

Investigação de Modelos Cinéticos na Formação de Fuligem em Chamas Difusivas de Etileno e Acetileno

Palavras-Chave: Fuligem, combustão, modelagem computacional

Autores(as):

Chen Jia Hao, FEQ – UNICAMP

Prof^(a). Dr^(a). Dirceu Noriler, FEQ - UNICAMP

Fabio Henrique Bastiani, FEQ - UNICAMP

INTRODUÇÃO:

A combustão de hidrocarbonetos é amplamente utilizada para geração de energia e calor, mas também está associada à emissão de poluentes. Dentre os principais produtos indesejáveis, a fuligem merece destaque por sua capacidade de absorver radiação térmica e causar efeitos nocivos à saúde humana e ao clima.

A modelagem computacional da formação de fuligem permite compreender e mitigar sua geração em processos combustivos. Neste trabalho, utilizou-se CFD, adaptando o modelo de três equações de Boulanger et al. (2007), que modela a concentração de núcleos, fração mássica de fuligem e densidade de número de partículas, utilizando o acetileno como precursor da formação de fuligem.

Três mecanismos cinéticos foram testados: o GRI-Mech 3.0 (Smith et al., 1999), o UCSD (Williams et al., 2016) e o FFCM-1 (Smith et al., 2016). As simulações foram feitas em ANSYS Fluent 19.0 com turbulência modelada via $k-\epsilon$ realizável e radiação via modelo P1.

METODOLOGIA:

As condições operacionais foram baseadas no experimento de Yang et al. (2005) vide Tabela 1. A malha computacional foi gerada no ICEM 19 e avaliada via Índice de Convergência de Malha (GCI) (Roache et al., 1994), garantindo a qualidade das malhas com pode ser observado na Tabela 2 e Figura 1.

Tabela 1. Condições de operações (Yang et al., 2005)

Fuel	D (mm)	m (g/s)	Re
C ₂ H ₄ (ethylene)	4,6	0,48	13,500
C ₂ H ₂ (acetylene)	6,0	0,76	15,100

Tabela 2. Resultados do GCI

Malha/Parâmetro	Acetileno	Etileno
Grossa	20.000	20.000
Intermediária	37.538	37.538
Fina	70.500	70.500
Altura da chama - Fina (mm)	145.10	157.30
Altura da chama extrapolada	144.29	157.22
GCI (%)	0.37	0.05

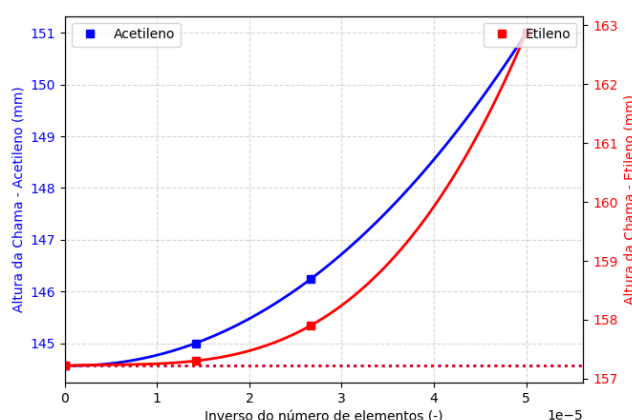


Figura 1. Análise do GCI para as malhas do caso de acetileno e etileno

A simulação foi dividida em três etapas: entrada dos gases, ignição e formação da chama. Para fuligem, foi utilizado o modelo de Boulanger et al. (2007), ajustando o fator empírico F com base em dados experimentais. Foram modeladas duas chamas com 72.000 elementos em domínio axissimétrico 2D.

