

O MOVIMENTO DA FRENTE DE CHAMA

F.A. Nascimento *

R.H. Quintella *

W. Gill **

ABSTRACT

Utilizando um modelo de chama de duas fases (inerte e reativa) inicialmente utilizado por Mallard e Le Chatelier (2), resolveu-se a equação da energia desprezando-se o termo convectivo na região de reação, assim como GILL e COL (3). Desta forma obtivemos analiticamente através de uma aproximação no termo de geração de calor, soluções muito próximas das obtidas numericamente por GILL e COL. Justificada a aproximação resolveu-se novamente o problema, desta vez considerando-se o termo convectivo, obtendo-se soluções analíticas que mostram a independência das temperaturas críticas com relação à velocidade da chama e a relação entre o comprimento da chama e a sua velocidade de propagação.

INTRODUÇÃO

A primeira teoria térmica para a propagação da chama, surgiu com Mallard e Le Chatelier (2), ainda no século passado (1883). Esta teoria utilizava um modelo de duas regiões (região inerte e região reativa), existindo uma temperatura de ignição ao final da zona inerte característica de cada material.

Mais tarde (1938, 1939 e 1969) foi proposto por Frank-Kamenetskii (1) e por Zeldovich e Semenov uma nova teoria térmica para a propagação de chama, teoria esta, pioneira ao analisar a ignição como um somatório de condições críticas, eliminando assim o conceito de temperatura de ignição como propriedade física. O modelo utilizado por Frank-Kamenetskii era o de uma placa semi-infinita de material reativo, submetida a uma temperatura constante em

* IMBEL, Piquete, SP - 12620.

** INPE, Cachoeira Paulista, 12630.

sua superfície. Os resultados desta modelagem mostraram que certas condições de temperatura e (ou) geometria não permitiam a existência de uma solução em regime permanente para o problema, definindo-se estas condições como situações de ignição. Este modelo na interface zona reativa/zona inerte, força a temperatura da interface para a temperatura máxima de chama na fase inerte, e para a temperatura ambiente na fase reativa ou seja, afasta-se bastante da distribuição real da temperatura ao longo da chama.

Em 1984 GILL, SHOUMAN e DONALSON (3) propuseram um novo modelo no qual se mantinha a estrutura de 2 regiões (inerte e reativa), mas onde não se destruía a distribuição de temperatura na chama, usando-se na interface a temperatura de ignição, obtida das condições críticas do sistema.

Da mesma forma que Frank-Kamenetskii, desprezaram o termo de geração na fase inerte e o termo convectivo da fase reativa.

No modelo descrito neste artigo simplificamos o anterior (3), aproximando o termo de geração de calor por e^{-1/θ_m} , onde θ_m é a temperatura máxima adimensional da chama.

A seguir justificaremos esta aproximação comparando a solução para a chama adiabática, com a obtida por GILL SHOUMAN e DONALSON. Uma vez justificada a aproximação a utilizamos sem desprezar a convecção, estudando as relações entre a velocidade da chama com os parâmetros críticos.

ANÁLISE

A equação da conservação da energia em coordenadas cartesianas para um meio no qual se propaga uma reação de ordem de zero com velocidade constante pode ser escrita como:

$$\frac{d^2\theta}{d\epsilon^2} + v \frac{d\theta}{d\epsilon} + e^{-1/\theta} = 0$$

A notação é familiar, originalmente utilizada por GILL (3) onde a temperatura adimensional é representada por θ que é igual a RT/E onde R é a constante universal dos gases, T a temperatura absoluta e E a energia de ativação. A distância adimensional é dada por:

$$\epsilon = \left(\frac{\rho Q Z R}{K E} \right)^{1/2} x$$

onde x é a distância dimensional, ρ a densidade, Q o calor de reação por unidade de massa, Z o fator de frequência e K a condutividade térmica.

A velocidade não dimensional de chama é dada por:

$$V = (KE/\rho QZR)^{1/2} \cdot W/a$$

onde W é a velocidade dimensional, a a difusividade térmica.

Assumindo que o termo convectivo seja desprezível na zona reativa temos:

$$\frac{d^2\theta}{d\varepsilon^2} + e^{-1/\theta} = 0 \quad (1)$$

Baseados na rápida subida da taxa de reação com a temperatura aproximaremos o termo da geração por e^{-1/θ_m} onde θ_m é a temperatura adimensional máxima da chama, como mostra a figura 1.

