

## UMA GENERALIZAÇÃO DA FORMULAÇÃO DE SHVAB-ZEL'DOVICH PARA COMBUSTÃO DE GOTAS

**Luiz E. M. Lima**

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil  
luizeduardomlima@yahoo.com.br

**Enizete A. Gonçalves**

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil  
enizeteag@yahoo.com.br

**Gabriela S. Moura**

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil  
gabriela@lcp.inpe.br

**Fernando F. Fachini**

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil  
fachini@lcp.inpe.br

**Resumo.** Este trabalho tem por objetivo descrever o problema da combustão de gota isolada usando uma formulação de Shvab-Zel'dovich estendida. A formulação original de Shvab-Zel'dovich descreve a temperatura e as frações mássicas do combustível e do oxidante por meio das funções excesso de entalpia e fração de mistura, considerando separadamente a parte do domínio da fase gasosa contendo o combustível e a parte contendo o oxigênio. Nos casos estacionários e quase-estacionários, o sistema de duas equações pode ser simplificado com a descrição de uma dessas equações em função da outra; por exemplo, o excesso de entalpia em função da fração de mistura. A contribuição deste trabalho está na generalização da formulação de Shvab-Zel'dovich, podendo considerar a fase gasosa como um único domínio. Com esta abordagem pode se estudar os casos de número de Lewis diferente da unidade. Escolheu-se o problema de combustão de gota esférica porque é relativamente simples: baseia-se no fato de que este processo é controlado principalmente pela fase gasosa na vizinhança da gota. A fase gasosa tem um comportamento quase-estacionário comparado com o comportamento da fase líquida. Através da integração numérica de uma equação diferencial-integral de primeira ordem foi possível obter valores da temperatura (um dos autovalores do problema) e fração mássica de combustível na superfície da gota, e temperatura da chama em função da temperatura ambiente para três combustíveis.

**Palavras chave:** combustão de gotas, formulação estendida de Shvab-Zel'dovich.

### 1. Introdução

A combustão de sprays de combustível líquidos é de considerável importância em motores de foguetes a propelente líquido, motores diesel, turbinas a gás e queimadores a óleo. Um primeiro passo em direção à descrição da combustão de spray é desenvolver o modelo para a queima de uma única gota de combustível (Spalding, 1953; Godsavage, 1953; Goldsmith e Pender, 1954; Kumagi e Isoda, 1957).

A maioria dos estudos de combustão de gotas isoladas considera simetria esférica, coeficientes de transporte e termodinâmico constantes, igualdade nos processos de transporte de calor e massa, e sem velocidade relativa entre a gota e a fase gasosa (Kumagi e Isoda, 1957). O alto valor da razão da densidade do líquido e da densidade do gás justifica a aproximação de regime quase-estacionário do processo na fase gasosa. A teoria clássica da combustão de gotas determina razoavelmente algumas propriedades, por exemplo, a taxa de vaporização e a evolução temporal do raio da gota, porém outras propriedades, por exemplo, a posição e a temperatura da chama, não são representadas corretamente por este modelo (Liñán e Rodrigues, 1985).

Embora, o sistema de equações diferenciais para o modelo quase-estacionário seja simples, quando se considera a reação química, mesmo que seja para um mecanismo de passo único, e a dependência dos coeficientes de transporte e termodinâmico com a temperatura e concentração, o sistema de equações não tem solução analítica. No decorrer dos anos, muitos procedimentos foram sugeridos com o fim de eliminar as não linearidades destes termos.

