



Universidade de Brasília – UnB
Faculdade UnB Gama – FGA
Engenharia Aeroespacial

Modelagem e simulação numérica da combustão distribuída em um motor de foguete sólido com propelente metalizado

Autor: Anne Elisa Leal Caselato
Orientador: Prof. Domenico Simone, Ph.D.

Brasília, DF
2019



Anne Elisa Leal Caselato

**Modelagem e simulação numérica da combustão
distribuída em um motor de foguete sólido com
propelente metalizado**

Monografia submetida ao curso de graduação em Engenharia Aeroespacial da Universidade de Brasília, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Aeroespacial.

Universidade de Brasília – UnB

Faculdade UnB Gama – FGA

Orientador: Prof. Domenico Simone, Ph.D.

Brasília, DF

2019

Anne Elisa Leal Caselato

Modelagem e simulação numérica da combustão distribuída em um motor de foguete sólido com propelente metalizado/ Anne Elisa Leal Caselato. – Brasília, DF, 2019-

65 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. Domenico Simone, Ph.D.

Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade de Brasília – UnB
Faculdade UnB Gama – FGA , 2019.

1. combustão. 2. alumínio. I. Prof. Domenico Simone, Ph.D.. II. Universidade de Brasília. III. Faculdade UnB Gama. IV. Modelagem e simulação numérica da combustão distribuída em um motor de foguete sólido com propelente metalizado

CDU 02:141:005.6

Anne Elisa Leal Caselato

Modelagem e simulação numérica da combustão distribuída em um motor de foguete sólido com propelente metalizado

Monografia submetida ao curso de graduação em Engenharia Aeroespacial da Universidade de Brasília, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Aeroespacial.

Trabalho aprovado. Brasília, DF, 9 de julho de 2019 – Data da aprovação do trabalho:

Prof. Domenico Simone, Ph.D.
Orientador

Prof. Olexiy Shynkarenko, Ph.D.
Convidado 1

Prof. Jungpyo Lee, Ph.D.
Convidado 2

Brasília, DF
2019

Resumo

A utilização de nano partículas de alumínio é uma proposta que veem crescendo nos últimos tempos devido aos estudos que comprovam um aumento considerável de performance do propelente com a sua aplicação. Entretanto, o estudo dos mecanismos e detalhes da combustão deste tipo de partícula são relativamente novos e escassos em relação aos existentes para micro partículas. Foi feita uma revisão bibliográfica sobre os principais estudos e modelos dos mecanismos relacionados à combustão de partículas e quais são os fatores afetados com a diminuição das partículas de escala micrométrica para nanométrica. Com isto, foi definido um modelo numérico de combustão distribuída de motor sólido com nano alumínio, baseado em um modelo existente para micro alumínio, e considerando-se as diferenças nos processos físicos entre os dois casos. Simulações foram realizadas com duas distribuições de injeção de partículas diferentes e aplicando os respectivos modelos em cada, e seus resultados foram comparados. Os resultados da simulação com micro alumínio foram similares aos da referência e os da simulação com nano alumínio apresentaram a distinção esperada entre a combustão de micro e nano alumínio.

Palavras-chave: combustão distribuída. propelente sólido. alumínio. nano-alumínio. modelo numérico.

Abstract

The use of aluminum nano particles is a proposal that have been growing in recent times due to studies that demonstrate a considerable increase of propellant performance with its application. However, the study of the mechanisms and details of the combustion of this type of particle are relatively new and scarce in relation to the existing ones for micro particles. A bibliographic review was done on the main studies and models of the mechanisms related to the combustion of particles and what are the factors affected with the reduction of the particles from micrometric scale to nanoscale. Thus, a numerical model of distributed combustion of solid motor with nano aluminum was defined, based on an existing model for micro aluminum and accounting for the differences in the physical processes between the two cases. Simulations were performed with two different particle injection distributions and applying the respective models in each, and their results were compared. The results of the simulation with micro aluminum were similar to those of the reference and those of the nano aluminum simulation presented the expected distinction between the combustion of micro and nano aluminum.

Key-words: distributed combustion. solid propellant. aluminum. nano aluminum. numerical model.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Morfologia e composição das superfícies de propelentes com micro alumínio antes da queima e com queima extinguída, respectivamente. (DELUCA; GALFETTI, 2008)	19
Figura 2 – Morfologia e composição das superfícies de propelentes com nano alumínio antes da queima e com queima extinguída, respectivamente. (DELUCA; GALFETTI, 2008)	20
Figura 3 – Resumo da combustão de micro-alumínio em propelente sólido. (LENGELLÉ; DUTERQUE; TRUBERT, 2002)	21
Figura 4 – Agregados de nano alumínio emergindo da superfície de queima em flocos finos. (DELUCA et al., 2005)	22
Figura 5 – Transição sequencial de agregados para aglomerado. (DELUCA; GALFETTI, 2008)	22
Figura 6 – Aglomerado esférico formado com a ignição de agregados de propelente com micro alumínio. (DELUCA et al., 2005)	23
Figura 7 – Superfície de queima de propelente com micro-alumínio. (DELUCA et al., 2005)	23
Figura 8 – Superfície de queima de propelente com nano-alumínio. (DELUCA et al., 2005)	23
Figura 9 – Tipos de aglomerado conforme a estrutura: (a) <i>oxide cap</i> (b) metal revestido. (BABUK et al., 2009)	24
Figura 10 – Partícula de nano alumínio revestida e pequeno grupo de partículas revestidas. (REINA et al., 2013)	25
Figura 11 – Taxa de queima para diferentes frações de μAl e nAl . (DELUCA et al., 2005)	26
Figura 12 – Etapas de ignição e combustão de partículas de alumínio. (PURI, 2008)	27
Figura 13 – Progresso da estrutura da chama com a redução do diâmetro da partícula. (AITA et al., 2006)	30
Figura 14 – Zonas de breakup secundário em função do número de Weber. (KADOCOSA; TATSCHL; KRISTOF, 2007)	40
Figura 15 – Geometria e dimensões do motor ONERA C1. (NAJJAR et al., 2006) .	41
Figura 16 – Malha computacional utilizada nas simulações numéricas.	42
Figura 17 – Detalhe da malha nas superfícies de injeção.	43
Figura 18 – Detalhe da malha no centro do motor.	43
Figura 19 – Detalhe da malha na tubeira.	44
Figura 20 – Distribuição de diâmetros das partículas de micro alumínio. (NAJJAR et al., 2006)	45

Figura 21 – Distribuição de diâmetros dos aglomerados de nano alumínio. Adaptado de (GALFETTI et al., 2007)	46
Figura 22 – Ajuste de curvas da distribuição de diâmetros das partículas de μAl e nAl , respectivamente.	47
Figura 23 – Tempo de queima das leis $D^{1.9}$ e $D^{0.3}$, respectivamente.	50
Figura 24 – Evolução de massa e diâmetro de partículas de μAl e nAl , respectivamente.	51
Figura 25 – Contornos de vorticidade da simulação de Najjar et al. (2006) e do caso μAl deste trabalho.	52
Figura 26 – Contornos de temperatura da simulação de Najjar et al. (2006) e do caso μAl deste trabalho.	52
Figura 27 – Diâmetro das partículas de alumínio da simulação de Najjar et al. (2006) e do caso μAl deste trabalho.	53
Figura 28 – Contornos de temperatura das simulações de μAl e nAl , respectivamente.	54
Figura 29 – Contornos de vorticidade das simulações de μAl e nAl , respectivamente.	55
Figura 30 – Fração de massa de fumaça das simulações de μAl e nAl , respectivamente.	56
Figura 31 – Diâmetro das partículas de alumínio das simulações de μAl e nAl , respectivamente.	57
Figura 32 – Número de Weber das partículas de alumínio das simulações de μAl e nAl , respectivamente.	57
Figura 33 – Posição dos pontos de monitoramento na geometria.	58
Figura 34 – Oscilação da pressão no monitor 0 das simulações de μAl e nAl , respectivamente.	59
Figura 35 – Oscilação da pressão no monitor 1 das simulações de μAl e nAl , respectivamente.	59
Figura 36 – Oscilação da pressão no monitor 2 das simulações de μAl e nAl , respectivamente.	59
Figura 37 – Oscilação da pressão no monitor 3 das simulações de μAl e nAl , respectivamente.	60
Figura 38 – Oscilação da pressão no monitor 4 das simulações de μAl e nAl , respectivamente.	60
Figura 39 – Oscilação da pressão no monitor 4 da simulação de nAl em $t = 18$ ms.	61
Figura 40 – Contorno de vorticidade da simulação de nAl em $t = 18$ ms.	61

Lista de abreviaturas e siglas

AN	Nitrato de amônio
AP	Perclorato de amônio
CTPB	Polibutadieno Líquido com Terminação Carboxílica
DPM	<i>Discrete Phase Model</i>
EDX	Espectroscopia de raios X por dispersão em energia
HTPB	Polibutadieno Líquido com Terminação Hidroxílica
nAl	Alumínio de diâmetro nano métrico
MET	Microscópio eletrônico de transmissão
MEV	Microscópio eletrônico de varredura
PBAN	Polibutadieno Acrilonitrila
UDF	<i>User Defined Function</i>
μ Al	Alumínio de diâmetro micro métrico

Lista de símbolos

C_p	Calor específico a pressão constante (J/kg · K)
C_s	Concentração de fumaça
d	Diâmetro (m)
e	Densidade de energia interna (J/m ³)
E_b	Energia de ativação (J/mol)
F	Força (N)
h	Calor de reação (J)
k	Condutividade (W/m · K)
L	Razão do número de partículas real/computacional
M_R	Razão do peso molecular
\dot{m}	Fluxo de massa (kg/s)
p	Pressão (Pa)
Pr	Número de Prandtl
q_j	Componente j-ésimo do vetor de fluxo de calor (W/m ²)
R	Constante universal dos gases (J/mol · K)
Re	Número de Reynolds
S	Termo de fonte
T	Temperatura (K)
t	Tempo (s)
t_b	Tempo de queima (s)
\mathbf{u}	Vetor velocidade (m/s)
\mathbf{v}_p	Vetor velocidade da partícula (m/s)
\mathbf{x}	Vetor posição (m)

\mathbf{w}_s	Vetor de velocidade da fumaça (m/s)
α	Fração de alumina condensada
χ	Fração de massa
η_1	Fração de óxido depositado na partícula
η_2	Fração de óxido emitido para a fase gasosa
η_c	Eficiência de colisão e aglomeração
α	Fração de alumina condensada
γ	Coefficiente de expansão adiabática
ρ	Densidade (kg/m ³)
μ	Viscosidade dinâmica (kg/m · s)
ϕ_{Al}	Fração de alumínio na partícula
σ_{ij}	Tensor de estresse (N/m ²)
τ	Escala de tempo (1/s)
	Subscritos:
bu	Queima
e	Energia
p	Partícula de alumínio
s	Fumaça
ρ	Densidade
ρu	Momento

Sumário

	Introdução	14
	Objetivos	16
	Metodologia	17
I	REFERENCIAL TEÓRICO	18
1	MECANISMO DE COMBUSTÃO DO ALUMÍNIO EM PROPELENTE SÓLIDO	19
1.1	Morfologia da superfície do propelente	19
1.2	Superfície de queima e aglomeração	20
1.2.1	Mecanismo geral	20
1.2.2	Formação de aglomerados	21
1.2.3	Estrutura do aglomerado	24
1.2.4	Efeitos do revestimento de alumínio	25
1.3	Taxa de queima	25
1.4	Processo de ignição e combustão das partículas	27
1.5	Tempo de queima	29
1.5.1	Lei D^2	29
1.5.2	Lei D^n para micro alumínio	29
1.5.3	Lei $D^{0.3}$ para nano alumínio	30
2	MODELO NUMÉRICO PARA MICRO ALUMÍNIO	31
2.1	Mistura gasosa	31
2.1.1	Equação da massa	31
2.1.2	Equação do momento	31
2.1.3	Equação da energia	32
2.2	Partículas de alumínio	32
2.2.1	Evolução lagrangiana das partículas	32
2.2.2	Taxa de queima do alumínio	33
2.2.3	Crescimento do ressalto de óxido	34
2.2.4	Evolução da massa, densidade e diâmetro da partícula	34
2.3	Acoplamento entre alumínio e gás	34
2.3.1	Fonte de massa	35
2.3.2	Fonte de momento	35

2.3.3	Fonte de energia	35
2.3.4	Acoplamento entre alumínio e fumaça	36
2.4	Partículas de fumaça de alumina	36
II	IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA	37
3	MODELO NUMÉRICO PARA NANO ALUMÍNIO	38
3.1	Mistura gasosa	38
3.2	Partículas de Alumínio	38
3.2.1	Taxa de queima do alumínio	38
3.2.2	Comportamento do óxido na partícula	39
3.3	Acoplamento entre alumínio e gás	39
3.4	Partículas de fumaça de alumina	39
3.5	Modelo de <i>breakup</i> de partículas	39
4	SIMULAÇÃO NUMÉRICA	41
4.1	Caso teste	41
4.1.1	Propriedades das fases	41
4.1.2	Malha	42
4.1.3	Condições de contorno	44
4.2	Injeção de partículas	44
4.3	Implementação do modelo numérico no software	47
4.3.1	Lei de evaporação	48
4.3.2	Fonte de energia	49
4.3.3	Adaptação do arrasto	49
4.3.4	Definição de escalares e modelo de <i>breakup</i>	49
5	RESULTADOS E ANÁLISE	50
5.1	Análise inicial	50
5.1.1	Tempo de queima	50
5.1.2	Evolução de massa e diâmetro da partícula	51
5.2	Simulação com μAl	51
5.2.1	Vorticidade	51
5.2.2	Temperatura	52
5.2.3	Diâmetro das partículas	53
5.3	Simulação com $n\text{Al}$	53
5.3.1	Temperatura	54
5.3.2	Vorticidade	55
5.3.3	Concentração de fumaça	56
5.3.4	Diâmetro das partículas	56

5.3.5	Número de Weber	57
5.4	Monitores	58
5.4.1	Monitor 0	59
5.4.2	Monitor 1	59
5.4.3	Monitor 2	59
5.4.4	Monitor 3	60
5.4.5	Monitor 4	60
	Considerações finais	62
	REFERÊNCIAS	64

Introdução

O alumínio faz parte de uma classe de materiais denominados materiais energéticos, estes são caracterizados pela capacidade de armazenar energia química em grande quantidade e liberá-la quando ativados. Isto gera diversas aplicações para estes materiais em explosivos, propelentes e pirotécnicos.

Na área de propelentes sólidos, uma das principais categorias é a de propelentes compósitos. Estes são compostos, usualmente, por um oxidante em pó, como perclorato de amônio (AP) e nitrato de amônio (AN), um combustível metálico, como alumínio e magnésio, e um ligante que também age como combustível, como polibutadieno líquido com terminação hidroxílica (HTPB) ou carboxílica (CTPB) e polibutadieno acrilonitrila (PBAN). O alumínio é o combustível metálico mais comumente empregado por ter um custo razoavelmente baixo em relação aos demais e por sua segurança, tendo menor propensão a ignição acidental.

O pó de alumínio geralmente aplicado em propelentes é composto por partículas de dimensões micrométricas. Entretanto, percebeu-se em experimentos que a utilização, parcial ou completa, de partículas nanométricas na composição do pó de alumínio resulta em um aumento notável na reatividade e na taxa de queima resultante do propelente. Consequentemente, iniciaram-se estudos sobre os motivos deste efeito, a aplicabilidade desta tecnologia e os riscos envolvidos, e como isso difere do comportamento conhecido com a utilização de micropartículas.

Atualmente, a maioria dos estudos sobre a utilização de nano alumínio como combustível são de caráter experimental, e modelos e análises numéricas são focados em partes específicas do processo de combustão. Contudo, a modelagem do escoamento interno de um motor é de grande interesse no projeto deste, uma vez que o campo de escoamento pode afetar significativamente o comportamento do motor e o seu estudo numérico providencia a possibilidade de investigação de fatores como parâmetros de performance, instabilidades, entre outros.

Em motores de propelente sólido compósito, deve-se considerar que o mecanismo de combustão das partículas de metal é diferente em relação aos dos outros componentes do propelente. Portanto, um modelo numérico do escoamento interno de um motor deve incluir estas características específicas do componente metálico. Como estas características sofrem alterações com a diminuição da escala das partículas, se torna necessária uma evolução do modelo existente para que possam ser feitas análises mais próximas à realidade.

Este trabalho é dividido em duas partes: Referencial Teórico e Implementação

Numérica. A primeira é uma pesquisa de referencial teórico que reúne a os elementos base da literatura relacionada ao processo de combustão do alumínio em propelente e apresenta o modelo numérico anteriormente desenvolvido para o caso de combustão distribuída com alumínio em micro escala. A segunda apresenta a concepção de uma evolução do modelo numérico, considerando partículas com diâmetro nano métrico, a implementação de ambos os modelos em simulação numérica e a análise de resultados das simulações dos dois casos.

Objetivos

Objetivo Geral

O principal objetivo deste trabalho é definir um modelo numérico que descreva o escoamento interno de um motor de foguete sólido, com nano-alumínio como combustível, que possa ser utilizado em análise numérica, considerando os efeitos gerados pela mudança de escala da partícula.

Objetivos Específicos

Conceber o modelo como uma modificação do modelo numérico existente, utilizado para retratar o escoamento na condição de que as partículas de alumínio no propelente sejam micro métricas.

Entender a mecânica de combustão dos dois casos estudados e quais são as diferenças causadas pela diminuição do diâmetro das partículas que devem ser consideradas para a modificação do modelo atual, através de uma pesquisa de referencial teórico.

Simular dois casos: um considerando o modelo numérico de micro partículas e um considerando o modelo deste trabalho. A simulação do primeiro caso deve ser comparada à referência para análise, com o objetivo de avaliar a aplicação do modelo no software de simulação e a metodologia geral utilizada. A simulação do segundo caso tem como objetivo avaliar a aplicabilidade do novo modelo concebido neste trabalho e deve ser comparada à do primeiro caso para a análise das diferenças entre os casos.

Metodologia

Inicialmente, foi realizada uma pesquisa bibliográfica afim de estudar os princípios da combustão do alumínio, com foco na utilização em propelentes sólidos. Foi possível analisar quais mecanismos governam o processo de combustão do alumínio e quais fatores alteram esse processo, com foco nos efeitos da diminuição das partículas de alumínio.

Em seguida, foi estudado o modelo de análise euleriana-lagrangiana existente para micro alumínio, a fim de entender cada fase do processo e identificar quais os pontos que deverão ser modificados com a mudança de escala do diâmetro.

Foi então estabelecido um modelo numérico para utilização na análise de escoamento com partículas nano métricas de alumínio, com base no modelo para micro alumínio, considerando as mudanças necessárias com a diminuição da partícula.