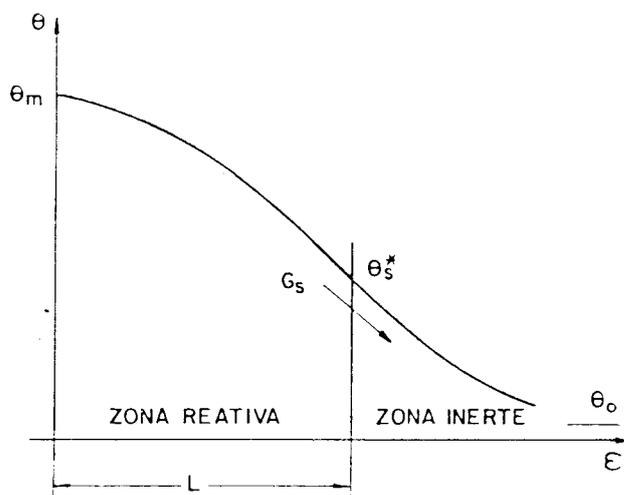


FIG. 1 - ESTRUTURA DA CHAMA EM DUAS ETAPAS.

Assim teríamos a fase reativa regida pela equação:

$$\frac{d^2\theta}{d\varepsilon^2} + e^{-1/\theta_m} = 0$$

cujas condições de contorno são dadas por:

$$\left. \frac{d\theta}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = 0$$

e

$$\theta(0) = \theta_m$$

$$\theta(L) = \theta_s$$

Desta maneira:

$$L = 2 (\theta_m - \theta_s)^{1/2} \cdot e^{1/2\theta_m} \quad (2)$$

onde L é o comprimento da região reativa e θ_s a temperatura adimensional entre as duas regiões.

A figura 2 mostra as curvas L versus θ_m para diversos valores de θ_s , obtidos na equação (2). As curvas são idênticas às obtidas numericamente por GILL e COL, mostrando com isto que a aproximação feita no termo de geração de calor é válida.