Considerando a taxa de reação química infinitamente rápida pode-se eliminar o termo de reação química das equações, porque assim garante que não há vazamento dos reagentes pela chama (Williams, 1985). Para os coeficientes de transporte e termodinâmico dependentes linearmente da temperatura também se consegue, por meio da combinação das equações

de conservação, a eliminação da não linearidade e com isso pode-se resolver o problema da gotas (Goldsmith e Pender, 1954). Posteriormente, a reação química e a dependência das propriedades de transporte foram também incluídas no modelo, porém o sistema de equações teve que ser integrado numericamente (Kassoy e Willians, 1968). Em todos estes modelos, o número de Lewis foi mantido constante igual a um e assumidos calores específicos constantes. Mais tarde o modelo quase estacionário foi formulado para o problema de vaporização de gotas com a adição da dependência dos coeficientes de transporte e calor específico com a composição do gás e temperatura (Law, 1975). A não linearidade relativa aos coeficientes de transporte foi eliminada por meio de mudanças de variáveis (Raghunandan e Mukunda, 1977).

Este mesmo problema foi resolvido numericamente considerando que a combustão gerava monóxido de carbono por meio da reação  $CO_2 + H_2 \rightarrow CO + H_2O$ . Expressões detalhadas para os coeficientes de transporte e termodinâmico foram adotadas (Puri e Libby, 1991). Este modelo mantém o compromisso de simplicidade e ao mesmo tempo inclui o fato da combustão ser incompleta.

Mais recentemente, combinaram-se os procedimentos de Shvab-Zel'dovich e de Goldsmith e Penner (Goldsmith e Pender, 1954) para eliminar tanto a não linearidade da reação química bem como a dos coeficientes de transporte e permitir que o número de Lewis tivesse um valor qualquer (Fachini, 1999). O modelo quasi-estacionário ainda foi estendido com a inclusão do termo de transporte de calor devido ao transporte de massa. A não linearidade correspondente a este termo foi eliminada com uma combinação apropriada das equações de conservação de energia e das espécies (Imaoka e Sirignano, 2005). Entretanto, para que este procedimento fosse realizado houve-se a necessidade de impor a condição de número de Lewis igual a um.

O presente trabalho apresenta um procedimento para resolver o problema da combustão de gotas isoladas sem a necessidade: 1) da separação do domínio entre a região que contém combustível da região que contém oxidante e 2) de impor a condição de número de Lewis igual a um.

## 2. Modelo

Foram adotadas as seguintes considerações para a formulação do modelo numérico:

- Gota esférica com raio  $a(t)$  no instante  $t$ , em  $t = 0$ ,  $a(0) = a_0$ ;
- Densidade,  $\rho_l$ , calor específico,  $c_l$ , e condutividade térmica,  $k_l$ , da fase líquida constantes;
- Densidade,  $\rho_\infty$ , calor específico à pressão constante,  $c_p$ , condutividade térmica,  $k_\infty$ , temperatura do gás,  $T_\infty$ , e fração mássica do oxidante,  $Y_{O_\infty}$ , no ambiente, são constantes.

As variáveis adimensionais utilizadas nesta análise são definidas como

$\theta = T/T_b$ ,  $\varrho = \rho/\rho_\infty$ ,  $y_F = Y_F$ ,  $y_O = Y_O/Y_{O_\infty}$ ,  $v = Va_0/\alpha_\infty$ ,  $x = r/a_0$  e  $\tau = t/t_c$  sendo  $t_c$  o tempo característico da queima da gota,  $t_c = a_0^2/\alpha_\infty\epsilon$ , a difusividade térmica  $\alpha_\infty = k_\infty/(c_p\rho_\infty)$ , e  $\epsilon = \rho_\infty/\rho_l \ll 1$ .  $T_b$  é a temperatura de ebulição do combustível. Notar que o subíndice  $\infty$  representa as condições no ambiente.

Para a densidade líquida constante,  $\rho_l$ , a equação de conservação da massa adimensional dentro da gota é dada por:

$$da^3/d\tau = -3\lambda(\tau), \quad (1)$$

sendo  $\lambda = (\dot{m}c_p)/(4\pi a_0 k_\infty)$ ,  $a = a/a_0$  (Fachini, 1999).

O problema térmico dentro da gota pode ser descrito facilmente assumindo também que o processo de condução é o único processo de transferência de calor ou esse processo é tão rápido que a temperatura é considerada uniforme (Fachini, 1999).