A simulação foi realizada utilizando o ANSYS Fluent, o qual possui a capacidade de simular um escoamento lagrangiano-euleriano. Entretanto, foi necessário acoplar ao programa as partes mais específicas ao caso estudado do modelo numérico, que não são nativamente incluídas no Fluent. Para isto, utiliza-se uma *User Defined Function* (UDF), por meio da qual o programa permite acoplar expressões contidas em um código na linguagem C/C++, e estas expressões podem ser utilizadas no cálculo da simulação. Foi também adicionado por UDF um modelo para o fenômeno de *breakup* das partículas.

Foi feita uma análise inicial do tempo de queima e da evolução de massa e diâmetro de uma partícula, considerando uma faixa de diâmetros para a análise do tempo de queima e um diâmetro exemplo para a análise da vida da partícula. Utilizou-se o programa Microsoft Excel para esta análise.

Foram simulados dois casos: o primeiro com injeção de aglomerados de micropartículas, utilizando o modelo existente para a combustão de μAl , e o segundo com injeção de aglomerados de nano partículas, aplicando o modelo concebido neste estudo. Para ambas simulações os demais parâmetros como geometria, malha, condições de contorno e massa injetada foram os mesmos, a fim de comparar apenas as mudanças causadas por mudança do tamanho das partículas. Na simulação de μAl foi utilizada uma UDF desenvolvida por pesquisadores da Universidade de Roma *La Sapienza* e para a simulação de nAl esta UDF foi modificada para considerar as diferenças na combustão de nano partículas.

Os resultados obtidos na simulação do caso de μAl foram comparados aos obtidos por [Najjar et al. \(2006\)](#). E os resultados obtidos na simulação do caso de nAl foram comparados aos do caso de μAl . E, enfim, foram propostos possíveis aprimoramentos futuros deste trabalho.

Parte I

Referencial Teórico

1 Mecanismo de Combustão do Alumínio em Propelente Sólido

O alumínio é extensamente utilizado como combustível em propelentes sólidos compósitos, geralmente em uma composição oxidante/Al/ligante. Na qual o oxidante geralmente é AP ou AN e o ligante é HTPB, PBAN ou CTPB. De modo geral, as partículas de alumínio estão inicialmente acumuladas em espaços entre as partículas de oxidante, denominados bolsos. Conforme a queima do propelente ocorre, as partículas são expostas e reagem. Entretanto, diversos fatores do mecanismo de combustão, desde a distribuição do alumínio no propelente até a taxa de queima resultante do processo de combustão, são diferentes com a alteração do diâmetro original das partículas de alumínio utilizadas no propelente.

1.1 Morfologia da superfície do propelente

DeLuca e Galfetti (2008) investigaram a morfologia da superfície de queima de um propelente AP/Al/HTPB por meio de técnicas de MEV e EDX aplicadas a superfícies anteriormente e após queima.

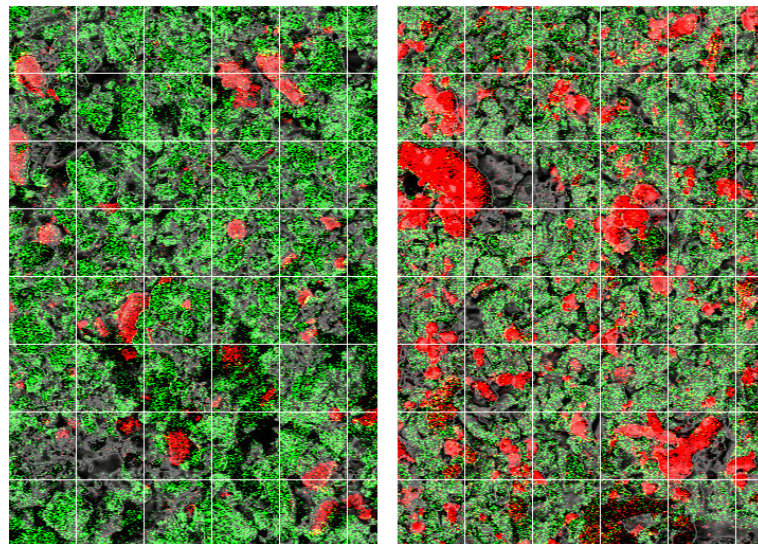


Figura 1 – Morfologia e composição das superfícies de propelentes com micro alumínio antes da queima e com queima extinguída, respectivamente. (DELUCA; GALFETTI, 2008)

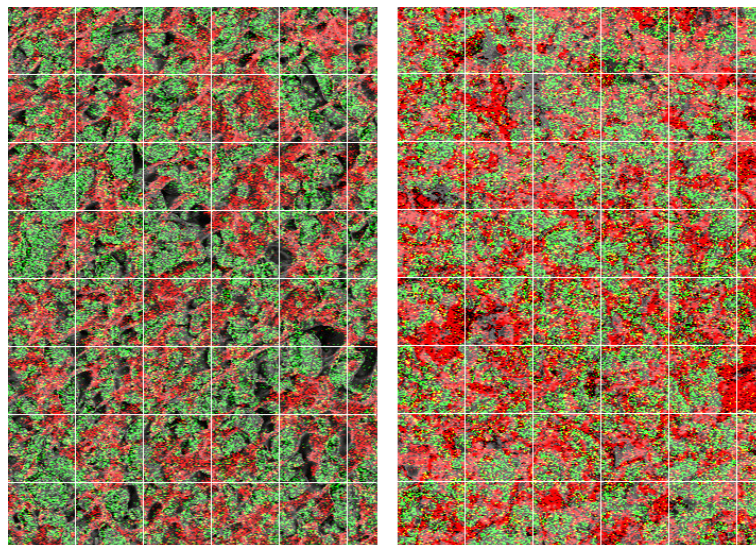


Figura 2 – Morfologia e composição das superfícies de propelentes com nano alumínio antes da queima e com queima extinguida, respectivamente. (DELUCA; GALFETTI, 2008)

Como resultado, nas Figuras 1 e 2 são apresentadas as composições e morfologias na superfície de propelentes baseados em nAl e em μ Al, onde a cor verde representa o cloro e a cor vermelha representa o alumínio.

Com esta análise, nota-se que para todas as superfícies o cloro aparenta ter distribuição razoavelmente uniforme. Para o propelente com μ Al, o alumínio está inicialmente reunido em aglomerados e se dispersa mais após a queima. Enquanto para o propelente com nAl, o alumínio parece estar uniformemente espalhado antes e depois da queima, concentrando-se em volta do cloro após a queima.

1.2 Superfície de queima e aglomeração

1.2.1 Mecanismo geral

Durante a queima do propelente, o alumínio presente é exposto e forma uma camada líquida na superfície. O fluxo dentro da câmara de combustão eventualmente separa da superfície e fragmenta o alumínio líquido formando gotículas.

Parte destas gotículas são partículas do tamanho original e parte são aglomerados. Conforme o alumínio vaporiza, ele reage com o oxidante em fase gasosa e forma alumina. Parte da alumina se torna fumaça e parte adere ao aglomerado formando um ressalto localizado em volta de parte da partícula. Como ilustrado na Figura 3.

Portanto, deixando a superfície de queima do propelente usualmente tem-se:

- Alumínio não aglomerado – Partículas de alumínio com diâmetro nominal. Compõe

cerca de 2/3 do total de alumínio deixando o propelente.

- Alumínio aglomerado – Gotículas de alumínio formadas pela agregação e aglomeração das partículas. O seu tamanho pode ser várias vezes o tamanho nominal das partículas dependendo do tamanho das partículas utilizadas. Compõe cerca de 1/3 do alumínio deixando o propelente.
- Partículas de óxido (fumaça) – São geradas pela evaporação do alumínio que sofre combustão próximo a superfície de queima. São compostas de Al_2O_3 e possuem diâmetro pequeno comparado ao das partículas de alumínio.
- Gases gerados pelos outros componentes do propelente – Produtos resultantes da decomposição do oxidante e do ligante utilizados.

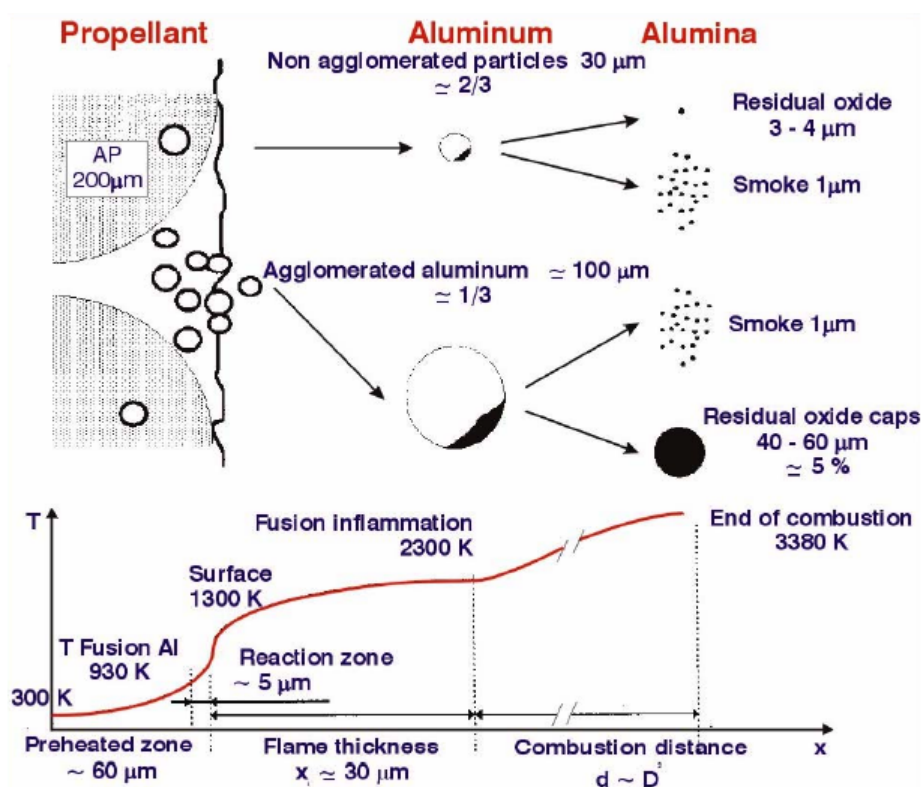


Figura 3 – Resumo da combustão de micro-alumínio em propelente sólido. (LENGELLÉ; DUTERQUE; TRUBERT, 2002)

1.2.2 Formação de aglomerados

DeLuca et al. (2005), por meio de câmera digital de alta velocidade, adquiriram imagens da chama, com o intuito de investigar o que ocorre na superfície de queima.

Nos resultados desse experimento, percebe-se um mecanismo fundamental comum para as formulações, no qual elementos de microestrutura de propelente são emitidos

em agregados de natureza aluminizada que possuem estrutura diferente da superfície de queima (Figura 4). Esses agregados crescem na superfície de queima e, eventualmente, soltam da superfície por diferentes motivos, como:

- Ignição dos agregados, na qual os agregados derretem e se unem formando um aglomerado quase esférico ilustrado na Figura 6.
- Combustão completa dos agregados perto da superfície.
- Carregamento dos agregados pelo fluxo de gás.

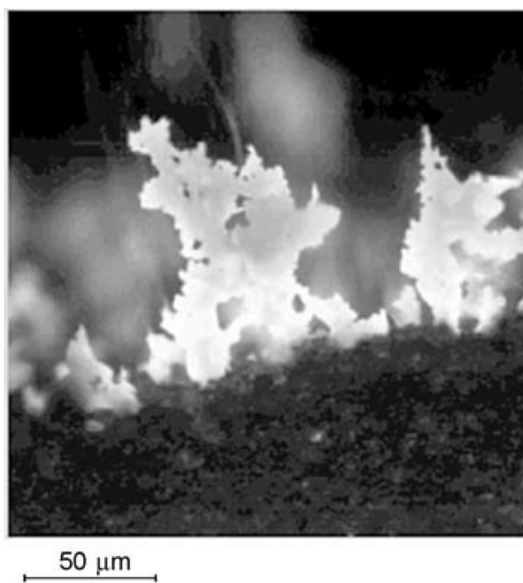


Figura 4 – Agregados de nano alumínio emergindo da superfície de queima em flocos finos. (DELUCA et al., 2005)

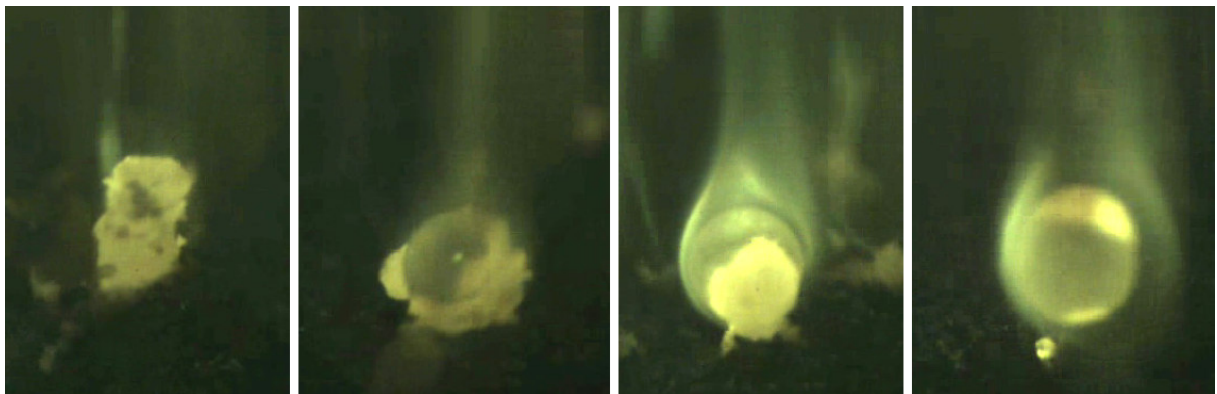


Figura 5 – Transição sequencial de agregados para aglomerado. (DELUCA; GALFETTI, 2008)

Na superfície de queima de propelentes com micro alumínio (Figura 7), são observados agregados espessos que ocasionalmente formam aglomerados com formato quase esférico, este processo é ilustrado na Figura 5. Aglomerados e partículas de alumínio queimam, usualmente, a uma certa distância da superfície em modo heterogêneo e homogêneo de fase gasosa.

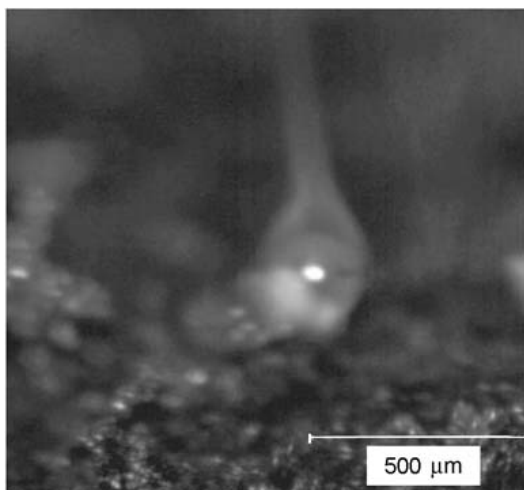


Figura 6 – Aglomerado esférico formado com a ignição de agregados de propelente com micro alumínio. (DELUCA et al., 2005)

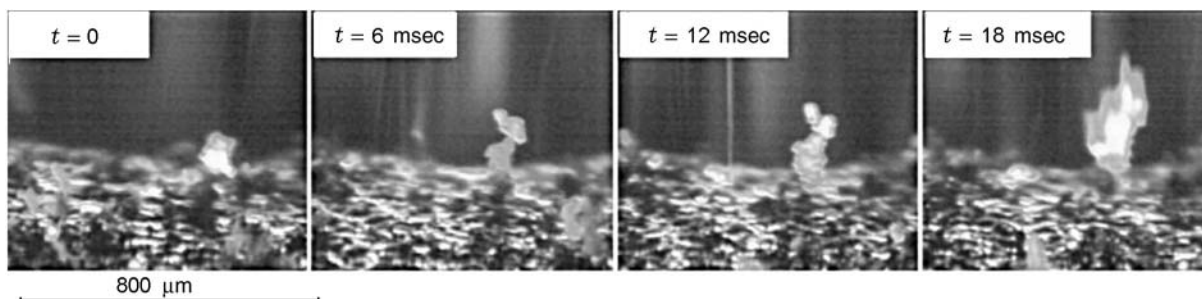


Figura 7 – Superfície de queima de propelente com micro-alumínio. (DELUCA et al., 2005)

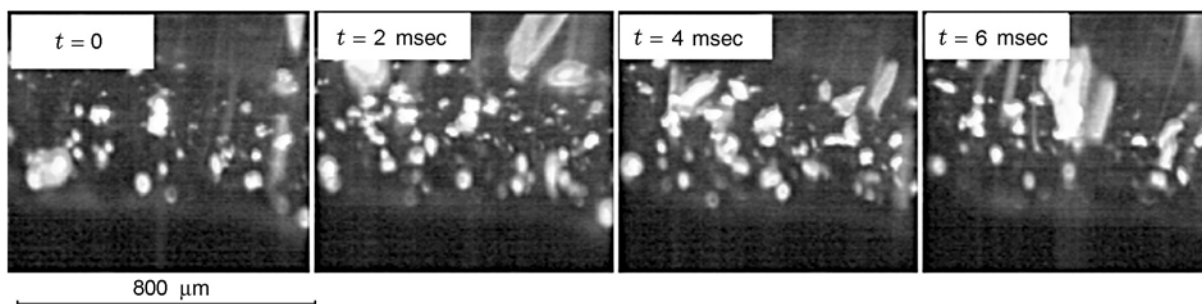


Figura 8 – Superfície de queima de propelente com nano-alumínio. (DELUCA et al., 2005)

Em comparação, na superfície de queima do propelente com nano alumínio (Figura 8), foi notada uma grande quantidade de agregados finos que frequentemente formam aglomerados. Também foi percebido que a combustão neste caso ocorre em uma camada estreita e fortemente luminosa adjacente a superfície de queima. Dokhan et al. (2001) relataram resultados semelhantes em seus estudos e atribuíram o aumento na taxa de queima, alcançado com a utilização de nano alumínio, à proximidade da região de queima com a superfície do propelente.

Em acordo com o observado por DeLuca et al. (2005) e Dokhan et al. (2001), Galfetti et al. (2007) notaram que a formação de aglomerados é mais frequente em propelente com nano alumínio com o diâmetro médio dos aglomerados podendo ser até 44 vezes maior do que o diâmetro original das partículas, em comparação, para micro alumínio, os aglomerados possuem em média um diâmetro de 3 a 5 vezes o diâmetro original. Diferente do mecanismo para micro alumínio em que 2/3 do alumínio deixando a superfície do propelente são partículas não aglomeradas com diâmetro nominal e 1/3 são aglomerados, para o caso de nano alumínio, o alumínio deixando a superfície de queima é composto basicamente apenas de aglomerados.