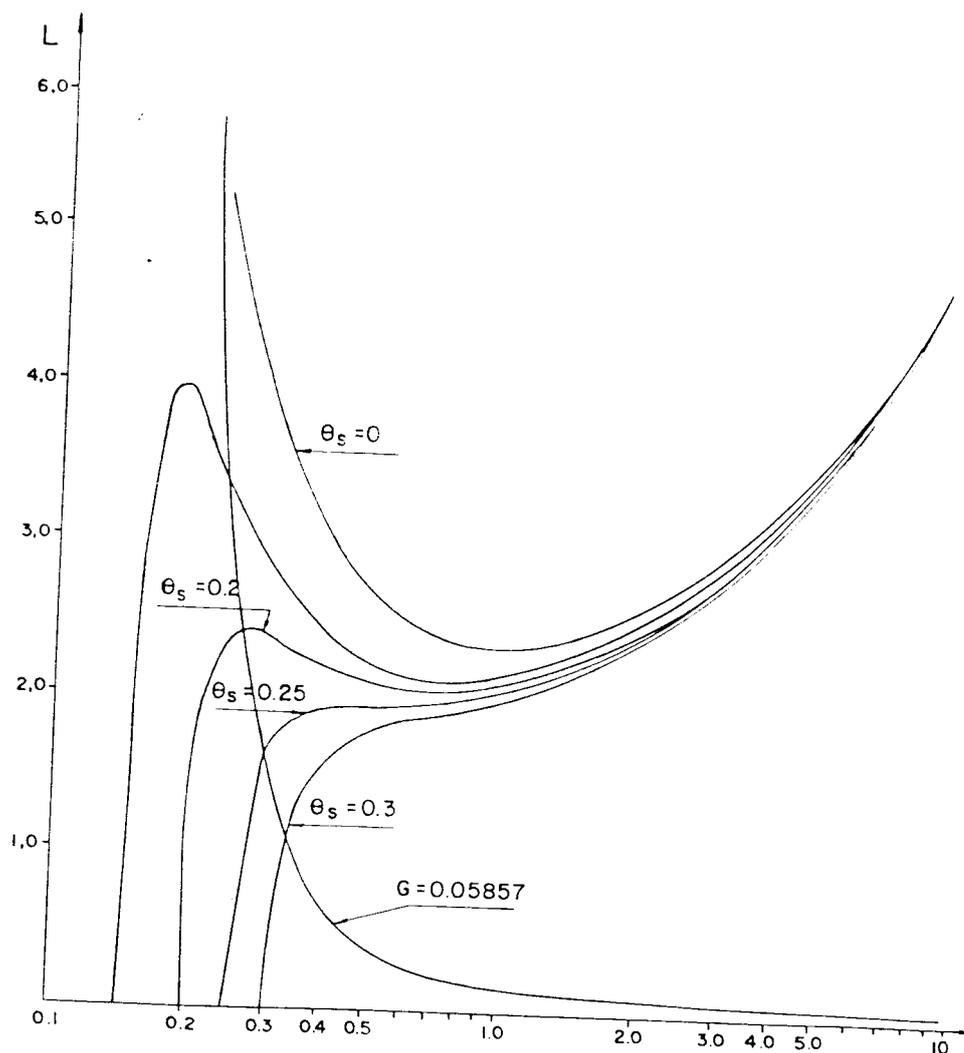


FIG. 2 - DIAGRAMA DE ESTABILIDADE DO SISTEMA APROXIMANDO-SE O TERMO DE GERAÇÃO POR e^{-1/θ_m} E DESPREZANDO-SE O TERMO CONVECTIVO.