O modelo consiste de uma gota queimando em ambiente estacionário com simetria esférica e a pressão constante. Os coeficientes de transporte dos gases nas condições ambientes ( $k_{g_\infty}$  e  $D_{i_\infty}$  [ $i = F, O$ ]) são considerados como constantes. Também, adotou-se o mesmo mecanismo cinético encontrado nos problema clássicos de chamas difusivas: o mecanismo de Burke-Schumann com taxa de reação infinita. Além dessas considerações, a dependência dos coeficientes de difusão,  $D_F$  e  $D_O$ , e da condutividade térmica,  $k_g$ , na temperatura é da forma de potência,  $\theta^n$ , sendo o valor representado por  $n$  igual a 0,5 (Fachini, 1999). Para completar o modelo, tomou-se a condição de equilíbrio entre o vapor e o líquido na interface líquido/gás. Com isso, fez-se valer a expressão de Clausius-Clapeyron:

$$y_{F_s} = \exp[\gamma(1 - 1/\theta_s)], \quad (2)$$

sendo  $y_{F_s}$  a fração mássica de combustível na superfície da gota,  $\theta_s$  é a temperatura na superfície da gota,  $\gamma = L/(R_g T_b)$ ,  $L$  é o calor latente de vaporização e  $R_g$  é a constante do gás; o subíndice  $s$  indica a propriedade na superfície da gota. Ainda, considerou-se o peso molecular do combustível igual ao da mistura do gás no ambiente. As forças de corpo, a radiação e a dissipação viscosa não são incluídas no modelo.

As equações de conservação adimensionalizadas para a fase gasosa,  $x > a(\tau)$ , podem ser escritas como:

$$x^2 \varrho v = \lambda(\tau) \quad (3)$$

$$L_i \lambda x^2 \frac{\partial y_i}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( x^2 \theta^n \frac{\partial y_i}{\partial x} \right) - s_i L_F x^2 w, \quad [i = O, F] \quad (4)$$

$$\lambda x^2 \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( x^2 \theta^n \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + Q L_F x^2 w, \quad (5)$$

sendo  $s_O = (\nu L_O)/(L_F Y_{O\infty})$  e  $s_F = 1$ ;  $w = (a_0^2 \dot{w})/(\rho_\infty \alpha_\infty)$  e  $Q = q/(c_p T_b L_F)$  O valor de  $\nu$  representa a massa de oxigênio necessário para queimar estequiometricamente uma massa unitária de combustível.

Para fechar o sistema de equações de conservação é empregado a equação de estado adimensionalizada do gás, escrita como:

$$1 = \rho \theta, \quad x > a. \quad (6)$$

Utilizaram-se as seguintes condições de contorno na integração das equações (4) e (5), em  $x = a$ ,

$$\left( x^2 \theta^n \frac{\partial y_F}{\partial x} \right) = -\lambda L_F (1 - y_{Fs}), \quad (7)$$

$$\left( x^2 \theta^n \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = \lambda L, \quad (8)$$

$$\text{em } x = x_f, \quad \theta - \theta_f = y_F = y_O = 0, \quad (9)$$

e

$$\text{em } x \rightarrow \infty, \quad \theta - \theta_\infty = y_F = y_{O\infty} - 1 = 0, \quad (10)$$

sendo  $L$  o calor de vaporização adimensionalizado e é obtido pela solução do problema térmico da fase líquida.

### 3. Solução

É assumido que a reação química ocorre no limite de Burke-Schumann, portanto o tempo característico da reação é infinitamente menor que qualquer tempo característico mecânico. O tempo de residência dos reagentes é infinitamente pequeno na zona de reação e a chama tem uma zona de reação infinitamente fina.

O problema de combustão de gota é descrito usando uma formulação de Shvab-Zel'dovich generalizada. Esta nova formulação não faz distinção da região que contém o combustível daquela que contém o oxigênio.