1.2.3 Estrutura do aglomerado

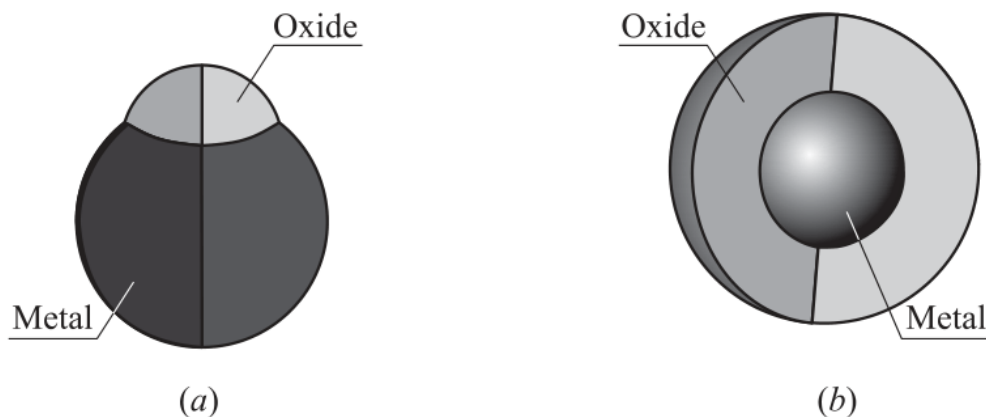


Figura 9 – Tipos de aglomerado conforme a estrutura: (a) *oxide cap* (b) metal revestido. (BABUK et al., 2009)

Existem diferentes tipos de aglomerados que podem ser formados. A grande maioria dos aglomerados que excedem $20 \mu\text{m}$ de diâmetro são do tipo *oxide cap*, nos quais ocorre uma deposição de óxido de alumínio em uma seção do aglomerado, formando um ressalto. Enquanto aglomerados menores são do tipo metal revestido, em que o aglomerado é composto de uma partícula metálica coberta por uma camada de óxido. Essas estruturas são ilustradas na Figura 9. (BABUK et al., 2009)

1.2.4 Efeitos do revestimento de alumínio

A utilização de nano-alumínio em formulações gera melhorias de performance do propelente, todavia também aumentam os custos de produção e os riscos envolvidos. Um dos parâmetros mais importantes a ser investigado para a utilização efetiva do nano-alumínio é a agregação e aglomeração de partículas. Agregação pré-queima e aglomeração resultante durante a queima fazem com que o tamanho aparente do metal seja aumentado, afetando negativamente parâmetros de performance. Para evitar essa agregação, pode-se revestir as partículas com uma camada protetora. (GALFETTI et al., 2006)

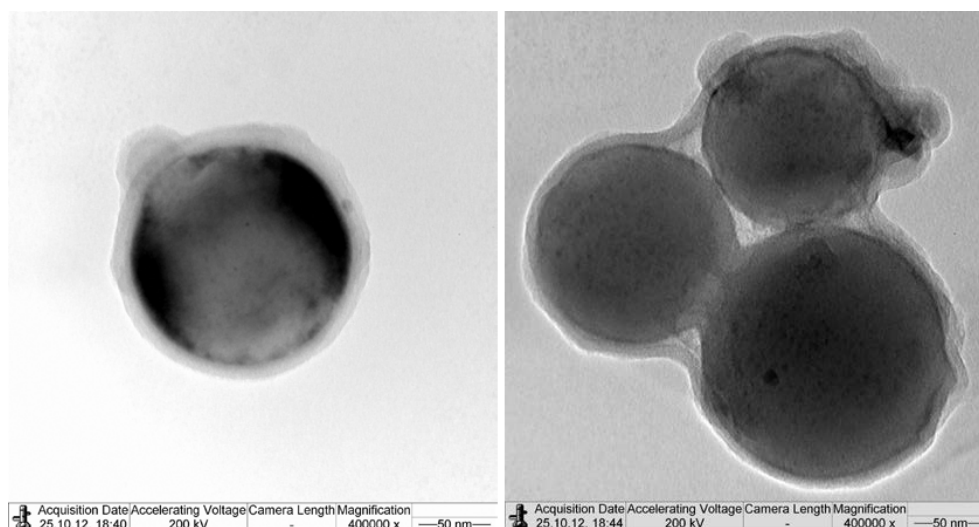


Figura 10 – Partícula de nano alumínio revestida e pequeno grupo de partículas revestidas. (REINA et al., 2013)

Em testes experimentais para investigar os efeitos de revestimento de nano-partículas de alumínio, foram utilizadas diferentes formulações de propelente com nano ou micro-alumínio e com ou sem revestimento. Foram notados efeitos de colagem de partículas causados pelo revestimento (Figura 10), por meio de análise por MET realizada para verificar a qualidade e características do revestimento. (REINA et al., 2013)

Com a queima das amostras de propelente, foi constatado que propelentes baseados em HTPB/AP com nano alumínio revestido com HTPB obtiveram taxa de queima até 26% maior, em relação a propelentes com a mesma formulação com alumínio não revestido, e até 117% maior, em relação a propelentes com formulação contendo micro-alumínio.

1.3 Taxa de queima

Foram investigadas as propriedades balísticas de propelentes sólidos compostos de 68%AP/17%HTPB/15%Al, com nano partículas de alumínio, e comparadas às propriedades de propelentes com micro partículas. Foram utilizadas diferentes combinações de μ Al

(variando entre 30 e 50 μm) e nano alumínio (variando entre 0.1 e 0.2 μm). (DELUCA et al., 2005)

Como resultado (Figura 11), para os propelentes investigados com alumínio em formulação bimodal, a substituição de micro alumínio por nano alumínio gera um aumento na taxa de queima conforme o crescimento da fração de nano alumínio. Para os propelentes com alumínio em formulação mono modal (apenas nAl), o aumento da superfície específica do nano alumínio acima de 10 m^2/g gera um aumento proeminente na taxa de queima.

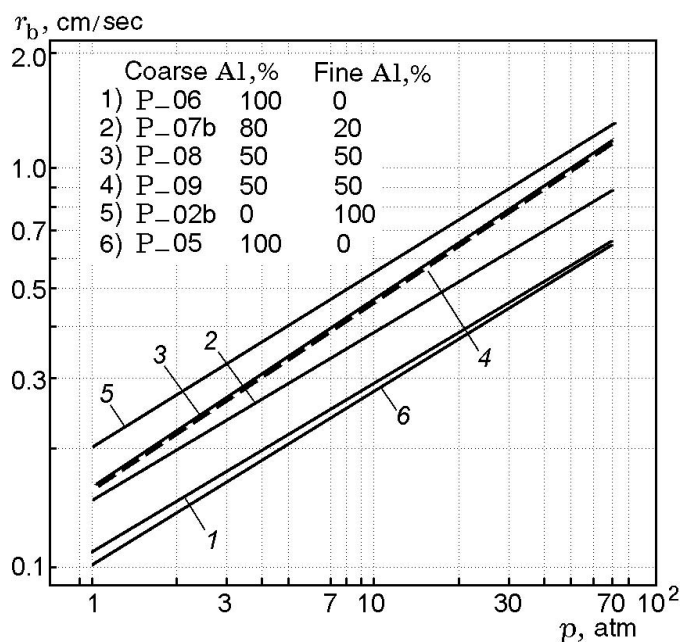


Figura 11 – Taxa de queima para diferentes frações de μAl e nAl. (DELUCA et al., 2005)

Também percebe-se, comparando resultados de formulações idênticas de nano alumínio, cuja única diferença é a data de fabricação do pó, que existe um aumento da taxa de queima conforme o aumento da idade do nano alumínio. Isso pode ocorrer devido a alteração da camada de óxido com o tempo.

Outros autores também conduziram experimentos semelhantes em amostras de propelente 71%AP/11%PBAN/18%Al com diferentes formulações de proporção de AP fino (82.5 μm ou 10 μm) e espesso (400 μm) e de Al fino (0.1 μm) e espesso (30 μm , 15 μm ou 3 μm). Como resultado, foi constatado que para formulações com 15 μm de Al a taxa de queima foi quase a mesma das com 30 μm Al, para 3 μm foi significativamente maior e para 0.1 μm foi muito maior. Quando substituiu-se 82.5 μm AP com 10 μm AP, a taxa de queima foi menor. O aumento da taxa de queima proporcionado pela utilização de 0.1 μm foi maior quando utilizado 82.5 μm do que com 10 μm . (DOKHAN et al., 2001)

1.4 Processo de ignição e combustão das partículas

O processo de ignição e combustão das partículas de alumínio pode ser dividido em cinco estágios, como ilustrado na Figura 12. (PURI, 2008)

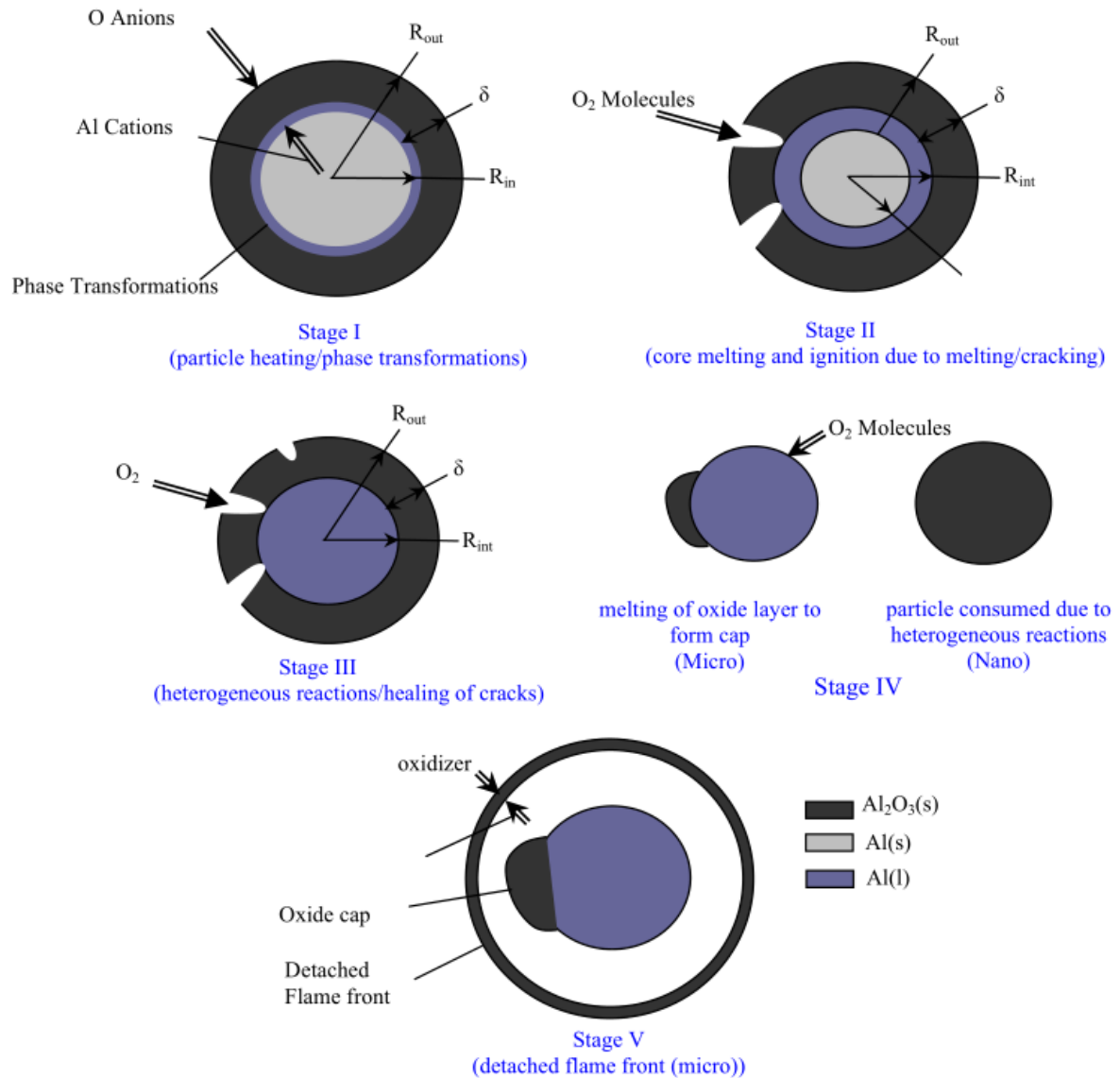


Figura 12 – Etapas de ignição e combustão de partículas de alumínio. (PURI, 2008)

Estes processos são explicados na seguinte ordem:

- 1. Aquecimento da partícula ao ponto de derretimento do núcleo** – No primeiro estágio, a partícula é aquecida até o ponto de derretimento do núcleo de alumínio (933 K). Ocorre o início da transformação de fase do núcleo de alumínio, de sólido para líquido, cercado pela camada de óxido.

- 2. Mudanças de fase e ignição de nano partículas de alumínio** – O início do segundo estágio se dá uma vez que a temperatura de derretimento do alumínio é alcançada e o final quando todo o alumínio do núcleo é derretido. Com a continuação da transformação de fases, estas se tornam um dos processos dominante deste estágio. A ignição de micro partículas é comumente observada ocorrendo quando a temperatura atinge o ponto de derretimento da camada de alumina. Porém nano partículas podem sofrer ignição no estágio II devido a rachamento da camada de óxido, que pode ocorrer devido a diferença de densidade do alumínio com a transformação de fase.

Devido a razão entre energia conduzida e energia armazenada pela camada de alumina ser proporcional a razão entre área de superfície e volume, conforme o tamanho da partícula diminui para escala nanométrica, a razão de energias aumenta e a camada conduz calor mais facilmente. Por este motivo, em nano-partículas o núcleo de alumínio derrete antes da camada de alumina, causando sua ruptura. Enquanto em micro-partículas, comumente a camada de óxido derrete antes do núcleo de alumínio sólido.

Neste estágio, conforme a camada de óxido começa a partir, pode ocorrer oxidação direta nestes pontos, fechando a as rachaduras.

- 3. Aquecimento até o ponto de derretimento da camada de óxido** – No terceiro estágio, fragmentação e selamento de rachaduras da camada de alumina continuam ocorrendo. As nano-partículas reagem com o gás oxidante e são formadas, a partir delas, partículas de óxido de alumínio. Para micro-partículas, a temperatura continua aumentando até atingir o ponto de derretimento da camada de óxido (2345 K), encerrando este estágio. (SUNDARAM; PURI; YANG, 2016)

- 4. Derretimento da camada de óxido e ignição de micro-partículas** – Nesta fase, a camada de alumínio ao redor da partícula de micro-alumínio derrete e, devido ao efeito de tensão de superfície, acumula cobrindo parte da superfície da partícula formando uma espécie de resalto.

O diâmetro da partícula e as condições de pressão podem afetar significativamente o processo de queima. Partículas menores sob baixa pressão em geral queimam sob condições cinematicamente controladas, enquanto partículas maiores sob alta pressão queimam sob um mecanismo controlado por difusão. Conseqüentemente, nano-partículas tem tempo de difusão curto. Ao final deste estágio, nano-partículas terão sido completamente consumidas, de modo que apenas micro-partículas passam pelo quinto estágio.

- 5. Combustão de micro-partículas** – Nessa etapa, é atingido o ponto de ebulição do alumínio (2743 K), possibilitando que, em micro-partículas, o alumínio em vapor

difunda em uma chama gasosa. Deste modo, o alumínio queima em fase gasosa com uma chama desacoplada da superfície da partícula.

1.5 Tempo de queima

1.5.1 Lei D^2

A lei D^2 define o tempo de queima de uma gotícula. Assumindo que essa gotícula é esférica e regrida uniformemente e completamente durante sua combustão, a lei define que:

$$t_b = \frac{d_0^2}{\beta} \quad (1.1)$$

Em que t_b é o tempo de queima, d_0 é o diâmetro inicial da gotícula e β é uma função do fluxo de massa, diâmetro da partícula e densidade.

1.5.2 Lei D^n para micro alumínio

Beckstead (2004) propôs que para a combustão de alumínio é possível adaptar a lei D^2 em uma lei D^n para encontrar o tempo de queima. Entretanto, deve-se considerar que a regressão do alumínio não ocorre uniformemente. Como foi visto anteriormente, durante a queima da partícula forma-se um ressalto na camada de óxido. A suposição tomada pela lei D^2 de que a partícula é completamente consumida, até que o diâmetro final seja zero, também não é aplicável a combustão de alumínio de acordo com estudos experimentais.

Portanto, a lei D^n para alumínio teria um expoente n menor do que dois, entre 1.5 e 1.9. Foi proposta a equação:

$$t_b = \frac{ad^n}{\chi_{eff} p^{0.1} T_0^{0.2}} \quad (1.2)$$

em que

$$a = 0.0244 \text{ para } n = 1.5 \text{ e}$$

$$a = 0.00735 \text{ para } n = 1.8$$

$$\chi_{eff} = \chi_{O_2} + 0.6\chi_{H_2O} + 0.22\chi_{CO_2} \quad (1.3)$$

O termo χ_{eff} é um balanço das frações de massa do oxigênio, da água e do dióxido de carbono. t_b está em ms, d é o diâmetro em μm , p é a pressão em atm e T_0 é a temperatura inicial em K.

1.5.3 Lei $D^{0.3}$ para nano alumínio

O modelo de Beckstead (2004) foi realizado para partículas de alumínio com dimensões iguais ou maiores que $100 \mu\text{m}$. Todavia, o mecanismo de combustão difere consideravelmente com diminuição do diâmetro da partícula, como é mostrado na Figura 13. Para partículas em escala nanométrica, acredita-se que a combustão é governada por processos cinemáticos.

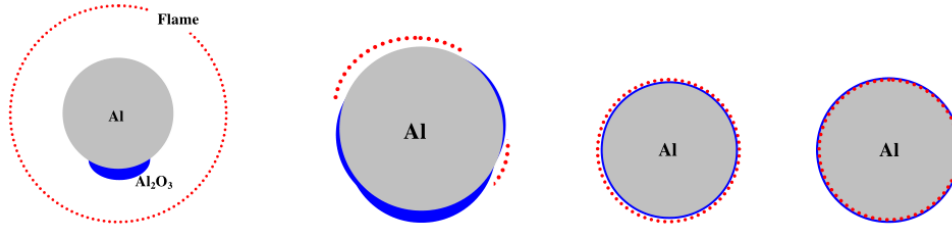


Figura 13 – Progresso da estrutura da chama com a redução do diâmetro da partícula. (AITA et al., 2006)

Huang et al. (2007) formularam uma relação para descrever o tempo de queima de partículas de alumínio entre 24 nm e $30 \mu\text{m}$ de diâmetro, com as observações de que para esta escala, reações heterogêneas de superfície são mais presentes, e a temperatura do ambiente se torna mais relevante neste caso. O modelo proposto é o da lei $D^{0.3}$.

$$t_b = \frac{d^{0.3}}{a_2 e^{-E_b/RT} \chi_{eff}} \quad (1.4)$$

Em que t_b está em segundos, $a_2 = 8.72 \times 10^5$ (HUANG et al., 2009), $E_b = 73.6 \text{ KJ/mol}$, d está em μm e R é a constante universal dos gases.