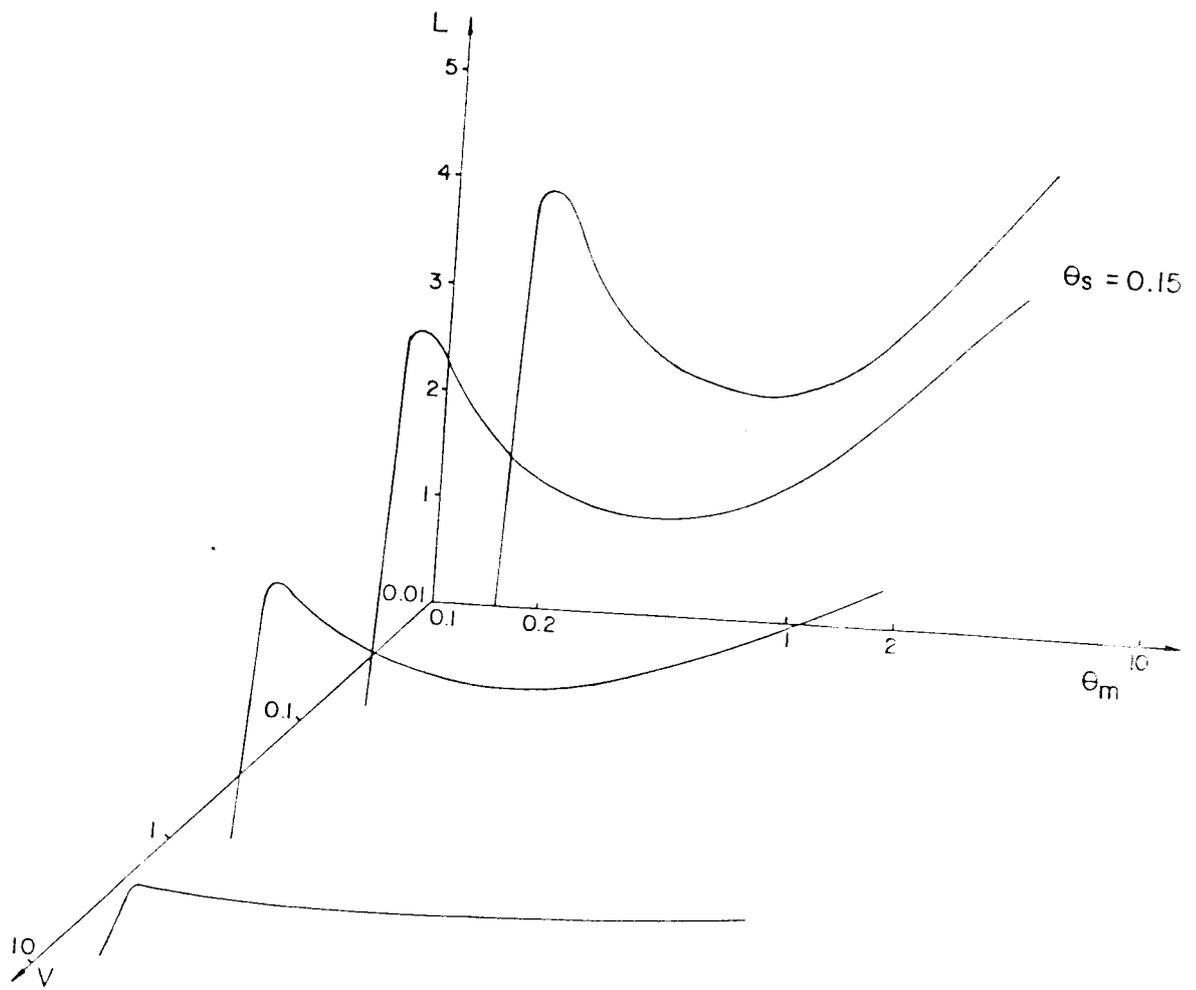


FIG. 3 - DIAGRAMA TRIDIMENSIONAL DE ESTABILIDADE PARA UM SISTEMA COM $\theta_s = 0.15$.

Estas curvas mostram claramente um comprimento máximo da chama, a partir do qual com o aumento de θ_m caímos em uma zona de instabilidade.

Com isto temos que para um $\theta_m = \theta_{ad}$ (temperatura adiabática) existe apenas um grupo de parâmetros críticos L, θ_s, G (gradiente crítico de temperatura em $\epsilon = L$) que caracteriza a chama.

De modo a obtermos uma relação entre θ_m e θ_s críticos, doravante apresentados como θ_m^* e θ_s^* , diferenciaremos a equação 2 em relação a θ_m fazendo:

$$\frac{dL}{d\theta_m} \bigg|_{\theta_s = cte} = 0$$

desta forma:

$$\theta_s^* = \theta_m^* - \theta_m^{*2} \quad (3)$$

O PROBLEMA INCLUIDO A TERMO CONVECTIVO:

A Fase Inerte:

Assumindo-se que na zona inerte o termo de geração de calor seja desprezível (taxas de reações muito pequenas) temos para esta fase a equação:

$$\frac{d^2\theta}{d\epsilon^2} - v \frac{d\theta}{d\epsilon} = 0$$

Considerando-se a chama adiabática temos como condições de contorno:

$$\frac{d\theta}{d\epsilon} = 0 \quad \text{em} \quad \theta = \theta_0$$

$$\frac{d\theta}{d\epsilon} = -G_s \quad \text{em} \quad \theta = \theta_s$$

logo:

$$\theta_s = \theta_0 - \frac{1}{v} G_s \quad (4)$$

A equação 4 servirá de condição de contorno para a solução de fase reativa.

A Fase Reativa:

Aproximando o termo de geração de calor por e^{-1/θ_m} temos:

$$\frac{d^2\theta}{d\xi^2} - v \frac{d\theta}{d\xi} + e^{-1/\theta_m} = 0$$

Com as condições de contorno:

$$\theta(0) = \theta_m = \theta_{ad} \quad \frac{d\theta(0)}{d\xi} = 0$$

$$\theta(L) = \theta_s = \theta_o - \left(\frac{1}{v} \right) G_s$$

Resolvendo-se a equação:

$$\theta - \theta_s = \frac{e^{-1/\theta}}{v^2} e^{vL} - e^{v\xi} - vL + v\xi \quad (5)$$

Quando $\epsilon = 0$ temos:

$$(\theta_m - \theta_s) e^{1/\theta_m} = \frac{1}{v^2} (e^{vL} - vL - 1) \quad (6)$$

Estudando-se a variação do comprimento da chama com sua temperatura máxima obtivemos um diagrama de estabilidade para o sistema (figura 3) cujas curvas seguem exatamente as tendências das curvas obtidas numericamente em (3), onde não se considerou o termo convectivo. Como podemos ver, a medida que v aumenta diminui o valor L^* , até um ponto em que não temos mais caracterizado um ponto de ignição do sistema.