Combinando as equações (4) e (5) pode-se encontrar:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \int_{Z_s}^Z L e(Z) dZ - \frac{x^2 \theta^n}{\lambda} \frac{\partial Z}{\partial x} \right) = 0, \quad (11)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( H + \int_{Z_s}^Z N(Z) dZ - \frac{x^2 \theta^n}{\lambda} \frac{\partial H}{\partial x} \right) = 0, \quad (12)$$

sendo

$$H = (S + 1)\theta/Q + y_O + y_F, \quad Z = S y_F - y_O + 1,$$

$$L e(Z) = \begin{cases} L_F, & Z > 1 \\ L_O, & Z < 1 \end{cases}, \quad N(Z) = \begin{cases} (L_F - 1)/S, & Z > 1 \\ (1 - L_O), & Z < 1 \end{cases},$$

$$S = (\nu L_O)/(L_F Y_{O\infty}).$$

As condições de contorno para as equações (11) e (12) são:

$$Z_s = S y_{Fs} + 1, \quad (13)$$

$$H_s = (S + 1)\theta_s/Q + y_{Fs}, \quad (14)$$

$$\left( x^2 \theta^n \frac{\partial Z}{\partial x} \right)_{x=a} = -L_F S (1 - y_{Fs}), \quad (15)$$

$$\left( x^2 \theta^n \frac{\partial H}{\partial x} \right)_{x=a} = \frac{(S + 1)L}{Q} - L_F (1 - y_{Fs}), \quad (16)$$

$$Z(x_f) = 1; \quad H(x_f) = (S + 1)\theta_f/Q, \quad (17)$$

$$Z(x \rightarrow \infty) = 0; \quad H(x \rightarrow \infty) = (S + 1)T_\infty/(T_b/Q) + 1, \quad (18)$$

sendo o subscrito  $f$  a condição na chama. As funções  $H$  e  $Z$  e as primeiras derivadas de cada são contínuas.

Da integração das equações (11) e (12) e combinando-as, na região  $a \leq x \leq \infty$ , obtém-se:

$$\frac{\partial H}{\partial Z} = \frac{H - H_s + \bar{H} + \int_{Z_s}^Z NdZ}{\int_{Z_s}^Z LedZ - \bar{Z}}, \quad (19)$$

sendo,  $\bar{H} = (S + 1)L/Q + L_F(1 - y_{Fs})$  e  $\bar{Z} = -SL_F(1 - y_{Fs})$ .

A equação (19) junto com as condições de contorno foi resolvida numericamente. O código numérico desenvolvido no trabalho foi baseado no método de Runge-Kutta. O método de Runge-Kutta baseia-se numa idéia semelhante à do método de Euler. O método de Euler de primeira ordem, que se obtém a partir da expansão em série de Taylor da função, ignorando os termos em função das derivadas de ordem superior ou igual a dois. Das fórmulas mais populares, o método de Runge-Kutta de quarta ordem é o que fornece melhores resultados. Embora não seja o mais fácil de implementar, pois exige quatro cálculos da função em cada passo, tem duas propriedades importantes. Tem erro de truncamento local  $O(h^5)$  e é uma fórmula de passo único.

#### 4. Resultados

Os resultados obtidos neste trabalho para três diferentes combustíveis (n-heptano, metanol e etanol) podem ser observados nas Figuras a seguir. Na Figura 1 tem-se a temperatura da chama, na Figura 2 tem-se a temperatura na superfície da gota, e na Figura 3 podemos observar o comportamento da fração mássica de combustível na superfície da gota, sendo que todos esses parâmetros foram relacionados com a temperatura ambiente na qual a gota está sendo queimada.

