



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

Modelagem e simulação numérica da combustão metano/oxigênio em um ignitor do tipo tocha

Autor: Carlos Henrique Silva Gomes
Orientador: Prof. PhD. Domenico Simone

Brasília, DF
2020



Carlos Henrique Silva Gomes

Modelagem e simulação numérica da combustão metano/oxigênio em um ignitor do tipo tocha

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. PhD. Domenico Simone

Brasília, DF

2020

Carlos Henrique Silva Gomes

Modelagem e simulação numérica da combustão metano/oxigênio em um ignitor do tipo tocha / Carlos Henrique Silva Gomes. – Brasília, DF, 2020-88 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. PhD. Domenico Simone

Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade de Brasília - UnB
Faculdade UnB Gama - FGA , 2020.

1. Simulação numérica. 2. Combustão. I. Prof. PhD. Domenico Simone. II. Universidade de Brasília. III. Faculdade UnB Gama. IV. Modelagem e simulação numérica da combustão metano/oxigênio em um ignitor do tipo tocha

CDU 02:141:005.6

Carlos Henrique Silva Gomes

Modelagem e simulação numérica da combustão metano/oxigênio em um ignitor do tipo tocha

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, 16 de junho de 2020:

Prof. PhD. Domenico Simone
Orientador

Prof. PhD. Olexiy Shynkarenko
Convidado 1

Prof. PhD. Paolo Gessini
Convidado 2

Brasília, DF
2020

Este trabalho é dedicado à minha família que são o que há de mais importante na minha vida.

Agradecimentos

Quero agradecer primeiramente à minha família, principalmente meus pais, que sempre me deram todo apoio e incentivo em tudo que faço e quero fazer na minha vida.

Agradeço os professores que contribuíram na minha formação acadêmica, em especial, o meu orientador que me guiou de forma espetacular e fez o melhor possível para me ensinar e me ajudar em todas as dificuldades encontradas neste trabalho.

Por último agradeço a todas as amizades que fiz ao longo do curso, sem a ajuda delas o caminho até aqui teria sido muito mais difícil.

Resumo

A propulsão híbrida vem ganhando cada vez mais notoriedade como uma alternativa em diversos projetos de aeroespacial, devido a suas vantagens de custo e complexidade diante de outros modelos propulsivos. Devido a isso, o Chemical Propulsion Laboratory, CPL, da Universidade de Brasília, vêm conduzindo pesquisas dentro dessa área e já vem aplicando essa tecnologia em projetos atuais, como a plataforma SARA, um satélite de reentrada atmosférica, que possui o objetivo de realizar experimentos em ambiente de microgravidade. O desenvolvimento de um motor desse tipo, com a função de iniciar a reentrada desta plataforma, trouxe consigo vários desafios e inovações, dentre eles, o desenvolvimento de um sistema de ignição que fosse viável e eficiente não só para esse projeto, mas também para outros motores do laboratório. O ignitor em questão é do tipo tocha e faz o uso de metano e oxigênio, como combustível e oxidante. No seu projeto, é de extrema importância a caracterização da sua chama para validar sua eficácia. Esse estudo será através de Computational Fluid Dynamics, CFD, uma ferramenta de extrema importância hoje na indústria, devido a sua facilidade e baixo custo em relação a experimentos reais. O trabalho a seguir, além de realizar um apanhado teórico acerca dessa combustão, realizará diversas simulações com intuito de comparar e validar mecanismos de reações, estudar o atraso de ignição e por fim, comparar o desempenho do ignitor com duas configurações de injetor.

Palavras-chaves: propulsão. atraso de ignição. chama. combustão. CFD.

Abstract

Hybrid propulsion is gaining more and more notoriety as an alternative in various aerospace projects, due to its cost and complexity advantages over other propulsive models. Because of this, the Chemical Propulsion Laboratory, CPL, from the University of Brasília, has been conducting research in this area and has already been applying this technology in current projects, such as the SARA platform, an atmospheric reentry satellite, which has the objective of carrying out experiments in a microgravity environment. The development of such an engine, with the function of initiating the re-entry of this platform, brought with it several challenges and innovations, among them, the development of an ignition system that was viable and efficient not only for this project, but also for others laboratory engines. The ignitor in question is of the torch type and uses methane and oxygen as fuel and oxidizer. In your project, it is extremely important to characterize your flame to validate its effectiveness. This study will be through Computational Fluid Dynamics, CFD, an extremely important tool in the industry today, due to its ease and low cost in relation to real experiments. The work to next, in addition to performing a theoretical overview of this combustion, it will carry out several simulations in order to compare and validate reaction mechanisms, study the ignition delay and finally, compare the ignitor performance with two injector configurations.

Key-words: propulsion. ignition delay. flame. combustion. CFD

Lista de ilustrações

Figura 1 – Modelo de ignição com câmara pré-misturada (SUTTON; BIBLARZ, 2017)	19
Figura 2 – Exemplo de reações de iniciação de cadeia, propagação de cadeia e encerramento de cadeia (KUO, 2005)	28
Figura 3 – – Diagrama de reação para combustão sob altas temperaturas de metano em um reator bem misturado a $T = 2200$ K e $P = 1$ atm para um tempo de residência de 0.1 s.(TURNS, 2000)	29
Figura 4 – Diagrama de reação para combustão baixa temperatura de metano em um reator bem misturado a $T = 1345$ K e $P = 1$ atm para um tempo de residência de 0.1 s.(TURNS, 2000)	30
Figura 5 – Diferentes estruturas de chamas, plotadas relacionando temperatura (T) e fração de mistura (z)(POINSOT; VEYNANTE, 2001)	37
Figura 6 – Primeira concepção do ignitor (FILHO, 2017)	38
Figura 7 – Estrutura atual do ignitor (FILHO, 2017)	39
Figura 8 – Visão compacta do ignitor tipo tocha.(FILHO, 2017)	39
Figura 9 – Esquema de injeção do combustível e oxidante no ignitor(JUNIOR, 2016)	39
Figura 10 – Componentes do ignitor (SOUZA; SHYNKARENKO,)	44
Figura 11 – Aspecto externo do ignitor	45
Figura 12 – Seção transversal do ignitor com injetor cilíndrico	45
Figura 13 – Seção transversal do ignitor com injetor cônico	45
Figura 14 – Volume do fluido a ser simulado	46
Figura 15 – Exemplo de malha estruturada (MALISKA, 2004)	47
Figura 16 – Exemplo de malha não-estruturada (MALISKA, 2004)	47
Figura 17 – Malha da geometria com injetor cilíndrico, elementos 50% maiores	48
Figura 18 – Malha da geometria com injetor cilíndrico, elementos 25% maiores	48
Figura 19 – Malha da geometria com injetor cilíndrico, elementos de tamanho padrão	49
Figura 20 – Malha da geometria com injetor cilíndrico, 25% menores	49
Figura 21 – Malha da geometria com injetor cônico, elementos 50% maiores	50
Figura 22 – Malha da geometria com injetor cônico, elementos 25% maiores	50
Figura 23 – Malha da geometria com injetor cônico, elementos de tamanho padrão	51
Figura 24 – Malha da geometria com injetor cônico, elementos 25% menores	51
Figura 25 – Condições de contorno no plano central do ignitor(SOUZA; SHYNKARENKO,).	58
Figura 26 – Variação da temperatura máxima em função da pressão e razão equivalente para mecanismo WD. Elaboração própria.	60

Figura 27 – Variação da temperatura máxima em função da pressão e razão equivalente para mecanismo JL. Elaboração própria.	61
Figura 28 – Variação da temperatura máxima em função da pressão e razão equivalente para mecanismo JLD. Elaboração própria.	61
Figura 29 – Variação da temperatura máxima em função da pressão e razão equivalente para mecanismo GRIMech. Elaboração própria.	62
Figura 30 – ADI para três mecanismos de reação com razão equivalente de 0.5. Elaboração Própria	63
Figura 31 – ADI para três mecanismos de reação com razão equivalente de 0.7. Elaboração Própria	63
Figura 32 – ADI para três mecanismos de reação com razão equivalente de 0.7, temperatura variando de 1700 a 2400. Elaboração Própria	64
Figura 33 – Atraso de ignição para o mecanismo WD, variando a razão equivalente de 0.5 a 1.1. Elaboração Própria	65
Figura 34 – Atraso de ignição para o mecanismo JL-D, variando a razão equivalente de 0.5 a 1.1. Elaboração Própria	65
Figura 35 – Atraso de ignição para o mecanismo JL-D, variando a razão equivalente de 0.5 a 1.1, temperatura entre 900 e 1400. Elaboração Própria	66
Figura 36 – Atraso de ignição para o mecanismo GRIMech, variando a razão equivalente de 0.5 a 1.1. Elaboração Própria	66
Figura 37 – Atraso de ignição para o mecanismo GRIMech, variando a razão equivalente de 0.5 a 1.1, temperatura entre 900 e 1400. Elaboração Própria	67
Figura 38 – Fração mássica do metano no ponto middle para as quatro malhas simuladas, injetor cilíndrico. Elaboração Própria	68
Figura 39 – Fração mássica do metano no ponto region para as quatro malhas simuladas, injetor cilíndrico. Elaboração Própria	68
Figura 40 – Fração mássica do metano no ponto middle para as quatro malhas simuladas, injetor cônico. Elaboração Própria	69
Figura 41 – Fração mássica do metano no ponto region para as quatro malhas simuladas, injetor cônico. Elaboração Própria	69
Figura 42 – Fração mássica do metano no plano central do ignitor, injetor cilíndrico.	70
Figura 43 – Fração mássica do metano no plano central, injetor cônico.	70
Figura 44 – Distribuição do metano em ambas as configurações.	71
Figura 45 – Iso - superfícies do metano em ambas as configurações, frações 0.05, 0.1 e 0.2	72
Figura 46 – Iso - superfícies do metano em ambas as configurações, frações 0.4, 0.6 e junção de baixas frações mássicas	73
Figura 47 – Pressão no plano central de ambos ignitores	74
Figura 48 – Temperatura da chama no plano central de ambos ignitores	75

Figura 49 – Iso - superfícies de 800, 1000, 1500 e 2500 K ambas as configurações	76
Figura 50 – Temperatura da chama em ambos ignitores	77
Figura 51 – Temperatura na parede externa do ignitor	78
Figura 52 – Distribuição do metano após combustão em ambos ignitores	79
Figura 53 – Distribuição do oxigênio após combustão em ambos ignitores	79
Figura 54 – Distribuição do CO_2 após combustão em ambos ignitores	80
Figura 55 – Distribuição do H_2O após combustão em ambos ignitores	81
Figura 56 – Distribuição do CO após combustão em ambos ignitores	81
Figura 57 – Distribuição do O após combustão em ambos ignitores	82
Figura 58 – Distribuição do H_2 após combustão em ambos ignitores	82
Figura 59 – Distribuição do OH após combustão em ambos ignitores	83
Figura 60 – Temperatura em ambos os injetores durante a queima	84

Lista de tabelas

Tabela 1 – Mecanismo de reação de Westbrook - Dryer(FRASSOLDATI et al., 2009)	31
Tabela 2 – Mecanismo de reação de Jones - Lindstedt (FRASSOLDATI et al., 2009)	31
Tabela 3 – Mecanismo de reação de Jones - Lindstedt com dissociação (FRASSOLDATI et al., 2009)	31
Tabela 4 – Resultados de dados experimentais do ignitor(JUNIOR, 2016)	40
Tabela 5 – Setup de simulação	42
Tabela 6 – Exemplo de setup de simulação no CHEMKIN	44
Tabela 7 – Número de elementos correspondentes a cada malha de injetor cilíndrico	49
Tabela 8 – Número de elementos correspondentes a cada malha de injetor cônico	52
Tabela 9 – Tempo por iteração para as malhas com injetor cilíndrico	67
Tabela 10 – Tempo por iteração para as malhas com injetor cônico	69

Lista de abreviaturas e siglas

CPL	Chemical Propulsion Laboratory
SARA	Satélite de Reentrada Atmosférica
CFD	Computational Fluid Dynamics
FGA	Faculdade do Gama
CEA	Chemical Equilibrium with Application
WD	Westbrook e Dryer
JL	Jones e Lindstedt
JL - D	Jones e Lindstedt com dissociação
ADI	Atraso de ignição

Lista de símbolos

ϕ	Razão equivalente
P	Pressão
V	Volume
T	Temperatura
n_i	Número de mols de cada espécie i
(C/O)	Razão entre combustível e oxigênio
$(C/O)_{st}$	Razão estequiométrica entre combustível e oxigênio
E	Energia armazenada do sistema
U	Energia interna
KE	Energia Cinética
PE	Energia Potencial
$\delta\hat{Q}$	Variação de calor
dE	Variação de Energia
$\delta\hat{W}$	Variação de trabalho
dU	Variação de Energia Interna
dV	Variação de Volume
H	Entalpia
dH	Variação de entalpia
S	Entropia
dS	Variação de entropia
S_T°	Entropia molar de uma espécie na pressão de 1 bar
$S_{T_o}^\circ$	Entropia molar de uma espécie em uma temperatura de referência
\bar{C}_p	Calor específico em pressão constante

T_o	Temperatura de referência
N	Número de mols total de um sistema
R_u	Constante universal dos gases
m	Massa
ν	Volume específico
ρ	Densidade
\bar{h}_i	Entalpia absoluta
$\bar{h}_{i,f}^o$	Entalpia de formação
$\Delta\bar{h}_{s,i}$	Variação de entalpia sensível
G	Energia livre de Gibbs
G^o	Energia de Gibbs de referência
Kp	Constante de equilíbrio
RR	Taxa de reação
k	Constante de taxa de reação específica
$C_{produto}$	Concentração de produtos
$C_{reagente}$	Concentração de reagentes
C_{M_i}	Concentração de cada espécie i
AT^b	Frequência de colisão
E_a	Energia de ativação
σ_{BC}	Raio de colisão de duas moléculas B e C
K	Constante de Boltzmann
μ	Massa reduzida das moléculas
\bar{P}	Fator estérico
CH_4	Metano
O_2	Oxigênio
CH_3	Metila

s Taxa estequiométrica de massa

D_k Coeficiente de difusividade

Sumário

1	INTRODUÇÃO	18
1.1	Objetivos Gerais	20
1.2	Objetivos Específicos	20
1.3	Metodologia	20
I	REVISÃO TEÓRICA	22
2	REVISÃO TEÓRICA	23
2.1	Razão Equivalente	23
2.2	Termodinâmica Química	23
2.2.1	Leis da termodinâmica	23
2.2.2	Equação do Estado	25
2.2.3	Entalpia absoluta e Entalpia de Formação	25
2.2.4	Lei de Hess	25
2.2.5	Função de Gibbs e constante de equilíbrio	25
2.3	Cinética Química	26
2.3.1	Taxa de Reação	27
2.3.2	Equação de Arrhenius	27
2.3.3	Reações em cadeia	28
2.3.4	Combustão metano/oxigênio	28
2.3.5	Mecanismos de reação CH_4/O_2	30
2.3.6	Atraso de Ignição	31
3	CHAMA DIFUSA	33
3.1	Estequiometria	33
3.2	Chama laminar difusa	34
3.3	Ferramentas de estudo	34
3.4	Fração de mistura	34
3.5	Estrutura da chama no espaço z	35
3.6	Decomposição do problema	36
4	IGNITOR TIPO TOCHA	38

II	SIMULAÇÕES	41
5	SIMULAÇÕES	42
5.1	NASA CEA	42
5.2	CHEMKIN	42
5.2.1	Reator homogêneo fechado	43
5.2.2	Setup de solução	43
5.3	Fluent	44
5.3.1	Geometria	44
5.3.2	Malha	46
5.3.3	Setup de solução	52
5.3.3.1	Simulações Frias	52
5.3.3.2	Simulações Quentes	56
5.3.3.3	Condições de contorno	58
III	RESULTADOS E DISCUSSÃO	59
6	SIMULAÇÕES E RESULTADOS	60
6.1	Simulações no CEA	60
6.2	Simulações no CHEMKIN	63
6.3	Simulações no Fluent	67
6.3.1	Simulações frias	67
6.3.2	Simulações quentes	74
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	85
	REFERÊNCIAS	87

1 Introdução

Propulsão em sentido amplo é o ato de mudar o movimento de um corpo. Mecanismos de propulsão fornecem uma força que move corpos que estão inicialmente em repouso, mudanças na velocidade ou supera as forças de retardamento quando um corpo é impulsionado através de um meio (SUTTON; BIBLARZ, 2017).

A propulsão de um foguete é um tipo de propulsão que consiste em gerar impulso através da ejeção de matéria armazenada, os propelentes. Um dos tipos dessa propulsão é a química, que consiste em gerar empuxo através da transformação da energia que provém da combustão dos propelentes, em energia cinética. Quanto a classificação de propulsores químicos, há 3, e se diz a respeito aos tipos de propelentes usados: propulsão líquida, se ambos estiverem em fase líquida, sólida, se oxidante e o combustível fizerem parte de um grão sólido, e a híbrida, em que um dos propelentes está em fase líquida e o outro na sólida.

Os sistemas híbridos vêm se tornado alvo de desenvolvimento e aplicação em diversos âmbitos espaciais devido as suas vantagens como: segurança durante a fabricação, armazenamento ou operação, sem qualquer possibilidade de explosão ou detonação, capacidade de parar e reiniciar a ignição, custo do sistema relativamente baixo; impulsos específicos mais elevados do que os motores de foguetes sólidos, baixa emissão de poluentes, entre outros. (FILIPI; KIM, 2010)(SUTTON; BIBLARZ, 2017)

Quando os propelentes não formam uma mistura hipergólica, isso é, uma mistura que entra em combustão espontaneamente, é necessário que haja um sistema de ignição externo que forneça a energia necessária para o começo da reação. Uma vez que a ignição começa, a chama se autosustenta(SUTTON; BIBLARZ, 2017). Há pelo menos 5 tipos de sistemas de ignição usados com sucesso.

A vela de ignição, que consiste em um mecanismo que gera uma centelha/faísca, a ignição por fios eletricamente aquecidos, que apesar de estar sendo cada vez mais usado, apresenta uma confiabilidade menor que o sistema com faísca, em propelentes líquidos. Outro sistema de ignição bastante consolidado é o ignitor pirotécnico, que faz o uso de propelentes sólidos em forma de grão que são eletricamente ignitados, queimando com uma chama dentro da câmara de combustão. Praticamente todos os foguetes sólidos usam esse sistema, porém o mesmo possui a desvantagem de não ser possível cancelar e reiniciar a ignição.

Outro dois métodos bastante utilizados são de ignição com fluido auxiliar e o com uso de uma câmara premixada. O primeiro, como o nome sugere, faz o uso de um líquido ou gás hipergólico, que, ao ser injetado na câmara de combustão, com o combustível e

oxidante, dando início a uma combustão espontânea. O segundo, método, que é o estudado neste trabalho, consiste em uma pequena câmara de combustão construída perto da principal, conectados através de um orifício. Uma pequena quantidade de oxidante e combustível são injetados e ignitados, criando uma chama semelhante à uma tocha, que entra na câmara principal e excita os propelentes. Esse tipo de sistema possui a vantagem de permitir o cancelamento e reiginição, várias vezes, aumentando sua viabilidade e segurança.

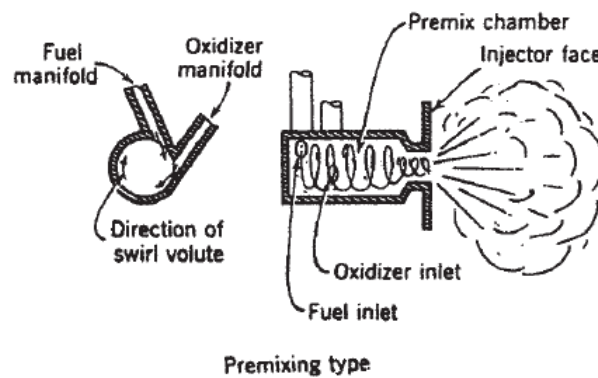


Figura 1 – Modelo de ignição com câmara pré-misturada (SUTTON; BIBLARZ, 2017)

Devido ao sistema escolhido, se faz notória a importância do estudo da combustão dentro do ignitor, visto que o comportamento e características da sua chama, devem ser validadas para assegurar a viabilidade do sistema.

Em (TURNS, 2000) é apresentada uma definição para combustão como uma “rápida oxidação gerando calor, ou ambos luz e calor; também, uma oxidação lenta acompanhada por um relativo pequeno calor e sem luz”. Para este trabalho, a primeira parte da definição é relevante. Dentro dos modos de combustão, classifica-las entre com chama e sem chama, e dentro da primeira classificação, chama pre - misturada ou chama não misturada (difusivas).

Essas duas classes de chamas são referentes as condições de mistura dos reagentes. Em uma chama pré - misturada, os reagentes são misturados em um nível molecular antes de haver qualquer reação. Já numa chama difusiva, os reagentes estão inicialmente separados, e a reação ocorre apenas na interface de interação entre eles, como em uma vela, por exemplo. A chama difusivas, que é o tipo de chama estudada, será mais abordada posteriormente.

Além de aspectos mais gerais da combustão, como a temperatura máxima da chama e concentração de espécies dos produtos, também é importante o estudo do atraso de ignição. O atraso de ignição é definido como o intervalo de tempo entre o momento que o fluido é injetado até o combustível queimar (MUHARAM et al., 2015). O estudo desse

parâmetro é de extrema importância, tanto para caracterizar o comportamento do sistema, quanto para sua segurança, visto que uma autoignição prematura ou uma combustão ruim pode danificar o sistema. (MUHARAM et al., 2015)(HEALY et al., 2010)

Há várias maneiras de estudar a combustão, e o estudo através de fluido dinâmica computacional, CFD, vem sendo largamente usada na indústria. Apesar de experimentos fornecerem resultados reais, um estudo confiável desse tipo pode se revelar muito dispendioso. Ferramentas computacionais no entanto, são mais baratos e sua precisão e acurácia está limitada apenas ao modelo matemático escolhido na simulação. Além disso, fornecem maior segurança e uma boa simulação pode servir como um guia para a montagem de um experimento de campo mais relevante.

1.1 Objetivos Gerais

O objetivo deste trabalho é fazer um estudo da combustão metano/oxigênio dentro do ignitor tipo tocha, construído para o motor desenvolvido na Faculdade do Gama, comparando não só diferentes mecanismos de reação, mas também duas configurações de injetores. Esse estudo consiste em um apanhado teórico, levantando conceitos de termodinâmica e cinética química para entendimento da combustão e, posteriormente, análises com o software NASA Chemical Equilibrium with Application (CEA), software Chemkin – PRO e Ansys Fluent.

1.2 Objetivos Específicos

- Embasamento teórico da combustão CH₄/O₂
- Apanhado de mecanismos de reação da combustão CH₄/O₂
- Comparação dos mecanismos com uso do software CEA
- Estudo de atraso de ignição com software Chemkin
- Validação de mecanismo mais simples com software Chemkin
- Comparação da combustão, com os diferentes injetores, usando o software Ansys Fluent

1.3 Metodologia

Após um estudo para embasamento teórico, serão escolhidos alguns mecanismos de reação de combustão metano/oxigênio, para serem analisados, determinando assim o mais vantajoso computacionalmente para ser usado nas simulações quentes no Ansys Fluent.

Essa análise será feita comparando tanto a temperatura de combustão quanto o atraso de ignição entre elas.

Escolhido o mais vantajoso, a combustão será simulada para determinar qual geometria do injetor é melhor para a qualidade da chama e segurança do ignitor.

Parte I

Revisão Teórica

2 Revisão teórica

Antes de dedicar uma atenção à combustão metano/oxigênio, é importante revisar e definir alguns conceitos termodinâmicos e químicos. As seguintes seções visam realizar um apanhado teórico que serão ferramentas usadas no entendimento da combustão em estudo.

2.1 Razão Equivalente

Uma grandeza relevante de se definir no estudo de combustão é a razão equivalente, definida abaixo:

$$\phi = \frac{(C/O)}{(C/O)_{st}} \quad (2.1)$$

Em que no numerador temos a razão real entre combustível e oxidante e no denominador a razão estequiométrica. A quantidade estequiométrica se refere a proporção exata em que os reagentes se consomem completamente. Quanto a razão equivalente, as misturas são classificadas em:

$$0 < \phi < 1 \text{ pobre em combustível}$$

$$\phi = 1 \text{ estequiométrica}$$

$$\phi > 1 \text{ rica em combustível}$$

2.2 Termodinâmica Química

Essa teoria busca estudar e prever o estado termodinâmico final de uma reação química, conhecendo seu estado inicial. Apesar de não levar em conta como essa transição se dá, essas mecânicas serão abordadas posteriormente em cinética química, esses conceitos oferecem um base suficiente para uma boa predição da qualidade da combustão. Os primeiros conceitos abordados serão as 3 leis da termodinâmica, que nortearão todos os precedentes.

2.2.1 Leis da termodinâmica

A **primeira lei** da termodinâmica estabelece que existe uma função extensiva chamada energia armazenada E , composta de (1) energia interna U , (2) energia cinética KE , e (3) energia potencial PE (KUO, 2005)

$$E = U + KE + PE \quad (2.2)$$

Onde

$$E = (p, V, n_i) \quad (2.3)$$

A adição de calor ($\delta\hat{Q}$), a um sistema fechado, está relacionado a mudança de energia e a um trabalho feito pelo sistema ($\delta\hat{W}$):

$$\delta\hat{Q} = dE + \delta\hat{W} \quad (2.4)$$

Em um sistema em equilíbrio químico, o trabalho pode ser escrito como pdV , então, desconsiderando mudanças nas energias cinética e potencial, a primeira lei pode ser reescrita como:

$$dU = \delta\hat{Q} - pdV \quad (2.5)$$

Para um sistema de volume constante, a equação é reescrita como:

$$du = \delta\hat{Q} \quad (2.6)$$

Há uma grandeza chamada entalpia H , definida como $H = U + pV$, com ela, a primeira lei é reescrita:

$$dH = \delta\hat{Q} + Vdp \quad (2.7)$$

E para p constante:

$$dH = \delta\hat{Q} \quad (2.8)$$

A **segunda lei** da termodinâmica afirma a existência de uma escala absoluta de temperatura e uma função extensiva chamada entropia (KUO, 2005):

$$S = (p, V, n_i) \quad (2.9)$$

Que, para um processo infinitesimal em um sistema fechado,

$$TdS \geq \delta\hat{Q} \quad (2.10)$$

Onde a igualdade é válida para processos reversíveis e a desigualdade para processos naturais (irreversíveis). Já a **terceira lei** da termodinâmica, estabelece que a entropia de um cristal perfeito é zero, na temperatura de zero absoluto. Isso é usado como base ou referência para desenvolvimento da entropia de várias substâncias (KUO, 2005). Com isso, a entropia molar de uma substância a uma certa temperatura T e a pressão de 1 bar pode ser calculada a partir de:

$$S_T^o = S_{T_o}^o + \int_{T_o}^T \frac{\bar{C}_p}{T} dT \quad (2.11)$$

Onde T_o é a temperatura de referência em que $S_{T_o}^o$ é conhecida.