Huang et al. (2007) notaram que, analisando as curvas para o modelo proposto e para o modelo de Beckstead (2004), existe um ponto de interseção entre elas. Isso sugere que partículas com um certo diâmetro podem estar em transição entre combustão controlada por difusão para uma cinematicamente controlada e, para este caso, ambos os modelos poderiam ser utilizados.

2 Modelo Numérico para Micro Alumínio

A formulação computacional de simulação de escoamento com duas fases pode ser, em geral, aproximada por dois métodos: análise Euleriana–Euleriana e análise Euleriana–Lagrangiana. O modelo Euleriano-Lagrangiano é mais adequado para a simulação em estudo, uma vez que considera o tamanho e a composição da partícula como um dos parâmetros atribuídos à partícula computacional e, portanto, consegue considerar as mudanças no tamanho e composição da partícula devido a combustão. Com isso, os aglomerados de alumínio, partículas maiores, devem ser analisados no modelo Lagrangiano e a fase gasosa, que inclui a fumaça de alumina, deve ser analisada no modelo Euleriano. (SABNIS, 2003)

Considerando estes fatores, [Najjar et al. \(2006\)](#) realizaram simulações numéricas do escoamento interno de um motor de foguete sólido e, para isto, desenvolveram um modelo numérico com o intuito de descrever apropriadamente os processos físicos envolvidos.

2.1 Mistura gasosa

A evolução da massa, da energia e do momento do escoamento interno do motor é governada pelas equações de Navier-Stokes que, para este caso, são dependentes do tempo e compressíveis.

2.1.1 Equação da massa

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = S_\rho \quad (2.1)$$

2.1.2 Equação do momento

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i}p - \frac{\partial}{\partial x_j}(\sigma_{ij}) = S_{\rho u, i} \quad (2.2)$$

Em que σ_{ij} , o tensor de estresse, é uma função da viscosidade dinâmica e do vetor velocidade e é dado por:

$$\sigma_{ij}(\mu, \mathbf{u}) = \mu(T)\left(\frac{\partial}{\partial x_j}u_i + \frac{\partial}{\partial x_i}u_j - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial}{\partial x_k}u_k\right) \quad (2.3)$$

2.1.3 Equação da energia

$$\frac{\partial}{\partial t}e + \frac{\partial}{\partial x_j}((e + p)u_j) - \frac{\partial}{\partial x_j}(\sigma_{ij}u_i - q_j) = S_e \quad (2.4)$$

e é a densidade de energia total que, considerando o gás ideal, é:

$$e(p, \mathbf{u}) = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho u_i u_i \quad (2.5)$$

E q_j é o componente j-ésimo do vetor de fluxo de calor, dado por:

$$q_j(k, T) = -k \frac{\partial}{\partial x_j} T = -(\mu C_p / Pr) \frac{\partial}{\partial x_j} T \quad (2.6)$$

Os outros componentes do escoamento interagem com a mistura de gás a partir dos termos de fonte das equações de Navier-Stokes S_ρ , $S_{\rho u}$ e S_e do seguinte modo:

$$S_\rho = S_\rho^s + S_\rho^p \quad (2.7)$$

$$S_{\rho u} = S_{\rho u}^s + S_{\rho u}^p \quad (2.8)$$

$$S_e = S_e^s + S_e^p \quad (2.9)$$

2.2 Partículas de alumínio

2.2.1 Evolução lagrangiana das partículas

O modelo lagrangiano é utilizado para descrever a evolução do vetor de posição \mathbf{x}_p , do vetor de velocidade \mathbf{v}_p e da temperatura T_p da gotícula de alumínio.

$$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \mathbf{v}_p \quad (2.10)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \frac{1}{\tau_p} [\mathbf{u}(\mathbf{x}_p) - \mathbf{v}_p] \quad (2.11)$$

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{\tau_{p,\theta}} [T(\mathbf{x}_p) - T_p] \quad (2.12)$$

Em que $\mathbf{u}(\mathbf{x}_p)$ é a velocidade da mistura na posição da gotícula e τ_p e $\tau_{p,\theta}$ são escalas de tempo dadas por:

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu f(Re_p)} \quad (2.13)$$

$$\tau_{p,\theta} = \frac{C_{p,p}\rho_p d_p^2}{12k f_\theta(Re_p)} \quad (2.14)$$

Onde ρ_p , d_p e $C_{p,p}$ são a densidade, o diâmetro e o calor específico da gotícula e $f(Re_p)$ e $f_\theta(Re_p)$ são leis de arrasto dadas por:

$$f(Re_p) = 1 + 0.15Re_p^{0.687} \quad (2.15)$$

$$f_\theta(Re_p) = 1 + 0.3Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \quad (2.16)$$

2.2.2 Taxa de queima do alumínio

A taxa de queima é uma função da massa da gotícula pelo tempo de queima, portanto, é uma relação de lei de potência do diâmetro da partícula. [Najjar et al. \(2006\)](#) utilizaram em sua análise uma equação baseada na expressão de tempo de queima desenvolvida por [Widener e Beckstead \(1998\)](#):

$$t_b = 1138 \frac{T^{-1.57} p^{-0.2} d^{1.9}}{\chi_{eff}^{0.39} \mathcal{D}_{rel}} \quad (2.17)$$

$$\dot{m}_{bu} = c\rho_{Al} T^{1.57} p^{0.2} \chi_{eff}^{0.39} \mathcal{D}_{rel} d_p^{1.1} \psi_{Al} \quad (2.18)$$

Onde t_b está em ms, $c = 2.885 \times 10^{-13}$, T e p são a temperatura e a pressão local, respectivamente, na posição da partícula, a fração de massa χ_{eff} é calculada pela Equação [1.3](#), $\mathcal{D}_{rel} = 1 + 2.7\chi_{H_2}$, d é o diâmetro da partícula e ψ_{Al} é um parâmetro que considera a presença de óxido na partícula:

$$\psi_{Al} = \frac{\phi_{Al}\rho_{Al_2O_3}}{\phi_{Al}\rho_{Al_2O_3} + (1 - \phi_{Al})\rho_{Al}} \quad (2.19)$$

Em que ϕ_{Al} é a fração de alumínio na partícula:

$$\phi_{Al} = m_{Al} / (m_{Al} + m_{Al_2O_3}) \quad (2.20)$$

2.2.3 Crescimento do ressalto de óxido

A Figura 9 (a) ilustra a estrutura de um aglomerado formado por micro partículas de alumínio, no qual parte do óxido de alumínio gerado durante a queima é depositado na partícula, se concentrando em parte da partícula e formando um ressalto. A taxa de deposição de óxido é calculada pela expressão:

$$\dot{m}_{dep} = (\pi/4)d_p^2 \|\mathbf{v}_p - \mathbf{u}(\mathbf{x}_p)\| C_s \eta_c \quad (2.21)$$

Com $(\pi/4)d_p^2 \|\mathbf{v}_p - \mathbf{u}(\mathbf{x}_p)\|$ representando o volume varrido pela partícula por unidade de tempo, C_s é a concentração local de fumaça de óxido e $\eta_c = 0.25$ é a eficiência de colisão e aglomeração.

2.2.4 Evolução da massa, densidade e diâmetro da partícula

Conforme o alumínio queima e evapora e parte do óxido gerado é acumulado na gotícula, a massa de alumínio na gotícula diminui e a massa de óxido aumenta com o tempo. A evolução da massa de alumínio e da massa de óxido na gotícula é dada por:

$$\frac{dm_{Al}}{dt} = -\dot{m}_{bu} \quad (2.22)$$

$$\frac{dm_{Al_2O_3}}{dt} = \dot{m}_{dep} \quad (2.23)$$

A partir da mudança nas massas, a densidade da partícula é calculada por:

$$\rho_p = (m_{Al} + m_{Al_2O_3}) \left(\frac{m_{Al}}{\rho_{Al}} + \frac{m_{Al_2O_3}}{\rho_{Al_2O_3}} \right)^{-1} \quad (2.24)$$

E a partir da massa e da densidade a evolução do diâmetro da partícula é:

$$d_p = \sqrt[3]{\frac{6}{\pi} \left(\frac{m_{Al}}{\rho_{Al}} + \frac{m_{Al_2O_3}}{\rho_{Al_2O_3}} \right)} \quad (2.25)$$

2.3 Acoplamento entre alumínio e gás

Como resultado do processo de queima, as gotículas de alumínio influenciam a massa, o momento e a energia da mistura gasosa e do campo de fumaça de alumina. Isso resulta no acoplamento da gotícula lagrangiana de volta na mistura gasosa (euleriana). Com isso, termos de fonte são adicionados às equações de continuidade, momento e energia.

2.3.1 Fonte de massa

A fonte de massa resultante da queima do alumínio é:

$$S_{\rho,l}^p = L\dot{m}_{bu,l}(1 - M_R) \quad (2.26)$$

Em que $M_R = M_{Al_2O_3}/2M_{Al}$ é a razão de peso molecular da reação e L é a razão do número de partículas real pelo número de partículas computacional.

2.3.2 Fonte de momento

A fonte de momento resultante da queima do alumínio é:

$$\mathbf{S}_{\rho u,l}^p = L\mathbf{F}_{p,l} + L\dot{m}_{bu,l}\mathbf{v}_{p,l} + S_{\rho,l}^p\mathbf{u}(\mathbf{x}_{p,l}) \quad (2.27)$$

Onde $\mathbf{F}_{p,l}$ é o arrasto dado por:

$$\mathbf{F}_{p,l} = -\frac{\pi}{6}d_{p,l}^3\frac{\rho_{p,l}}{\tau_{p,l}}(\mathbf{v}_{p,l} - \mathbf{u}(\mathbf{x}_{p,l})) \quad (2.28)$$

2.3.3 Fonte de energia

O calor total liberado pelo processo de combustão é expresso pela seguinte relação composta por termos de contribuição resultantes de subprocessos, com a definição e os valores de cada componente descritos na Tabela 1:

$$h = -h_{ev} + h_{react} + h_{cond} + h_{solid} \quad (2.29)$$

Tabela 1 – Definição e valores típicos para calores de reação. (NAJJAR et al., 2006)

Termo	Definição	Valor (J)
h_{ev}	Calor de evaporação de Al(l) para Al(g)	8240.0
h_{react}	Calor de reação de Al(g) para Al ₂ O ₃ (g)	7157.0
h_{cond}	Calor de condensação de Al ₂ O ₃ (g) para Al ₂ O ₃ (l)	29326.0
h_{solid}	Calor de solidificação de Al ₂ O ₃ (l) para Al ₂ O ₃ (s)	0.0

O termo de fonte de energia resultante da queima de alumínio é:

$$S_{e,l}^p = \mathbf{S}_{\rho u,l}^p \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}_{p,l}) + L\dot{m}_{bu,l}h_b + L\dot{m}_{cond,l}h_c \quad (2.30)$$

Em que $\dot{m}_{cond,l}$ é o fluxo de massa em que $\text{Al}_2\text{O}_3(\text{g})$ condensa para a fase sólida, $h_c = h_{cond} + h_{solid}$ é o calor liberado associado, e h_b é:

$$h_b = \alpha h + (1 - \alpha)(-h_{ev} + h_{react}) \quad (2.31)$$

Onde α é a fração de alumina que condensa para estado sólido na forma de fumaça.

2.3.4 Acoplamento entre alumínio e fumaça

O tratamento lagrangiano das partículas de alumínio também deve ser acoplado a fumaça de óxido com tratamento euleriano. Neste caso, o alumínio atua como fonte e sumidouro para a fumaça de óxido, uma vez que a combustão do alumínio gera óxido que se torna fumaça, mas a colisão entre partículas de fumaça e alumínio aumenta o ressalto de óxido no alumínio. O acoplamento é feito, portanto, por um único termo de fonte líquido que abrange ambos os fenômenos:

$$S_{s,l}^p = L[(\dot{m}_{bu,l} + \dot{m}_{cond,l})M_R - \dot{m}_{dep,i}] \quad (2.32)$$

2.4 Partículas de fumaça de alumina

Devido a sua dimensão pequena, as partículas de alumina são analisadas no modelo euleriano, onde as equações contínuas possuem um termo fonte/sumidouro para incluir estas partículas. Logo, o campo de fumaça de óxido age como fonte de momento para a mistura gasosa por meio do seguinte termo:

$$\mathbf{S}_{\rho u}^s = -LM_R\dot{m}_{bu,l}\mathbf{w}(\mathbf{x}_{p,l}) \quad (2.33)$$

Em que \mathbf{w} é o campo de velocidade da fumaça, expresso em função da velocidade da mistura gasosa local e com escala de tempo τ_s , dados por:

$$\mathbf{w}_s = \mathbf{u} - \tau_s \frac{D\mathbf{u}}{Dt} \quad (2.34)$$

$$\tau_s = \rho_s d_s^2 / 18\mu \quad (2.35)$$

Parte II

Implementação numérica

3 Modelo Numérico para Nano Alumínio

A diminuição do diâmetro das partículas para a escala nanométrica resulta em alterações na mecânica de combustão das partículas e, conseqüentemente, o modelo numérico do escoamento deve ser alterado em acordo.

3.1 Mistura gasosa

Assim como no modelo de [Najjar et al. \(2006\)](#), as equações de Navier-Stokes governam a evolução de massa, momento e energia da mistura gasosa. E o acoplamento entre as partículas de alumínio e de fumaça e a mistura gasosa é feito por meio de termos de fonte presentes nas equações de Navier-Stokes (Equações [2.1](#), [2.2](#) e [2.4](#)).

3.2 Partículas de Alumínio

Os aglomerados de alumínio são rastreados no modelo lagrangiano com a evolução de sua posição, velocidade e temperatura calculadas nas Equações [2.10](#), [2.11](#) e [2.12](#).

3.2.1 Taxa de queima do alumínio

Foi visto anteriormente que a lei D^n utilizada para o cálculo do tempo de queima da partícula não é adequada para aplicação conforme o diâmetro é reduzido ao ponto em que a combustão passa a ser governada por processos cinemáticos.

Neste modelo a expressão da taxa de queima é portanto definida a partir da lei $D^{0.3}$ para o tempo de queima (Equação [1.4](#)), da seguinte forma:

$$\dot{m}_{bu} = \frac{\text{massa inicial da partícula}}{\text{tempo de queima}} \quad (3.1)$$

$$\dot{m}_{bu} = \frac{\rho_{Al}(\pi/6)d_p^3}{t_b} \quad (3.2)$$

Em que a densidade do alumínio está em kg/m^3 , o diâmetro em metros e o tempo de queima em segundos. Inserindo o tempo de queima (Equação [1.4](#)) na equação acima, convertendo suas unidades necessárias e adicionando o termo ψ_{Al} para considerar a presença de óxido na partícula, temos:

$$\dot{m}_{bu} = \rho_{Al}(\pi/6)d_p^3 a_2 e^{(-E_b/RT)} \chi_{eff}(d_p \times 10^6)^{-0.3} \psi_{Al} \quad (3.3)$$

E esta equação é simplificada para:

$$\dot{m}_{bu} = c\rho_{Al}e^{(-E_b/RT)}\chi_{eff}d_p^{2.7}\psi_{Al} \quad (3.4)$$

Em que $c = 7236.3$.

3.2.2 Comportamento do óxido na partícula

Os aglomerados de nano alumínio não formam um ressaltado como os de micro alumínio. Contudo, ainda há a presença de óxido no aglomerado na forma de uma camada que cobre um núcleo de alumínio, essa estrutura é apresentada na Figura 9.

Como não ocorre a deposição de alumina na partícula, a quantidade desse óxido é portanto considerada constante durante todo o processo de queima do aglomerado. Consequentemente:

$$\frac{dm_{Al_2O_3}}{dt} = 0 \quad (3.5)$$

3.3 Acoplamento entre alumínio e gás

O acoplamento entre as partículas de alumínio e a mistura gasosa é feito a partir dos termos de fonte que são acoplados as equações de Navier-Stokes, a partir das Equações 2.26, 2.27 e 2.30.

3.4 Partículas de fumaça de alumina

Considera-se que todo o óxido resultante do processo de evaporação do alumínio forma partículas de fumaça de óxido. Consequentemente, o termo de fonte de acoplamento entre as partículas de alumínio e as partículas de fumaça se torna:

$$S_{s,l}^p = L(\dot{m}_{bu,l} + \dot{m}_{cond,l})M_R \quad (3.6)$$

Emfim, igualmente a situação do modelo anterior, as partículas de fumaça servem como fonte de momento para a mistura gasosa, seguindo a Equação 2.33.

3.5 Modelo de *breakup* de partículas

Em adição às seções anteriores, este trabalho também inclui um modelo de representação do fenômeno de *breakup* de partículas. Conforme o alumínio se desprende da superfície de queima e interage com o escoamento, dependendo da velocidade relativa do

fluxo, a força aerodinâmica pode afetar as partículas causando sua deformação e eventualmente fragmentação, formando novas partículas menores, o que é denominado *breakup* secundário.

Esse fenômeno é governado pelo número de Weber, que é razão da força aerodinâmica pela tensão de superfície:

$$We = \frac{\rho_g u^2 d_p}{\sigma} \quad (3.7)$$

De acordo com a faixa do valor de We , o processo de *breakup* acontece de forma diferente e, conseqüentemente, é classificado em diferentes categorias denominadas zonas de *breakup*.