As equações resolvidas consideram formação de núcleos (Eq. 1), crescimento superficial (Eq. 2) e oxidação (Eq. 2). A absorção de radiação pela fuligem foi modelada com base em Widmann (2003), acoplada ao coeficiente do gás pela WSGGM. E, três mecanismos cinéticos detalhados foram avaliados (GRI-Mech 3.0, UCSD e FFCM-1) para determinar sua influência na formação de precursores de fuligem, como C₂H₂, e no campo de temperatura.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho n^*) + \nabla \cdot (\rho v n^*) - \nabla \cdot \left(\frac{u}{\sigma_t} \nabla n^* \right) = a_0^* \rho_f e^{\left(\frac{-T_a}{T} \right)} + F c_{n^*} - g_0 c_{n^*} - g_0 c_{n^*} C_N - S'_{ox} \quad (\text{Eq. 1})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_s) + \nabla \cdot (\rho v Y_s) - \nabla \cdot \left(\frac{u_t}{\sigma_t} \nabla Y_s \right) = K_G c_f c_N + a c_a c_n - c_N A_s S_{ox,ns} \quad (\text{Eq. 2})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho N^*) + \nabla \cdot (\rho v N^*) - \nabla \cdot \left(\frac{u_t}{\sigma_t} \nabla N^* \right) = a c_{n^*} - b c_{N^*} c_{n^*} - K_c \sqrt{T} \left(\frac{\rho Y_s}{\rho_s} \right)^{\frac{1}{6}} c_{N^*}^{\frac{11}{6}} \quad (\text{Eq. 3})$$

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

Como resultado, a formação de fuligem foi significativamente mais intensa na chama de acetileno, como visto nas Figuras 2, 4, 5 e 7. Isso se deve principalmente ao fato de o acetileno (C_2H_2) ser um precursor bem estabelecido de fuligem, conforme descrito no mecanismo HACA de Frenklach (1994). Como o acetileno é injetado diretamente como combustível, a rota de formação torna-se mais direta.

Além de sua função na formação de partículas, a fuligem também impacta fortemente o campo de temperatura da chama, como visto nas Figuras 3 e 6. As partículas de fuligem absorvem e emitem radiação térmica, contribuindo para a transferência de calor por radiação. Isso pode provocar aumentos localizados de temperatura em regiões com alta concentração de fuligem, ao mesmo tempo em que reduz a temperatura em áreas sombreadas da radiação. Assim, a presença de fuligem altera a distribuição de temperatura e influencia a dinâmica da combustão.

Nos testes com etileno, o mecanismo UCSD produziu menos fuligem por prever menor formação de C_2H_2 , o FFCM-1, por outro lado, apresentou comportamento similar ao GRI-Mech 3.0, vide Figura 2. Em termos radiativos, a menor formação de fuligem reduziu a absorção e manteve a temperatura axial elevada. Já para a chama de acetileno, as diferenças entre os mecanismos estiveram mais ligadas à distribuição espacial do C_2H_2 . E, O FFCM-1 apresentou deslocamento do pico de fração mássica de C_2H_2 para regiões mais próximas do bico de entrada de combustível, o que favoreceu o crescimento de partículas e aumentou a formação de fuligem vide Figura 5.

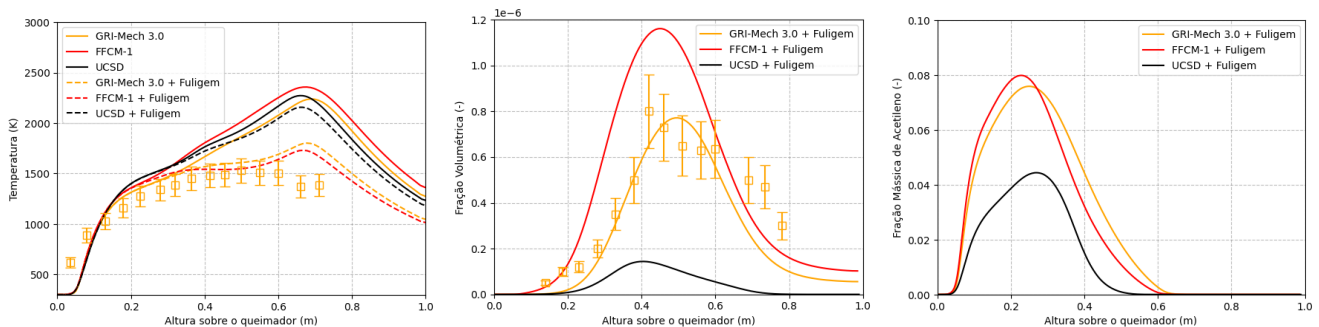


Figura 2. Perfil axial de temperatura, fração volumétrica e fração mássica de acetileno para a chama de etileno