2.2.2 Equação do Estado

A equação do estado fornece uma relação entre pressão, P , temperatura, T , e volume V de uma substância. Para um gás de comportamento ideal, as seguintes equações podem ser aplicadas (TURNES, 2000):

$$PV = mRT \quad (2.12)$$

2.2.3 Entalpia absoluta e Entalpia de Formação

No estudo de reações químicas, os conceitos de entalpia de formação e entalpia absolutas são bastante relevantes para predizer o resultado das reações. A entalpia absoluta é a soma das entalpias de formação, h_f , e a variação de entalpia sensível, Δh_s (TURNES, 2000):

$$\bar{h}_i(T) = \bar{h}_{i,f}^o(T_{ref}) + \Delta \bar{h}_{s,i}(T_{ref}) \quad (2.13)$$

A entalpia de formação de uma substância, é definida como o calor envolvido quando 1 mol dessa substância é formada a partir de seus elementos nos respectivos estados padrão. O estado padrão de um elemento é definido como sua forma estável à temperatura ambiente e a pressão de 1 bar. Por convenção, a entalpia de formação desses elementos nesse estado é 0. Durante a formação da substância, quando calor é desenvolvido para fora do sistema, a reação é chamada de **exotérmica** e a entalpia é uma quantia negativa. Quando o calor é absorvido e adicionado ao sistema, a reação é chamada **endotérmica** e o valor da entalpia é positivo.

2.2.4 Lei de Hess

Para alguns cálculos de predição de calor liberados em uma reação de combustão, a Lei de Hess se mostra bastante útil. Essa lei afirma que *a mudança de calor resultante, a uma pressão e temperatura constante, em uma dada reação química é a mesma quer aconteça em um ou em várias etapas* (KUO, 2005). Ou seja, o calor na rede de reações depende apenas do estado inicial e final.

2.2.5 Função de Gibbs e constante de equilíbrio

Para diversos estudos de equilíbrio químico, apenas a segunda lei e o conceito de entropia se mostram insuficientes. Para solucionar problemas em que isso ocorre, a energia livre de Gibbs, G , substitui a entropia como propriedade termodinâmica. (TURNES, 2000) A energia livre de Gibbs é definida como:

$$G \equiv H - TS \quad (2.14)$$

Sendo a segunda lei expressa como:

$$dG_{T,P,m} \leq 0 \quad (2.15)$$

que estabelece que a função de Gibbs sempre decai para uma espontânea, isotérmica e isobárica mudança de um sistema de massa fixa na ausência de efeitos de trabalho (TURNES, 2000). Para uma mistura de gases ideais, a função de Gibbs de cada espécie é dada por:

$$G(T) = G^o(T) + n_i R_u T \ln \left(\frac{p^i}{p^o} \right) \quad (2.16)$$

E a variação de G para um sistema é dado por:

$$\Delta G(T) = \Delta G^o(T) + n_i R_u T \ln \left(\frac{\frac{A}{C}}{\frac{B}{D}} \right) \quad (2.17)$$

em que **a** e **b** são o número de mols dos reagentes, e **c** e **d** são o número dos produtos.

Como para um sistema em equilíbrio, ΔG é igual a 0:

$$\Delta G(T) = \Delta G^o(T) + n_i R_u T \ln \left(\frac{\frac{A}{C}}{\frac{B}{D}} \right) \quad (2.18)$$

Onde a constante de equilíbrio K_p é definida como:

$$K_p \equiv \ln \left(\frac{\frac{A}{C}}{\frac{B}{D}} \right) \quad (2.19)$$

Resultando na equação:

$$\Delta G^o = -R_u T \ln(K_p) \quad (2.20)$$

Essa equação estabelece uma relação entre a energia livre padrão e a constante equilíbrio em uma determinada pressão e temperatura. Uma constante de equilíbrio elevada significa que uma vez que a reação começa, a conversão de reagentes em produtos é bastante completa no equilíbrio, com a concentração de produtos bem maior que a dos reagentes (TURNES, 2000).

2.3 Cinética Química

Apesar da termodinâmica demonstrar a possibilidade de predizer o estado final de um sistema, conhecendo apenas o inicial, ela por si só não explica como esse processo ocorre. A cinética química é uma teoria que busca explicar os mecanismos da reação, as taxas nas quais elas ocorrem e quais os fatores que influenciam nisso. Diante disso, é importante revisar alguns conceitos de cinética pra entender a velocidade da combustão, o atraso na ignição, dissociação das espécies e como isso influencia na qualidade da reação.

2.3.1 Taxa de Reação

É estabelecido através de inúmeras observações experimentais, que a taxa de reação, RR , de uma espécie de produto químico é proporcional ao produto das concentrações das espécies dos reagentes, cada concentração sendo elevada ao coeficiente estequiométrico (KUO, 2005):

$$RR = \frac{dC_{\text{produto}}}{dt} = \frac{dC_{\text{reagentes}}}{dt} = k \prod_{i=1}^N (C_{M_I})_i^{V_i'} \quad (2.21)$$

Em que k é uma constante chamada de **constante de taxa de reação específica**, depende apenas da temperatura e é expressa a seguir:

$$k = AT^b \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T}\right) \quad (2.22)$$

Em que AT^b representa a frequência de colisão, e o termo exponencial é chamada de fator de Boltzmann. A , b e E_a são baseadas na natureza da reação. Como a maioria das reações de combustão são bimoleculares, apenas a taxa de colisão desse tipo de reação é interessante para estudo. A expressão matemática para uma reação de segunda ordem e bimolecular pode ser expressa como (KUO, 2005):

$$Z = \sigma_{BC}^2 \left(\frac{8\pi KT}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}} C_B C_C \quad (2.23)$$

Onde K é a constante de Boltzmann, μ é a massa reduzida das moléculas B e C [$\mu \equiv \frac{m_B m_C}{m_B + m_C}$], $e\sigma_{BC}$ o raio de colisão.

2.3.2 Equação de Arrhenius

A lei de Arrhenius é dada por:

$$k = A \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T}\right) \quad (2.24)$$

onde se assume que A inclui os efeitos dos termos de colisão, o fator estérico, \bar{P} , associado com a orientação das moléculas colidindo, e a dependência da temperatura do fator preexponencial. Para uma reação bimolecular, A vale:

$$A = \sigma_{BC}^2 \left(\frac{8\pi KT}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}} \bar{P} \quad (2.25)$$

fator estérico é relacionado com a probabilidade de duas moléculas reagirem, baseando-se na orientação com que elas colidem.

2.3.3 Reações em cadeia

A maioria das reações químicas não ocorrem de maneira simples e direta. Na verdade, o que acontece é uma série de reações consecutivas, opostas e competitivas de diferentes taxas de reação. Reações em cadeia podem ser definidas como reações em que produtos intermediários são produzidos em uma etapa gerando espécies reativas em etapas subsequentes, gerando então outras reações intermediárias e assim por diante (KUO, 2005). Durante série de reações, **radicais livres** são criados e destruídos devido as interações com as outras espécies. Radicais livres são espécies químicas, que possuem elétrons não pareados e que possuem grande reatividade com as outras moléculas. Reações que liberam radicais são chamadas de reações de iniciação-de-cadeia, de modo semelhante, reações que destroem esses radicais são reações de encerramento-de-cadeia. E com respeito a taxa do número de radicais livres nos produtos e nos reagentes, as reações são chamadas de reações de propagação de cadeia. O conjunto de reações elementares necessárias para descrever uma reação global é chamada de **mecanismo** de reação.

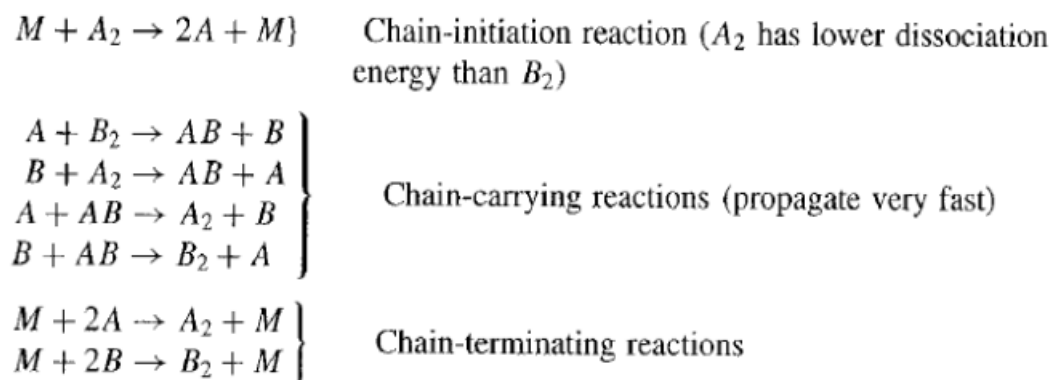
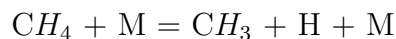


Figura 2 – Exemplo de reações de iniciação de cadeia, propagação de cadeia e encerramento de cadeia (KUO, 2005)

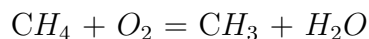
2.3.4 Combustão metano/oxigênio

O uso de alternativas limpas de energia vem sendo cada vez mais valorizado. Atualmente, a combustão de hidrocarbonetos permanece o maior produtor de energia em todo o mundo, o menor deles, o metano, é um dos potenciais combustíveis alternativos, visto que pode ser derivado da biomassa através da metanização. Seu baixo custo e baixa emissão de poluentes o torna um forte candidato a combustível para pesquisas. (MERHUBI et al., 2016). Além dessas vantagens, devido a sua estrutura molecular, o metano possui uma combustão de características únicas bastante interessantes. Por exemplo, possui uma alta temperatura de ignição e baixa velocidade de chama (TURNS, 2000).

Em (KUO, 2005) é descrita duas possíveis reações de iniciação, uma decomposição térmica que libera radicais de metil:



e a outra reação sob condições de oxidação é:



Na condição de altas temperaturas, é perceptível uma progressão linear de CH_4 para CO_2 através de vários loops provenientes do radical metil. Após sua origem, o metil se combina com o oxigênio, formando o formaldeído, após isso, o formaldeído é atacado pelos radicais de OH, H e O, originando o radical HCO, o mesmo é convertido em monóxido de carbono (CO) através de um trio de reações e então finalmente convertido em CO_2 . Essa série de reações é ilustrada na figura (3), em que a espessura das setas representam a relevância da reação, enquanto os números entre parênteses quantificam a taxa de reação de destruição dos reagentes. (TURNES, 2000)

Em baixas temperaturas (< 1500 K), reações que antes eram sem importância agora se tornam relevantes. Novas reações químicas acontecem dando origem a novos fenômenos bastante interessantes. Primeiramente, uma forte recombinação do metil de volta ao metano; uma rota alternativa do CH_3 para o CH_2O através da produção do metanol e também a formação do etano, um hidrocarboneto mais pesado que o reagente original.

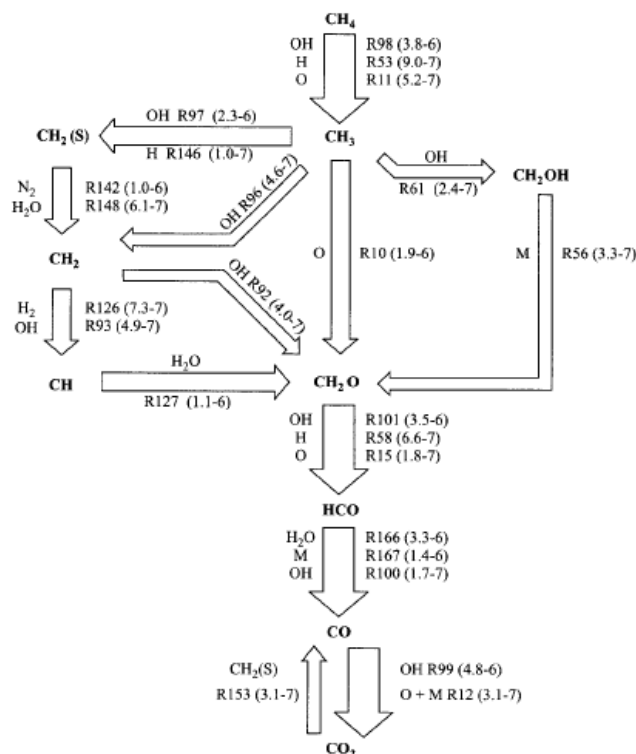


Figura 3 – Diagrama de reação para combustão sob altas temperaturas de metano em um reator bem misturado a $T = 2200$ K e $P = 1$ atm para um tempo de residência de 0.1 s. (TURNES, 2000)

taxas:

Reação	Taxa de reação
$CH_4 + \frac{3}{2} O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$	$r_1 = 5 \cdot 10^{11} e^{\frac{-47800}{RT}} [CH_4]^{0.70} [O_2]^{0.80}$
$CO + 0.5 O_2 \rightarrow CO_2$	$r_2 = 2.24 \cdot 10^{12} e^{\frac{-40700}{RT}} [CO] [H_2O]$
$CO_2 \rightarrow CO + 0.5O_2$	$r_3 = 5 \cdot 10^8 e^{\frac{-40700}{RT}} [CO_2]$

Tabela 1 – Mecanismo de reação de Westbrook - Dryer (FRASSOLDATI et al., 2009)

O mecanismo de Jones – Lindstedt já apresenta 4 reações, sendo duas reversíveis, e envolve 6 espécies, abaixo uma tabela com seus dados:

Reação	Taxa de reação
$CH_4 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO + 2H_2$	$r_1 = 4.4 \cdot 10^{11} e^{\frac{-30000}{RT}} [CH_4]^{0.50} [O_2]^{1.25}$
$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$	$r_2 = 3 \cdot 10^8 e^{\frac{-30000}{RT}} [CH_4] [H_2O]$
$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$	$r_3 = 2.75 \cdot 10^9 e^{\frac{-20000}{RT}} [CO] [H_2O]$
$H_2 + 0.5O_2 \leftrightarrow H_2O$	$r_4 = 6.8 \cdot 10^{15} T^{-1} e^{\frac{-40000}{RT}} [H_2]^{0.25} [O_2]^{1.5}$

Tabela 2 – Mecanismo de reação de Jones - Lindstedt (FRASSOLDATI et al., 2009)

Por último, um mecanismo JL melhorado, que leva em conta reações de dissociação (JL – D) e possui 6 reações envolvendo 9 espécies químicas.

Reação	Taxa de reação
$CH_4 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO + 2H_2$	$r_1 = 4.4 \cdot 10^{11} e^{\frac{-30000}{RT}} [CH_4]^{0.50} [O_2]^{1.25}$
$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$	$r_2 = 3 \cdot 10^8 e^{\frac{-30000}{RT}} [CH_4] [H_2O]$
$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$	$r_3 = 2.75 \cdot 10^9 e^{\frac{-20000}{RT}} [CO] [H_2O]$
$H_2 + 0.5O_2 \leftrightarrow H_2O$	$r_4 = 6.8 \cdot 10^{15} T^{-1} e^{\frac{-40000}{RT}} [H_2]^{0.25} [O_2]^{1.5}$
$O_2 \leftrightarrow 2O$	$r_5 = 1.5 \cdot 10^9 e^{\frac{-113000}{RT}} [O_2]$
$H_2O \leftrightarrow H + OH$	$r_6 = 2.3 \cdot 10^{22} T^{-3} e^{\frac{-120000}{RT}} [H_2O]$

Tabela 3 – Mecanismo de reação de Jones - Lindstedt com dissociação (FRASSOLDATI et al., 2009)

2.3.6 Atraso de Ignição

Como já foi comentado, o estudo no atraso de ignição (ADI) é de extrema importância não só para caracterização da chama, quanto para garantir a segurança de sistemas, visto que uma autoignição em algum momento inoportuno pode causar danos a estrutura. De acordo com (MUHARAM et al., 2015), o atraso de ignição pode ser definido como o tempo entre a injeção do combustível até a sua combustão.

É importante definir os critérios para identificar o ADI da combustão, a priori, dois foram levados em conta e, depois de uma análise, apenas um foi empregado neste

trabalho. O primeiro é o **ponto de inflexão da temperatura**, em que se é computado o ponto em que a variação de temperatura no tempo é máxima. O segundo critério é a observação do momento em que há a concentração máxima de OH (CHEMKIN, 2016).

Esse segundo critério está relacionado com o fato do radical OH ser forte, então sua concentração é usada como parâmetro para a rapidez da reação. Uma rápida elevação na sua quantidade implica no acontecimento da ignição (MUHARAM et al., 2015). Além disso em (MERHUBI et al., 2016) é discutido que, devido a correlação de Arrhenius, o tempo de ignição é mais dependente da cinética CH_4/O_2 do que dos efeitos térmicos. A concentração de OH também é um critério usado nos estudos (MYERS; BARTLE, 1969) e (HEALY et al., 2010)

3 Chama difusa

3.1 Estequiometria

Os conceitos de estequiometria e razão equivalente já foram apresentados, porém se faz importante aprofundar mais um pouco neles devido as diferenças que surgem ao separar a combustão em *com pré-mistura* e *sem pré-mistura* e, apesar de várias espécies químicas se envolverem na combustão, algumas são mais importantes para caracterizar a chama.

Há duas maneiras de determinar a taxa equivalente, se for uma combustão com pré-mistura, onde o combustível e o oxidante são misturados antes de entrar na câmara, a condição de estequiometria é:

$$\left(\frac{Y_O}{Y_F}\right)_{st} = \frac{\nu'_O W_O}{\nu'_F W_F} = s \quad (3.1)$$

Onde s é chamada de *taxa estequiométrica de massa*. Logo, a taxa equivalente de uma mistura, equação 2.1, pode ser reescrita como (POINSOT; VEYNANTE, 2001):

$$\phi = s \frac{Y_F}{Y_O} \quad (3.2)$$

Que também pode ser escrita como:

$$\phi = s \frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_O} \quad (3.3)$$

Em uma chama difusa, combustão sem pré-mistura, o oxidante e o combustível entram separadamente. Para este caso, a taxa estequiométrica pode ser escrita como:

$$\phi = s \frac{Y_F^1}{Y_O^2} \quad (3.4)$$

Porém, essa equação só descreve a estrutura da chama no local onde as duas correntes interagem. Para descrever o comportamento geral do combustor, se faz necessário introduzir o conceito de *taxa equivalente global* (POINSOT; VEYNANTE, 2001), que pode ser escrita como:

$$\phi_g = s \frac{\dot{m}_F^1}{\dot{m}_O^2} \quad (3.5)$$

Onde \dot{m}_F^1 e \dot{m}_O^2 são os fluxos mássicos de combustível e oxidante na primeira e segunda entrada, respectivamente.

3.2 Chama laminar difusa

A importância de se estudar a chama laminar, é devido ao uso de muitos de seus conceitos na turbulenta e em teorias mais avançadas de combustão. Além disso, fornecem um bom entendimento do que se trata essa classe de chama. Chamas difusas são uma classe de problema de combustão onde o combustível e oxidantes entram separadamente na câmara de combustão.

3.3 Ferramentas de estudo

Uma das ferramentas mais importantes no estudo de chamas difusas é a fração de mistura, um escalar passivo crucial para descrever o comportamento da chama. Para defini-la entretanto, algumas considerações devem ser feitas, que, apesar de nem todas serem satisfeitas em casos reais, fornecem uma base inicial interessante para o estudo (POINSOT; VEYNANTE, 2001):

- pressão termodinâmica é constante e números de Mach são pequenos
- todos os coeficientes de difusividade D_k das espécies químicas são iguais a \mathbf{D} . Lei de Fick é usada para velocidades de difusão
- as capacidades caloríficas Cp_k de todas as espécies químicas são iguais e independente da temperatura

3.4 Fração de mistura

Considerando uma reação que envolve apenas combustível (F), oxidante (O) e produtos (P):



A fração mássica de cada espécie segue a equação de balanceamento:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \mathbf{D} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}) + \dot{\omega}_k \quad (3.7)$$

Onde as taxas de reação das espécies, $\dot{\omega}_k$ são relacionadas a taxa de reação de uma etapa Q :

$$\dot{\omega}_k = W_k \nu_k Q \quad (3.8)$$

ou seja, a taxa de reação do oxidantes está ligada a taxa de reação do combustível:

$$\dot{\omega}_O = s \dot{\omega}_F \quad (3.9)$$

A taxa de reação da temperatura é também ligada a taxa de reação do combustível:

$$\dot{\omega}_T = -Q\dot{\omega}_F \quad (3.10)$$

Com todas essas relações, as equações de conservação do combustível, oxidantes e temperatura se tornam:

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_F) = \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \mathbf{D} \frac{\partial Y_F}{\partial x_i}) + \dot{\omega}_F \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial \rho Y_O}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_O) = \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \mathbf{D} \frac{\partial Y_O}{\partial x_i}) + s\dot{\omega}_F \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i T) = \frac{\partial}{\partial x_i}(\frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial T}{\partial x_i}) - \frac{Q}{C_p} \dot{\omega}_F \quad (3.13)$$

Combinando as equações (3.11) até (3.13) dois a dois, e assumindo número de Lewis unitário, as três quantidades:

$$Z_1 = sY_F - Y_O; Z_2 = \frac{C_p T}{Q} + Y_F; Z_3 = s \frac{C_p T}{Q} + Y_O \quad (3.14)$$

seguem a mesma equação de balanceamento, sem termos de fonte:

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Z) = \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \mathbf{D} \frac{\partial Z}{\partial x_i}) \quad (3.15)$$

onde Z é um escalar passivo que muda por causa de difusão e convecção, mas não devido a reação. Após a normalização de Z , descrita em (POINSOT; VEYNANTE, 2001), todas as variáveis reduzidas z_j seguem a mesma equação de balanceamento e possuem as mesmas condições de contorno: $z_j = 1$ na corrente de combustível e $z_j = 0$ na corrente de oxidante, portanto todas elas serão iguais.

$$z_1 = z_2 = z_3 = z \quad (3.16)$$

onde z é chamada de fração de mistura e mede a relação combustível/oxidante local.

3.5 Estrutura da chama no espaço z

A determinação da fração de mistura permite uma redução considerável no número de variáveis do problema. Sendo possível, por exemplo, expressar a fração mássica das espécies em função apenas da fração de mistura e da temperatura. Porém, para simplificar mais o problema, se faz necessário mais uma consideração:

- a estrutura de uma chama difusa depende apenas da fração de mistura z e do tempo t . Temperatura e fração mássica das espécies podem ser reescritas como:

$$T = T(z, t)e^{Y_k} = Y_k(z, t) \quad (3.17)$$

Essas duas funções descrevem a estrutura da chama. Formalmente essa consideração é traduzida através de uma mudança de variáveis na equação das espécies, de (x_1, x_2, x_3, t) para (z, y_2, y_3, t) , onde y_2, y_3 são variáveis espaciais nos planos paralelos às superfícies *iso-z*. Na equação resultante os termos correspondentes aos gradientes ao longo da frente da chama são negligenciados em comparação aos termos normais à chama (gradiente ao longo de z). Fisicamente, essas derivações implicam que a estrutura da chama é localmente uni-dimensional e depende apenas do tempo e da coordenada z . Em um escoamento multi-dimensional, essa consideração requer que a chama seja fina comparada com outras escalas do escoamento. Cada elemento da chama pode ser vista como uma pequena chama laminar, chamada de *flamelet* (POINSOT; VEYNANTE, 2001). A partir dessas hipóteses, as equações de balanceamento das frações mássicas das espécies é reescrita como:

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \dot{\omega}_k + \rho \mathbf{D} \left(\frac{\partial z}{\partial x_i} \frac{\partial z}{\partial x_i} \right) \frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2} = \dot{\omega}_k + \frac{1}{2} \rho \mathbf{X} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (3.18)$$

onde o escalar taxa de dissipação \mathbf{X} foi introduzido:

$$\mathbf{X} = 2\mathbf{D} \left(\frac{\partial z}{\partial x_i} \frac{\partial z}{\partial x_i} \right) \quad (3.19)$$

A temperatura é reescrita como:

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \dot{\omega}_T + \frac{1}{2} \rho \mathbf{X} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (3.20)$$

As equações (3.18) e (3.20) são as equações de *flamelet*, e são fundamentais na teoria de chamas difusas. Uma vez que \mathbf{X} é especificado, essas equações podem ser resolvidas no espaço z , definindo a estrutura da chama.

3.6 Decomposição do problema

O problema de chama difusa pode ser dividido em dois: um problema de mistura e um problema de estrutura da chama. O primeiro consiste em determinar o campo de fração de mistura $z(x_i, t)$, já o segundo consiste em determinar as variáveis da chama, $Y_k(z)$ e $T(z)$.

Ambos os problemas devem ser resolvidos para determinar as variáveis de chama, pois conhecer z não é suficiente para determinar a temperatura e as frações mássicas, para isso, são necessárias novas considerações, que determinam diferentes tipos de problema. Os aspectos relacionados ao escoamento são tratados no problema de mistura, já as informações químicas são tratadas na estrutura da chama. As condições são:

- Equilíbrio: assumir que as reações químicas são infinitamente rápidas. Isso implica que todas as reações químicas acontecem localmente tão rapidamente que o equilíbrio é instantaneamente alcançado.
- Irreversibilidade: assumir que as reações procedem apenas da esquerda pra direita.

Todas elas são de extrema importância ao tratar analiticamente do problema e permitem determinar propriedades básicas da chama difusa, porém, não são eficientes em analisar problemas mais reais, logo, não podem ser aplicadas. Abaixo uma figura ilustrando a diferença de estrutura da chama difusa para diferentes condições aplicadas.

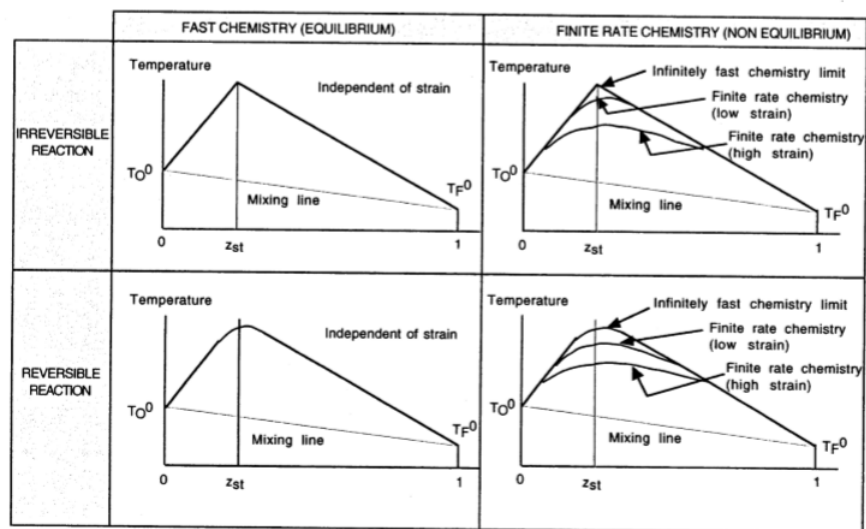


Figura 5 – Diferentes estruturas de chamas, plotadas relacionando temperatura (T) e fração de mistura (z)(POINSOT; VEYNANTE, 2001)

As linhas de mistura correspondem as regiões onde combustível e oxidante se misturam sem reação. Ao plotar uma imagem da chama, todos os pontos deve estar entre as linhas de mistura e as linhas de equilíbrio. Quando a maioria dos pontos estão localizados perto da linha de mistura, significa que a chama está quase extinguida ou ainda não foi inflamada. De outra maneira, se os pontos estiverem próximos da linha de equilíbrio demonstra uma chama vigorosa.