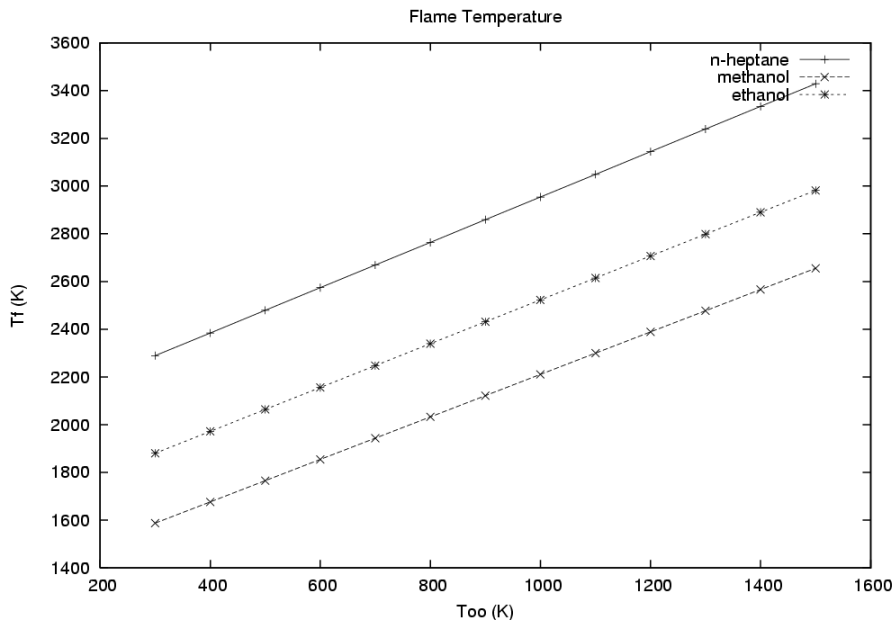


Figura 1: Temperatura da chama em função da temperatura ambiente para n-heptano, metanol e etanol.

Comparando os nossos resultados com os apresentados na literatura (Fachini, 1999) para a temperatura de chama,  $T_f = 2631, 2363, 2375K$ , respectivamente para n-heptano, metanol e etanol, na temperatura ambiente de 298 K, podemos observar que para os três casos há uma considerável discrepância nos valores. Isso pode ter ocorrido pelas diferenças nas propriedades termodinâmicas adotadas para a mistura combustível e produtos da combustão. Podemos observar que para todos os casos analisados a temperatura da chama aumenta linearmente com a temperatura ambiente, e que a inclinação dessas retas é praticamente igual nos três casos.

As duas outras propriedades de combustão de gotas, temperatura e fração mássica na superfície da gota, dependem do calor latente  $L$  do combustível. Quanto maior for o valor de  $L$  mais próximo a temperatura na superfície da gota está do valor da temperatura de ebulição, conseqüentemente  $y_{Fs} \sim 1$ . Então a variação na temperatura do ambiente na combustão