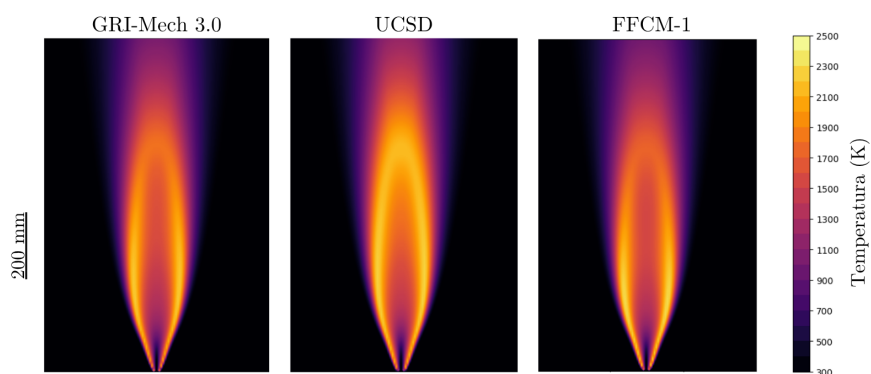


Figura 3. Contornos de temperatura das chamas de etileno com formação de fuligem

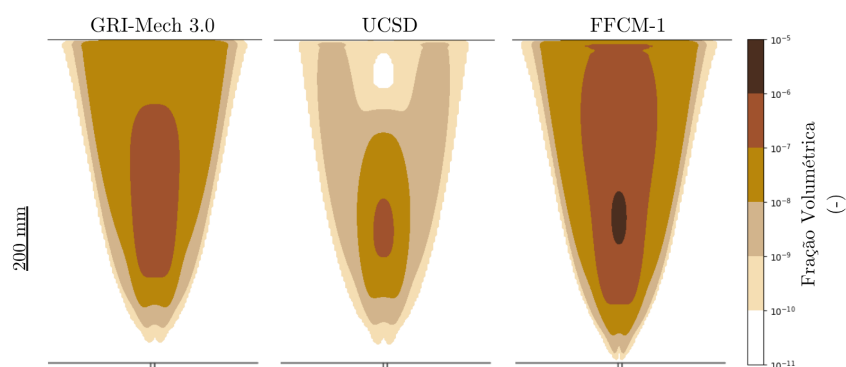


Figura 4. Contornos de fração volumétrica de fuligem das chamas de etileno com formação de fuligem

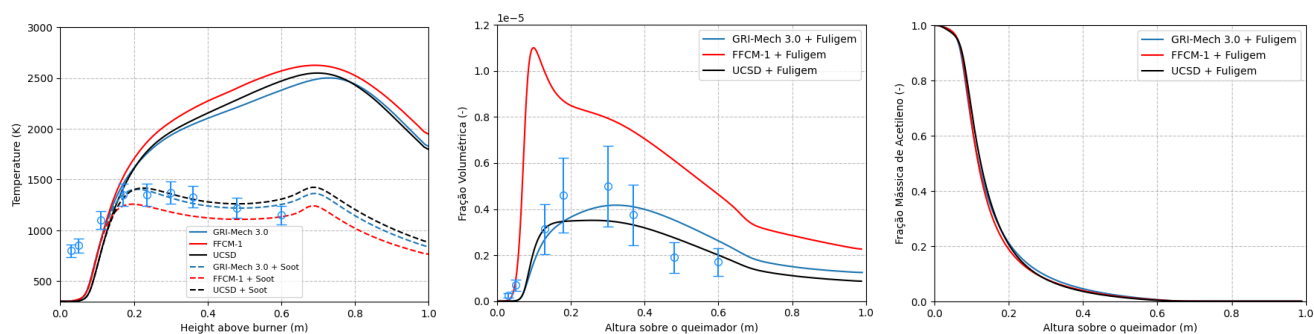


Figura 5. Perfil axial de temperatura, fração volumétrica e fração mássica de acetileno para a chama de acetileno