4 Ignitor tipo tocha

O ignitor em estudo é um tipo tocha e, como já foi citado, possui vantagens como a possibilidade de múltiplas ignições. Entretanto, oferece uma complexidade maior em relação a outros sistemas, visto que necessita de uma série de válvulas, tubos, sensores e reservatório de gases.

O ignitor desenvolvido é modelado com uma câmara de combustão cilíndrica e uma tubeira convergente acoplada. Na concepção inicial, o ignitor possuía três injetores, dois laterais para o oxidante e um axial para o combustível. Além disso, havia uma vela de ignição, que é responsável pelo início da queima do combustível e oxidante, e um adaptador termoelétrico que permite a colocação do sensor (SHYNKARENKO; SIMONE; ANDRIANOV, 2016).

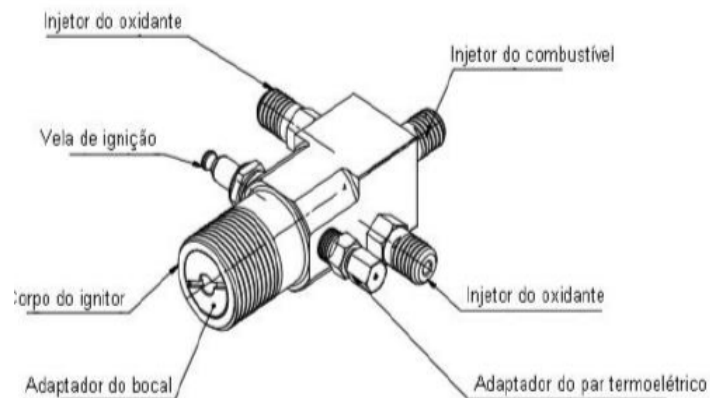


Figura 6 – Primeira concepção do ignitor (FILHO, 2017)

Porém, o mesmo sofreu uma mudança de retirada de um injetor de oxidante, como pode ser visto nas imagens (7) e (8).

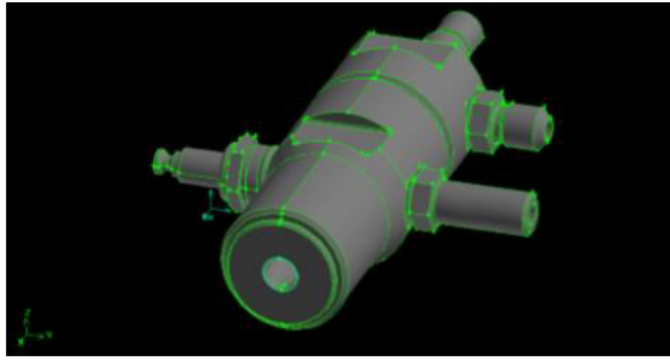


Figura 7 – Estrutura atual do ignitor (FILHO, 2017)

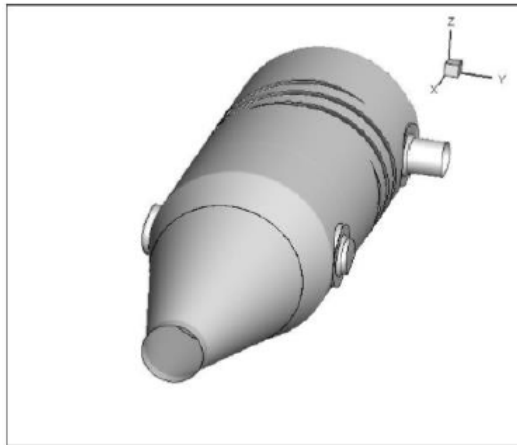


Figura 8 – Visão compacta do ignitor tipo tocha.(FILHO, 2017)

O funcionamento do ignitor projetado consiste em uma injeção do metano, através do injetor axial e do oxigênio pelo injetor lateral. Durante a mistura dos reagentes, o combustível recebe o momento rotacional do oxidante, provocando uma turbulência na câmara de combustão, como ilustra a figura (9).

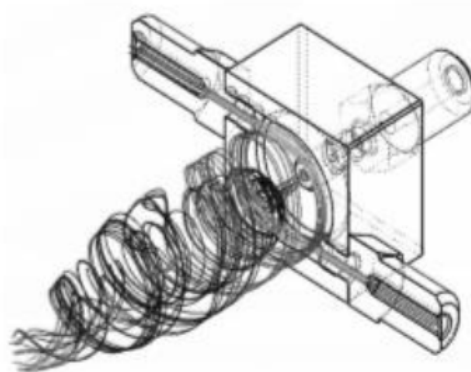


Figura 9 – Esquema de injeção do combustível e oxidante no ignitor(JUNIOR, 2016)

A ideia desse método de redemoinho é proporcionar um auto arrefecimento dentro da câmara, com objetivo de proteger o sistema contra o calor da combustão.([JUNIOR, 2016](#))

Após a mistura dos reagentes, a vela de ignição gera uma faísca que dá início a combustão e gera a chama que fornece energia para combustão dos propelentes do motor.

Em ([JUNIOR, 2016](#)) alguns experimentos com o ignitor já foram feitos, logo abaixo, uma tabela com os resultados já obtidos.

Teste	Pressão (bar)		Duração do Teste	Temperatura Máxima (°C)
	Combustível	Oxidante		
T01	1	1.3	20	891
T02	1	2	20	257.2
T03	1	2.5	20	226.2
T04	1	3	20	223.5
T05	1.5	1.3	20	1229.5
T06	1.5	2	20	563.2
T07	1.5	2.5	20	379.4
T08	1.5	3	20	304.5
T09	2	1.3	10	1283.2
T10	2	2	13.4	881
T11	2	2.5	20	479.4
T12	2	3	17.6	658
T13	2.5	1.3	5	1290
T14	2.5	2	20	755.2
T15	2.5	2.5	20	595
T16	2.5	3	20	522.3
T17	3	1.3	5	1500
T18	3	2	20	913.8
T19	3	2.5	20	696.3
T20	3	3	20	806.4

Tabela 4 – Resultados de dados experimentais do ignitor([JUNIOR, 2016](#))

Parte II

Simulações

5 Simulações

5.1 NASA CEA

O primeiro software usado para comparação dos mecanismos de reação foi o NASA CEA. O CEA (Chemical Equilibrium with Applications), é um programa que calcula as concentrações de produtos de equilíbrio químico de qualquer conjunto de reagentes e determina as propriedades termodinâmicas e de transporte da mistura de produtos.

As simulações no CEA foram feitas com o intuito de analisar a temperatura máxima com os 4 mecanismos de combustão já citados: WD, JL, JL -D e GRI Mech 3.0. Além de variar os mecanismos de reação, as simulações compararam a combustão em 5 pressões diferentes, variando a razão equivalente de 0.6 a 1.6 com incrementos de 0.2, e a pressão de 1 a 3 bar, com incrementos de 0.5. Abaixo uma tabela demonstrando um setup de simulação, o mesmo modelo se repete para os outros 3 mecanismos e 4 pressões.

Simulação	Mecanismo	Pressão (bar)	Razão Equivalente
1	WD	1	0.6
2	WD	1	0.8
3	WD	1	1.0
4	WD	1	1.2
5	WD	1	1.4
6	WD	1	1.6

Tabela 5 – Setup de simulação

5.2 CHEMKIN

O CHEMKIN é um software que facilita o estudo e problemas de cinética química em fase gasosa. As simulações foram feitas com o intuito de investigar a temperatura necessária para começar combustão dos reagentes e também o atraso de ignição. Para esse estudo, o mecanismo de combustão usado foi o WD, JL - D e o GRI Mech 3.0, buscando realizar uma comparação entre eles e validar o uso do mecanismo JL - D para as simulações no fluent

Como o intuito destas simulações não é analisar os efeitos do escoamento mas apenas o caráter químico do problema, o modelo utilizado foi o do reator homogêneo fechado.

5.2.1 Reator homogêneo fechado

Neste tipo de reator, presume-se que o conteúdo, bem misturado ou agitado, seja quase espacialmente uniforme devido a altas taxas de difusão ou mistura turbulenta forçada. Ou seja, a taxa de conversão de reagentes em produtos é controlada pelas taxas de reação química e não pelos processos de mistura. Assim, consideramos que o reator é "limitado" pela cinética da reação (CHEMKIN, 2016).

Esta suposição é boa, por exemplo, para condições de baixa pressão e alta difusão. A maior vantagem dessa aproximação é o baixo custo computacional, permitindo investigar diferentes mecanismos de reação.

Além da mistura rápida, a modelagem de reatores homogêneos requer várias suposições. Primeiro, o transporte de massa para as paredes do reator é assumido como sendo infinitamente rápido. Portanto, a importância relativa das reações de superfície às reações da fase gasosa é determinado apenas pelas proporções superfície-volume de cada material e as taxas de reação relativas (e não por restrições de transporte). Segundo, o fluxo através do reator deve ser caracterizado por um tempo de residência nominal, que pode ser deduzido da taxa de fluxo e do volume do reator (CHEMKIN, 2016).

5.2.2 Setup de solução

As simulações foram feitas variando a temperatura do reator, buscando perceber a temperatura de ignição da mistura e variando a razão equivalente. A temperatura foi parametrizada de 900 a 2600 K, com incrementos de 100 K. A razão equivalente também variou, de 0.5 a 1.1, com incrementos de 0.1, totalizando 126 simulações para cada mecanismo de reação.

A pressão do gás considerada foi de 3.0 bar e o volume simulado foi de 9 cm^3 , que é aproximadamente o volume da câmara de combustão do ignitor. Abaixo uma tabela ilustrando o setup de 16 simulações.

Simulação	Mecanismo	Razão Equivalente	Temperatura (K)
1	JL-D	0.5	900
2	JL-D	0.5	1000
3	JL-D	0.5	1100
4	JL-D	0.5	1200
5	JL-D	0.5	1300
6	JL-D	0.5	1400
7	JL-D	0.5	1500
8	JL-D	0.5	1600
9	JL-D	0.5	1700
10	JL-D	0.5	1800
11	JL-D	0.5	1900
12	JL-D	0.5	2000
13	JL-D	0.5	2100
14	JL-D	0.5	2200
15	JL-D	0.5	2300
16	JL-D	0.5	2400
17	JL-D	0.5	2500
18	JL-D	0.5	2600

Tabela 6 – Exemplo de setup de simulação no CHEMKIN

5.3 Fluent

As simulações do fluent foram feitas para modelar a chama e estudar suas propriedades, além disso, foram feitas usando duas configurações de injetor: um cilíndrico e um cônico.

5.3.1 Geometria

O primeiro passo foi realizar a construção do ignitor no em um software CAD, para então, poder extrair os volumes de fluido que seriam simulados no Fluent.



Figura 10 – Componentes do ignitor (SOUZA; SHYNKARENKO,)

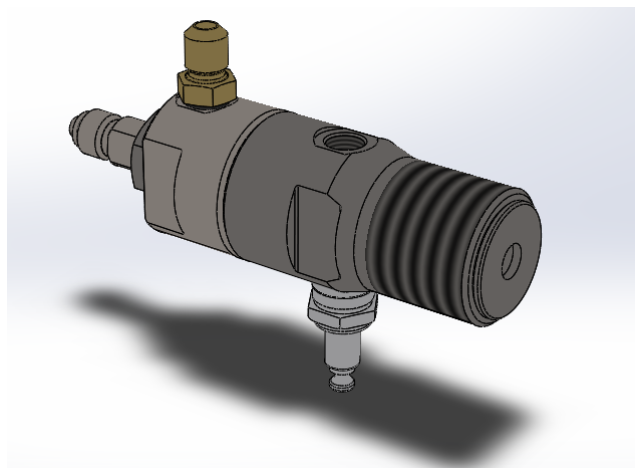


Figura 11 – Aspecto externo do ignitor

Foi realizado a construção de dois modelos, diferenciando apenas a geometria do injetor, que teriam seus desempenhos comparados durante o estudo.

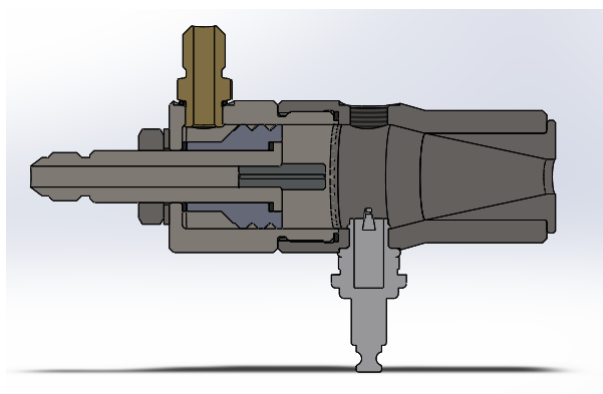


Figura 12 – Seção transversal do ignitor com injetor cilíndrico

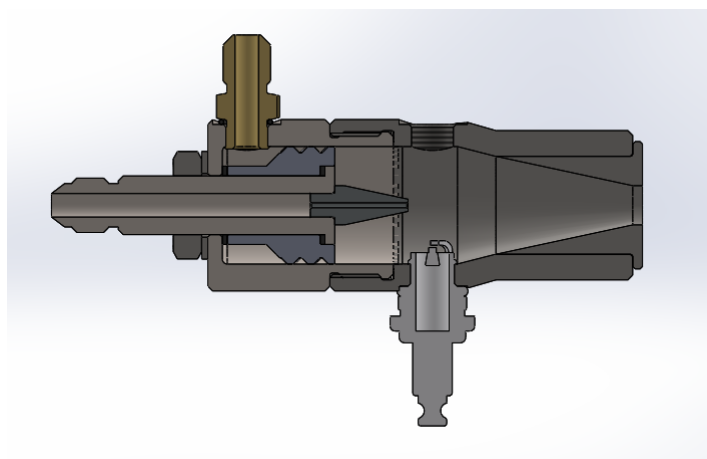


Figura 13 – Seção transversal do ignitor com injetor cônico

Após a construção dos modelos, o volume que seria simulado foi extraído no Design Modeler, do Ansys, e após isso a malha foi construída.

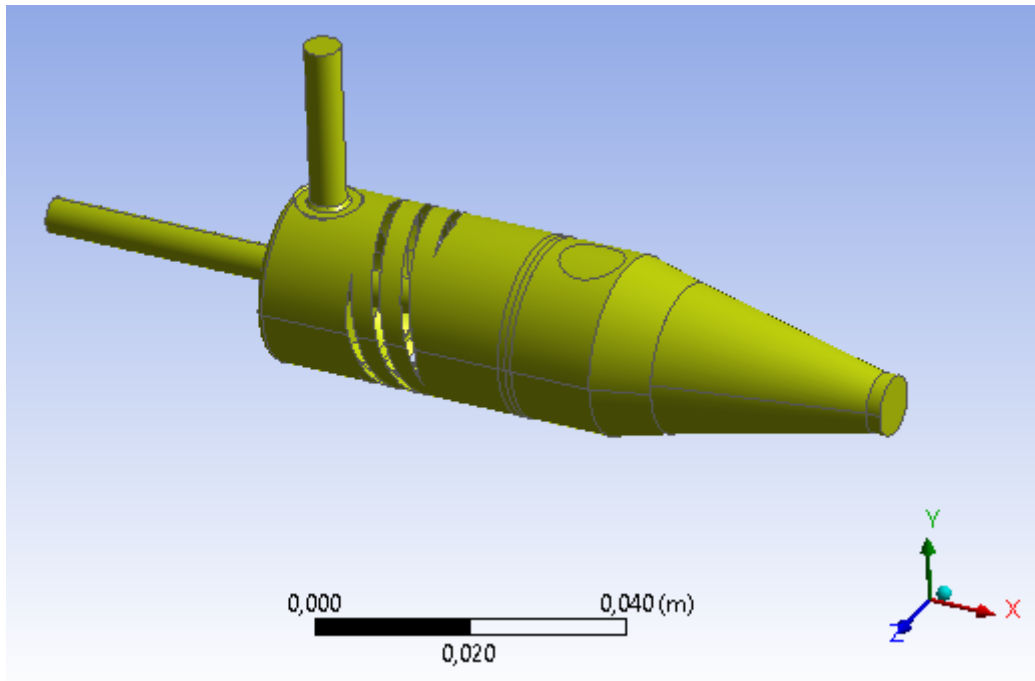


Figura 14 – Volume do fluido a ser simulado

5.3.2 Malha

A construção de uma boa malha é um passo extremamente importante para a realização de uma boa simulação. O objetivo dela é transformar um domínio complexo, que seria extremamente difícil de se estudar, em vários subdomínios. Com isso, ocorre a discretização das equações diferenciais que governam o problema, transformando-as em equações algébricas mais simples, relacionadas aos domínios menores. As malhas podem ser estruturadas, não-estruturadas e híbridas.

Uma malha estruturada, como o nome sugere, possui uma regularidade na disposição e formato de seus elementos. Por ela seguir um padrão, é muito mais fácil analisar a disposição de um elemento em relação aos seus vizinhos. Isso traz uma enorme vantagem computacional, visto que reduz o número de acesso a memória e a matriz de coordenadas. Logo, pesam a favor das malhas estruturadas a enorme facilidade de geração associada e o alto grau intuitivo dos algoritmos numéricos empregados na solução de problemas CFD que usam este tipo.

Já em uma malha não – estruturada, essa disposição e conectividades entre os elementos não são feitas de forma regular. O uso da malha não estruturada faz com que o código a ser programado seja mais complexo. Também impõe que se tenha que acessar a matriz de conectividade várias vezes, aumentando o número de operações na máquina em

relação à malha estruturada. Essas são algumas desvantagens. Porém, este tipo oferece uma facilidade bem maior de construção em geometrias complexas. A malha híbrida faz o uso dos dois tipos no mesmo domínio.

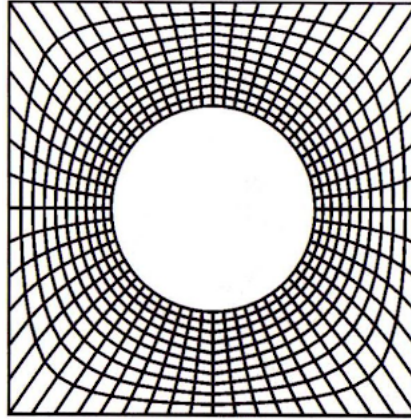


Figura 15 – Exemplo de malha estruturada (MALISKA, 2004)

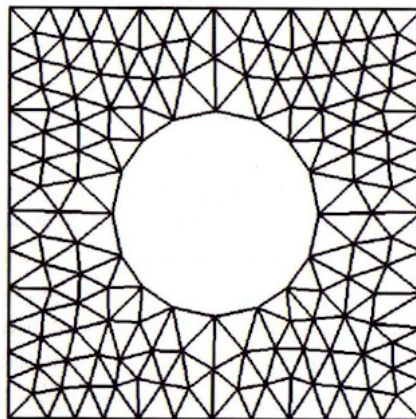


Figura 16 – Exemplo de malha não-estruturada (MALISKA, 2004)

Devido a complexidade de se gerar uma malha estruturada para o domínio em questão, uma não-estruturada com elementos tetraédricos foi empregada. Com o intuito de analisar de forma mais precisa o escoamento na saída dos injetores, o comportamento da chama e a temperatura nas faces dos injetores, a malha foi refinada no centro até a saída da tubeira. Além disso, foi empregado um refinamento nas paredes do injetor para resultados mais precisos de temperatura no mesmo, além de uma melhoria nas paredes externas do ignitor, buscando notar a influência do escoamento nelas.

Para cada geometria, foram feitas 4 malhas. A primeira, chamada de padrão, foi construída buscando um bom refino com um número razoável de elementos. A partir desta, uma mais refinada foi feita, realizando um decréscimo de 25% no tamanho dos elementos. As duas restantes, mais grosseiras, foram feitas realizando um aumento no tamanho dos

elementos, 25% para uma, e 50% para outra. Com cada uma foi feita uma simulação fria (sem reação), com o intuito de validá-las e agilizar o resultado das simulações quentes, visto que o problema de mistura já teria sido resolvido. As malhas com injetor cilíndrico estão representadas nas figuras abaixo:

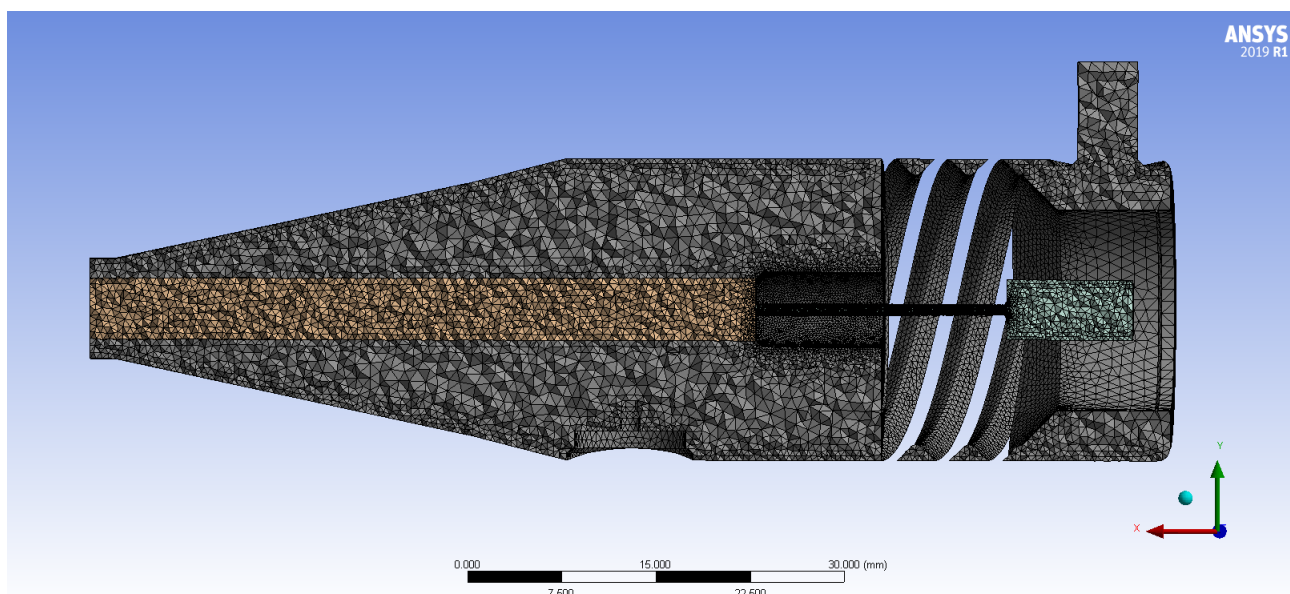


Figura 17 – Malha da geometria com injetor cilíndrico, elementos 50% maiores

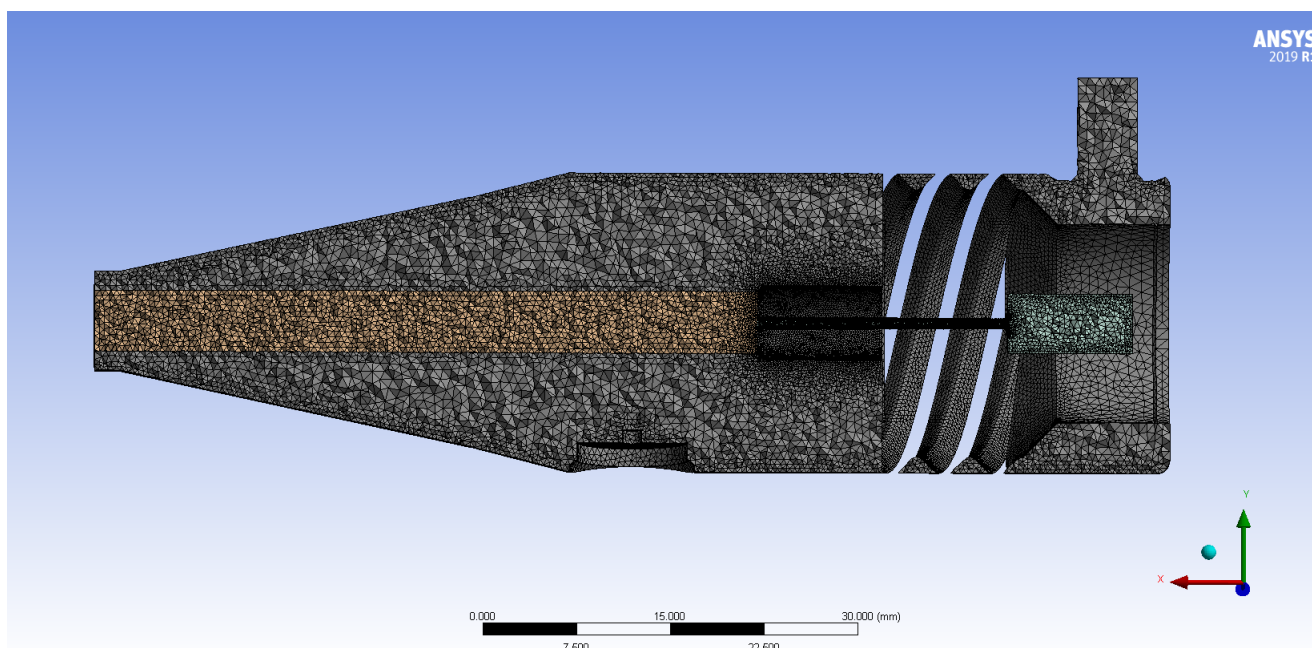


Figura 18 – Malha da geometria com injetor cilíndrico, elementos 25% maiores

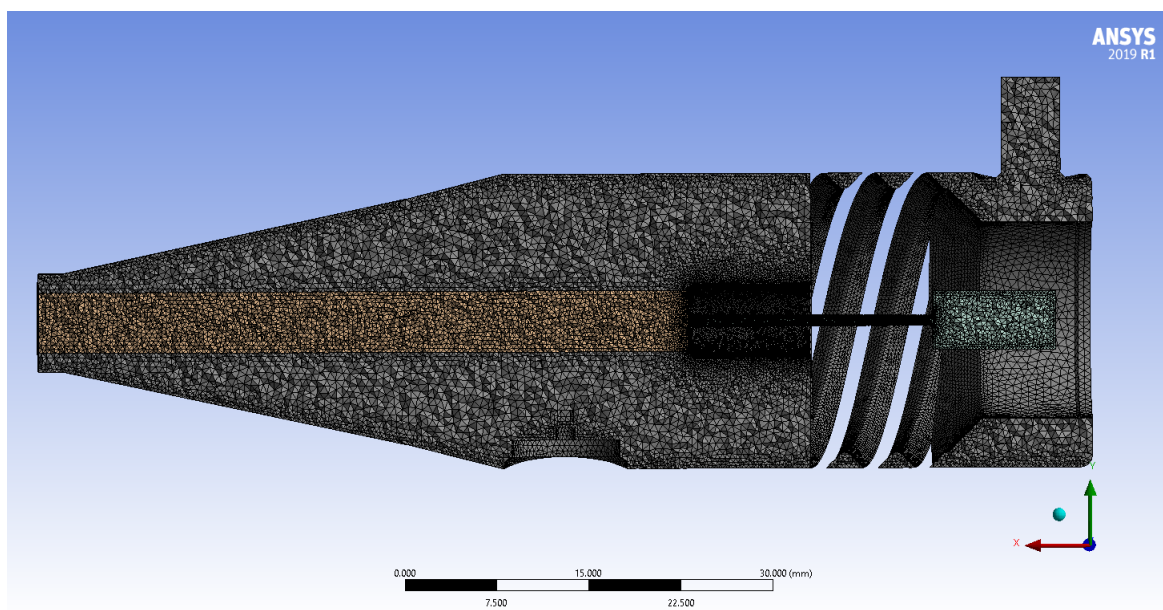


Figura 19 – Malha da geometria com injetor cilíndrico, elementos de tamanho padrão