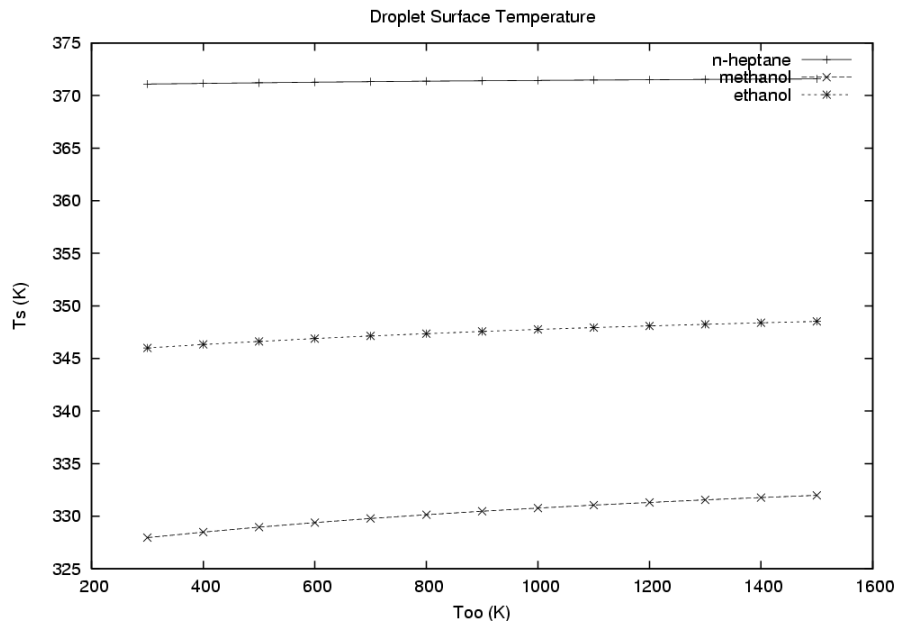


Figura 2: Temperatura na superfície da gota em função da temperatura ambiente para n-heptano, metanol e etanol.

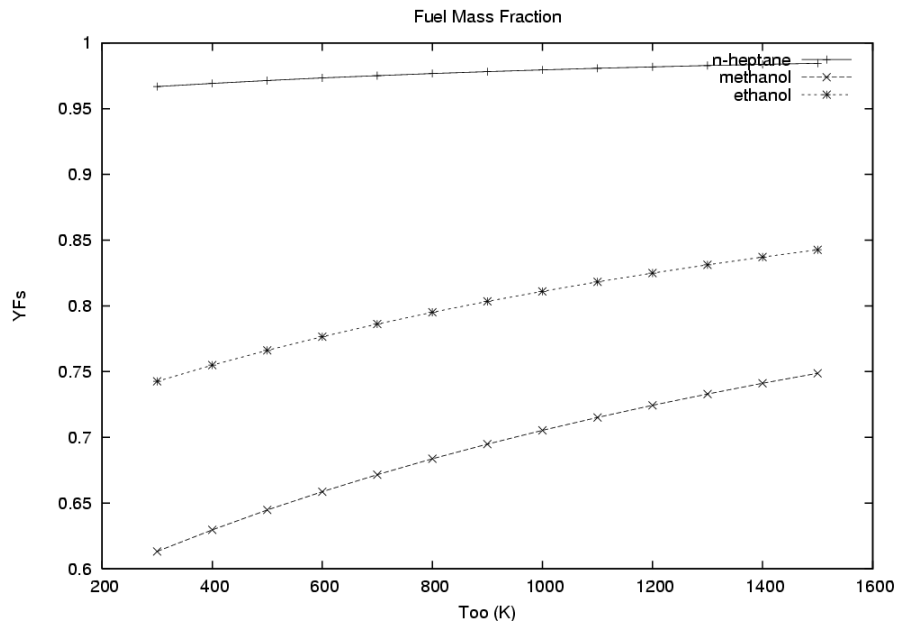


Figura 3: Fração mássica de combustível na superfície da gota em função da temperatura ambiente para n-heptano, metanol e etanol.

de líquidos com altos valores de  $L$  não modifica significativamente a temperatura e fração mássica na superfície da gota. Como observamos na figuras 2 e 3 para o caso do n-heptano. Entretanto, para os outros dois casos, etanol e metanol, o valor do calor latente não é tão alto por isso a vaporização ocorre nas condições  $|\theta_s - 1| = O(1)$  e  $|y_{Fs} - 1| = O(1)$ . Para estes combustíveis, a mudança na temperatura do ambiente resulta em variações expressivas na temperatura e fração mássica na superfície da gota, por causa do aumento do fluxo de calor para a gota.

## 5. Conclusão

O presente trabalho apresenta um modelo para a determinação rápida das temperaturas da superfície da gota e da chama, assim como da fração mássica de combustível na superfície da gota. O baixo custo computacional para o cálculo destas propriedades é uma motivação para o emprego deste modelo em análise de combustão de spray. Para os futuros estudos aplicar-se-á um calor efetivo de combustão,  $Q_e = k_f Q$ , para corrigir a super-estimativa da temperatura da chama e aproximar os valores com os já encontrados por via experimental.