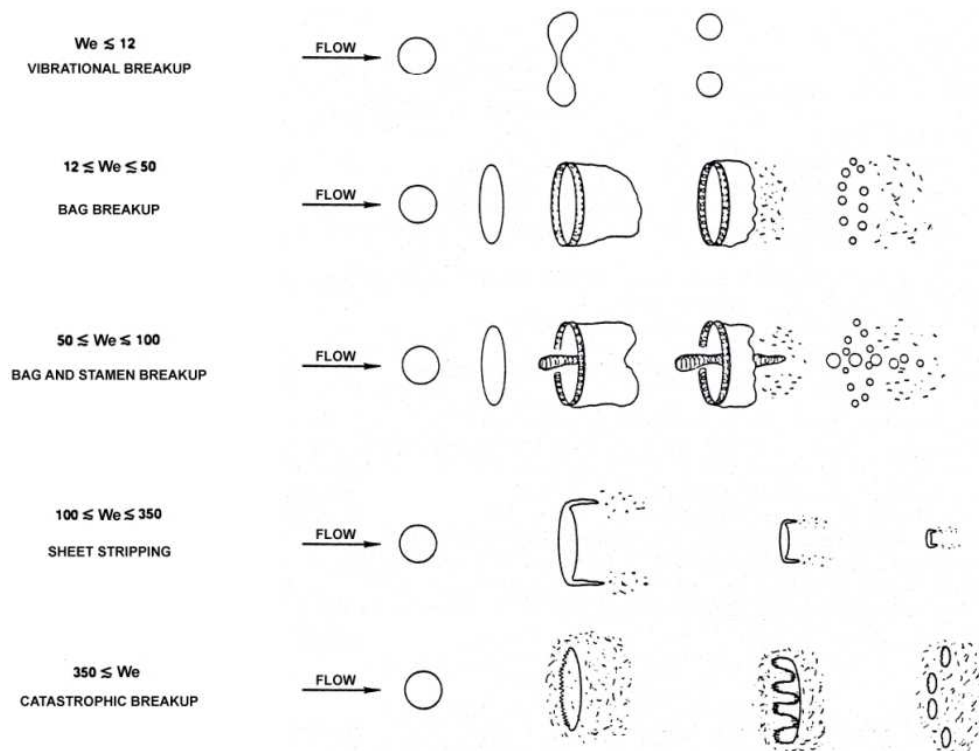


Figura 14 – Zonas de breakup secundário em função do número de Weber. (KADOCSA; TATSCHL; KRISTOF, 2007)

Uma vez que o tempo característico para o *breakup* vibracional é muito longo comparado ao tempo de residência das partículas na câmara de combustão, a zona de *breakup* considerada neste trabalho é a zona de *bag breakup* na qual o número de Weber é entre 12 e 50.

4 Simulação Numérica

Para analisar a aplicabilidade do modelo concebido, foram simulados numericamente, por meio do software ANSYS Fluent, os dois casos em estudo: motor de foguete sólido com alumínio como combustível em diâmetros iniciais micrométricos e em diâmetros iniciais nanométricos. Empregando em cada simulação o modelo numérico adequado conforme descrito nas seções anteriores.

4.1 Caso teste

Para fins de comparação dos resultados, o caso teste analisado neste estudo é o mesmo simulado por [Najjar et al. \(2006\)](#), o qual emprega a configuração ONERA C1, cujo esquemático e dimensões são ilustrados na Figura 15.

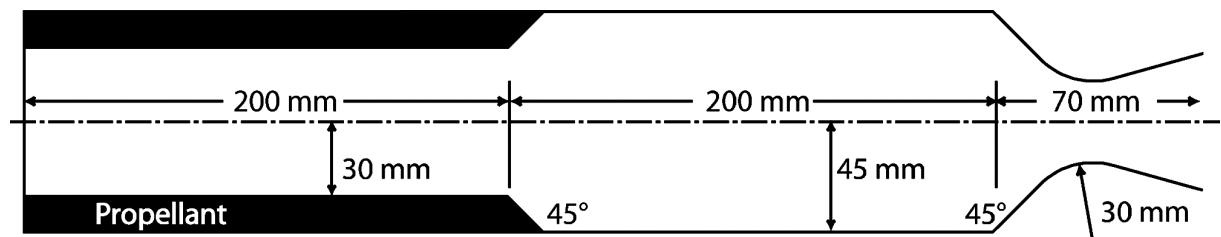


Figura 15 – Geometria e dimensões do motor ONERA C1. ([NAJJAR et al., 2006](#))

4.1.1 Propriedades das fases

Foram também consideradas as mesmas propriedades da mistura gasosa (Tabela 2) e das partículas de alumínio (Tabela 3).

Tabela 2 – Propriedades da mistura gasosa. ([NAJJAR et al., 2006](#))

Propriedade	Valor	Unidade
γ	1.14	
C_p	2439.04	J/(kg · K)
T_{inj}	3387.0	K
\dot{m}_{tot}	21.201	kg/(m ² · s)
μ	36.0×10^{-5}	kg/(m · s)

Tabela 3 – Propriedades das partículas de alumínio.(NAJJAR et al., 2006)

Propriedade	Valor	Unidade
ρ_{Al}	1766.0	kg/m ³
$T_{Boil,Al}$	3000.0	K
$C_{p,Al}$	1375.0	J/(kg · K)
$\rho_{Al_2O_3}$	1600.0	kg/m ³
T_{Boil,Al_2O_3}	4000.0	K
C_{p,Al_2O_3}	1100.0	J/(kg · K)
$T_{p,inj}$	3387.0	K
\dot{m}_p	3.1622	kg/(m ² · s)
ϕ_p	0.176	

4.1.2 Malha

Foi utilizada nas simulações uma malha computacional totalmente estruturada de 810 x 80 células não uniformemente distribuídas, observada na Figura 16, a qual considera completamente a geometria estudada no modelo bidimensional.

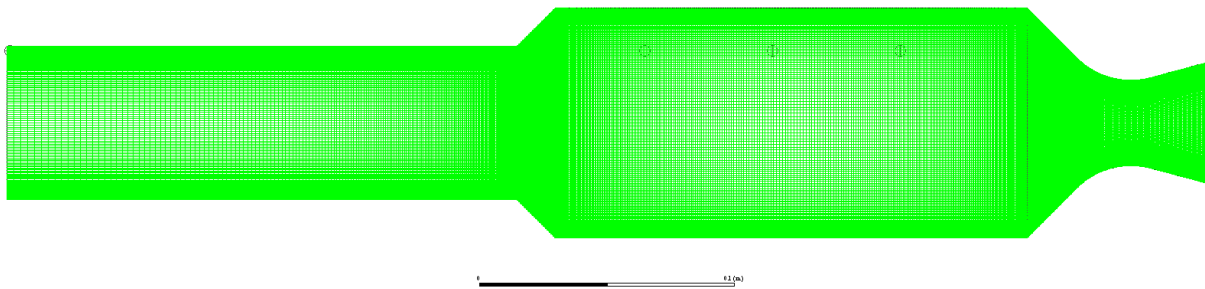


Figura 16 – Malha computacional utilizada nas simulações numéricas.

Como a grade deste estudo é mais refinada do que a utilizada por Najjar et al. (2006) (317 x 60 células), a qual foi validada por Lupoglazoff e Vuillot (1992), não foi necessária a realização de uma análise de sensibilidade de malha.

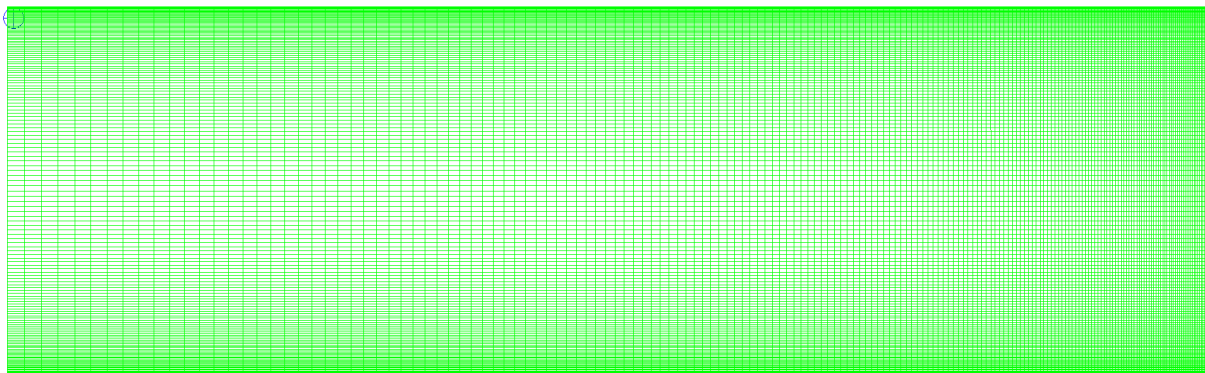


Figura 17 – Detalhe da malha nas superfícies de injeção.

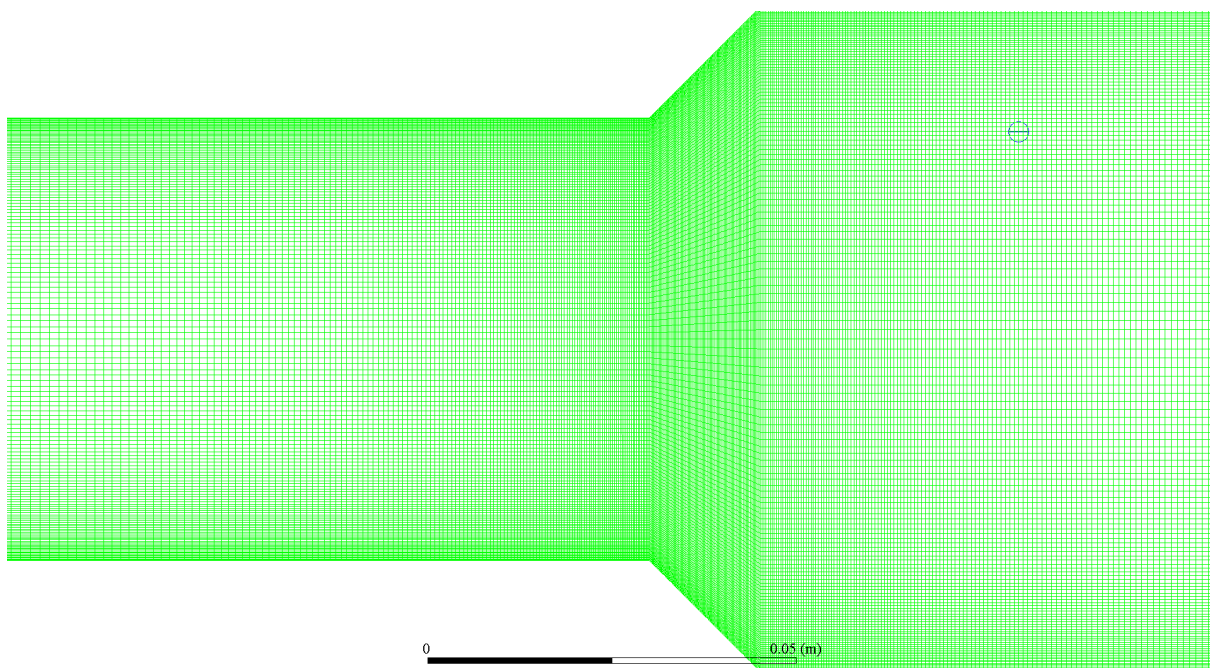


Figura 18 – Detalhe da malha no centro do motor.

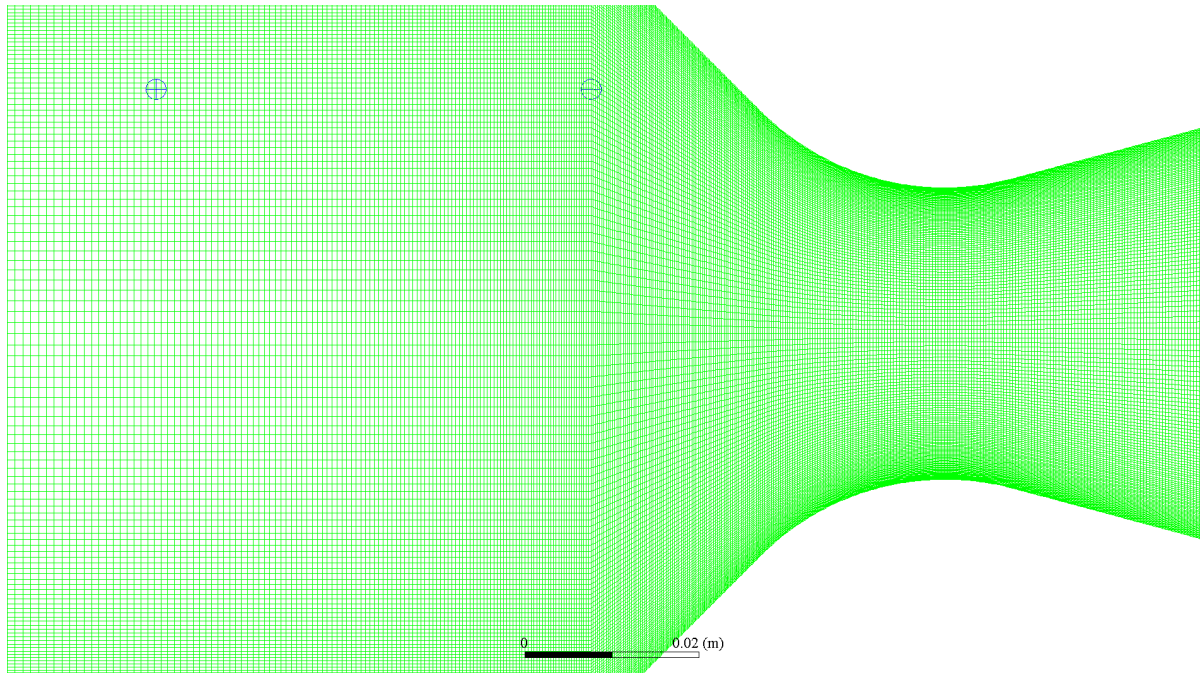


Figura 19 – Detalhe da malha na tubeira.

As Figuras 17, 18 e 19 expõe o detalhamento da malha nas principais zonas de interesse do motor. Nota-se que a malha é mais refinada na superfície de injeção, nas paredes da câmara de combustão, na área entre o propelente e a câmara e nas paredes e garganta da tubeira.

4.1.3 Condições de contorno

Foi considerada uma condição anti-deslizamento para a velocidade nas paredes da câmara de combustão. Nas superfícies de injeção, o gás é injetado do grão utilizando uma condição de *mass flow inlet* com taxa de massa do fluxo igual a 4.69 kg/s e temperatura e pressão das Tabelas 2 e 3. Na saída da tubeira é aplicada a condição de contorno *pressure outlet* com pressão atmosférica.

4.2 Injeção de partículas

Devido ao fenômeno de aglomeração das partículas, deve-se considerar que as gotículas de alumínio deixando a superfície do propelente não terão as mesmas dimensões, uma vez que os aglomerados são formados distintamente.

Galfetti et al. (2007) realizou um estudo coletando produtos de combustão condensados na zona de fase gasosa acima da superfície de queima para diferentes formulações de propelente. Foi notado que, diferentemente do caso de micropartículas no qual 2/3 do

total de alumínio são partículas não aglomeradas e apenas 1/3 são partículas aglomeradas, com o uso de nano alumínio praticamente todas as partículas dos produtos de combustão são aglomerados e esse fenômeno ocorre em uma escala muito maior, com o diâmetro dos aglomerados sendo em média 44 vezes maior do que o diâmetro original das partículas no pó de alumínio utilizado.

A distribuição de [Galfetti et al. \(2007\)](#) foi escolhida como referência para a distribuição de diâmetros das partículas injetadas na simulação deste trabalho, uma vez que nos estudos realizados pra obtenção desta distribuição concordam com o comportamento de aglomeração observado no referencial teórico realizado.

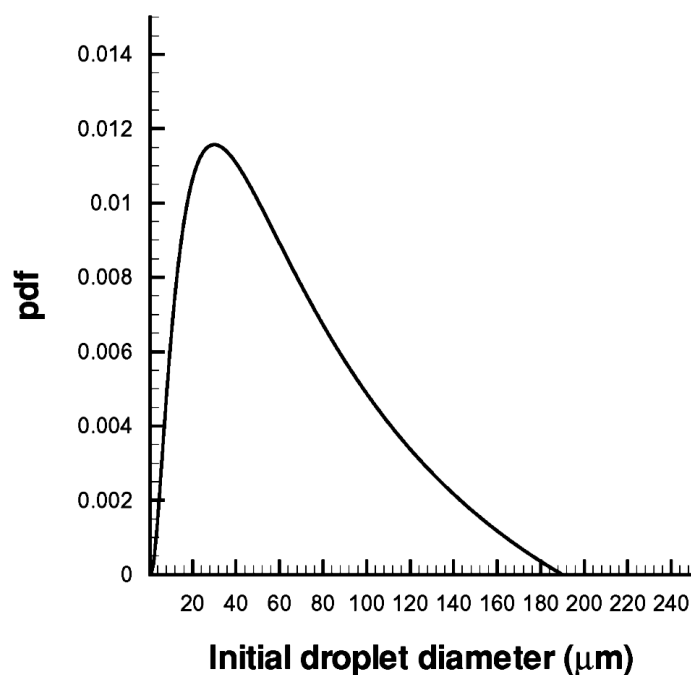


Figura 20 – Distribuição de diâmetros das partículas de micro alumínio. ([NAJJAR et al., 2006](#))

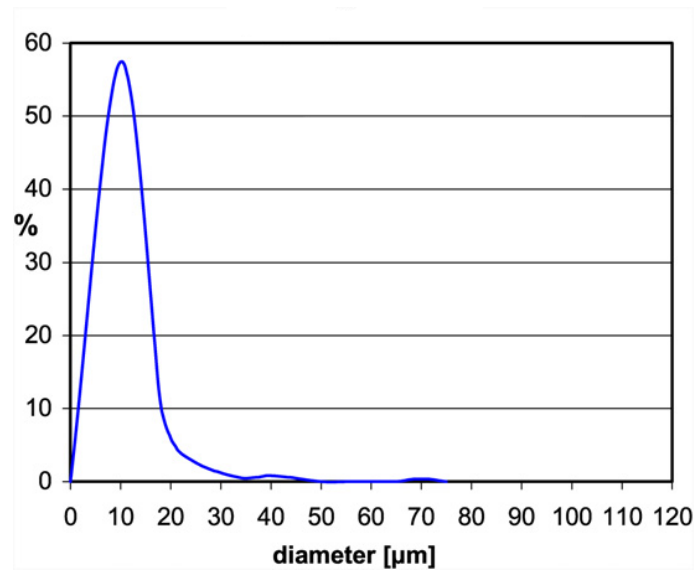


Figura 21 – Distribuição de diâmetros dos aglomerados de nano alumínio. Adaptado de (GALFETTI et al., 2007)

A Figura 20 apresenta a função densidade de probabilidade (PDF) utilizada como distribuição dos diâmetros por Najjar et al. (2006), enquanto a Figura 21 apresenta uma distribuição obtida a partir de dados experimentais de coleta de produtos da combustão, com o gráfico apresentando a porcentagem do número de partículas por diâmetro.

Observando estas distribuições, percebe-se que, no caso de partículas com um diâmetro inicial micrométrico, existe uma faixa maior de diâmetros diferentes e os tamanhos são bem distribuídos nessa faixa. Enquanto no caso de partículas com diâmetro inicial nanométrico, os valores estão concentrados em uma faixa menor, próximos ao valor médio.