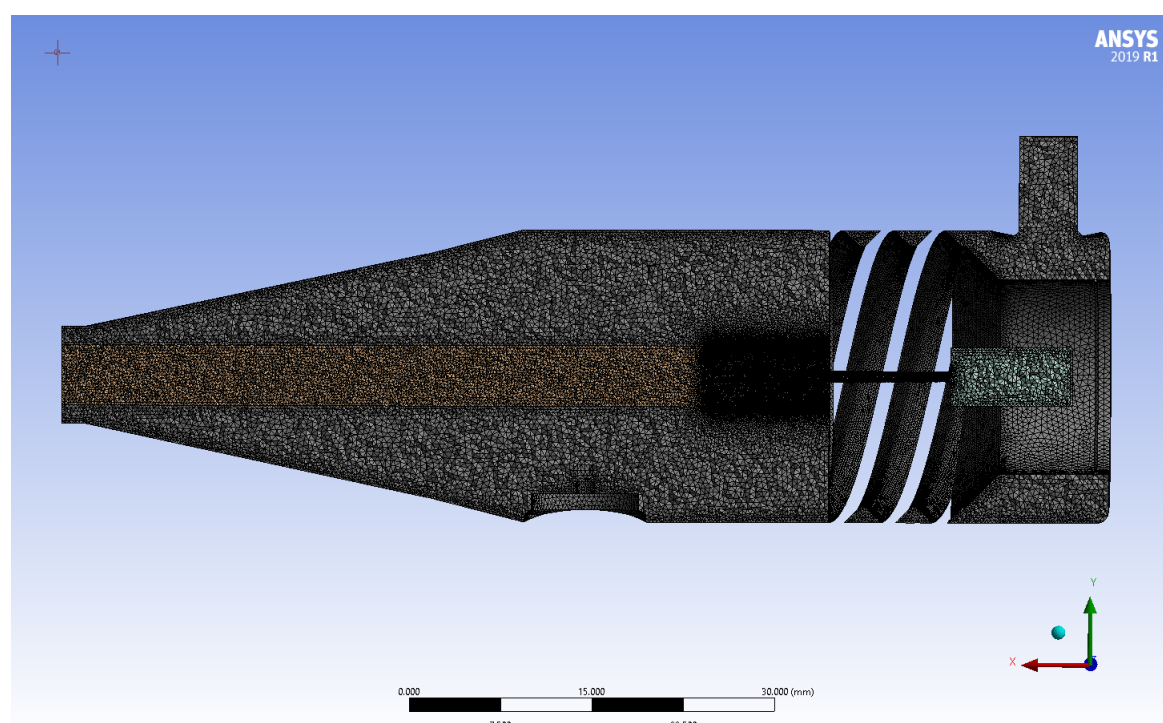


Figura 20 – Malha da geometria com injetor cilíndrico, 25% menores

Malha	Descrição	Número de elementos
1	Elementos 50% maiores	927.176
2	Elementos 25% maiores	1.526.824
3	Malha padrão	2.403.421
4	Elementos 25% menores	4.596.093

Tabela 7 – Número de elementos correspondentes a cada malha de injetor cilíndrico

Abaixo, as malhas com injetor cônico, que passaram pelo mesmo processo de construção:

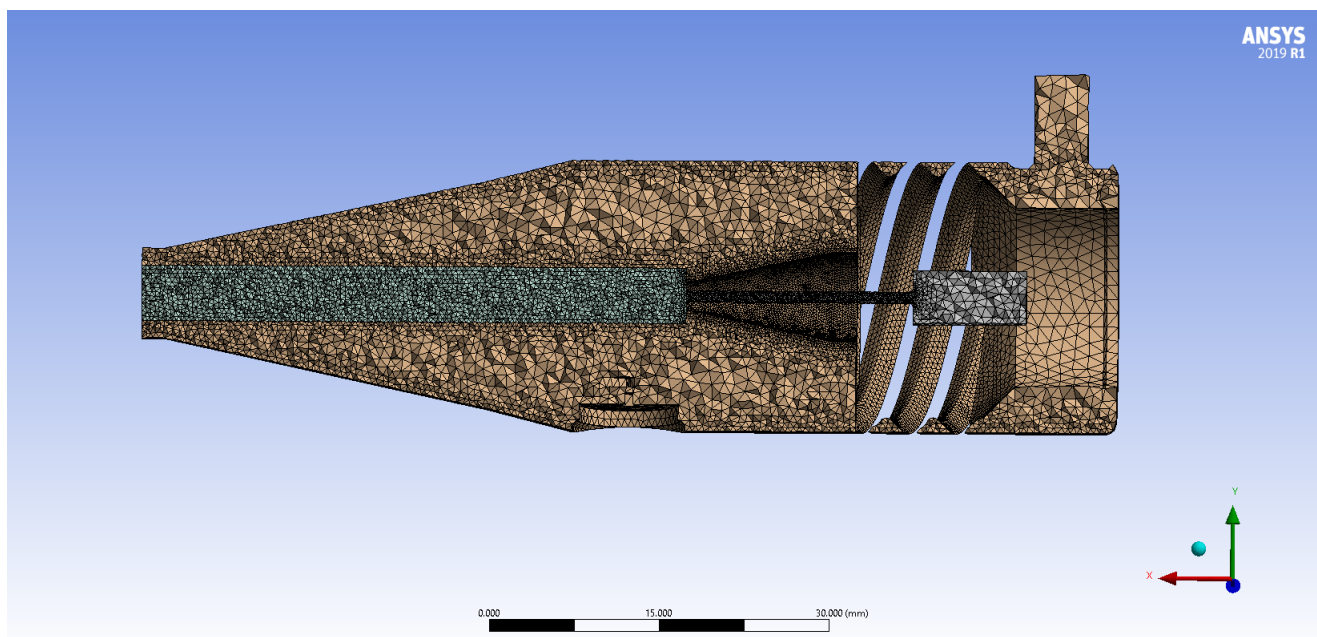


Figura 21 – Malha da geometria com injetor cônico, elementos 50% maiores

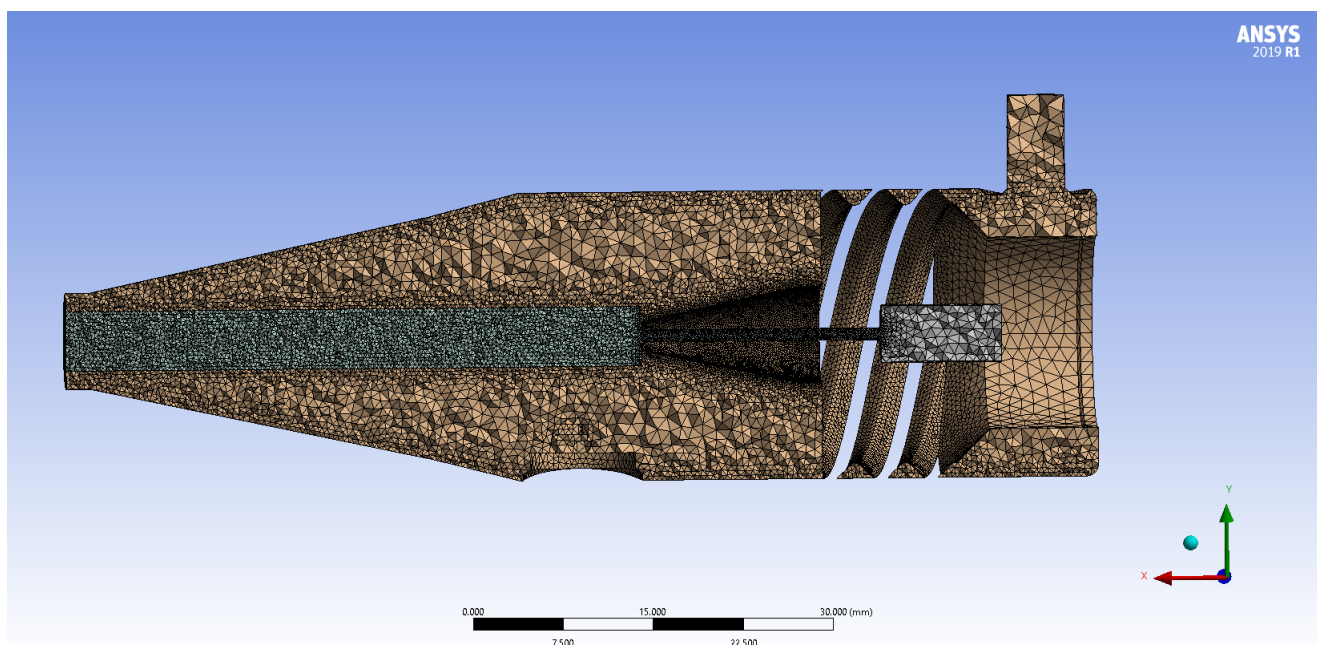


Figura 22 – Malha da geometria com injetor cônico, elementos 25% maiores

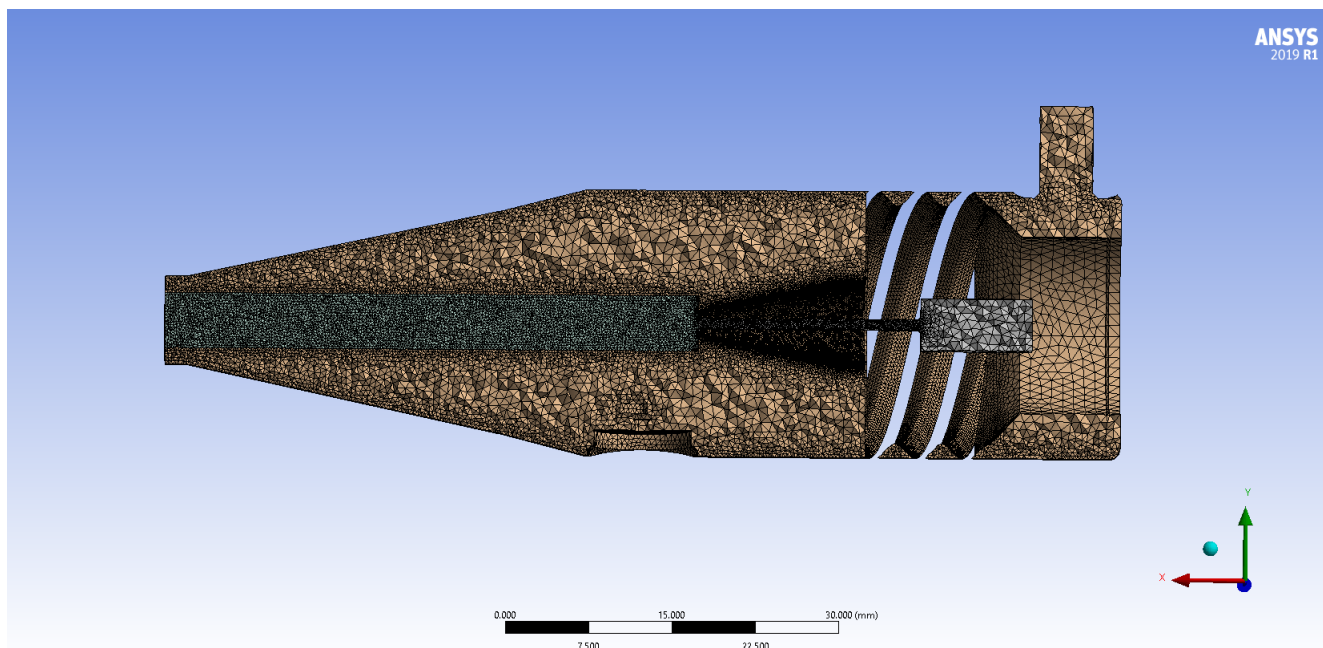


Figura 23 – Malha da geometria com injetor cônico, elementos de tamanho padrão

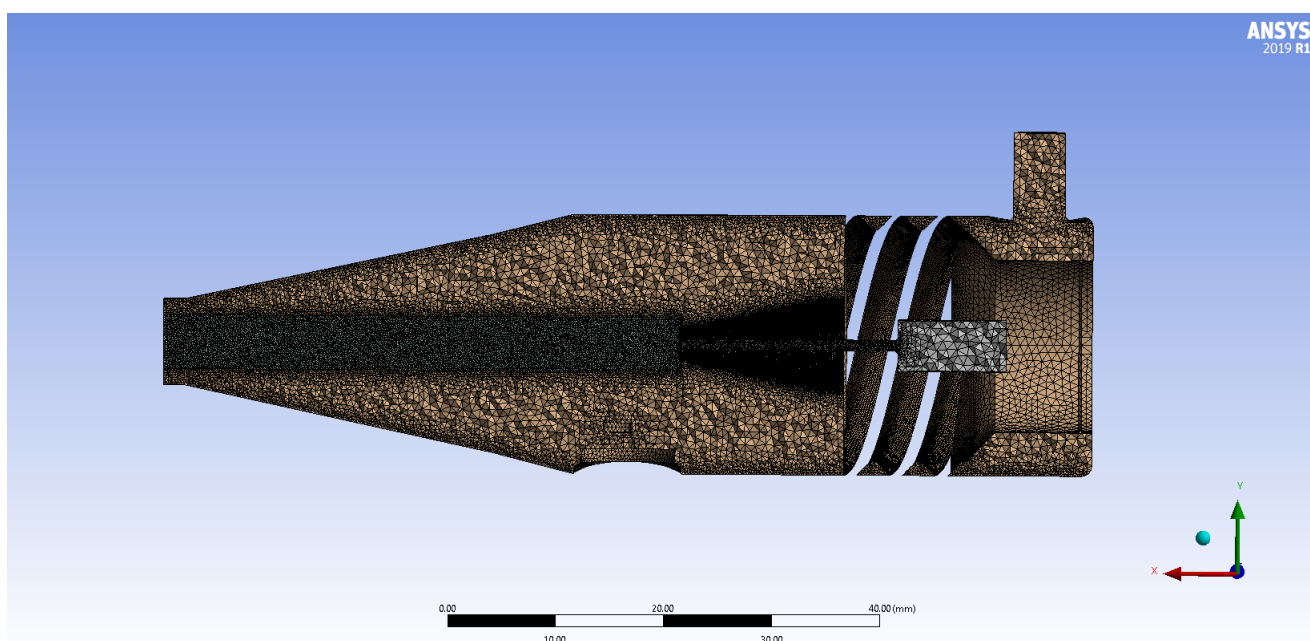


Figura 24 – Malha da geometria com injetor cônico, elementos 25% menores

Malha	Descrição	Número de elementos
1	Elementos 50% maiores	788.027
2	Elementos 25% maiores	1.168.490
3	Malha padrão	1.925.844
4	Elementos 25% menores	3.729.042

Tabela 8 – Número de elementos correspondentes a cada malha de injetor cônico

5.3.3 Setup de solução

As seguintes seções visam especificar e justificar as configurações dos setups de ambas as simulações, frias e quentes.

5.3.3.1 Simulações Frias

Como já citado, as simulações frias foram realizadas com intuito de validar a malha e ajudar na convergência das simulações quentes.

1. Parte geral

a) Solucionador - Método baseado na pressão: O ANSYS Fluent disponibiliza dois algoritmos, o baseado na pressão e o baseado na densidade. Historicamente falando, o baseado na pressão foi desenvolvido para escoamentos incompressíveis de baixa velocidade, enquanto o segundo foi principalmente usado para escoamentos compressíveis de alta velocidade. Entretanto, recentemente ambos os métodos foram reformulados para resolver uma gama de escoamentos, além das condições as quais eles foram projetados inicialmente. (ANSYS, 2013)

Em ambos os métodos o campo de velocidade é obtido das equações de momentum. No método da densidade, a equação de continuidade é usada para obter o campo de densidade enquanto a pressão provém da equação de estado. Já no método da pressão, o campo de pressão é obtido resolvendo uma equação de pressão a partir da manipulação das equações de momentum e continuidade. (ANSYS, 2013)

O método escolhido foi o baseado na pressão por ser um escoamento de baixa velocidade, além de ele ter atendido bem às simulações.

b) Velocidade - Absoluta: É recomendado que se use a formulação de velocidade que resultará, na maior parte do domínio do escoamento, as menores rotações de velocidade naquela região, reduzindo a difusão numérica na solução e levando a uma solução mais precisa.

A formulação absoluta é preferida em aplicações onde o escoamento na maior parte do domínio não está se movendo, apesar de não ser o caso da simulação em questão, por ser um escoamento tranquilo e pouco turbulento, a formulação relativa não foi necessária.

c) Tempo - Transiente: A dependência temporal é classificada entre estacionária e transiente. A primeira diz respeito as simulações cujas características não mudam com o tempo, não necessitando de informações em tempo real para serem descritas. Muitos fluxos práticos podem ser considerados estáveis após o desenvolvimento inicial do momento instável.

Simulações transientes por outro lado, exigem informações em tempo real para determinar os intervalos de tempo em que o solucionador calcula o campo do fluxo. O comportamento instável e transitório pode ser proveniente pela alteração inicial das condições de contorno ou pode ser inerentemente relacionado às características do escoamento, de modo que uma condição estável nunca seja atingida.

Para a simulação fria, a formulação temporal escolhida foi a transiente, devido ao interesse em saber o tempo necessário para o fluxo se estabilizar, sendo esse momento, o ponto de partida para a simulação quente.

2. Modelos Na aba de modelos são escolhidos os modelos físicos que serão aplicados à simulação, de a criar a melhor modelagem do problema de interesse. Nela se encontra modelos referentes a troca de calor, viscosidade, radiação, fases do elemento, espécies e reações químicas e etc.

Neste trabalho a opção de energia foi habilitada, mas apenas os modelos referentes a viscosidade e transporte de espécies foram de interesse.

a) Viscosidade - Modelo de turbulência k - ϵ : Antes de falar sobre a escolha, é importante fazer uma breve revisão sobre os modelos computacionais de turbulência. Escoamentos turbulentos são caracterizados por campos de velocidade flutuantes. Essas flutuações misturam quantidades transportadas, como momento, energia e concentração de espécies, e fazem com que as quantidades transportadas também fltuem. Como essas flutuações podem ser de pequena escala e alta frequência, elas são caras em termos computacionais para serem simuladas diretamente em cálculos práticos de engenharia. Em vez disso, as equações instantâneas (exatas) que governam podem ser médias do tempo, médias do conjunto ou manipuladas para remover a resolução de pequenas escalas, resultando em um conjunto modificado de equações que são computacionalmente mais baratas de resolver. No entanto, as equações modificadas contêm variáveis desconhecidas adicionais e modelos de turbulência são necessários para determinar essas variáveis em termos de quantidades conhecidas.

As flutuações nas variáveis são assumidas na forma $f = \bar{f} + f'$ onde \bar{f} é o valor médio de f e f' representa a flutuação em torno da média, pode-se obter as equações de momento e continuidade de tempo médio (NALLASAMY, 1987):

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = 0 \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_i} + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 u_i - \frac{\partial R_{ij}}{\partial x_j} \quad (5.2)$$

onde $R_{ij} = \overline{u_i u_j}$, a tensão de Reynolds. Com objetivo de estabelecer um modelo de turbulência menos complicado que as equações completas, é necessário estabelecer um jeito de calcular R_{ij} em termos da variável \bar{u}_i , estatísticas de turbulência de ordem elevada e algumas constantes provenientes de dados experimentais.

Os procedimentos numéricos que são associados aos modelos de turbulência para a realização dos cálculos podem ser divididos entre os tipos *integrais* e os *diferenciais*. Os diferenciais envolvem suposições diretas para a tensão de Reynolds em um ponto e procuram a solução para as equações governantes em suas formas diferenciais parciais. Já os métodos integrais envolvem os parâmetros integrais da espessura da camada limite de cisalhamento, parâmetro de forma, coeficiente de atrito da parede etc. (NALLASAMY, 1987)

Os modelos de turbulência podem ser classificados de várias maneiras. Uma das mais usadas é em função do número de equações diferenciais que são resolvidas além das equações médias do escoamento:

- (I) Modelos de zero equações
- (II) Modelos de uma equação
- (III) Modelos de duas equações
- (IV) Modelo de equações de tensões

A maioria dos modelos, classes de I a III, utilizam o modelo de viscosidade *eddy* de Boussinesq. Outros modelos como os da classe IV não utilizam a suposição da viscosidade *eddy*, obtendo a tensão de Reynolds a partir de equações diferenciais.

O **ANSYS Fluent** fornece os seguintes modelos de turbulência:

- Modelo de Spalart - Allmaras
- Modelos $\kappa - \epsilon$
- Modelos $\kappa - \omega$
- Modelos de tensão de Reynolds (RSM)
- Modelos simulação eddy desanexada (DES)
- Modelo de simulação eddy larga (LES)

Dois métodos alternativos podem ser empregados para tratar a equação de Navier - Stokes de modo que as flutuações turbulentas de pequena escala não precisem ser

diretamente simuladas: média de Reynolds e filtragem. Ambos os métodos introduzem termos adicionais nas equações governantes que precisam ser modeladas para alcançar um "desfecho" das variáveis desconhecidas. (ANSYS, 2013)

As equações de *Reynolds - averaged Navier - Stokes* (RANS) regem o transporte da quantidades médias do escoamento, com uma grande extensão de escalas de turbulência sendo modeladas. Essa abordagem reduz bastante o esforço computacional, sendo adotada em inúmeras práticas de engenharia.

O LES fornece uma abordagem alternativa na qual os grandes *eddies* são explicitamente computados (resolvidos) em uma simulação dependente do tempo, usando as equações de Navier-Stokes "filtradas". A lógica por trás do LES é que, modelando menos turbulência (e resolvendo mais), o erro introduzido pela modelagem de turbulência pode ser reduzido, e acredita-se que seja mais fácil encontrar um modelo "universal" para as pequenas escalas, pois elas tendem a ser mais isotrópicas e menos afetadas pelas características macroscópicas, como condições de contorno, do que aos grandes *eddies*. A filtragem é essencialmente uma manipulação matemática das equações exatas de Navier-Stokes para remover os *eddies* menores que o tamanho do filtro, o que geralmente é considerado o tamanho da malha quando a filtragem espacial é empregada como no ANSYS FLUENT. Como a média de Reynolds, o processo de filtragem cria termos desconhecidos adicionais que devem ser modelados para obter o fechamento. Estatísticas dos campos de fluxo variáveis no tempo, como médias de tempo e r.m.s. os valores das variáveis da solução, geralmente de maior interesse de engenharia, podem ser coletados durante a simulação dependente do tempo. (ANSYS, 2013)

O LES para altos fluxos industriais de número de Reynolds requer uma quantidade significativa de recursos computacionais. Isso ocorre principalmente devido à necessidade de resolver com precisão os redemoinhos turbulentos que contêm energia nos domínios do espaço e do tempo, que se tornam mais agudos nas regiões próximas à parede, onde as escalas a serem resolvidas se tornam muito menores. As funções de parede em combinação com uma malha grossa de parede próxima podem ser empregadas, geralmente com algum sucesso, para reduzir o custo do LES para fluxos limitados por parede. No entanto, é preciso considerar cuidadosamente a ramificação do uso de funções de parede para o fluxo em questão. Pelo mesmo motivo (para resolver com precisão os redemoinhos), o LES também requer discretizações espaciais e temporais altamente precisas.

O modelo de turbulência utilizado neste trabalho foi o $\kappa - \epsilon$ *Realizable*. Os três modelos disponíveis, *standard*, *RNG* e *realizable*, são semelhantes, com diferenças principais no cálculo da viscosidade turbulenta, os números turbulentos de Prandtl que governam a difusão turbulenta do κ e ϵ e os termos na equação do ϵ .

Os "modelos completos" mais simples de turbulência são os modelos de duas equações, nos quais a solução de duas equações de transporte separadas permite que as escalas

de velocidade e comprimento turbulentos sejam determinadas independentemente. Robustez, economia e precisão razoável para uma ampla gama de fluxos turbulentos explicam sua popularidade no setor industrial em simulações de fluxo e transferência de calor. É um modelo semi-empírico, e a derivação das equações do modelo baseia-se em considerações fenomenológicas e empirismo. Esse modelo foi escolhido devido a essa abrangência de aplicações, enquanto o modelo realizável foi por já ter tido sucesso em outras simulações semelhantes e anteriores a este trabalho.

b) Espécies - Desligado: Como o nome sugere, nas simulações frias não ocorrem reações químicas, apenas o desenvolvimento do escoamento até a fase estacionária. A escolha do modelo de reação será explicado na sessão da simulação quente.

5.3.3.2 Simulações Quentes

O setup das simulações quentes é bastante semelhante à da simulação fria, mudando apenas a dependência temporal e a escolha da modelagem das espécies.

1. Parte geral

a) Solucionador - Método baseado na pressão:

b) Velocidade - Absoluta:

c) Tempo - Estacionário: O tempo nestas simulações foi o estacionário pois o objetivo é atestar as características da chama e distribuição das espécies na fase estável.

2. Modelos

a) Viscosidade - Modelo de turbulência $k - \epsilon$:

b) Modelagem das Espécies - Transporte de espécies - Volumétrico: O ANSYS FLUENT disponibiliza 5 modelos para as espécies: transporte de espécies, combustão sem pré - mistura, combustão com pré - mistura, combustão com pré - mistura parcial e transporte de composição PDF. Diante do problema, as duas primeiras opções eram as possíveis.

A modelagem sem pré-mistura consiste na solução de equações de transporte para um ou dois escalares conservados (as frações da mistura). Equações para espécies individuais não são resolvidas. Em vez disso, as concentrações de espécies são derivadas dos campos de fração de mistura previstos. Os cálculos de termoquímica são pré-processados e depois tabulados para consulta no ANSYS FLUENT. A interação de turbulência e química é explicada com uma Função de Densidade de Probabilidade (PDF) em formato presumido. (ANSYS, 2013)

Essa seria a escolha se o mecanismo escolhido fosse o GRIMech 3.0, devido a quantidade enorme de espécies envolvidas nas reações. Como o mecanismo usado foi um reduzido de apenas 6 equações e 10 espécies, o modelo de transporte de espécies foi o

utilizado, com o objetivo de levar em conta as taxas de reação e realizar um cálculo mais preciso e satisfatório. Nesta modelagem, múltiplas reações químicas simultâneas podem ser calculadas.