Observando a variação do comprimento da chama com a sua velocidade de propagação (Figura 4) vemos que abaixo de uma certa velocidade de adimensional, que passaremos a chamar velocidade limite (v_L), passamos a ter um comprimento de chama constante. O valor de v_L a partir do qual teremos $L^* = cte$ varia de acordo com as temperaturas críticas θ_m^* e θ_s^* , sendo que a medida em que estas temperaturas diminuem, o valor da velocidade limite também diminui.

Comparando os resultados de L^* obtidos por GILL e COL (3) onde se desprezou o termo convectivo na análise fase reativa, vemos que estes são muito próximos aos valores obtidos para L^* em velocidade menores que a velocidade limite (ver Tabela 1).

Desta forma é possível precisarmos, para um dado θ_m^* e θ_s^* , o valor da velocidade abaixo da qual passa a ser válida a aproximação de desprezar-se o termo convectivo na equação da energia na fase reativa.

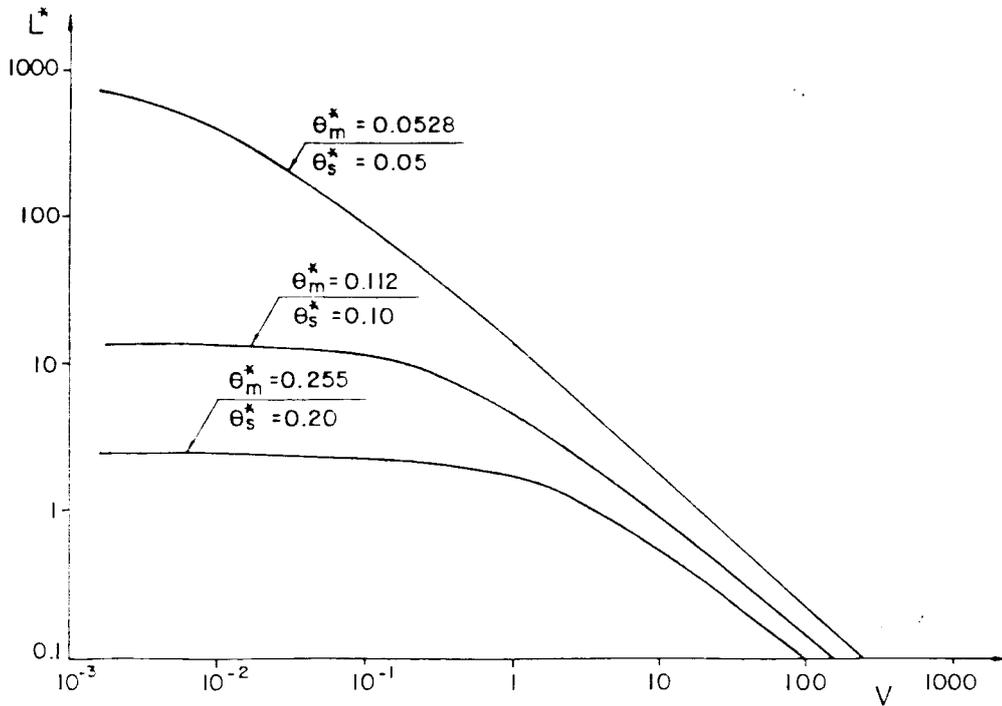


FIG: 4 - VARIACÃO DO COMPRIMENTO ADIMENSIONAL DA CHAMA COM A VELOCIDADE DE PROPAGAÇÃO A DIMENSIONAL.

A fim de determinarmos a relação entre os parâmetros críticos da chama, diferenciaremos a equação 6 fazendo:

$$\frac{dL}{d\theta_m} \Big|_{\theta_s = cto} = 0$$

e desta forma:

$$\theta_s^* = \theta_m^* - \theta_m^{*2} \quad (7)$$

Como vemos, a relação entre os parâmetros críticos da chama (Figura 5) é a mesma obtida na análise do problema desprezando-se a convecção na fase reativa (equação 3), sendo interessante observar que os valores de θ_m^* e θ_s^* que prendem o valor de L^* , independem da velocidade de propagação da chama (Figura 3).