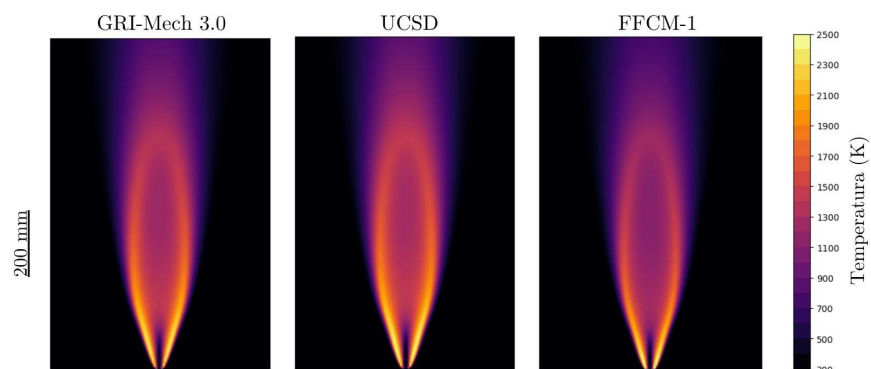


Figura 6. Contornos de temperatura das chamas de acetileno com formação de fuligem

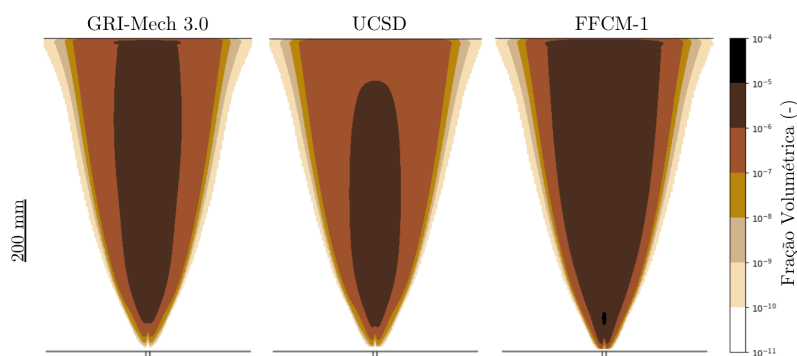


Figura 7. Contornos de fração volumétrica de fuligem das chamas de etileno com formação de fuligem

CONCLUSÕES:

A formação de fuligem depende fortemente da disponibilidade de precursores, como o acetileno, e da distribuição de temperatura na chama. Entre os mecanismos avaliados, o GRI-Mech 3.0 apresentou a melhor concordância com os dados experimentais. O estudo evidenciou que pequenas variações na previsão de espécies químicas impactam significativamente a estimativa da formação de fuligem. Como continuidade do trabalho, propõe-se a calibração do fator F com base em dados experimentais sob diferentes condições operacionais.

REFERÊNCIAS:

- BOULANGER, J. et al. **Modeling of soot formation in turbulent diffusion flames using a semi-empirical approach**. Combustion and Flame, v. 151, p. 1–15, 2007.
- FRENKLACH, M. **Method of moments with interpolative closure**. Combustion Science and Technology, v. 112, p. 173–192, 1996.
- ROACHE, P. J. **Verification and validation in computational science and engineering**. Albuquerque: Hermosa Publishers, 1998.
- SMITH, G. P. et al. **GRI-Mech 3.0**. 1999. Disponível em: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/. Acesso em: jul. 2025.
- SMITH, C. J. et al. **FFCM-1: A foundational fuel chemistry model for use in combustion science**. Combustion and Flame, v. 162, p. 2319–2332, 2016.
- WIDMANN, J. F. **A soot radiation model for laminar diffusion flames and its application in CFD**. PhD Thesis – University of California, Davis, 2003.
- WILLIAMS, T. C. et al. **An updated chemical kinetic model of ethylene combustion with application to shock tube ignition and flame propagation**. Combustion and Flame, v. 160, n. 12, p. 2495–2507, 2016.
- YANG, B. et al. **Measurements of chemical species in low-pressure ethylene flames**. Proceedings of the Combustion Institute, v. 30, p. 375–383, 2005.