Quando a resolução das equações de conservação das espécies é escolhida, o ANSYS FLUENT prediz a fração mássica local de cada espécie Y_i , através da solução de uma equação de convecção - difusão para as $i_{ésimas}$ espécies. Esta equação assume a seguinte forma geral:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (5.3)$$

onde R_i é a taxa líquida de produção das espécies i por reação química e S_i é a taxa de criação por adição da fase dispersa mais qualquer fonte definida pelo usuário. O \vec{J}_i é o fluxo de difusão das espécies i , que surge devido a gradientes de concentração e temperatura. Para escoamentos laminares, por padrão, o ANSYS FLUENT usa a aproximação diluída (também chamada lei de Fick) para modelar a difusão em massa devido a gradientes de concentração, nos quais o fluxo de difusão pode ser escrito como:

$$\vec{J}_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (5.4)$$

onde $D_{i,m}$ é o coeficiente de difusão de massa para as espécies i na mistura, e $D_{T,i}$ é o coeficiente de difusão térmica. (ANSYS, 2013)

Já para escoamentos turbulentos, a difusão de massa é computada da seguinte forma:

$$\vec{J}_i = -\left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right) \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (5.5)$$

onde Sc_t é o número Schmidt turbulento.

Além disso, as taxas de reação que aparecem como termos de fonte na equação 5.3, para escoamentos turbulentos, podem ser computados de através de três modelos: modelo laminar de taxa finita, modelo de dissipação de redemoinhos, e o conceito de dissipação de redemoinhos (EDC).

O modelo escolhido neste trabalho foi o EDC, pois a cinética química detalhada de Arrhenius pode ser incorporada em chamas turbulentas. Apesar dos cálculos cinéticos químicos detalhados serem computacionalmente caros, o tamanho do domínio e o mecanismo reduzido permitiram a escolha desse modelo. No EDC, é assumido que a reação ocorre em pequenas estruturas turbulentas, chamadas de escalas finas. (ANSYS, 2013)

5.3.3.3 Condições de contorno

As condições de contorno usadas neste trabalho foram bastante semelhantes as usadas em (SOUZA; SHYNKARENKO,), ilustradas na figura 25.

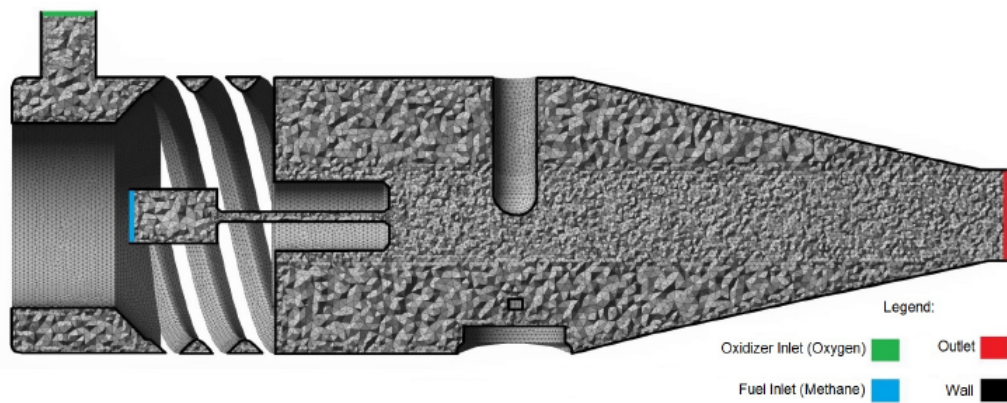


Figura 25 – Condições de contorno no plano central do ignitor(SOUZA; SHYNKARENKO,).

As entradas de combustível e oxidante foram definidas como entradas de fluxo de massa, com uma taxa de 0,351 g/s para o metano e 2,03 g/s para o oxigênio, ambos a 300 K. Com intuito de configurar as condições de operação para 0, apenas por conveniência durante as simulações, a saída de volume, definida como uma saída de pressão, possui uma pressão manométrica de 101325 Pa. Enquanto isso, ambos oxigênio e metano tiveram uma pressão de entrada de 3 bar.

Parte III

Resultados e Discussão

6 Simulações e resultados

6.1 Simulações no CEA

Abaixo está alguns gráficos demonstrando resultados obtidos das simulações no NASA CEA:

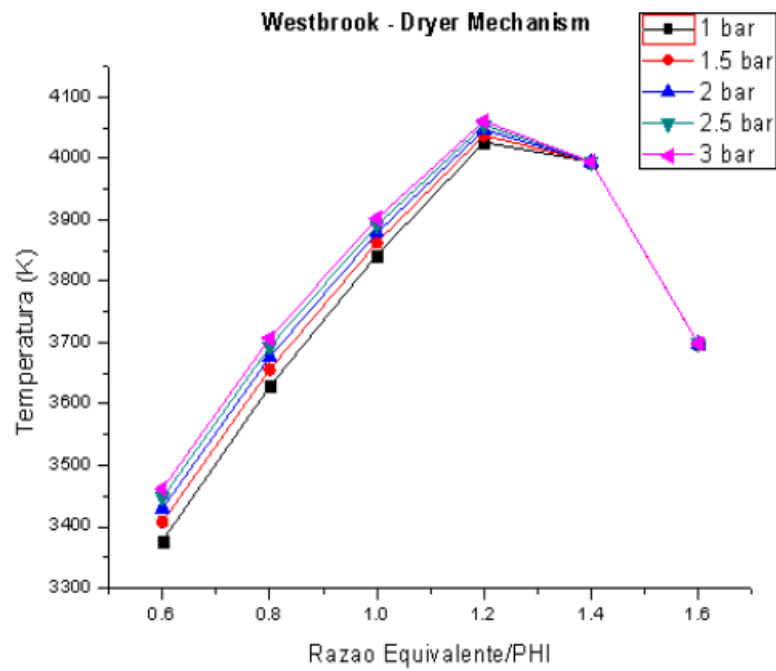


Figura 26 – Variação da temperatura máxima em função da pressão e razão equivalente para mecanismo WD. Elaboração própria.

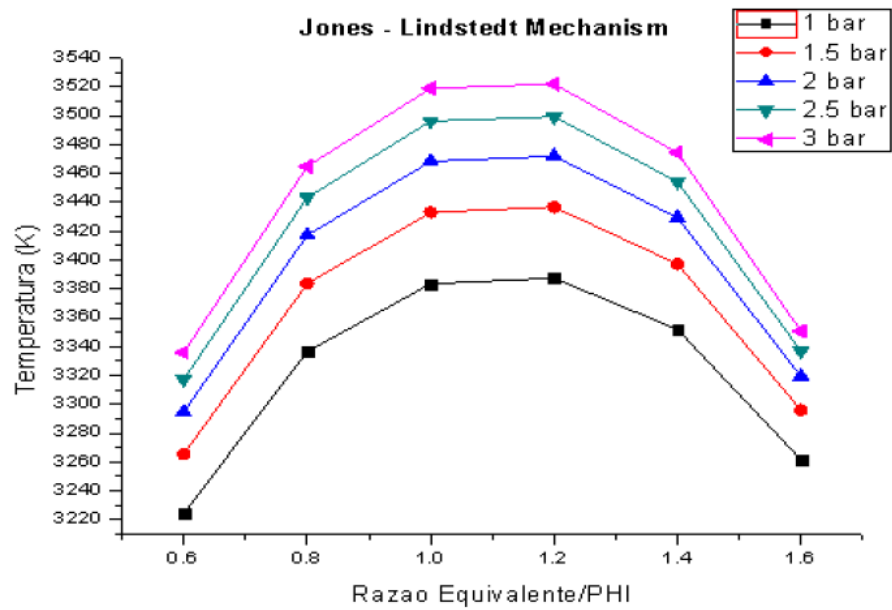


Figura 27 – Variação da temperatura máxima em função da pressão e razão equivalente para mecanismo JL. Elaboração própria.

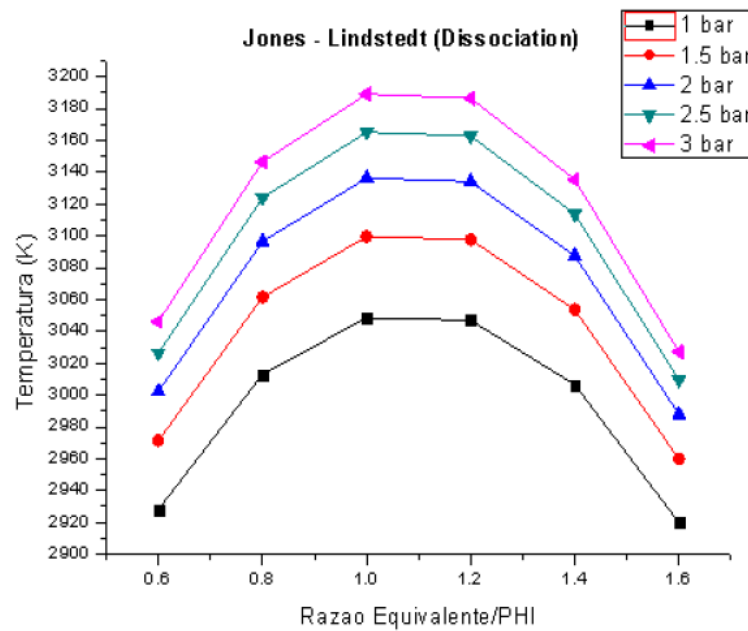


Figura 28 – Variação da temperatura máxima em função da pressão e razão equivalente para mecanismo JLD. Elaboração própria.

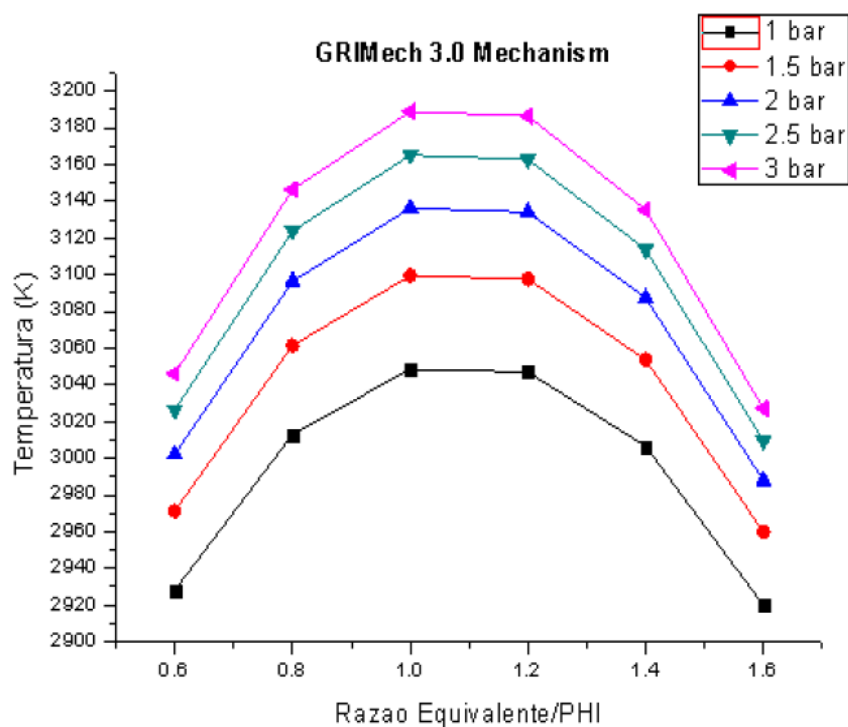


Figura 29 – Variação da temperatura máxima em função da pressão e razão equivalente para mecanismo GRIMech. Elaboração própria.

Observando estes gráficos, foi perceptível que a temperatura máxima encontrada no mecanismo WD foi bastante elevada, acima de 4000 K, não condizente com os dados experimentais já encontrados. Por ser uma reação bastante simples e que não leva em conta nenhuma dissociação, era esperado um resultado assim. O mecanismo JL apresentou resultados mais coerentes, com temperaturas máximas acima de 3500 K, porém, ainda fora de realidade. O resultado mais interessante que o CEA forneceu, foi a semelhança entre os mecanismos JL - D e GRI Mech 3.0. Como já foi citado, este último possui uma centena de reações e leva conta 53 espécies, sendo uma aproximação bastante próxima de reações reais. O fato de um mecanismo reduzido à apenas 6 reações e 9 espécies químicas, fornecer resultados tão satisfatórios quanto um conjunto tão complexo assim, é bastante satisfatório, visto que valida o uso desse modelo computacional, dando aval para seu uso em simulações posteriores. Ainda sobre os resultados encontrados no CEA, mesmo com o uso do GRI Mech 3.0, a temperatura encontrada pelo software divergiu bastante das encontradas nos experimentos realizados em (JUNIOR, 2016). Isso se deve à disparidade das condições em que ambos os dados são colhidos, visto que o software simula a reação em condições adiabáticas e perfeitas, enquanto em um experimento real, inúmeras perdas fluidodinâmicas e de temperatura acontecem, além do sistema e coleta de dados não serem perfeitas.

6.2 Simulações no CHEMKIN

Em concordância aos resultados do CEA, as simulações no CHEMKIN foram positivas em relação ao mecanismo JL-D, negativas em relação ao WD, mostrando que ele pode ser usado com uma precisão interessante em relação ao GRIMech 3.0

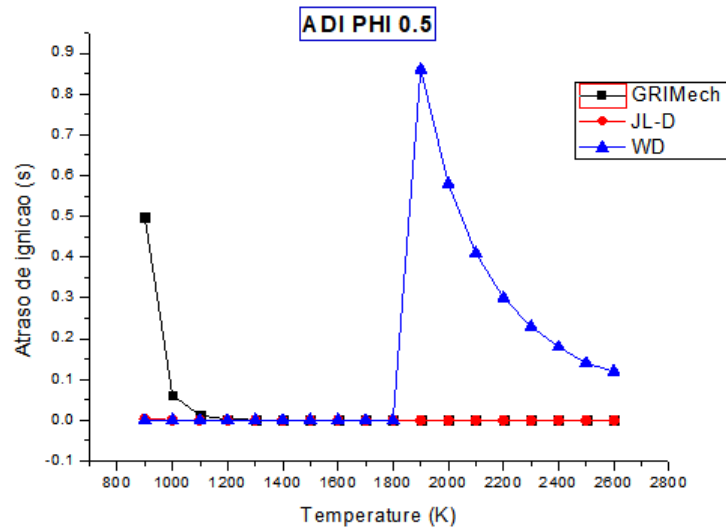


Figura 30 – ADI para três mecanismos de reação com razão equivalente de 0.5. Elaboração Própria

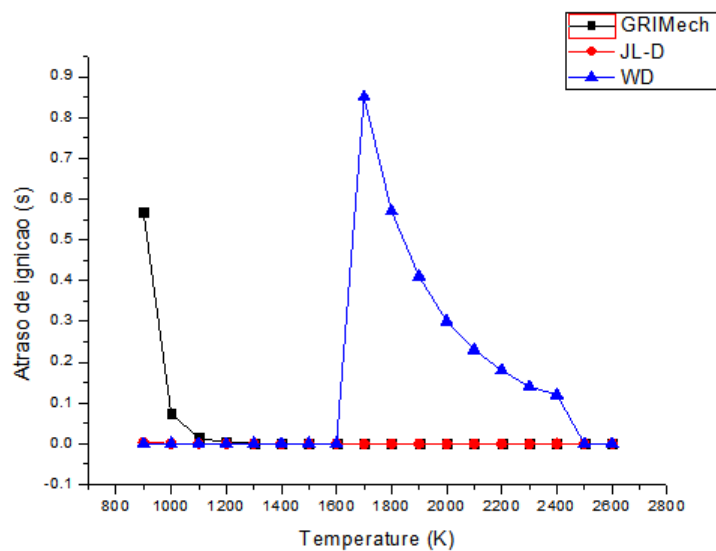


Figura 31 – ADI para três mecanismos de reação com razão equivalente de 0.7. Elaboração Própria

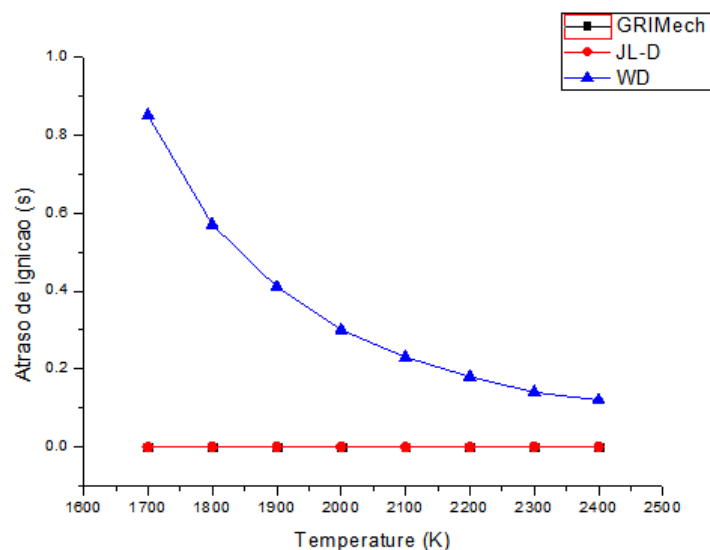


Figura 32 – ADI para três mecanismos de reação com razão equivalente de 0.7, temperatura variando de 1700 a 2400. Elaboração Própria

Avaliando os gráficos é perceptível o quão semelhante são os valores de ADI na faixa de temperatura entre 1200 K a 2600 K. Esse valor de temperatura foi escolhido para o estudo por ser a com resultados mais confiáveis como visto em (SPADACCINI; III, 1994).

Analisando os mecanismos de forma independente, se atentando a temperatura, é perceptível que quanto maior a temperatura inicial, menor é o atraso no início da combustão. Além disso, é visto que quanto maior é essa energia inicial, menos relevante é a proporção de reagentes, com o ADI convergindo para o mesmo valor, demonstrando que a partir de certa temperatura, os efeitos térmicos são mais importantes que os cinéticos inerentes à reação.

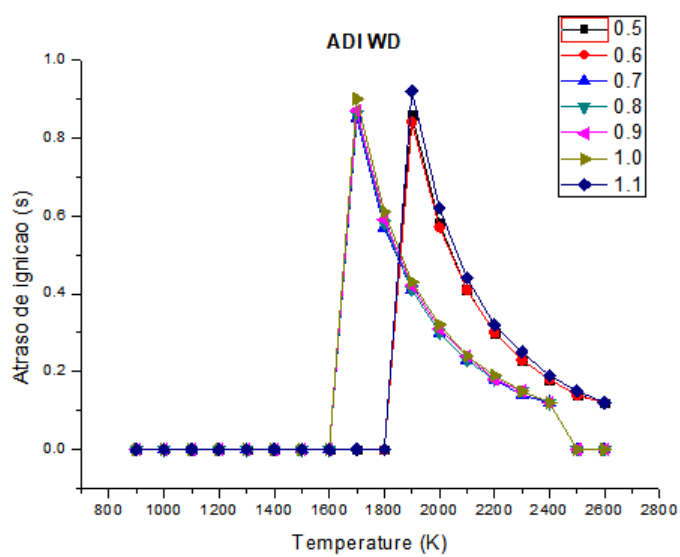


Figura 33 – Atraso de ignição para o mecanismo WD, variando a razão equivalente de 0.5 a 1.1. Elaboração Própria

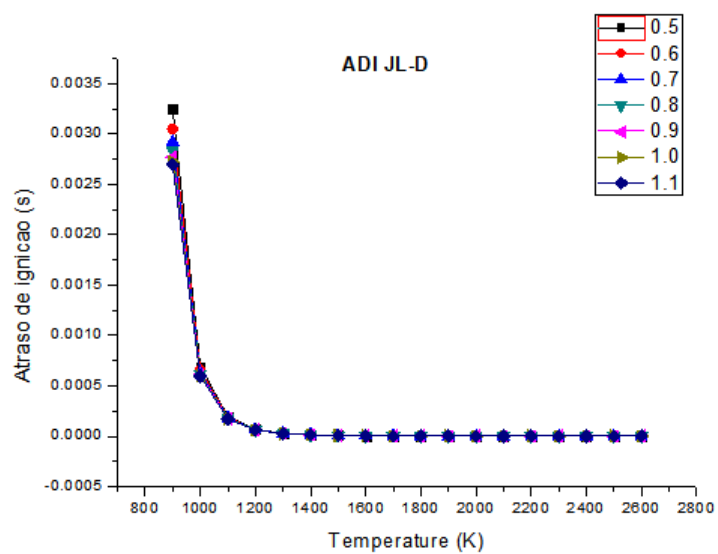


Figura 34 – Atraso de ignição para o mecanismo JL-D, variando a razão equivalente de 0.5 a 1.1. Elaboração Própria

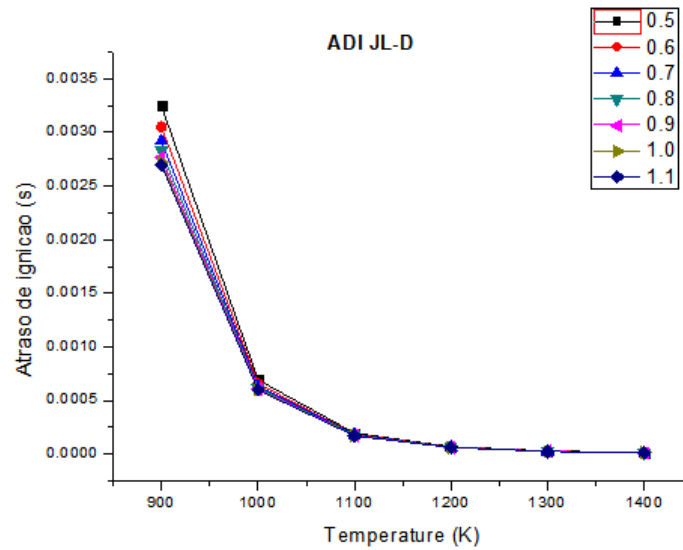


Figura 35 – Atraso de ignição para o mecanismo JL-D, variando a razão equivalente de 0.5 a 1.1, temperatura entre 900 e 1400. Elaboração Própria

Também é perceptível a influência da razão equivalente no ADI. É visto que quanto mais rica a mistura, em temperaturas mais baixas, maior o atraso de ignição, sendo um resultado condizente com a referência teórica. Em (MERHUBI et al., 2016) esse comportamento é discutido e acontece devido a competição entre as reações $H + O_2 = O + OH$ e $CH_4 + H = CH_3 + H_2$, que devido ao seu consumo de átomos de H, inibe a primeira reação. O que explica a diminuição de reatividade com o aumento da concentração de CH_4 .

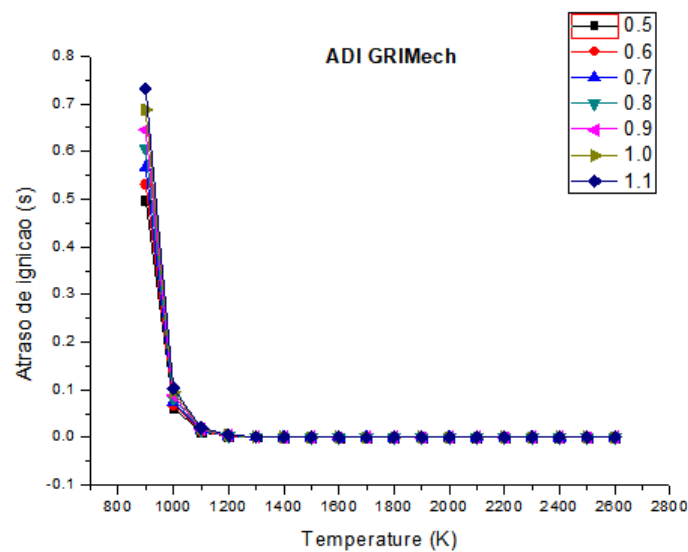


Figura 36 – Atraso de ignição para o mecanismo GRIMech, variando a razão equivalente de 0.5 a 1.1. Elaboração Própria

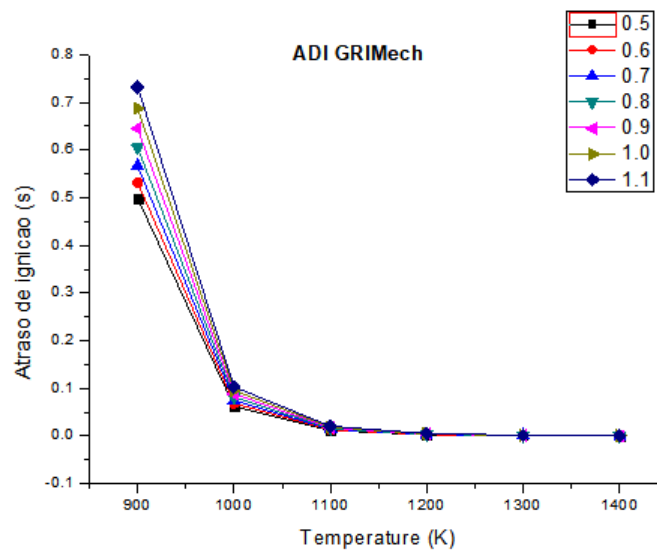


Figura 37 – Atraso de ignição para o mecanismo GRIMech, variando a razão equivalente de 0.5 a 1.1, temperatura entre 900 e 1400. Elaboração Própria

6.3 Simulações no Fluent

6.3.1 Simulações frias

As simulações frias mostraram que o escoamento atingiu o estado estacionário por volta de 0.2 segundos, tanto para a configuração com injetor cilíndrico quanto para com o injetor cônico. Para avaliar o andamento da simulação e avaliar a acurácia das malhas para decidir qual seria usada nas simulações quentes, 3 pontos foram analisados, denominados: central, region e middle. Abaixo, há uma tabela mostrando o tempo médio por iteração das malhas com injetor cilíndrico durante as simulações, além de gráficos demonstrando o comportamento da fração mássica do metano nos pontos *region* e *middle*:

Malha	Tempo médio por iteração (s)
L 50	2.729
L 25	5.133
Padrão	8.03
M 25	17.166

Tabela 9 – Tempo por iteração para as malhas com injetor cilíndrico

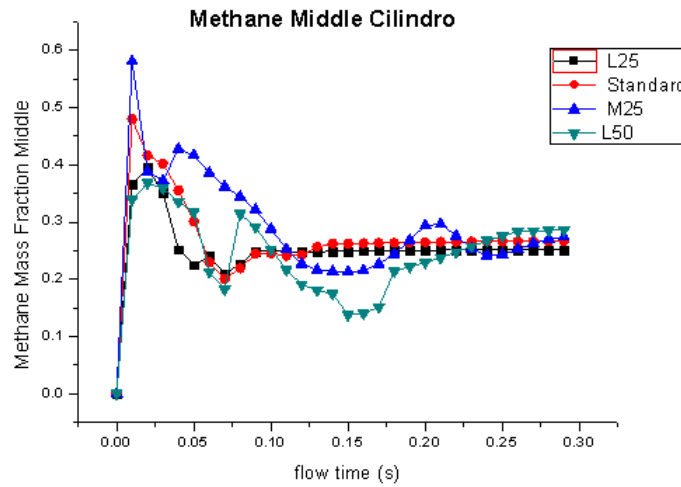


Figura 38 – Fração mássica do metano no ponto middle para as quatro malhas simuladas, injetor cilíndrico..Elaboração Própria

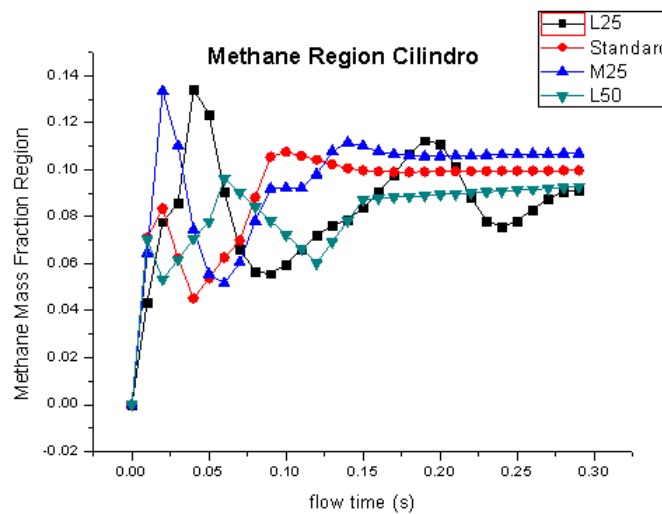


Figura 39 – Fração mássica do metano no ponto region para as quatro malhas simuladas, injetor cilíndrico..Elaboração Própria

Analisando a tabela e os gráficos, é possível ver o quão dispendioso a simulação se torna com o refinamento do domínio, visto que o tempo quase dobra de uma malha para outra. Os dados demonstram a acurrácia da malha padrão, visto que apesar de ela possuir um tempo quase 4 vezes maior que o da malha mais pobre, se aproxima bastante do resultado da M25, o que justificou a escolha do seu uso nas simulações quentes.