Para a aplicação na simulação, a distribuição dos diâmetros de injeção é aproximada por uma distribuição Rosin-Rammler, a qual é baseada na consideração de que existe uma relação exponencial entre o diâmetro d de uma partícula e fração de massa de partículas com diâmetro superior a d , Y_d . (ANSYS, 2018)

$$Y_d = e^{-(d/\bar{d})^n} \quad (4.1)$$

Para definir os parâmetros \bar{d} e n , é feito um ajuste de curvas entre uma Função Distribuição Acumulada Complementar (CCDF) obtida da distribuição da referência e a distribuição Rosin-Rammler. A CCDF é obtida integrando a curva da referência e subtraindo de 1. A comparação entre as curvas é ilustrada na figura a seguir.

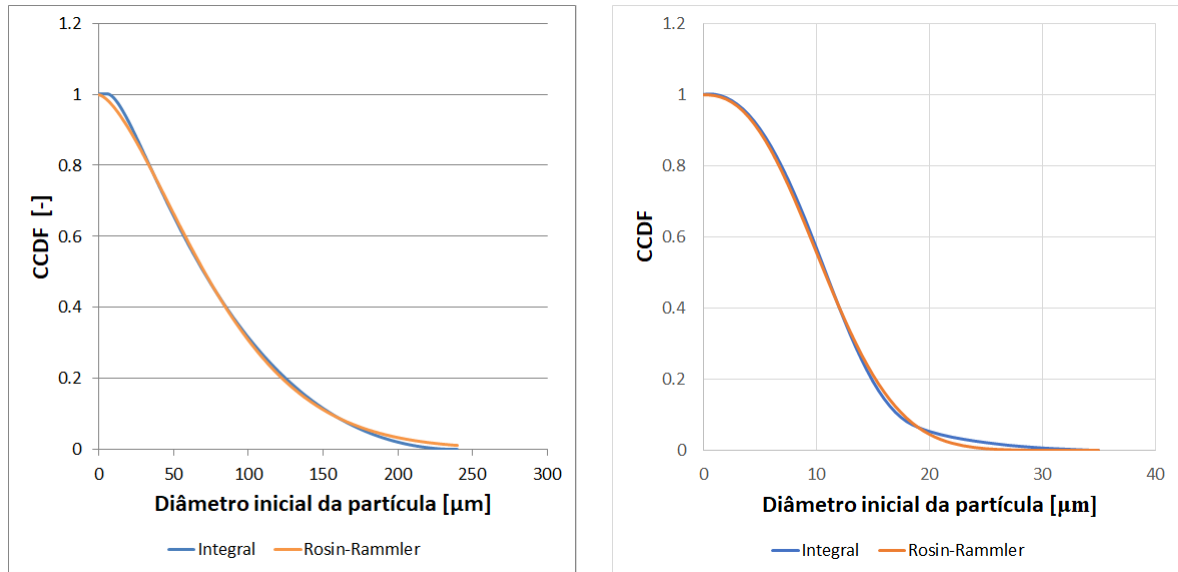


Figura 22 – Ajuste de curvas da distribuição de diâmetros das partículas de μAl e nAl , respectivamente.

Com esse método, são definidos os parâmetros que devem ser inseridos na simulação. Os valores adotados dos parâmetros neste trabalho são dados na Tabela 4.

Tabela 4 – Parâmetros adotados para as distribuições de Rosin-Rammler.

	μAl	nAl
d_{min} [μm]	5	0.15
d_{max} [μm]	240	35
\bar{d} [μm]	90	12.5
n	1.53	2.4

4.3 Implementação do modelo numérico no software

A combustão distribuída é simulada sob a consideração de que existem diferentes fases durante o processo de combustão. Na simulação deste estudo são consideradas três partes em duas fases: mistura gasosa, partículas de alumínio e fumaça de óxido, a qual é tratada como gás neste trabalho.

No ANSYS Fluent é possível rastrear as partículas lagrangianas, fase discreta, com o Discrete Phase Model (DPM), o qual permite computar a trajetória destas partículas, bem como a transferência de massa e energia delas ou para elas. (ANSYS, 2018)

UDFs são códigos em C/C++ que usam macros para interagir com o solucionador do programa, customizando a solução. Estas macros são funções pré definidas do ANSYS contidas em um arquivo de código base.

“Espontaneamente” – sem necessidade de customização por UDF – o Fluent soluciona a fase contínua (mistura gasosa) utilizando as equações de Navier-Stokes, bem como a evolução lagrangiana da posição, da velocidade e da temperatura das partículas de alumínio, e as fontes de massa e momento das partículas. Neste estudo, a fumaça foi considerada uma fase gasosa e sua evolução também é calculada pelo Fluent naturalmente. Portanto as partes que devem ser inclusas na solução por meio de UDFs são:

- Lei de evaporação das partículas de alumínio.
- Fonte de energia das partículas de alumínio.
- Adaptação da lei de arrasto conforme a Equação 2.15.
- Modelo de breakup de partículas.

4.3.1 Lei de evaporação

A lei de evaporação da partícula é customizada com a macro `DEFINE_DPM_LAW` e deve considerar a natureza composta da partícula, na qual está presente alumínio e óxido e cada parte evolui de modo diferente.

No código do modelo para μAl , a taxa de queima é calculada utilizando a Equação 2.18, enquanto no código do modelo para $n\text{Al}$ utiliza-se a Equação 3.4. Para os dois casos, a evolução da massa de alumínio na partícula é calculada pela seguinte equação:

$$m_{Al} = m_{Al} - \dot{m}_{bu}\Delta t \quad (4.2)$$

O modelo de Najjar et al. (2006) utiliza a Equação 2.21 para calcular a taxa de deposição de óxido na partícula e, conseqüentemente, a evolução de massa de óxido na partícula. Contudo, percebeu-se que o processo de deposição de óxido pode ser tratado de modo diferente, utilizando coeficientes para definir o quanto de óxido é depositado na partícula e o quanto é emitido para a fase gasosa. No caso de micro alumínio os coeficientes utilizados são: $\eta_1 = 0.57$ e $\eta_2 = 0.43$ os quais representam, respectivamente, a fração de óxido que é depositado na partícula e a fração que é emitido para o gás. Como no caso de $n\text{Al}$ não ocorre a deposição, os coeficientes utilizados são $\eta_1 = 0$ e $\eta_2 = 1$.

Com isso, a evolução da massa de óxido é dada pela equação:

$$m_{Al_2O_3} = m_{Al_2O_3} + \eta_1 \dot{m}_{bu}\Delta t \quad (4.3)$$

Com isso, a massa total da partícula é calculada pela soma da massa de alumínio e a massa de óxido. As evoluções do diâmetro, da densidade e da fração de massa de alumínio das partículas são calculadas com as Equações 2.25, 2.24 e 2.20.

No código, a queima da partícula é considerada encerrada quando a massa de óxido na partícula compõe 95% da massa total, a qual é uma condição proposta por Beckstead (2004).

4.3.2 Fonte de energia

A macro *DEFINE_DPM_SOURCE* é utilizada para calcular a fonte de energia das partículas de alumínio que é acoplada na equação de energia de Navier-Stokes. É implementada a Equação 2.30 e os valores de calores de reação da Tabela 1.

4.3.3 Adaptação do arrasto

A partir da Equação 2.15, é definida uma lei de arrasto utilizando a macro *DEFINE_DPM_DRAG*.

4.3.4 Definição de escalares e modelo de breakup

Com a macro *DEFINE_DPM_SCALAR_UPDATE* são definidos e atualizados escalares impostos pelo usuário para armazenar valores desejados como número de Weber, fração de alumínio em relação a massa total da partícula, indicadores do código, entre outros. O fenômeno de breakup de partículas é aplicado por esta UDF, na qual o número de Weber é calculado, e, quando superior a 12, a partícula rastreada é dividida em 27 partículas, às quais são atribuídos valores de diâmetro e massa equivalentes e são a partir daí tratadas como partículas individuais.

5 Resultados e Análise

5.1 Análise inicial

Como base, inicialmente foi feita uma análise da vida de uma partícula inserindo as equações para tempo de queima, taxa de queima e evolução da massa, do diâmetro e da composição das partículas em uma planilha no Microsoft Excel.

5.1.1 Tempo de queima

Foi calculado o tempo de queima para diâmetros entre 1 nm e 1000 nm utilizando a lei $D^{0.3}$ (Equação 1.4) e para diâmetros entre 1 μm e 1000 μm utilizando a lei $D^{1.9}$ (Equação 2.17). Os intervalos utilizados foram 1, 10 e 100 para as faixas de 1-10, 10-100 e 100-1000, respectivamente, porque ao observar o tempo de queima com um mesmo intervalo na faixa de 1-1000, a evolução do tempo de queima entre 1-100 era quase imperceptível no gráfico.

Foram obtidos os seguintes gráficos:

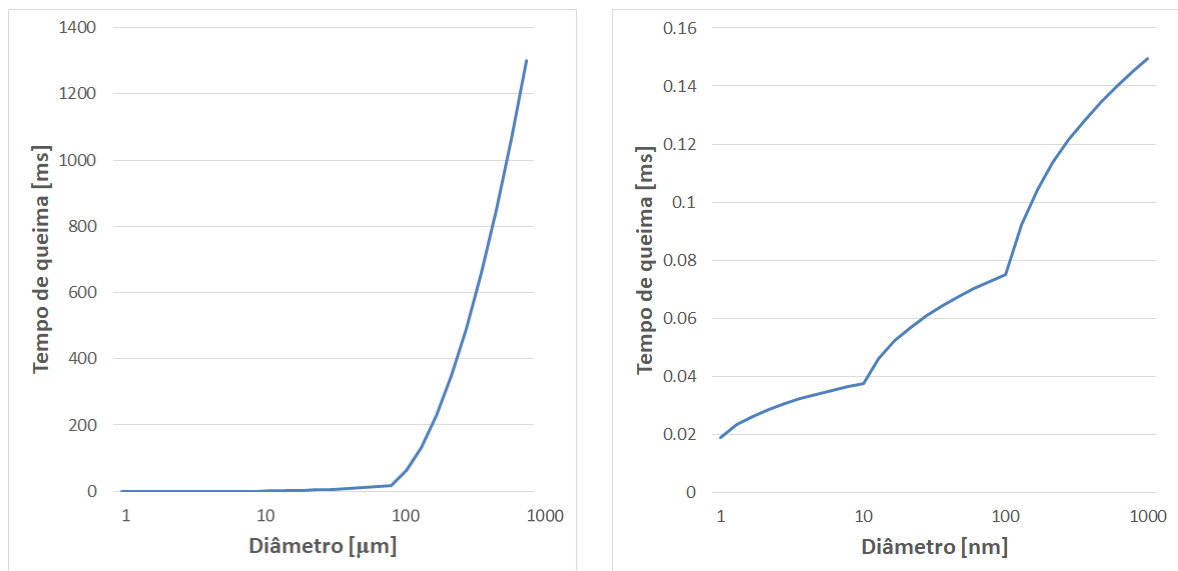


Figura 23 – Tempo de queima das leis $D^{1.9}$ e $D^{0.3}$, respectivamente.

Percebe-se que tempo de queima aumenta consideravelmente com a elevação do diâmetro na lei $D^{1.9}$ utilizada para micro partículas, enquanto o tempo de queima da lei $D^{0.3}$, para nano partículas, aumenta a uma taxa muito menor. Isso é esperado considerando a diferença nos expoentes.

5.1.2 Evolução de massa e diâmetro da partícula

Utilizou-se as Equações 2.18, 3.4, 4.3, 2.25, 2.24 e 2.20 para estudar a vida de uma partícula com um determinado diâmetro inicial. Considerando dois casos de diâmetro, 100 nm e 100 μm , e definindo como ponto de fim da evaporação quando a fração de massa de alumínio em relação à massa total é 5%, obteve-se as seguintes evoluções de massa e diâmetro da partícula com o tempo:

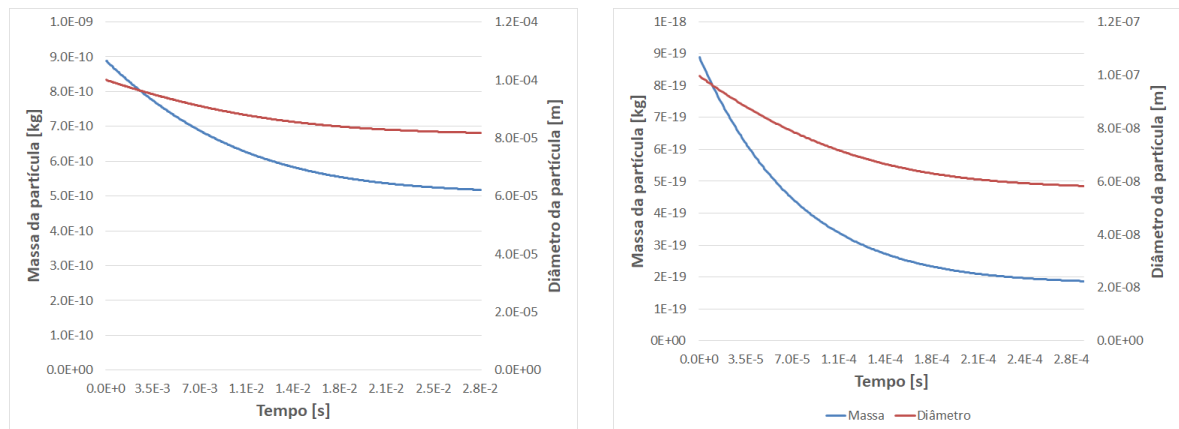


Figura 24 – Evolução de massa e diâmetro de partículas de μAl e nAl , respectivamente.

Na queima de nAl a massa e o diâmetro diminuem mais, considerando a diferença de escala. Isso ocorre, principalmente, porque não há deposição de óxido como no caso de μAl .

5.2 Simulação com μAl

Os resultados da simulação realizada com o modelo e a injeção de nano alumínio são comparados aos da análise realizada por Najjar et al. (2006). Empregando mapas de cores similares aos utilizados por eles, e as mesmas faixas de valores limites, de modo a facilitar a comparação.

5.2.1 Vorticidade

A Figura 25 apresenta os contornos de vorticidade, obtidos por volta do mesmo tempo, da simulação realizada por Najjar et al. (2006) e da realizada neste estudo, respectivamente, com valores limites entre -5×10^4 e 5×10^4 e unidades de $1/\text{s}$. Nota-se que estrutura do campo de escoamento é, no geral, bem similar. Na figura inferior são percebidos traços de vorticidade na tubeira que apontam um fluxo não uniforme adentrando-a. A diferença nas cores abaixo da linha central do motor é devido a valores invertidos de vorticidade causador porque Najjar et al. (2006) realizaram uma geometria espelhada no eixo central, enquanto neste estudo foi utilizada uma geometria bidimensional completa.

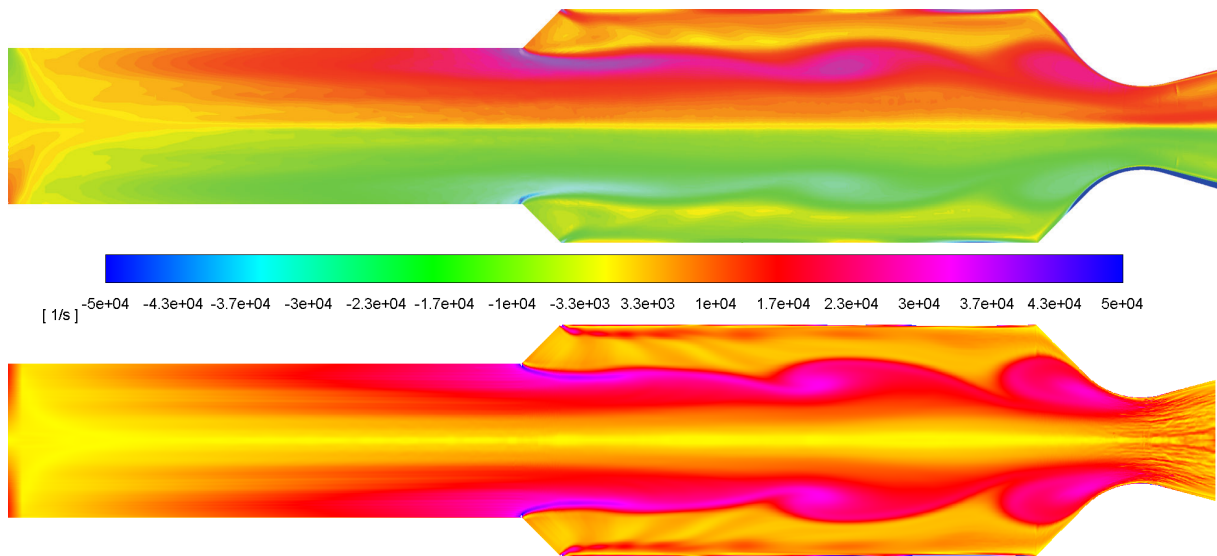


Figura 25 – Contornos de vorticidade da simulação de Najjar et al. (2006) e do caso μAl deste trabalho.

5.2.2 Temperatura

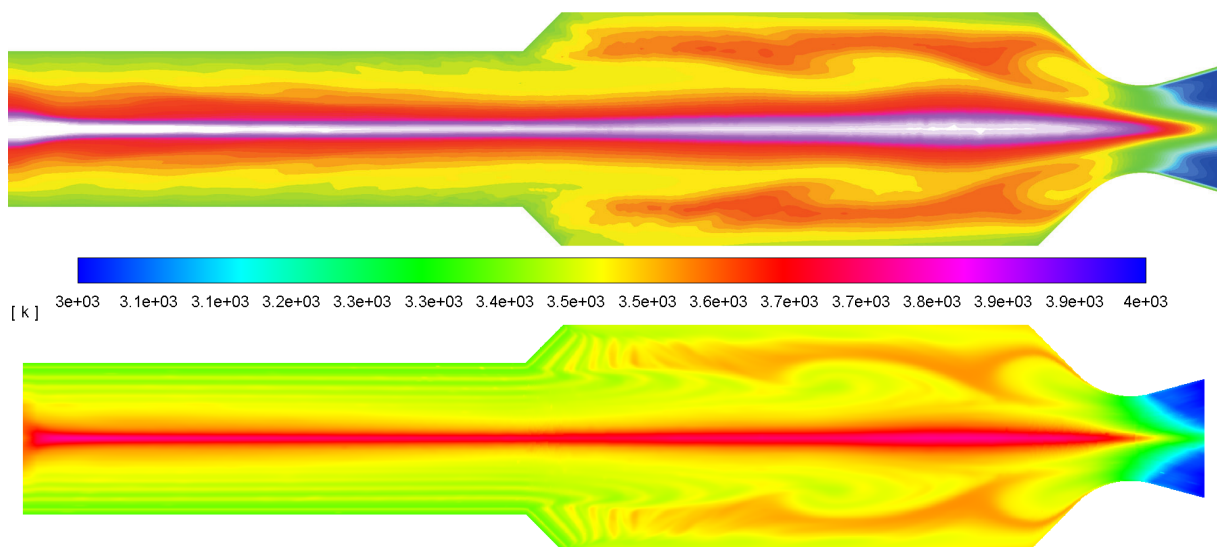


Figura 26 – Contornos de temperatura da simulação de Najjar et al. (2006) e do caso μAl deste trabalho.

