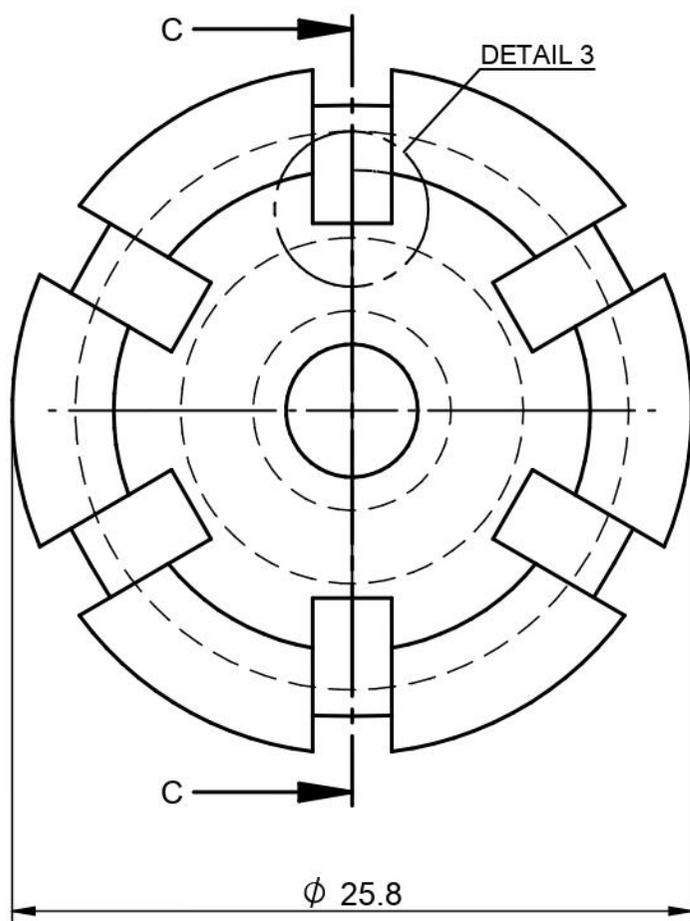

LETA
 Laboratório de Ensaios
 Térmicos e Aerodinâmicos

THIS DESIGN IS THE PROPERTY OF LETA & IS ONLY ALLOWED TO BE USED BY EXPRESS PERMISSION & LICENCE FROM LETA

PROJECTION
FIRST ANGLE


UNLESS OTHERWISE SPECIFIED
 DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS
 ANGLES $\pm 0.2^\circ$
 2 PL ± 0.02

DRAWING TITLE		
OUTER PART DETAIL		
PROJECT	DRAWN	DATE
SMART PECÉM	RAUL VANZ	10/03/19
FILE NAME: NEW_NOZZLE_DETAILS_10022019.dft		
SCALE: 1:2.5	ORIGINAL SIZE: A4	SHEET 3 OF 4




LETA
 Laboratório de Ensaios
 Térmicos e Aerodinâmicos

THIS DESIGN IS THE PROPERTY OF LETA & IS ONLY ALLOWED TO BE USED BY EXPRESS PERMISSION & LICENCE FROM LETA

PROJECTION FIRST ANGLE 	DRAWING TITLE		
	INNER PART DETAIL		
UNLESS OTHERWISE SPECIFIED DIMENSIONS ARE IN MILLIMETERS ANGLES $\pm 0.2^\circ$ 2 PL ± 0.02	PROJECT	DRAWN	DATE
	SMART PECÉM	RAUL VANZ	10/03/19
	FILE NAME: NEW_NOZZLE_DETAILS_10022019.dft		
SCALE: 1:3.5	ORIGINAL SIZE: A4	SHEET 4 OF 4	