Malha	Tempo médio por iteração (s)
L 50	2.446
L 25	3.842
Padrão	6.295
M 25	12.865

Tabela 10 – Tempo por iteração para as malhas com injetor cônico

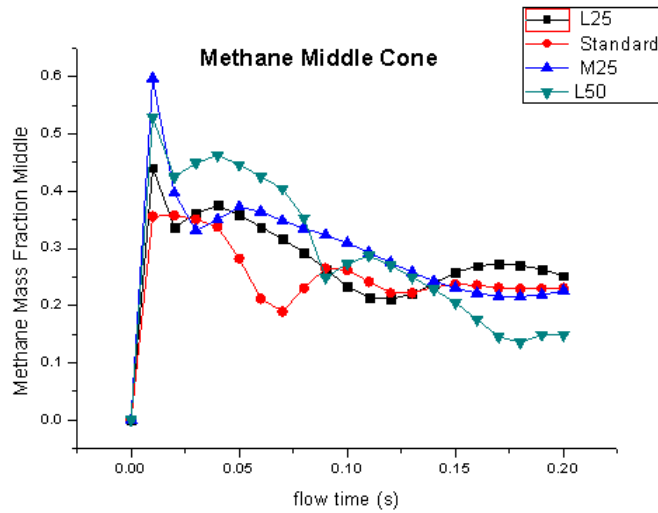


Figura 40 – Fração mássica do metano no ponto middle para as quatro malhas simuladas, injetor cônico. Elaboração Própria

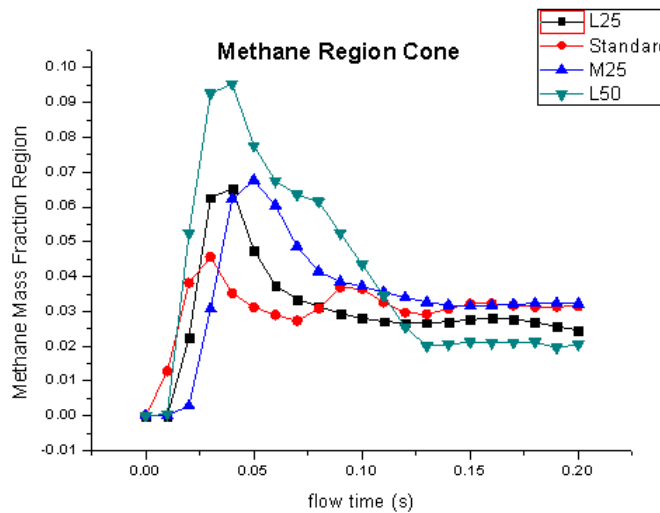


Figura 41 – Fração mássica do metano no ponto region para as quatro malhas simuladas, injetor cônico. Elaboração Própria

Os resultados encontrados para o injetor cônico foram semelhantes aos do cilíndrico, devido a isto, a malha padrão também foi a escolhida para a simulação quente.

Quanto as características do escoamento, os resultados se mostraram bastante interessantes em relação a influência da diferença entre as geometrias dos injetores. Comparando a fração mássica do metano no plano central, é notório que a distribuição com o injetor cônico é muito mais concentrada, como pode ser observado comparando as figuras (42) e (43), em que é visível que quase não há metano fora da câmara de combustão, ao contrário do ignitor com injetor cilíndrico.

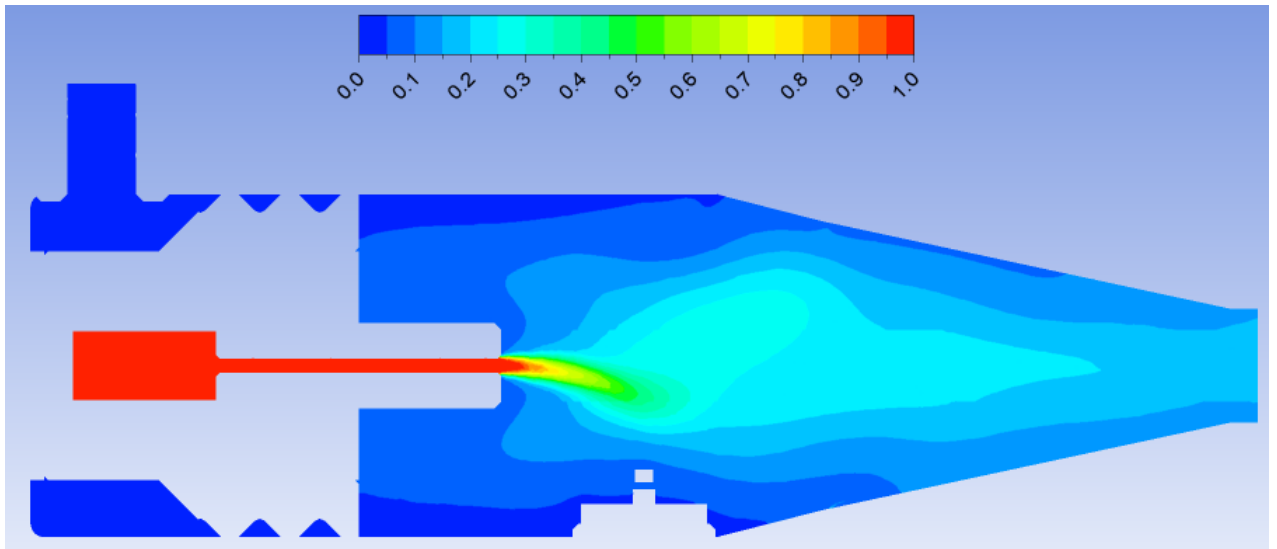


Figura 42 – Fração mássica do metano no plano central do ignitor, injetor cilíndrico.

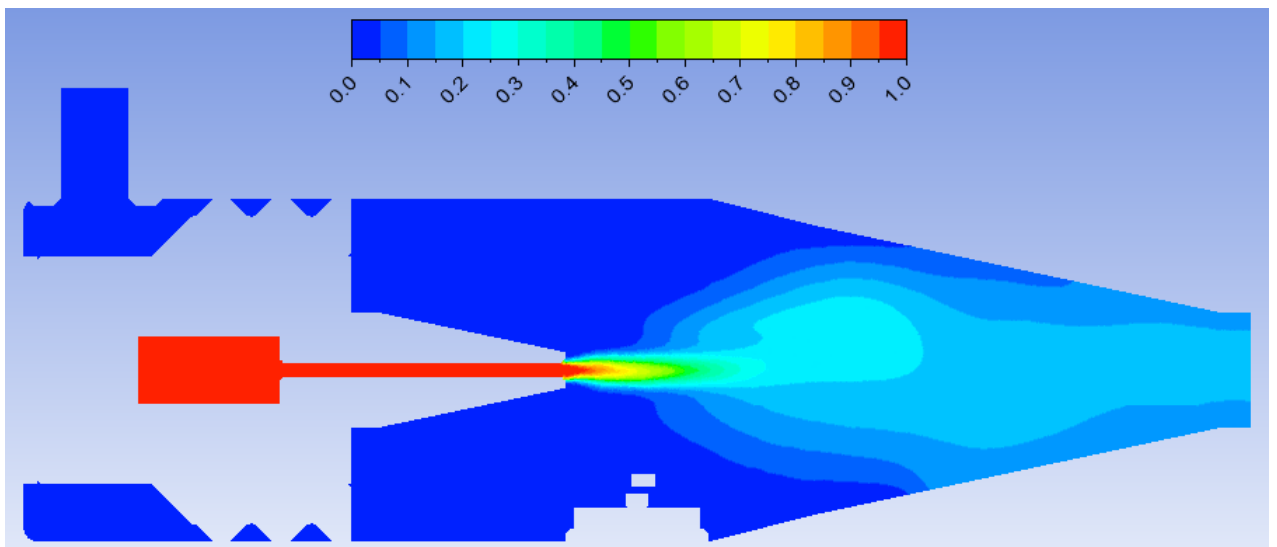


Figura 43 – Fração mássica do metano no plano central, injetor cônico.

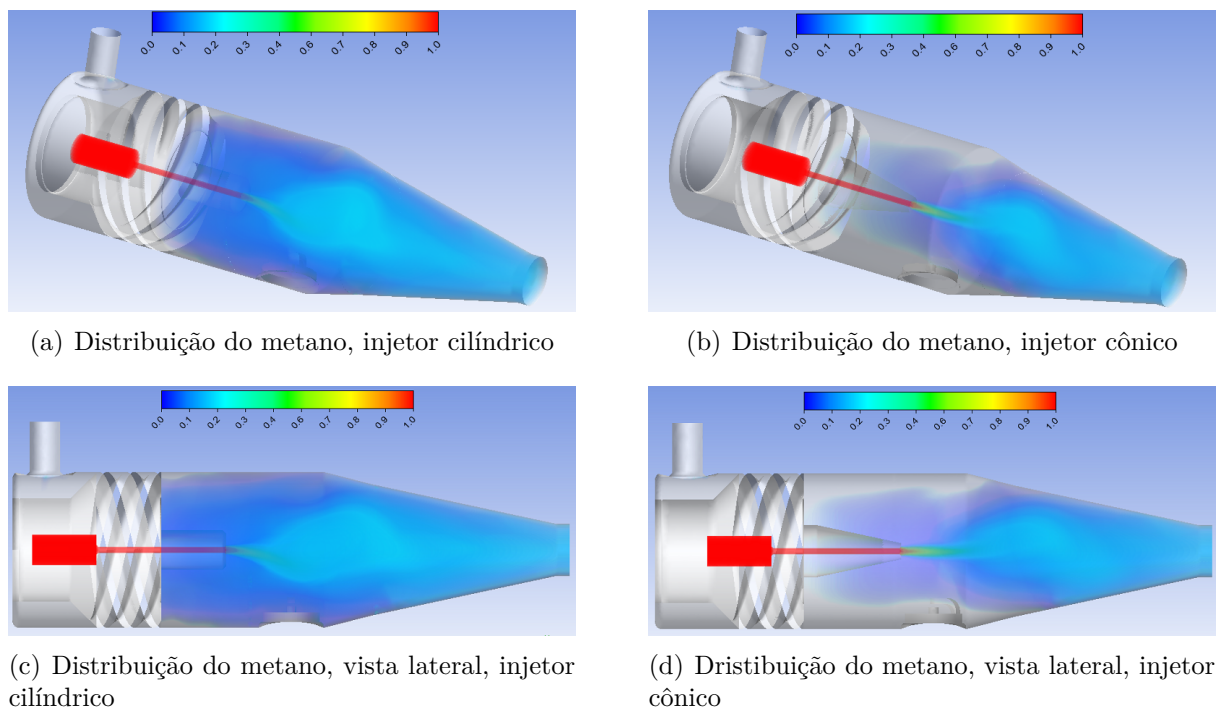
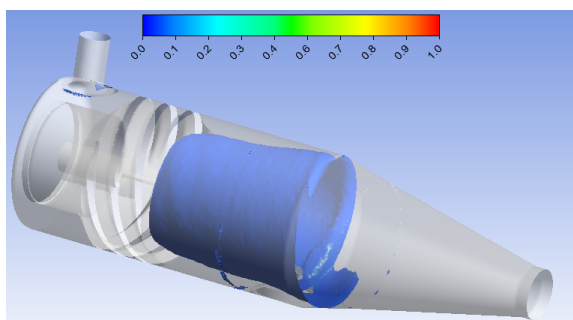
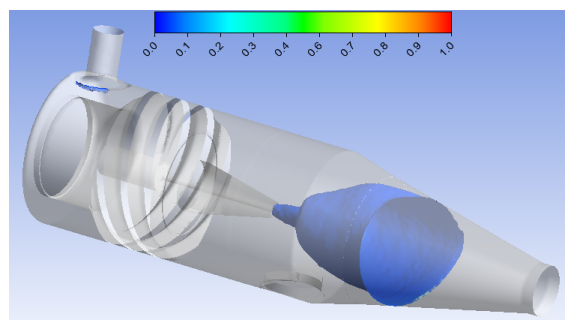


Figura 44 – Distribuição do metano em ambas as configurações.

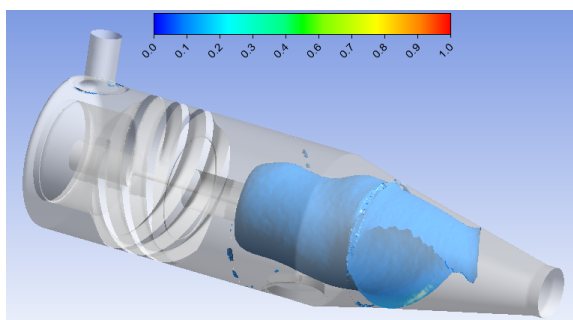
Analisando as imagens tridimensionais da distribuição do metano nos injetores, pode-se ver mais claramente que no injetor cilíndrico, muito metano acaba voltando, o que pode influenciar negativamente tanto na combustão, já que o combustível está mal distribuído, quanto na integridade do ignitor pois a presença de metano nessas regiões pode causar um aumento inesperado na temperatura das paredes internas, visto que o baixo limite inferior de inflamabilidade do metano torna propícia a queima nesta região. A energia cinética proveniente da injeção em espiral do oxidante, colabora de forma positiva para a injeção no "ignitor cônico", onde o oxidante se agarra à superfície do injetor fazendo com que o metano saia mais concentrado. Por outro lado, no injetor cilíndrico ela acaba encontrando uma resistência maior, o que resulta em fluxos reversos que espalham o combustível.



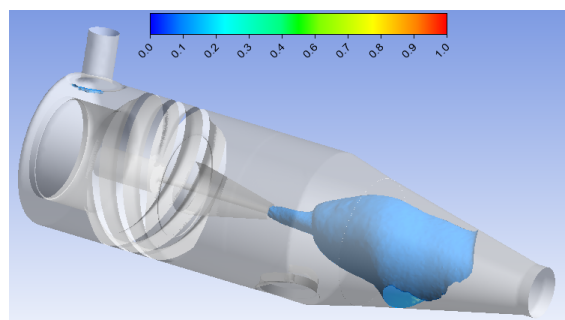
(a) Superfície com fração mássica do metano igual a 0.05, injetor cilíndrico



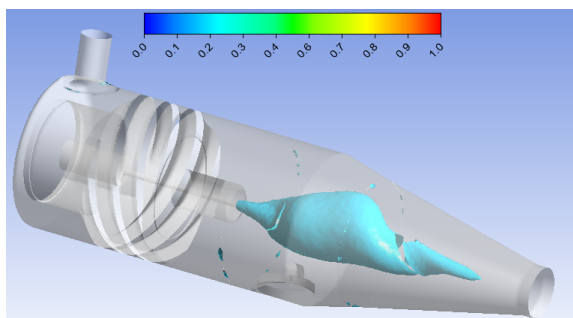
(b) Superfície com fração mássica do metano igual a 0.05, injetor cônico



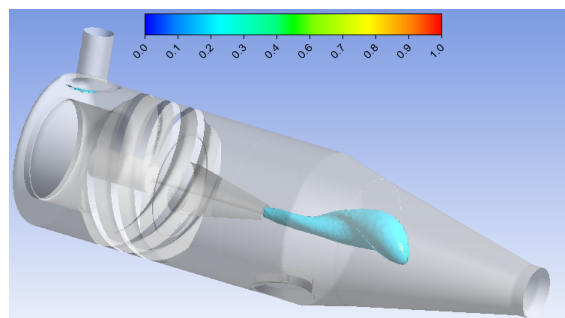
(c) Superfície com fração mássica do metano igual a 0.1, injetor cilíndrico



(d) Superfície com fração mássica do metano igual a 0.1, injetor cônico



(e) Superfície com fração mássica do metano igual a 0.2, injetor cilíndrico



(f) Superfície com fração mássica do metano igual a 0.2, injetor cônico

Figura 45 – Iso - superfícies do metano em ambas as configurações, frações 0.05, 0.1 e 0.2

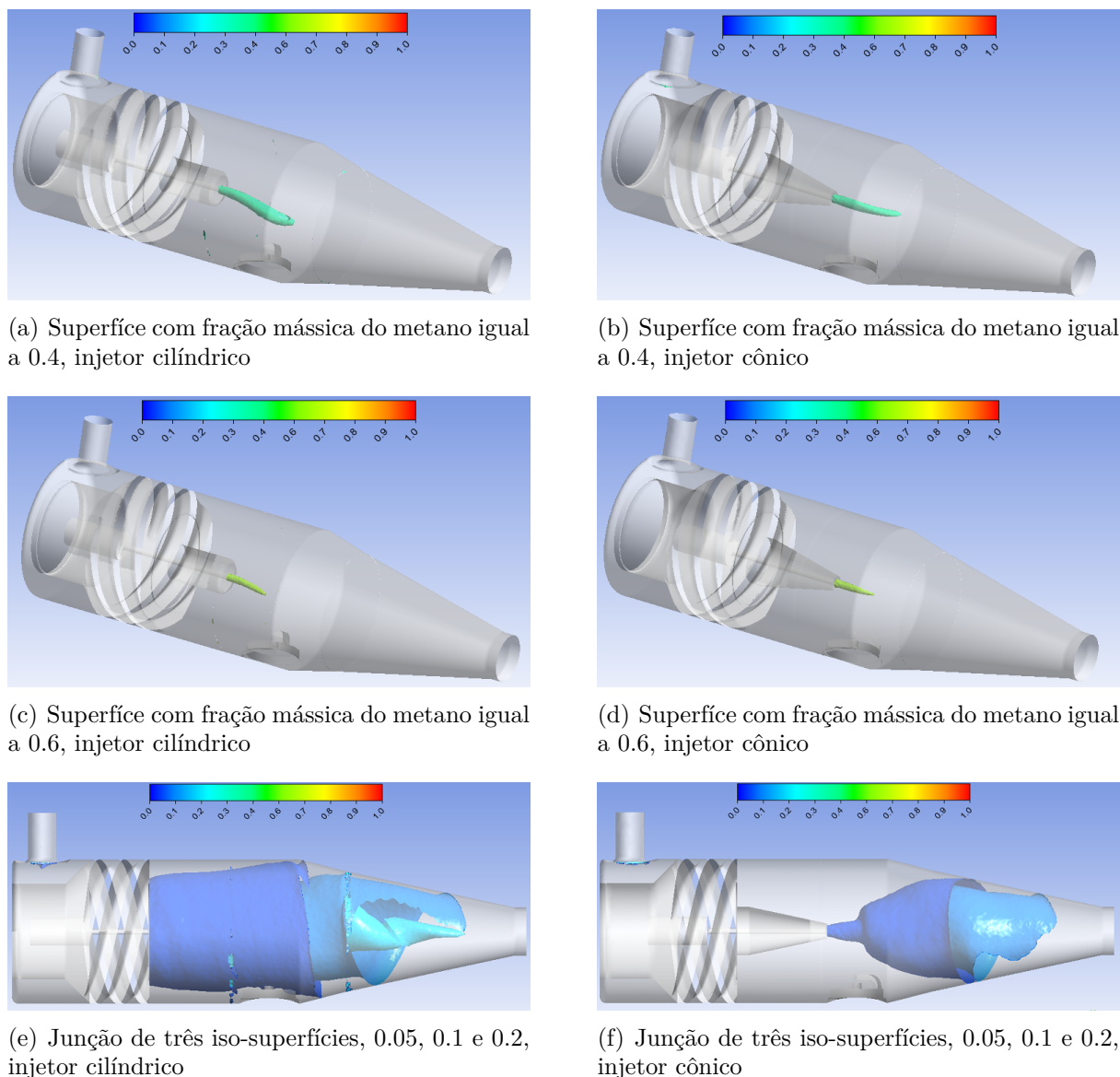


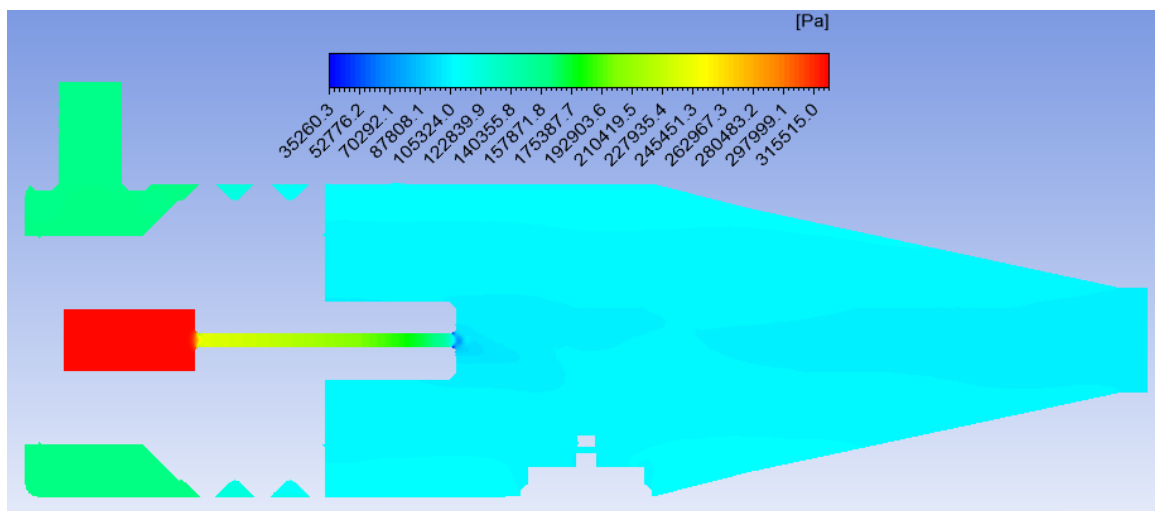
Figura 46 – Iso - superfícies do metano em ambas as configurações, frações 0.4, 0.6 e junção de baixas frações mássicas

As imagens nas figuras (45) e (46) reforçam o que já foi discutido. Em (45 - a) e (45 - c), pode - se notar a presença de bastante metano próximo ao swirl e ao redor do injetor que, apesar de em pouca concentração, compromete a qualidade da queima e integridade do ignitor. Em contrapartida, em (45 - b), (45 - d) e (45 - f), é possível ver que o escoamento se comporta de forma mais suave e restrita, com pouco espalhamento do combustível para fora da zona de reação.

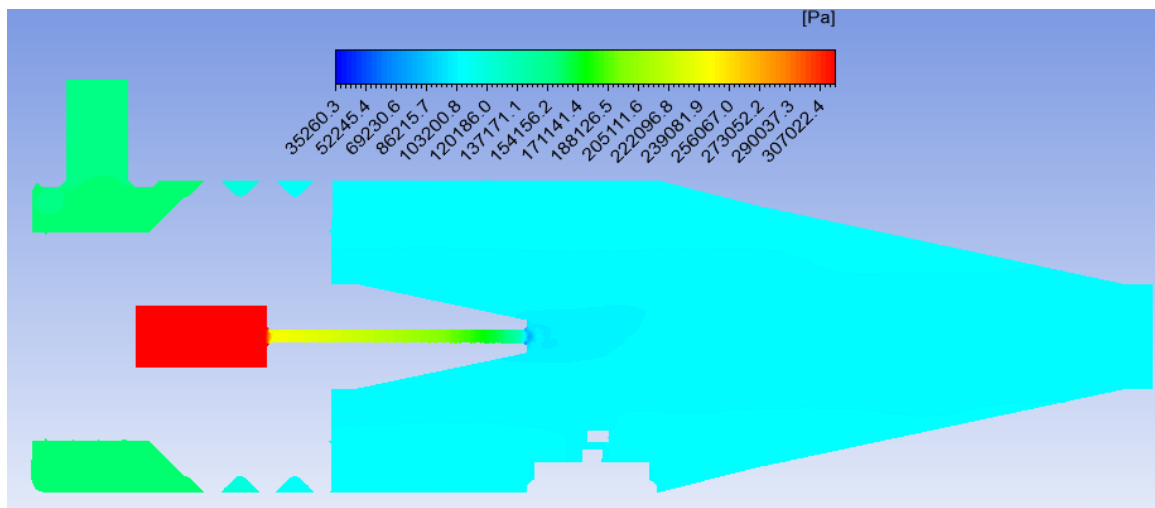
Comparando as imagens (46 - a) e (46-c) com as (46-b) e (46-d), pode - se notar um declive do combustível na saída do injetor cilíndrico, o que não acontece na outra configuração, onde o metano é injetado de forma quase completamente retilínea. Por último, comparando (46 - e) e (46 - f) fica evidente a qualidade da injeção da configuração

cônica, onde pouquíssimo combustível escapa da câmara de combustão.

Esse fenômeno é devido a zona divergente que o injetor cônico proporciona, visto que no momento que o oxigênio se expande ao redor do injetor, o aumento de pressão mantém a injeção de metano mais restrita. O mesmo não ocorre com o injetor cilíndrico, já que o escoamento de forma paralela não proporciona nenhum efeito de pressão. A figura (47) mostra a diferença de pressão entre os ignitores. É perceptível em (47 - b) uma zona de maior pressão que se estende ao longo de quase todo corpo do ignitor, responsável pela restrição do escoamento do metano. Em (47 - a) ela é bem menor.