Os contornos de temperatura expostos na Figura 26 são semelhantes no geral, com pequenas diferenças estrutura próximo ao grão de propelente, o que é provavelmente uma resultante da diferença em algum parâmetro utilizado na simulação. O modelo de injeção pode ser futuramente aprimorado, por meio de UDF, para suprimir esse fenômeno, entretanto isto não foi trabalhado neste estudo, uma vez que ele não parece alterar os

valores absolutos e os resultados continuam similares no geral. A diferença de coloração por volta da linha de central é devido à utilização de um esquema de cores diferentes. Foram delimitados valores entre 3000K e 4000 K.

5.2.3 Diâmetro das partículas

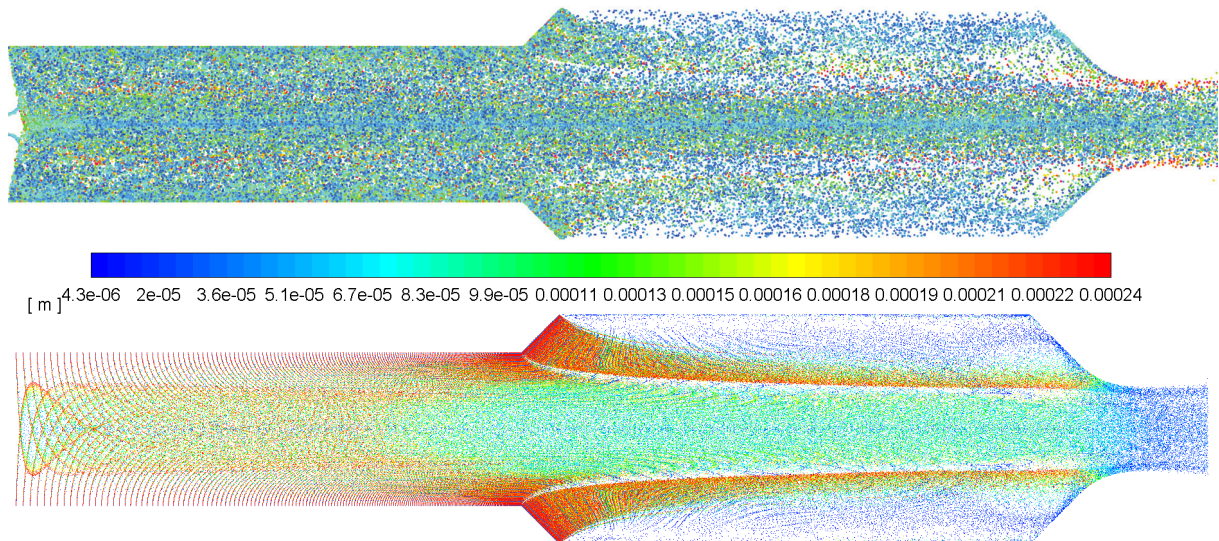


Figura 27 – Diâmetro das partículas de alumínio da simulação de [Najjar et al. \(2006\)](#) e do caso μAl deste trabalho.

A Figura 27 expõe a distribuição de partículas na câmara de combustão, colorida por diâmetro. A diferença visual é causada pela distinção na quantidade de partículas computacionais consideradas nas duas simulações. Contudo, é possível observar que a estrutura do campo de escoamento é parecida, com áreas de concentração e espaçamento em locais semelhantes nas duas imagens.

5.3 Simulação com nAl

Os resultados da simulação utilizando modelo e injeção de nano alumínio são comparados aos da simulação com micro alumínio. Os limites de valores e os mapas de cores foram ajustados para facilitar a comparação entre os dois casos, conseqüentemente, alguns destes serão diferentes dos resultados da seção anterior, apesar de serem da mesma simulação para μAl .

5.3.1 Temperatura

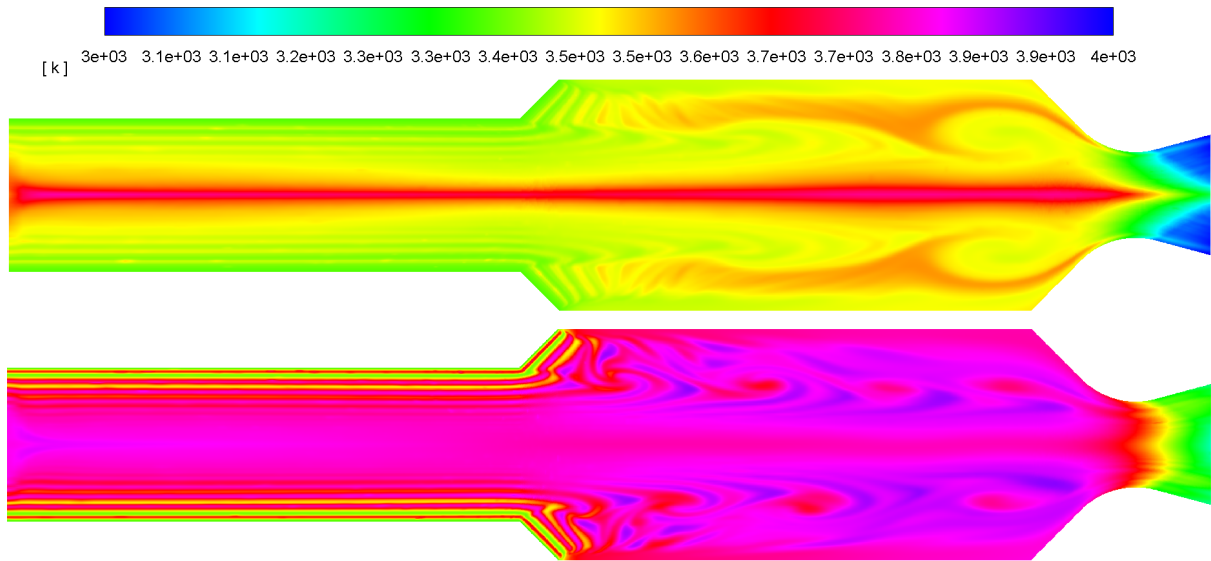


Figura 28 – Contornos de temperatura das simulações de μAl e nAl , respectivamente.

Os contornos de temperatura para as duas simulações realizadas neste trabalho são comparados na Figura , a qual utiliza o mesmo mapa de cores com os mesmos limites de 3000 K a 4000 K. É imediatamente reparado que a temperatura em toda a câmara é superior na simulação com nano alumínio. Além disso, percebe-se que ocorre uma queima intensa próxima à superfície do propelente, o que condiz com a teoria estudada.

5.3.2 Vorticidade

Os contornos de vorticidade exibidos na Figura 29 estão na faixa entre 0 e 50000 1/s. A comparação entre os resultados das duas simulações mostra que os valores de magnitude de vorticidade são similares em ambos casos. Contudo, os vórtices aparentam serem formados mais próximos ao início da câmara.

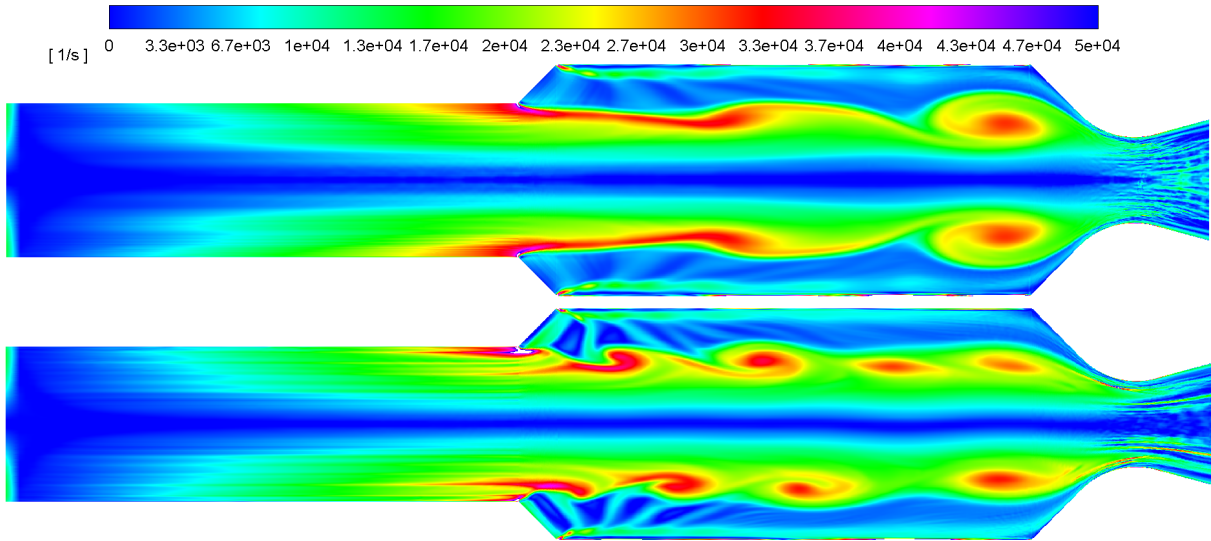


Figura 29 – Contornos de vorticidade das simulações de μAl e nAl , respectivamente.

5.3.3 Concentração de fumaça

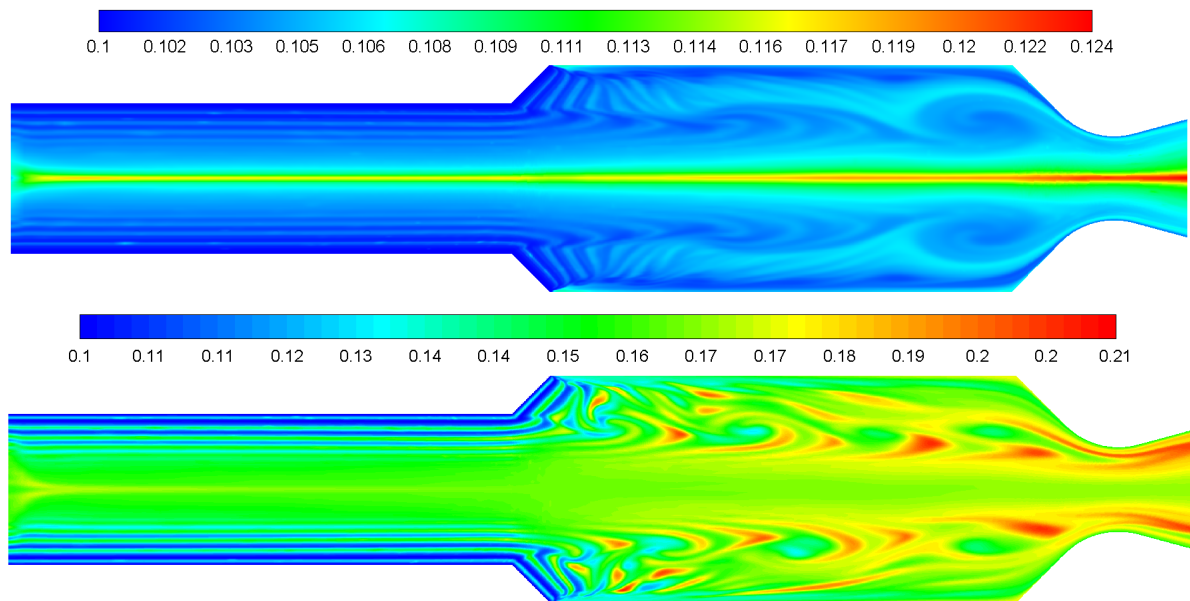


Figura 30 – Fração de massa de fumaça das simulações de μAl e nAl , respectivamente.

A Figura 30 expõe uma distinção notável na quantidade e localização de fumaça entre os dois casos simulados. Na simulação com micro alumínio a concentração de fumaça é maior por volta da linha central da câmara. Enquanto para a simulação com nano alumínio a fração de massa de fumaça é maior por toda a câmara após a área em volta

da superfície de queima, e as maiores concentrações são observadas em volta dos vórtices e na tubeira.

5.3.4 Diâmetro das partículas

As distribuições das partículas, coloridas por diâmetro, para as simulações dos dois casos estudados neste trabalho são apresentadas na Figura 31. Nota-se uma estrutura de distribuição distinta entre os casos. Na simulação de nAl, as partículas são carregadas pelos vórtices, o que provavelmente causa a concentração elevada de fumaça em volta destes vórtices. Em geral, o valor do diâmetro é mais uniforme no caso com nAl, sem muito contraste nas cores, o que é uma consequência da distribuição de diâmetros na injeção (Figura 21).

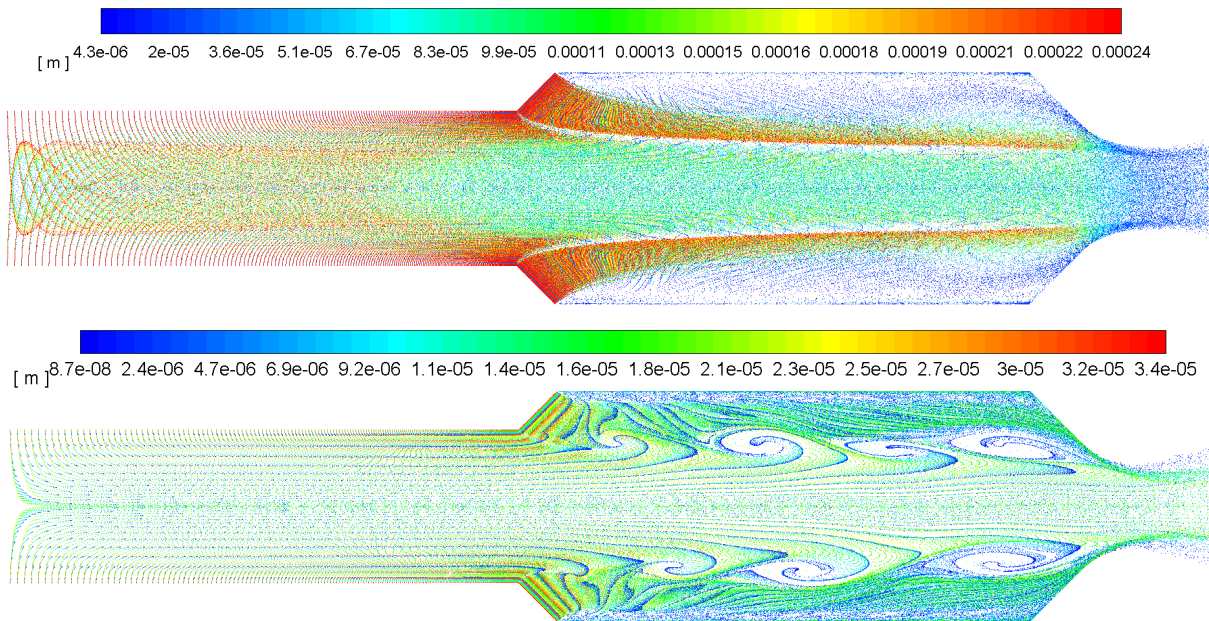


Figura 31 – Diâmetro das partículas de alumínio das simulações de μAl e nAl, respectivamente.

5.3.5 Número de Weber

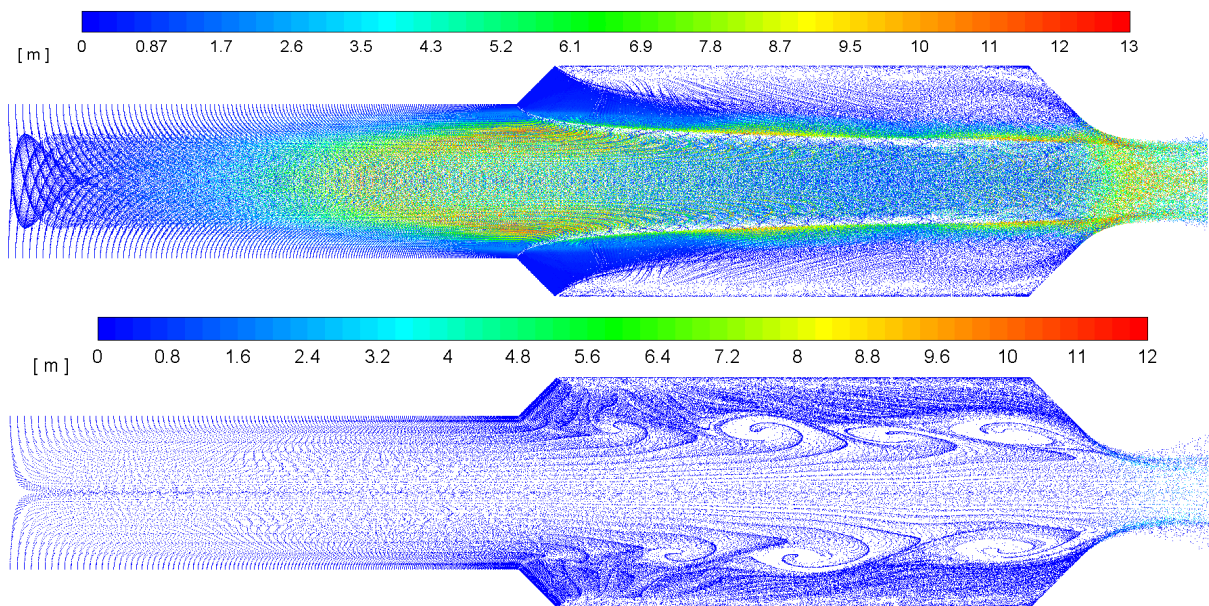


Figura 32 – Número de Weber das partículas de alumínio das simulações de μAl e nAl , respectivamente.

A Figura 32 apresenta a distribuição das partículas colorida por número de Weber, o qual governa o fenômeno de *breakup* das partículas no modelo utilizado para as simulações. Os resultados mostram que o fenômeno ocorreu apenas no caso com micro alumínio, o qual possui partículas com número de Weber igual ou superior a 12. Como o número de Weber é diretamente proporcional ao diâmetro da partícula, era esperado que este teria valores menores com a diminuição da escala das partículas.