## 6. Referências

- Fachini, F. F., 1999, An analytical solution for the quasi-steady droplet combustion, “Combustion and Flame”, Vol. 116, pp. 302–306.
- Godsave, G., 1953, Studies of the Combustion of Drops in a Fuel Spray - The Burning of Single Droplets of Fuel, “Proc. Combust. Instit.”, Vol. 4, pp. 818–830.
- Goldsmith, M. and Pender, S. S., 1954, On the burning of single drops of fuel in an oxidizing atmosphere, “Jet Propulsion”, Vol. 24, pp. 245–251.
- Imaoka, R. T. and Sirignano, W. A., 2005, A Generalized Analysis for Liquid-Fuel Vaporization and Burnign, “International Journal of Heat and Mass Transfer”, Vol. 48, pp. 4342–4353.
- Kassoy, D. R. and Williams, F. A., 1968, Variable property effects on liquid droplet combustion, “AIAA Journal”, Vol. 6, pp. 1961–1965.
- Kumagi, S. and Isoda, H., 1957, Combustion of fuel droplets in a falling chamber, “Proceedings of Combustion Institute”, Vol. 6, pp. 726–731, New York, USA.
- Law, C. K., 1975, Quasy-Steady Droplet Vaporization Theory with Property Variations, “Physics of Fluids”, Vol. 18, pp. 1961–1965.
- Liñán, A. and Rodrigues, M., 1985, Droplet vaporizacion, ignicion y combustión de gotas, Jornadas Sobre Combustion en Motores Termicos.
- Puri, I. K. and Libby, P. A., 1991, The Influence of Transport-Properties on Droplet Burning, “Combustion Science and Technology”, Vol. 76, pp. 67–80.
- Raghunandan, B. N. and Mukunda, H. S., 1977, Problem of Liquid Droplet Combustion - Re-examination, “Combustion and Flame”, Vol. 30, pp. 71–84.
- Spalding, D., 1953, The Combustion of Liquid Fuels, “Proc. Combust. Instit.”, Vol. 4, pp. 847–864.
- Williams, F. A., 1985, “Combustion theory”, Addison-Wesley, California, USA, Combustion Science and Engineering Series.

## A GENERALIZATION OF THE SHVAB-ZEL'DOVICH FORMULATION FOR DROPLETS COMBUSTION

### Luiz E. M. Lima

National Space Research Institute, 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil.

luizeduardomlima@yahoo.com.br

### Enizete A. Gonçalves

National Space Research Institute, 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil.

enizeteag@yahoo.com.br

### Gabriela S. Moura

National Space Research Institute, 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil.

gabriela@lcp.inpe.br

### Fernando F. Fachini

National Space Research Institute, 12630-000, Cachoeira Paulista, São Paulo, Brasil.

fachini@lcp.inpe.br

**Abstract.** *The aim of this work is the description of the droplet combustion problem using (via) an extended Shvab-Zel'dovich formulation. The previous Shvab-Zel'dovich formulation describes the temperature and the oxygen and fuel mass fractions by determining the enthalpy excess and the mixture fraction functions in the fuel region and in the oxygen region. In the steady and quasi-steady states, the equations for these two functions can be simplified with the description of one function in terms of the other function; for example, the enthalpy excess as a function of the mixture fraction. The contribution of this work is on generalization of the Shvab-Zel'dovich formulation: the two domains of the gaseous phase are treated as one. The spherical droplet combustion problem was chosen to be described by the generalized formulation. The droplet combustion description is relatively simple because it is controlled by quasi-steady state processes in the gas phase near the droplet surface. The numerical integration of the first order differential equation for the excess enthalpy in terms of the mixture fraction provides the droplet surface temperature, that is the eigenvalue of the problem, and as part of the solution the flame temperature is also determined. Once knowing the droplet surface temperature, the fuel mass fraction at the surface is specified via Clayperon relation.*

**Keywords** *droplets combustion, Shvab-Zel'dovich extended formulation.*