(a) Pressão no plano central do injetor cilíndrico



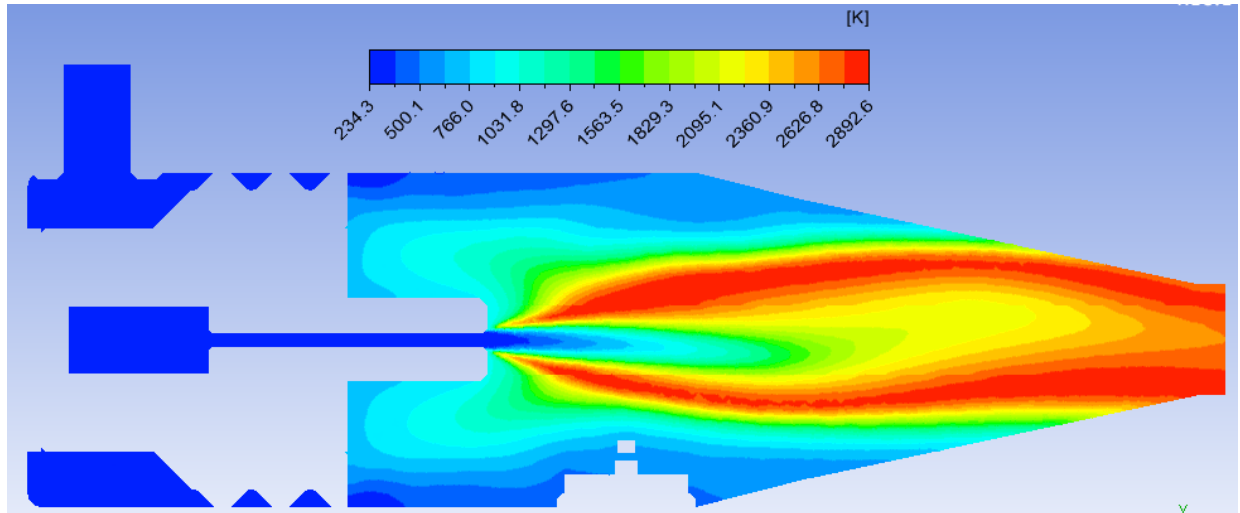
(b) Pressão no plano central do injetor cônico

Figura 47 – Pressão no plano central de ambos ignitores

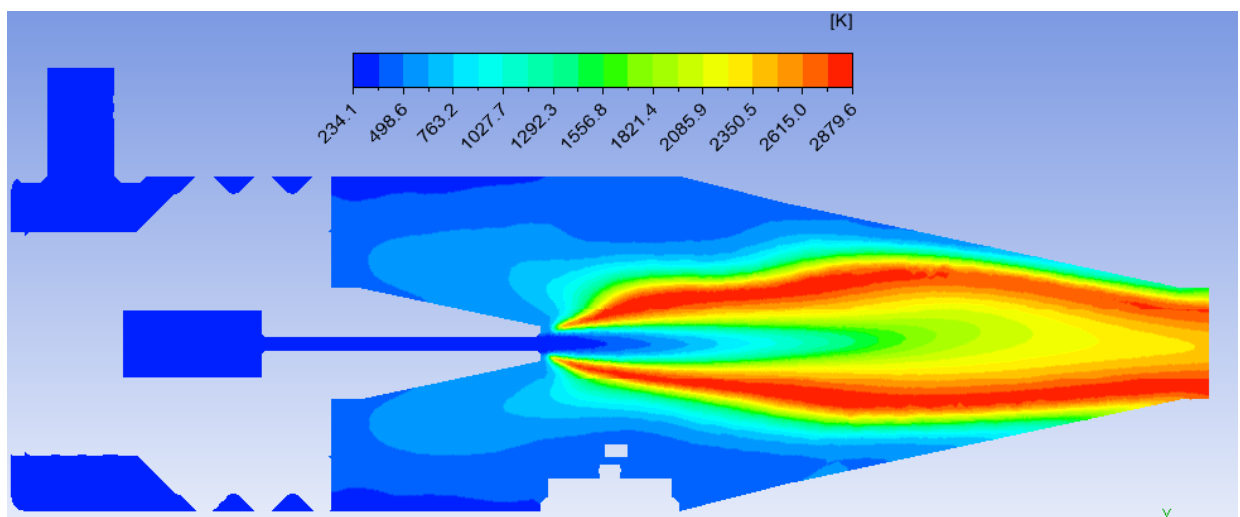
6.3.2 Simulações quentes

As simulações quentes foram realizadas com o intuito de avaliar a chama em ambos os ignitores e determinar finalmente o melhor injetor, para garantir tanto a melhor

desempenho, quanto a integridade do componente. Olhando apenas a distribuição de temperatura da chama na figura (48), é notório o problema esperado no ignitor de injeção cilíndrica: há uma elevação da temperatura na base do injetor, aquecendo-o bastante.



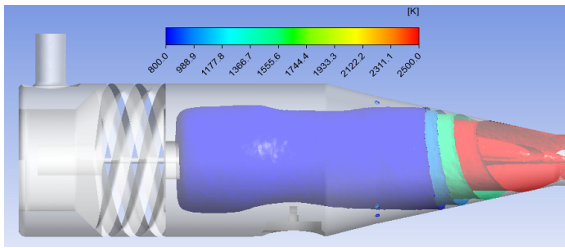
(a) Temperatura da chama no plano central do ignitor cilíndrico



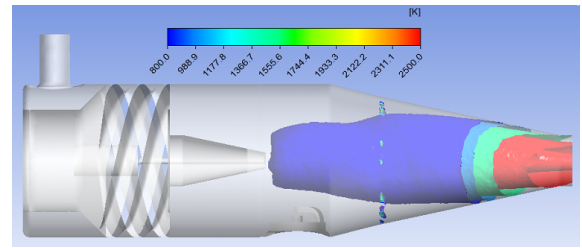
(b) Temperatura da chama no plano central do ignitor cônico

Figura 48 – Temperatura da chama no plano central de ambos ignitores

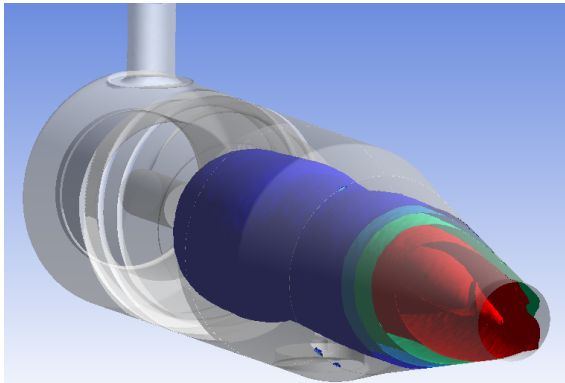
O escoamento do oxigênio restringe mais o metano no injetor cônico, entretanto isso não afetou a temperatura de forma negativa, visto que nesta configuração a temperatura máxima alcançada foi de 2879.6 K enquanto na configuração cilíndrica foi de 2892.6 K. O resultado é condizente com o tabelado em (JUNIOR, 2016), vide capítulo 4, visto que o termopar é posicionado de forma que acaba por realizar a medição na região da chama em torno de 750 a 1000 K.



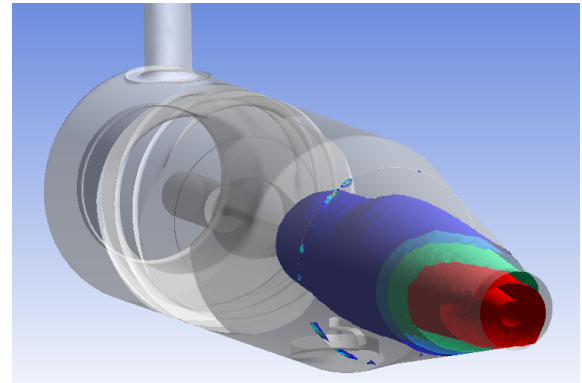
(a) Iso - superfícies de 800, 1000, 1500 e 2500 K, vista lateral, injetor cilíndrico



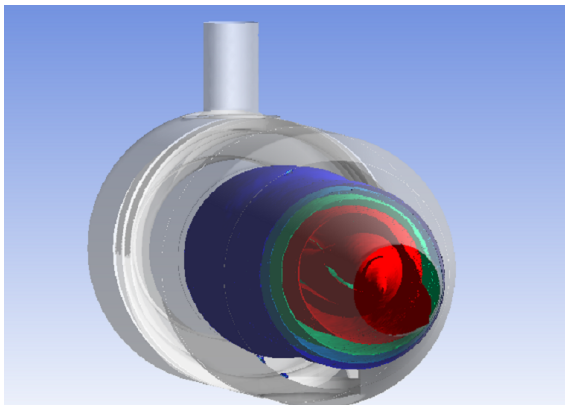
(b) Iso - superfícies de 800, 1000, 1500 e 2500 K, vista lateral, injetor cônico



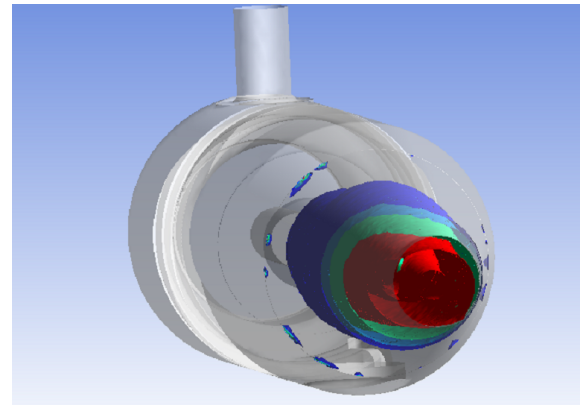
(c) Iso - superfícies de 800, 1000, 1500 e 2500 K, vista frontal 1, injetor cilíndrico



(d) Iso - superfícies de 800, 1000, 1500 e 2500 K, vista frontal 1, injetor cônico



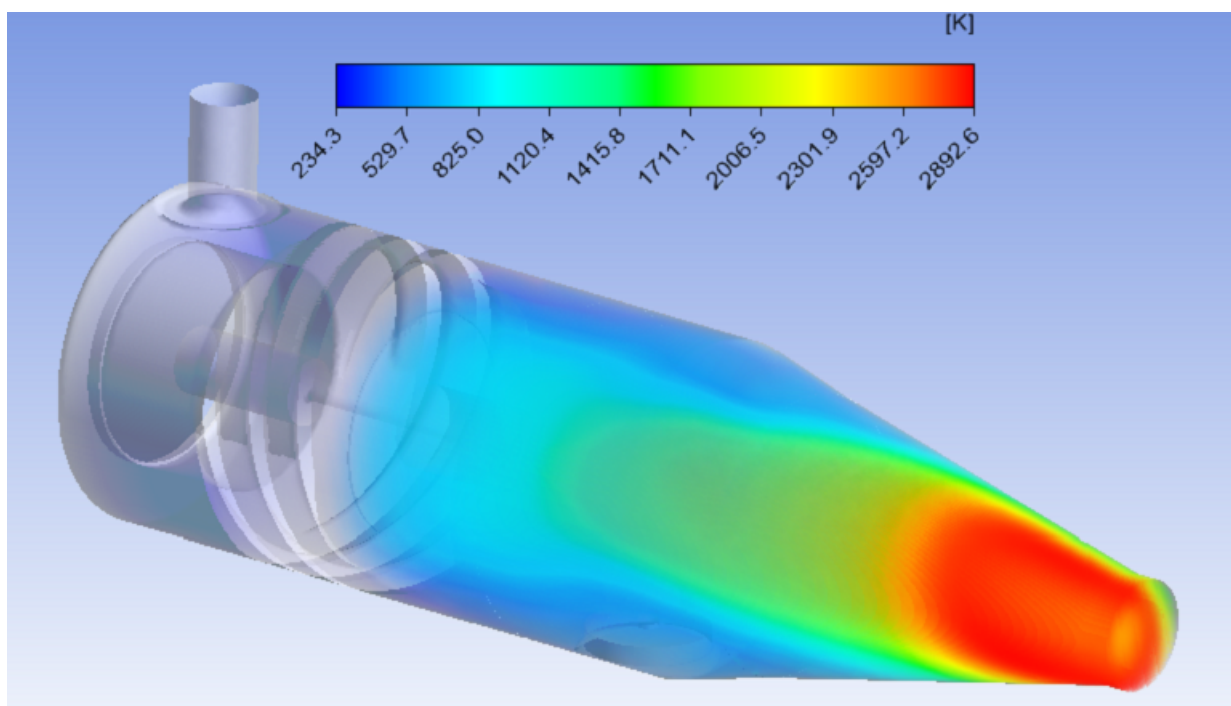
(e) Iso - superfícies de 800, 1000, 1500 e 2500 K, vista frontal 2, injetor cilíndrico



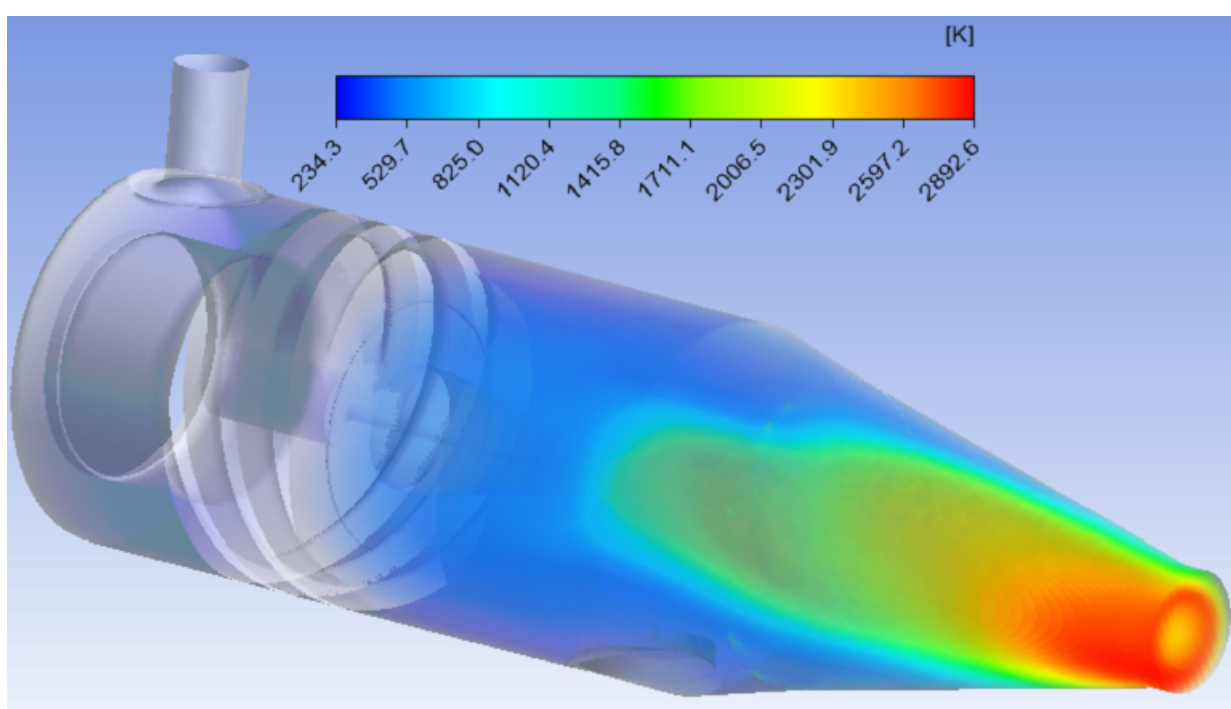
(f) Iso - superfícies de 800, 1000, 1500 e 2500 K, vista frontal 2, injetor cônico

Figura 49 – Iso - superfícies de 800, 1000, 1500 e 2500 K ambas as configurações

Na figura (49) fica mais aparente o quão volumosa é a chama no "ignitor cilíndrico", o que sugere um sobreaquecimento na saída da tubeira, além disso, a elevação da temperatura ao redor do injetor também pode ser observada, já que a iso-superfície de 800 K o envolve quase por completo.



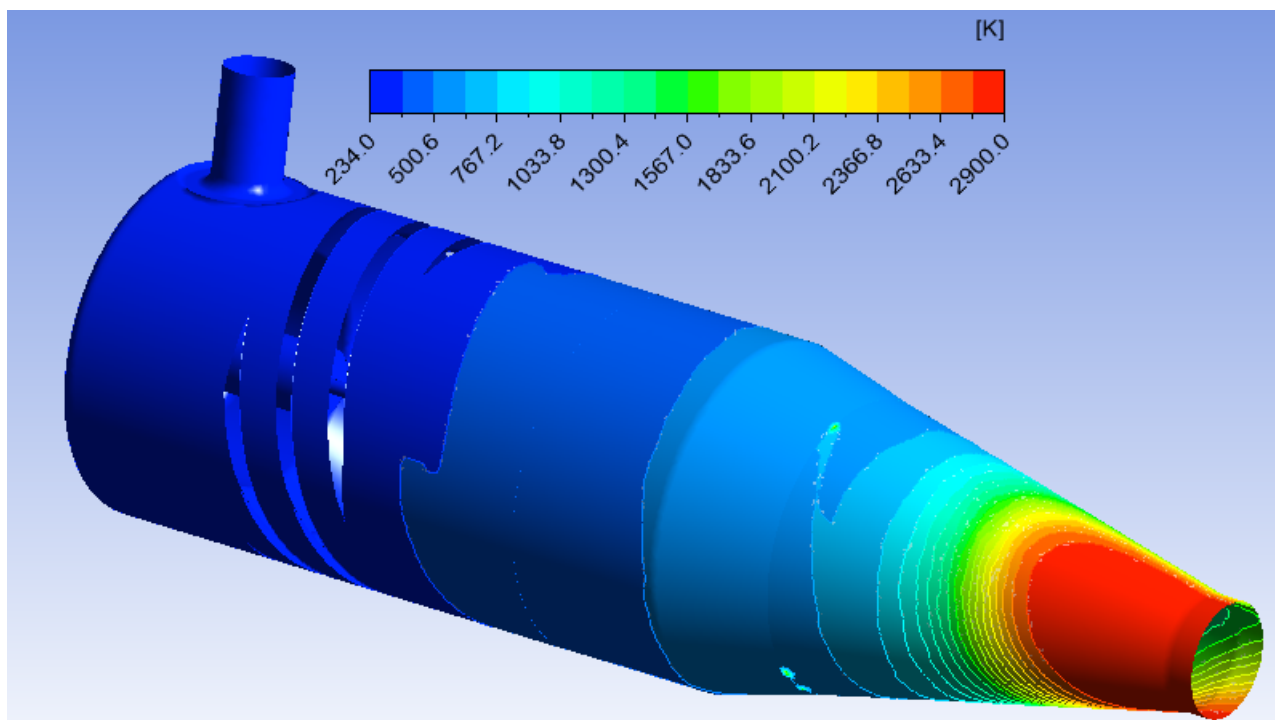
(a) Temperatura da chama com ignitor cilíndrico



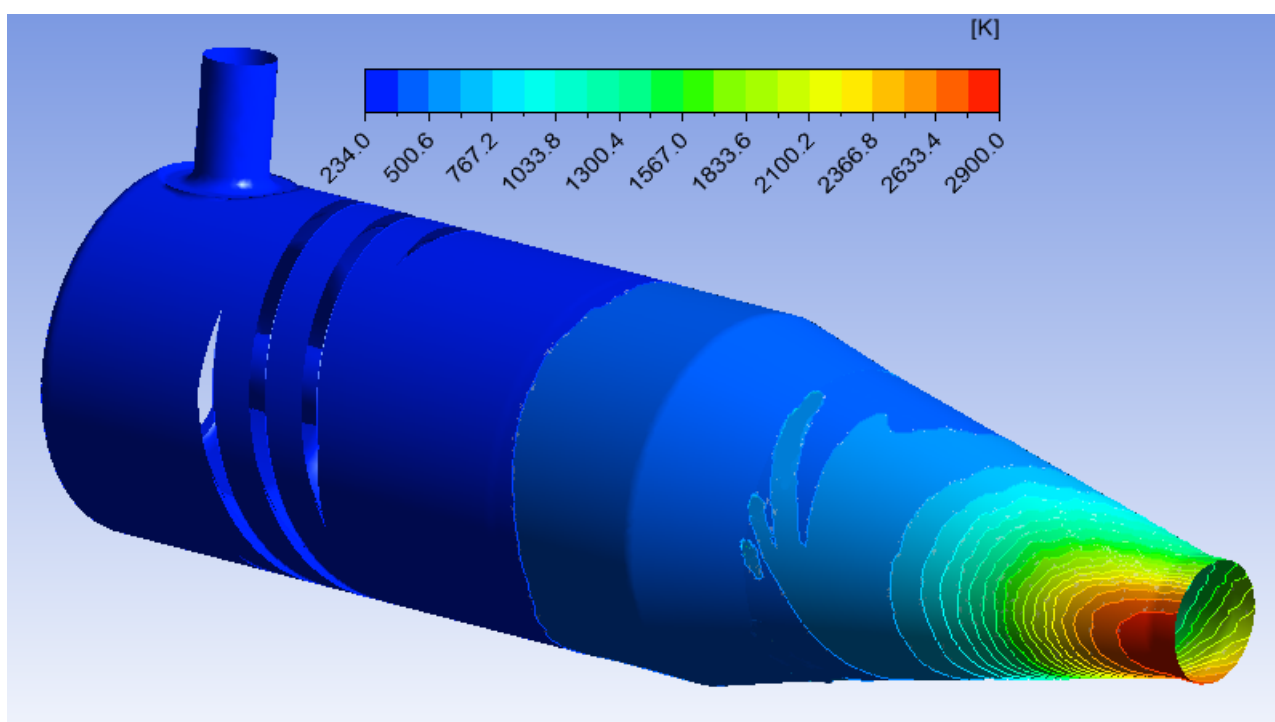
(b) Temperatura da chama com ignitor cônico

Figura 50 – Temperatura da chama em ambos ignitores

A figuras (50) e (51) mostram com mais clareza esse aquecimento na saída da tubeira. A configuração com injetor cônico é claramente mais saudável para o componente levando em conta esse aspecto, visto que o aquecimento é muito menor e menos abrangente.



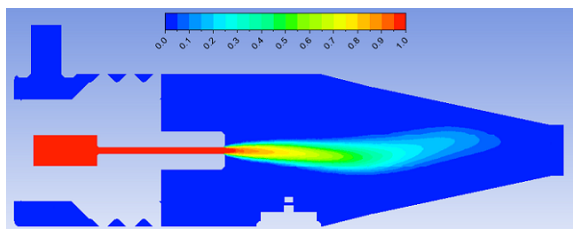
(a) Temperatura na parede do ignitor cilíndrico



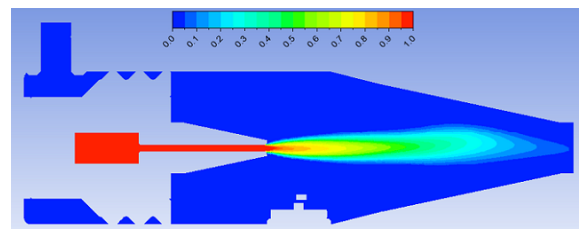
(b) Temperatura na parede do ignitor cônico

Figura 51 – Temperatura na parede externa do ignitor

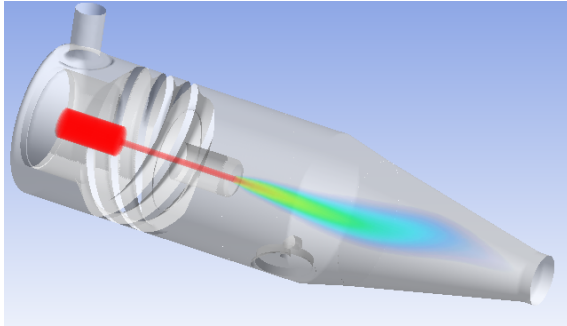
As imagens abaixo visam ilustrar a distribuição dos reagentes e produtos da combustão no ignitor e na chama e, com isso, avaliar a qualidade da queima.



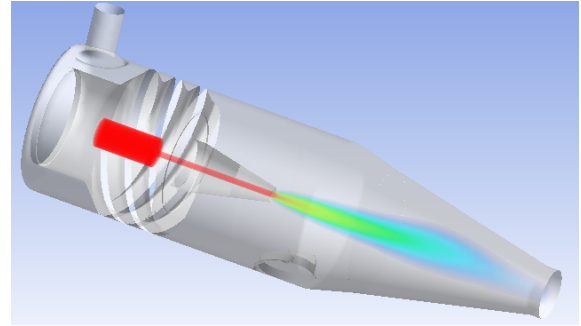
(a) Metano no plano central do ignitor cilíndrico



(b) Metano no plano central do ignitor cônico

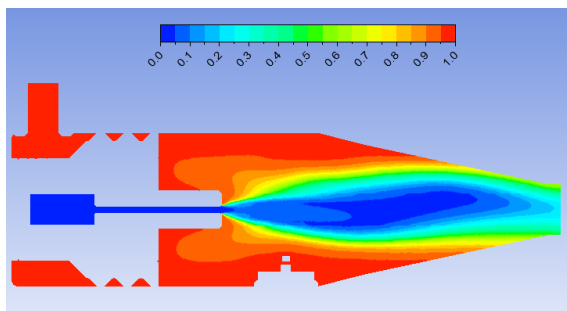


(c) Metano no ignitor cilíndrico

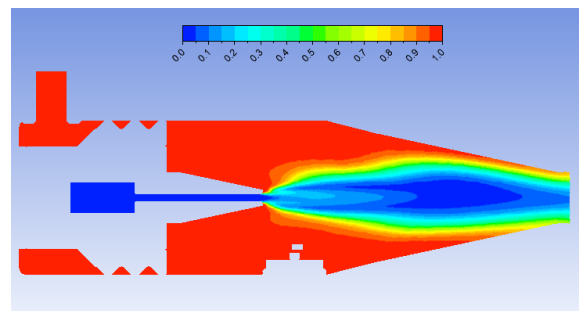


(d) Metano no ignitor cônico

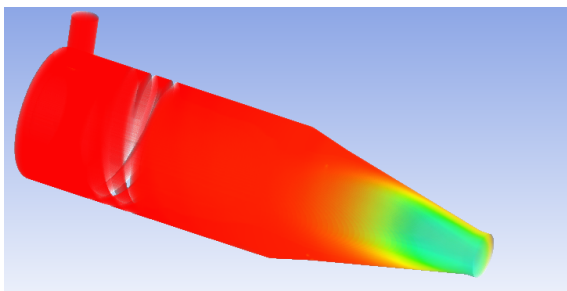
Figura 52 – Distribuição do metano após combustão em ambos ignitores



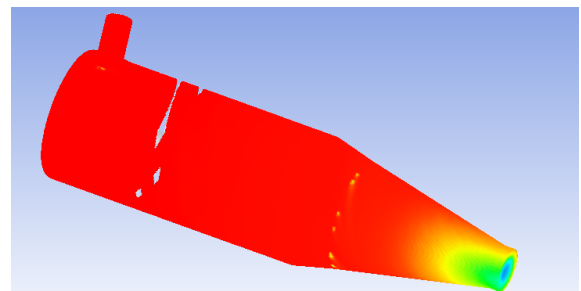
(a) Oxigênio no plano central do ignitor cilíndrico



(b) Oxigênio no plano central do ignitor cônico



(c) Oxigênio no ignitor cilíndrico



(d) Oxigênio no ignitor cônico

Figura 53 – Distribuição do oxigênio após combustão em ambos ignitores

A figura (52) por si só não revela muito sobre a qualidade da queima, porém, ao olhar a distribuição do oxigênio ao longo da estrutura da chama na figura (53), é

perceptível uma melhor queima no ignitor cônico, por apresentar uma queima quase por completa no interior da chama até o fim da tubeira.