5.4 Monitores

Foram posicionados 5 monitores, 1 na “cabeça” do motor (monitor 0) e os outros 4 (monitores 1, 2, 3 e 4) em pontos da câmara de combustão, com o propósito de observar os principais parâmetros do escoamento com o avanço do tempo. Os monitores foram posicionados conforme o seguinte esquemático:

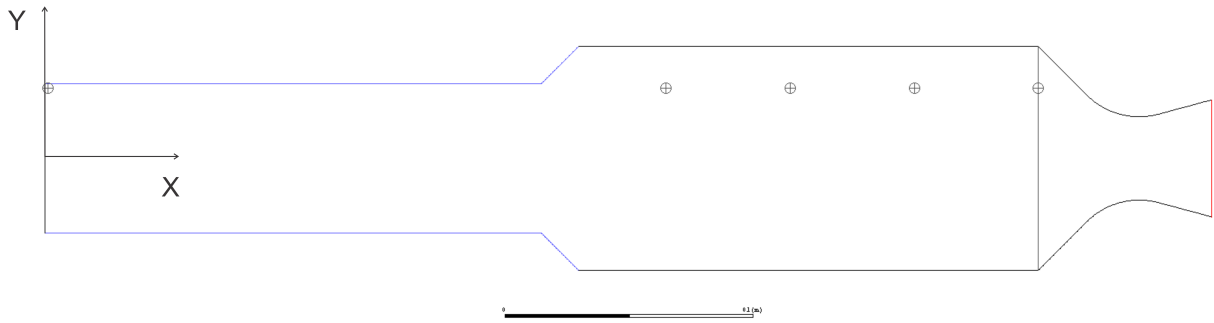


Figura 33 – Posição dos pontos de monitoramento na geometria.

Em que as coordenadas da posição de cada monitor são:

Tabela 5 – Coordenadas dos monitores na geometria.

	x (mm)	y (mm)
Monitor 0	1	28
Monitor 1	200	28
Monitor 2	300	28
Monitor 3	350	28
Monitor 4	400	28

Por meio destes monitores obtém-se a pressão nos pontos monitorados com o decorrer do tempo.

5.4.1 Monitor 0

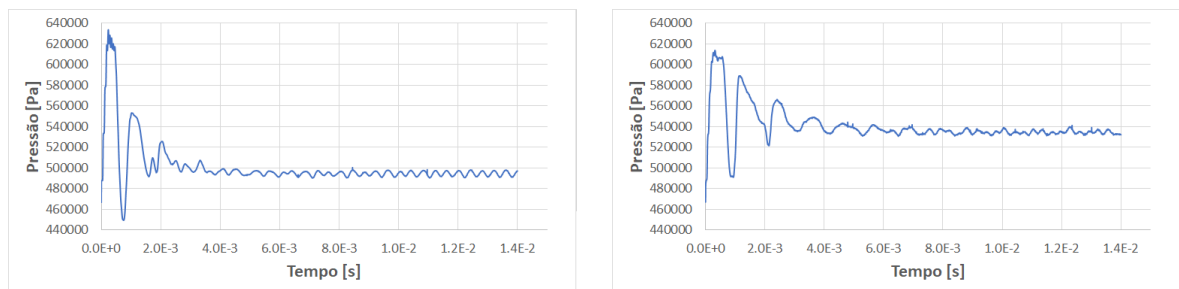


Figura 34 – Oscilação da pressão no monitor 0 das simulações de μAl e $n\text{Al}$, respectivamente.

Na posição do monitor 0, as oscilações de pressão são menores e, comparando ambos os casos, as oscilações são bem similares para os dois, sendo um pouco mais uniforme no caso de micro alumínio.

5.4.2 Monitor 1

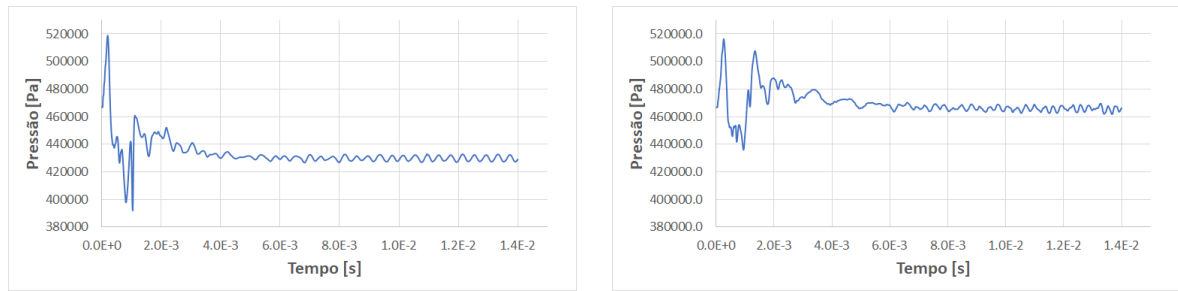


Figura 35 – Oscilação da pressão no monitor 1 das simulações de μAl e $n\text{Al}$, respectivamente.

As oscilações de pressão são similares entre os monitores 0 e 1, com os valores gerais de pressão diminuindo.

5.4.3 Monitor 2

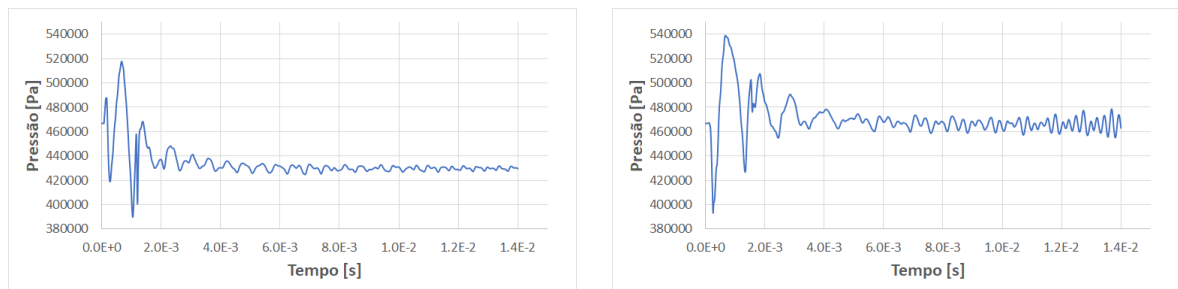


Figura 36 – Oscilação da pressão no monitor 2 das simulações de μAl e $n\text{Al}$, respectivamente.

No local do monitor 2, as oscilações são similares às dos monitores 0 e 1 para o caso de μAl , mas começam a aumentar consideravelmente para o caso de $n\text{Al}$, o aumento é maior por volta do tempo a partir de 12 ms.

5.4.4 Monitor 3

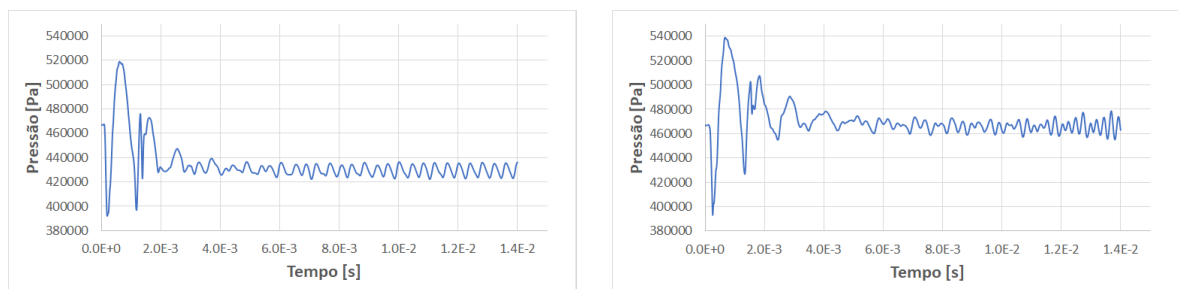


Figura 37 – Oscilação da pressão no monitor 3 das simulações de μAl e $n\text{Al}$, respectivamente.

No monitor 3, as oscilações aumentam para o caso de μAl , mas mantêm um comportamento similar ao do monitor 2 para o caso de nAl.

5.4.5 Monitor 4

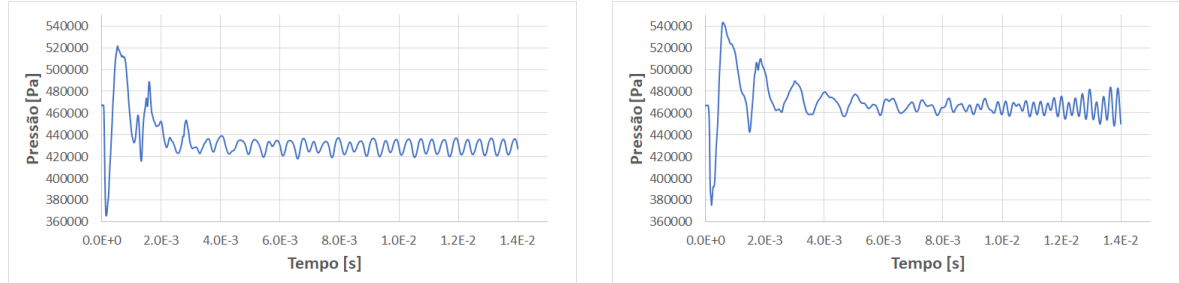


Figura 38 – Oscilação da pressão no monitor 4 das simulações de μAl e nAl, respectivamente.

Enfim, no monitor 4 as oscilações aumentam pouco para o caso de μAl , mas se elevam consideravelmente para o caso de nAl.

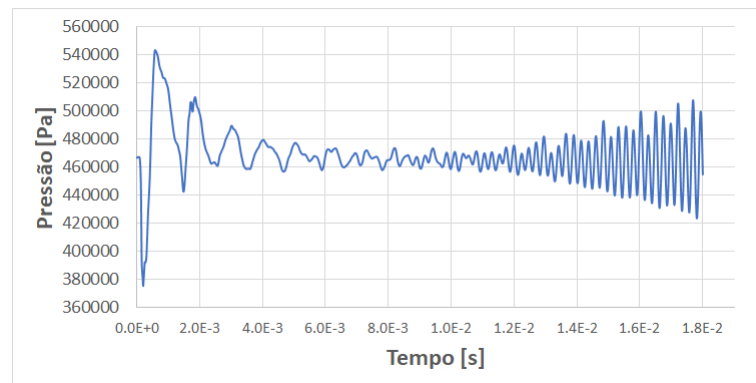


Figura 39 – Oscilação da pressão no monitor 4 da simulação de nAl em $t = 18$ ms.

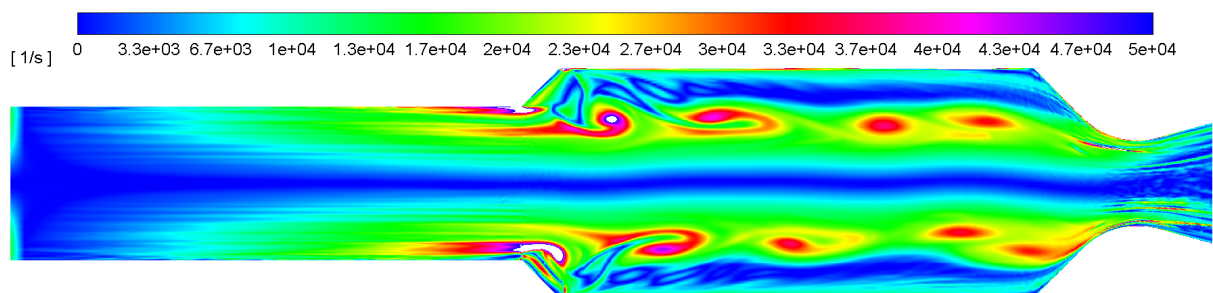


Figura 40 – Contorno de vorticidade da simulação de nAl em $t = 18$ ms.

A Figura 39 mostra que simulando por mais passos de tempo, percebe-se que estas oscilações estão aumentando ainda mais. Essas oscilações aparentam ocorrer devido

a interação de vórtices, ilustrada na Figura 40, próximo ao ponto em que se encontra o monitor 4. Para um melhor entendimento desse fenômeno, futuramente a simulação deve ser feita por um período maior de tempo.

Considerações finais

Com a expansão do campo de estudo de propelente com nano alumínio e as vantagens observadas na sua utilização, é relevante estudar as possibilidades em análise numérica de motores utilizando alumínio em nano escala. Este trabalho apresentou uma proposta de modelo numérico para a simulação da combustão distribuída de um motor de foguete sólido com propelente contendo nAl.

Foram explorados dois casos: combustão de micro alumínio e combustão de nano alumínio. Para cada caso foram estudados os processos físicos e mecânicas que o governam. Em seguida foi definido um modelo numérico descrevendo esses processos para o caso de nano alumínio, com base em um modelo existente para micro alumínio. Enfim, foram realizadas simulações dos casos e comparados os resultados.

Os resultados obtidos na simulação do caso de micro alumínio foram comparados com os da referência e mostraram, no geral, uma forte semelhança, o que valida a utilização dos parâmetros alterados entre a metodologia da referência e a da simulação realizada. Comparando os resultados da simulação do caso de nAl com os da de μ Al, são observados diversos pontos de distinção entre os dois casos, a maioria são pontos com comportamento justificado pela teoria e alguns pontos deverão ser investigados mais profundamente.

Com este estudo, pode-se classificar as partículas em três categorias durante a evaporação:

1. Partículas com diâmetro até $30 \mu\text{m}$ que foram injetadas com um diâmetro até $30 \mu\text{m}$ e, conseqüentemente, devem seguir o modelo para nano alumínio.
2. Partículas com diâmetro superior a $30 \mu\text{m}$ que foram injetadas com um diâmetro superior a $30 \mu\text{m}$ e, portanto, devem seguir o modelo para micro alumínio.
3. Partículas com diâmetro até $30 \mu\text{m}$ que foram injetadas com um diâmetro superior a $30 \mu\text{m}$ que, como possuem estrutura com ressalto de óxido, devem seguir o modelo para micro alumínio.

A partir desta definição, o próximo passo no trabalho é a concepção de um modelo unificado que possa ser utilizado para distribuições de injeção que possua as duas classes de diâmetros.

Outro aprimoramento que pode ser feito é a adição de uma seção no código da UDF que transforme as partículas consideradas consumidas em fumaça, transferindo a massa destas partículas para a fase de fumaça de óxido.

Foi considerada a mesma massa de injeção de alumínio em ambos os casos estudados, com o objetivo de observar as diferenças causadas apenas pela mudança de diâmetro. Um caso diferente a ser estudado pode ser o de comparar este estudo com um caso em que a massa de alumínio injetada é menor e a de fumaça é maior, considerando o efeito de queima mais próxima a superfície que ocorre com a combustão de nano alumínio.

Seria interessante também, especialmente com um modelo unificado, estudar o efeito de distribuições de injeções produzidas por diferentes fatores, como a distribuição de um propelente que contem mistura do pó de micro e nano partículas e de propelentes que utilizam partículas revestidas de nano alumínio, as quais diminuem os efeitos de aglomeração e portanto a distribuição de diâmetros seria mais espalhada e os diâmetros menores.

Enfim, o modelo concebido neste trabalho oferece um modo mais apurado de simular a combustão distribuída em motores sólidos e, com a continuação deste estudo, oferece o potencial de ser uma ferramenta relevante neste campo.

Referências

- AITA, K. et al. Modeling the combustion of nano-sized aluminum particles. In: *44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. Reno, Nevada: [s.n.], 2006. Citado 2 vezes nas páginas 6 e 30.
- ANSYS. *ANSYS Fluent User's Guide*. 19.0. ed. [S.l.], 2018. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 47.
- BABUK, V. et al. Condensed combustion products from burning of nanoaluminum-based propellants: Properties and formation mechanism. *Progress in Propulsion Physics*, v. 1, p. 3–16, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 6 e 24.
- BECKSTEAD, M. W. *A Summary of Aluminum Combustion*. [S.l.]: Defense Technical Information Center, 2004. (AD-a425 147). Citado 3 vezes nas páginas 29, 30 e 49.
- DELUCA, L. T.; GALFETTI, L. Burning of metallized composite solid rocket propellants: from micrometric to nanometric aluminum size. In: *3rd Asian Joint Conference on Propulsion and Power (AJCPP) 2008 - Book of Proceedings*. Gyeongju, Korea: [s.n.], 2008. Citado 4 vezes nas páginas 6, 19, 20 e 22.
- DELUCA, L. T. et al. Burning of nano-aluminized composite rocket propellants. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, v. 41, p. 680–692, 2005. Citado 6 vezes nas páginas 6, 21, 22, 23, 24 e 26.
- DOKHAN, A. et al. The effects of al particle size on the burning rate and residual oxide in aluminized propellants. In: *37th Joint Propulsion Conference and Exhibit*. Salt Lake City, UT, U.S.A: [s.n.], 2001. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 26.
- GALFETTI, L. et al. Nanoparticles for solid rocket propulsion. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 18, p. S1991–S2005, 2006. Citado na página 25.
- GALFETTI, L. et al. Pre and post-burning analysis of nano-aluminized solid rocket propellants. *Aerospace Science and Technology*, v. 11, p. 26–32, 2007. Citado 5 vezes nas páginas 7, 24, 44, 45 e 46.
- HUANG, Y. et al. Combustion of bimodal nano/micron-sized aluminum particle dust in air. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 31, p. 2001–2009, 2007. Citado na página 30.
- HUANG, Y. et al. Effect of particle size on combustion of aluminum particle dust in air. *Combustion and Flame*, v. 156, p. 5–13, 2009. Citado na página 30.
- KADOCSA, A.; TATSCHL, R.; KRISTOF, G. Analysis of spray evolution in internal combustion engines using numerical simulation. *Journal of Computational and Applied Mechanics*, v. 8-1, p. 85–100, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 6 e 40.
- LENGELLÉ, G.; DUTERQUE, J. M.; TRUBERT, J. F. Combustion of solid propellants. In: *Internal Aerodynamics of Solid Rocket Motor, Special Course at the Von Karman Institute for Fluid Dynamics*. Rhode-Saint-Genèse, Belgium: [s.n.], 2002. Citado 2 vezes nas páginas 6 e 21.

- LUPOGLAZOFF, N.; VUILLOT, F. Numerical simulation of vortex shedding phenomenon in 2d test case solid rocket motors. *AIAA Paper*, v. 92-0776, 1992. Citado na página 42.
- NAJJAR, F. M. et al. Simulations of solid-propellant rockets: Effects of aluminum droplet size distribution. *Journal of Spacecraft and Rockets*, v. 43, p. 1258–1270, 2006. Citado 15 vezes nas páginas 6, 7, 17, 31, 33, 35, 38, 41, 42, 45, 46, 48, 51, 52 e 53.
- PURI, P. *Multi Scale Modeling of Ignition and Combustion of Micro and Nano Aluminum Particles*. Tese (Doutorado) — Pennsylvania State University, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 6 e 27.
- REINA, A. et al. Coating nano-sized aluminum to improve solid rocket propellant performance. In: *5th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS)*. [S.l.: s.n.], 2013. Citado 2 vezes nas páginas 6 e 25.
- SABNIS, J. S. Numerical simulation of distributed combustion in solid rocket motors with metalized propellant. *Journal of Propulsion and Power*, v. 19, p. 48–55, 2003. Citado na página 31.
- SUNDARAM, D. S.; PURI, P.; YANG, V. A general theory of ignition and combustion of nano- and micron-sized aluminum particles. *Combustion and Flame*, v. 169, p. 94–109, 2016. Citado na página 28.
- WIDENER, J. F.; BECKSTEAD, M. W. Aluminum combustion modeling in solid propellant combustion products. *AIAA Paper*, v. 98-3824, 1998. Citado na página 33.