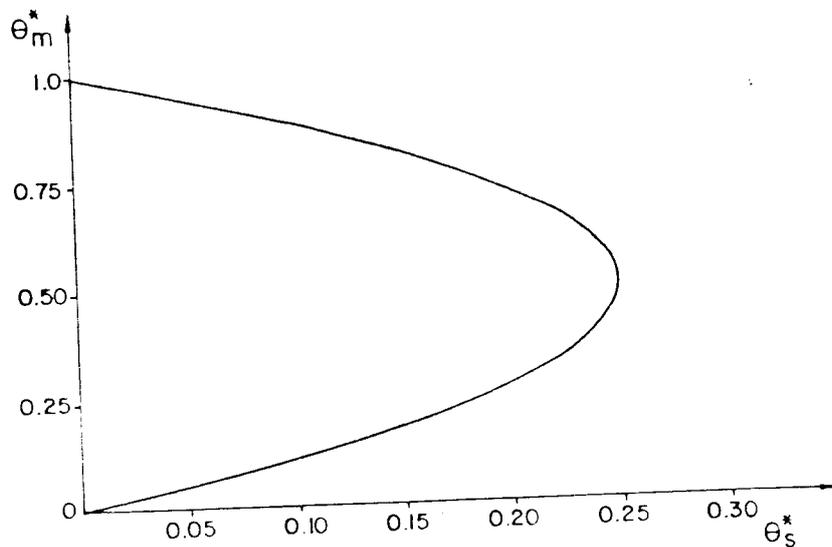


FIG. 5 - RELAÇÃO ENTRE A TEMPERATURA MÁXIMA DA CHAMA E A TEMPERATURA DE IGNIÇÃO DO SISTEMA.

CONCLUSÕES

A aproximação do termo de geração de calor na fase reativa é válida, simplificando em muito a solução da modelagem da propagação de chama (usando-se o teoria térmica em questão).

Face a simplificação da solução do problema, tornou-se possível a resolução da equação da energia na fase reativa considerando-se a convecção do sistema, o que nos levou a constatar:

- a. A conclusão obtida por GILL e COL em (3), de que a velocidade adimensional de propagação da chama é estritamente uma função de sua temperatura adiabática, só é válida para valores de velocidade abaixo da velocidade limite, definida no modelo em questão.
- b. Com o aumento da velocidade adimensional continuamos tendo um mesmo par $(\theta_m^*; \theta_s^*)$ que caracteriza a chama, observando-se apenas uma diminuição no comprimento adimensional da mesma (L^*). Esta diminuição ocorre até uma dada velocidade, a partir da qual não temos mais caracterizado um ponto de ignição do sistema, isto é, não temos mais um ponto de máximo no diagrama de estabilidade da Figura 3.

	METODOLOGIA EMPREGADA NA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DA ENERGIA	L^*	θ_m^*	V_L
$\theta_s^* = 0,10$	A	12,93	0,115	—
	B	13,45	0,112	—
	C	13,45 ($V < V_L$)	0,112	0,05
$\theta_s^* = 0,15$	A	4,20	0,191	—
	B	3,95	0,185	—
	C	3,92 ($V < V_L$)	0,185	0,1
$\theta_s^* = 0,20$	A	2,57	0,295	—
	B	2,38	0,29	—
	C	2,40 ($V < V_L$)	0,29	0,2

Tabela 1 - Comparação entre os parâmetros críticos usando-se as três metodologias empregadas na solução da equação da energia onde:

Método A - Solução numérica da equação da energia desprezando-se o termo convectivo.

Método B - Solução analítica da equação da energia aproximando-se o termo de geração de calor por e desprezando-se o termo convectivo.

Método C - Solução analítica da equação da energia aproximando-se o termo de geração de calor por e considerando-se o termo convectivo.

REFERÊNCIAS

- (1) Frank-Kamenetskii, D.A., Diffusion and Heat Transfer in Chemical Kinetics, 2nd Ed., Plenum Press, New York, 1969.
- (2) Mallard, E., and Le Chatelier, H.L., Ann Mines 4, 379 (1883).
- (3) Gill, W., Shouman, A.R., and Donaldson, A.B., Combustion and Flame 55: 105-115 (1984).