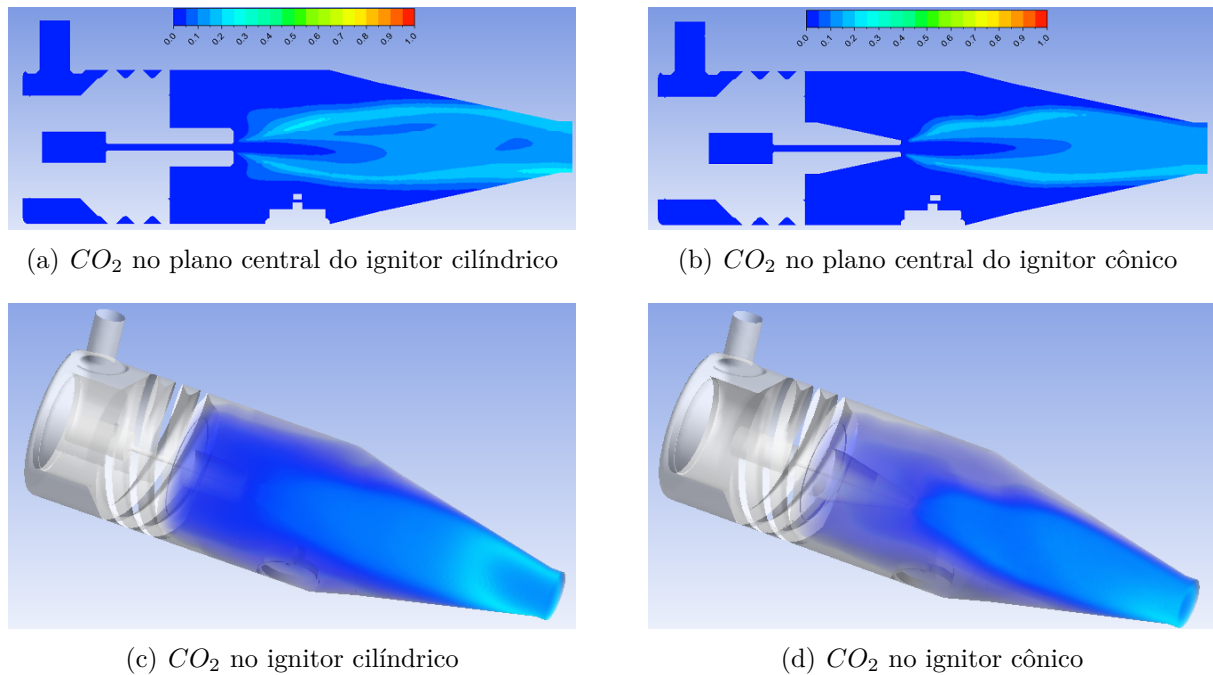


Figura 54 – Distribuição do CO_2 após combustão em ambos ignitores

O padrão do CO_2 visto na figura (54) é bastante semelhante ao da água, na figura (55) em que ambas provam haver uma queima mais saudável pro componente com a configuração cônica. É possível ver um formato mais delgado dos produtos e uma presença bem menor dos mesmos fora da câmara de combustão e tubeira, o que sugere mais segurança. A imagem (56 -d) mostra uma menor concentração de CO nas bordas da chama, o que revela uma menor reatividade nessa região e conseqüentemente, temperaturas levemente menores neste local. Além disso, comparando as figuras (54) e (56), é possível notar uma concentração levemente maior de monóxido de carbono em detrimento do dióxido de carbono, o que pode ser interessante para o propósito do ignitor, já que CO a esta temperatura é reativo e pode auxiliar na queima da parafina e portanto, na ignição.

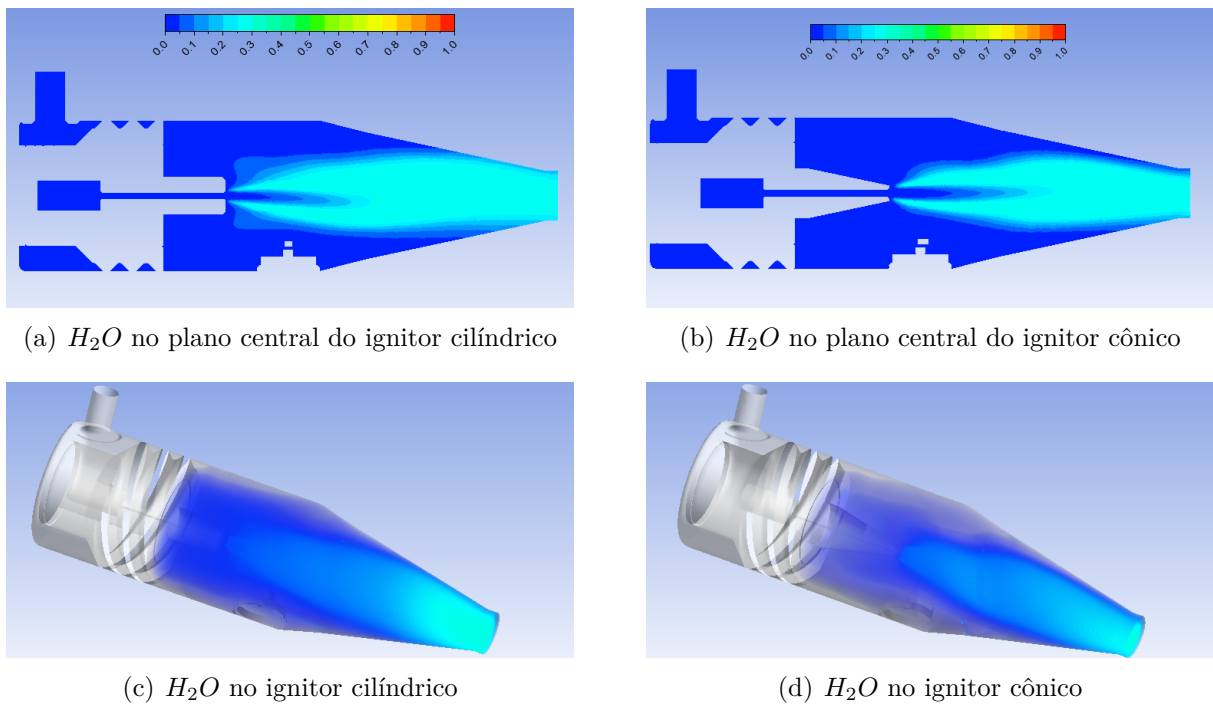


Figura 55 – Distribuição do H_2O após combustão em ambos ignitores

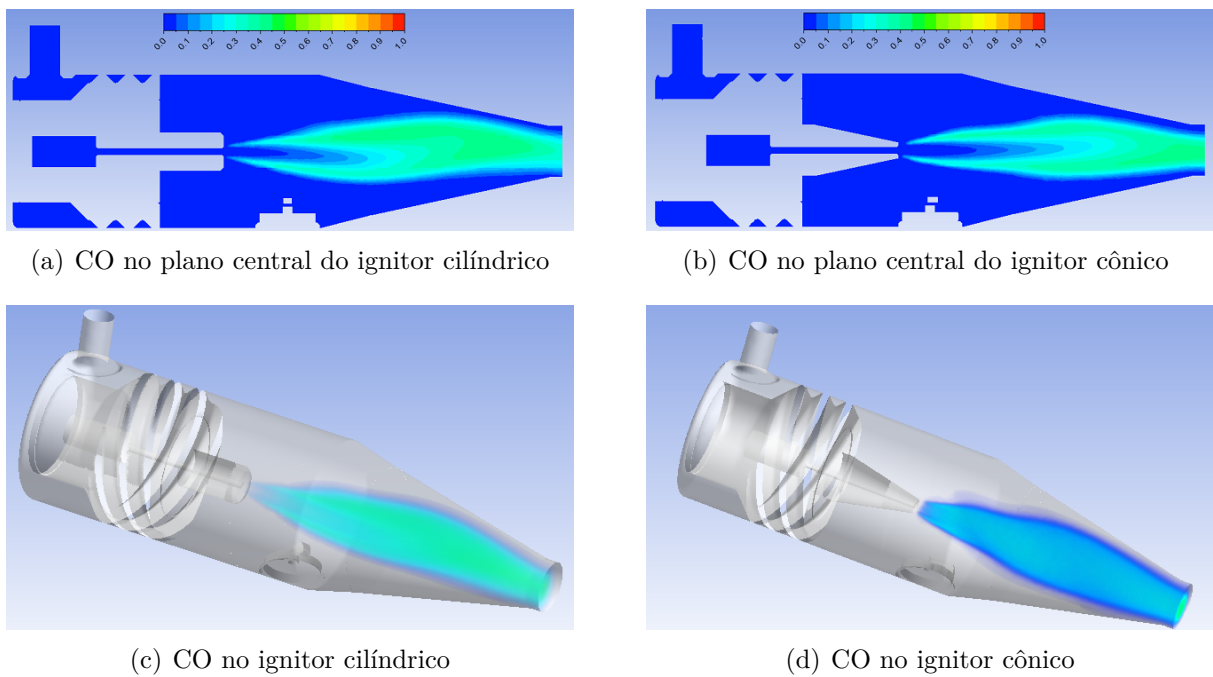


Figura 56 – Distribuição do CO após combustão em ambos ignitores

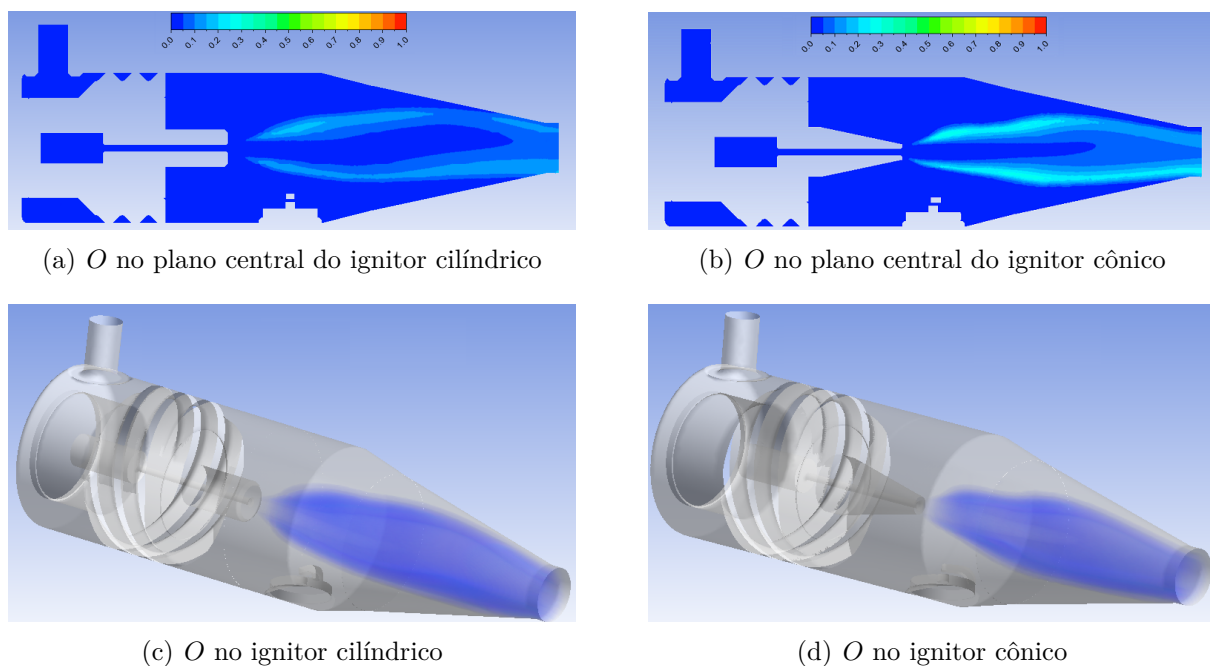


Figura 57 – Distribuição do O após combustão em ambos ignitores

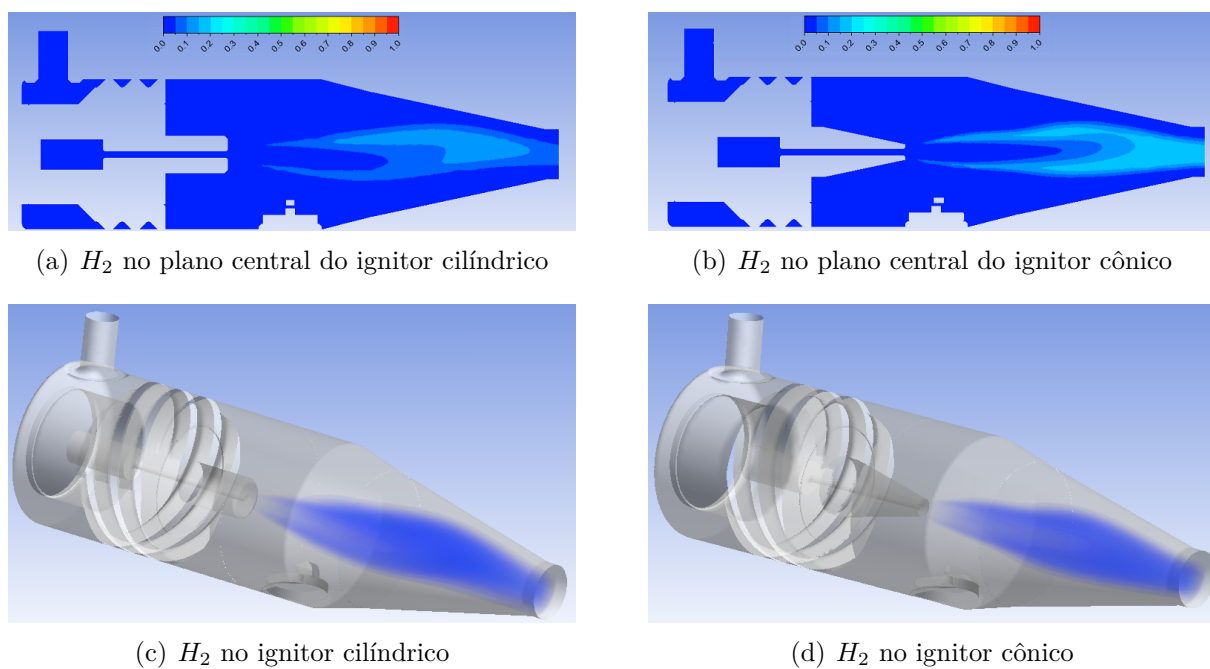


Figura 58 – Distribuição do H_2 após combustão em ambos ignitores

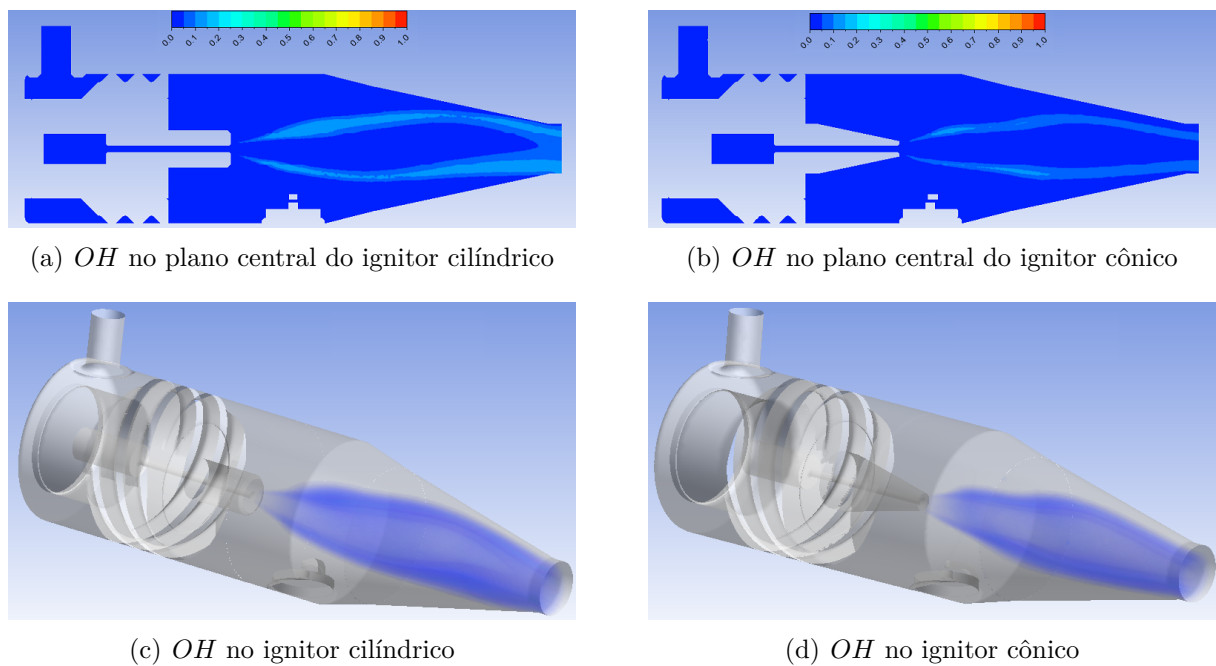


Figura 59 – Distribuição do OH após combustão em ambos ignitores

As figura (57) a (59) ilustram produtos de concentração quase irrisória no fim da reação. Apesar de semelhantes, o injetor cônico apresenta leve vantagem, visto que a concentração das mesmas é um pouco menor, demonstrando uma queima de maior qualidade. Ressalta-se a distribuição do OH na figura (59), sendo a hidroxila uma espécie importante ao avaliar a chama, visto seu comportamento durante o início da combustão. Nota - se que o perfil da mesma no com o injetor cônico mal toca as paredes da tubeira, o que sugere uma chama muito mais "comportada" que na configuração cilíndrica.

Por último, é importante avaliar a temperatura diretamente na parede dos injetores, para então confirmar qual formato é mais saudável para a vida útil do ignitor.

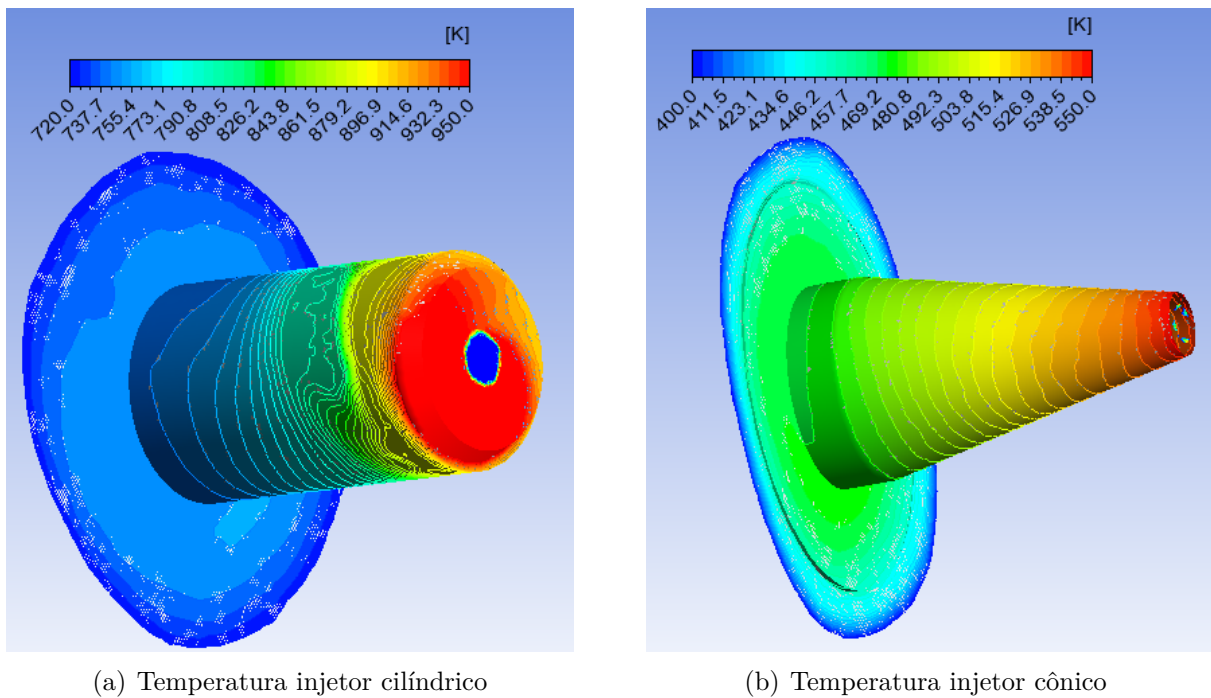


Figura 60 – Temperatura em ambos os injetores durante a queima

A figura (60) atesta a segurança do injetor de geometria cônica, nele a temperatura máxima encontrada foi de aproximadamente 550 K, enquanto que no modelo cilíndrico, foi de 950 K, deixando evidente que o mesmo sofre muito mais com a temperatura da chama o que garante uma integridade muito menor do componente. A variação da temperatura no corpo de ambos se comporta de maneira diferente também, sendo muito menos abrupta no injetor cônico que no injetor cilíndrico.

7 Considerações Finais

A indústria aeroespacial sempre foi uma área de constantes inovações tecnológicas, visando a evolução não só da ciência como também de um bem maior da sociedade. Nos últimos anos, com um crescimento da preocupação com o meio ambiente, o desenvolvimento de sistemas de baixa emissão de poluentes se tornou uma prioridade na hora de conceber um projeto. Além disso, novas tecnologias em propulsão vêm ganhando espaço em meio a alternativas mais consolidadas e tradicionais, como a propulsão híbrida, que demonstra cada vez mais confiabilidade e economia, o que reflete na sua crescente escolha em vários projetos. Isso impulsiona não só a indústria, mas também o meio acadêmico, oferecendo campos de pesquisas e proporcionando uma aproximação maior dos estudantes com o que há de mais novo em pesquisas. Essa inovação é bem exemplificada no escopo deste trabalho, visto que o ignitor em estudo possui uma complexidade bastante interessante e proporciona vantagens em relação a outros tipos, como confiabilidade, múltiplas ignições e capacidade de autoresfriamento através de sua mecânica de injeção. Para a validação deste sistema, é importante a caracterização da chama, seus mecanismos e particularidades. A coleta de um apanhado de teorias relevantes para o entendimento dessa reação foi de extrema valia não só para o desenvolvimento da parte prática do trabalho, mas também para a edificação do conhecimento.

Várias simulações e cálculos prévios foram feitos, buscando estabelecer um bom ponto de partida no entendimento da combustão CH_4/O_2 e validação de um esquema que fosse eficiente computacionalmente, com precisão confiável, que, posteriormente, foi usado nas simulações realizadas no software Ansys Fluent. As simulações no NASA CEA revelaram a diferença de cada mecanismo ao mostrar a disparidade dos valores referentes à temperatura da combustão. Enquanto isso, a análise do atraso de ignição mostrou não só a precisão do mecanismo JL-D, mas também a influência da temperatura inicial e razão equivalente no início da combustão.

Os resultados foram satisfatórios. Foi possível confirmar a confiabilidade de um mecanismo de reação reduzido, o que foi responsável pela agilidade das simulações quentes. Os resultados das simulações com ambas as configurações dos ignitores foram bastante positivas, já que a influência de ambas as geometrias dos injetores pôde ser vista claramente, o que tornou a avaliação de suas performances muito mais fácil. O injetor cônico se mostrou superior em vários aspectos. Com ele, a injeção do metano foi feita de modo mais preciso, visto que uma quantidade irrisória escapou da zona de reação. Isso refletiu diretamente na chama e na queima, que foi muito mais concentrada oferecendo menos perigo à integridade da tubeira e do componente em geral. Além disso, a temperatura no injetor foi muito menor com a configuração cônica, visto que a temperatura máxima

encontrada nele não chegou nem perto da mínima avaliada na configuração cilíndrica.

Referências

- ANSYS. *Ansys Fluent Theory Guide*. [S.l.], 2013. 814 p. Citado 4 vezes nas páginas 52, 55, 56 e 57.
- CHEMKIN. *Reaction Design Theory Manual*. Rio de Janeiro, Brasil, 2016. 412 p. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 43.
- FILHO, J. A. C. Modelagem e análise numérica de um sistema de ignição do tipo tocha baseado na combustão ch_4/o_2 . 2017. Citado 3 vezes nas páginas 8, 38 e 39.
- FILIPI, Z.; KIM, Y. Hydraulic hybrid propulsion for heavy vehicles: Combining the simulation and engine-in-the-loop techniques to maximize the fuel economy and emission benefits. *Oil & Gas Science and Technology—Revue de l'Institut Francais du Petrole*, IFP, v. 65, n. 1, p. 155–178, 2010. Citado na página 18.
- FRASSOLDATI, A. et al. Simplified kinetic schemes for oxy-fuel combustion. In: *1st International conference on sustainable fossil fuels for future energy*. [S.l.: s.n.], 2009. p. 6–10. Citado 3 vezes nas páginas 11, 30 e 31.
- HEALY, D. et al. Methane/n-butane ignition delay measurements at high pressure and detailed chemical kinetic simulations. *Energy & fuels*, ACS Publications, v. 24, n. 3, p. 1617–1627, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 32.
- JUNIOR, L. P. d. O. Análise experimental e teórica de um sistema de ignição tipo tocha baseado na combustão ch_4/o_2 . 2016. Citado 6 vezes nas páginas 8, 11, 39, 40, 62 e 75.
- KUO, K. K. *Principles of Combustion*. [S.l.]: John Wiley Sons, 2005. ISBN 0-471-04689-2. Citado 6 vezes nas páginas 8, 23, 24, 25, 27 e 28.
- MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. [S.l.]: LTC Editora S.A, 2004. ISBN 0-07-230096-5. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 47.
- MERHUBI, H. E. et al. A high pressure experimental and numerical study of methane ignition. *Fuel*, Elsevier, v. 177, p. 164–172, 2016. Citado 3 vezes nas páginas 28, 32 e 66.
- MUHARAM, Y. et al. Simulation of ignition delay time of compressed natural gas combustion. *International Journal of Automotive and Mechanical Engineering*, Universiti Malaysia Pahang, v. 12, p. 3125, 2015. Citado 4 vezes nas páginas 19, 20, 31 e 32.
- MYERS, B.; BARTLE, E. Reaction and ignition delay times in the oxidation of propane. *AIAA Journal*, v. 7, n. 10, p. 1862–1869, 1969. Citado na página 32.
- NALLASAMY, M. Turbulence models and their applications to the prediction of internal flows: a review. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 15, n. 2, p. 151–194, 1987. Citado 2 vezes nas páginas 53 e 54.
- POINSOT, T.; VEYNANTE, D. *Theoretical and Numerical Combustion*. [S.l.]: Edwards, 2001. ISBN 1-930217-05-6. Citado 6 vezes nas páginas 8, 33, 34, 35, 36 e 37.

SHYNKARENKO, O.; SIMONE, D.; ANDRIANOV, A. Hybrid rocket motor ignition system development and testing in chemical propulsion laboratory of the university of brasilia. *Journal of Polish-Brazilian Science and Technology*, v. 2, 2016. Citado na página 38.

SOUZA, K. M. de; SHYNKARENKO, O. Cobem-2017-0264 development of a measurement system of temperature and pressure in the combustion chamber of a torch ignition system. Citado 3 vezes nas páginas 8, 44 e 58.

SPADACCINI, L.; III, M. C. Ignition delay characteristics of methane fuels. *Progress in energy and combustion science*, Pergamon, v. 20, n. 5, p. 431–460, 1994. Citado na página 64.

SUTTON, G. P.; BIBLARZ, O. *Rocket Propulsion Elements*. [S.l.]: John Wiley Sons, 2017. ISBN 9781118753651. Citado 3 vezes nas páginas 8, 18 e 19.

TURNES, S. R. *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. [S.l.]: McGraw – Hill, 2000. ISBN 0-07-230096-5. Citado 7 vezes nas páginas 8, 19, 25, 26, 28, 29 e 30.