

Trabalho de Licenciatura em
Matemática

**Modelação Matemática Aplicada a
Processos de Combustão:
Avanços na Teoria de Modelação da Combustão**

Autor: Gerson João Timbe

Maputo, 12 de Março de 2025

Trabalho de Licenciatura em
Matemática

**Modelação Matemática Aplicada a
Processos de Combustão:
Avanços na Teoria de Modelação da Combustão**

Autor: Gerson João Timbe

Supervisor: Professor Catedrático, Manuel Joaquim
Alves, UEM

Co-Supervisora: Professora Associada, Elena Vladmirovna
Molchanova Alves, ISCTEM

Maputo, 12 de Março de 2025

Dedicatória

Aos meus irmãos, Adimiro e André, pela compreensão e contribuição. Aos meus pais, João Timbe e Delfina Massango, pelo apoio e incentivo prestados.

Declaração de Honra

Declaro por minha honra que o presente Trabalho de Licenciatura é resultado da minha investigação e que o processo foi concebido para ser submetido apenas para a obtenção do grau de Licenciado em Matemática na Faculdade de Ciências da Universidade Eduardo Mondlane.

Maputo, 12 de Março de 2025

Gerson João Timbe

Agradecimentos

Aos que acreditaram e torceram pela concretização e sucesso do meu trabalho, aos que me estenderam a mão nos momentos difíceis do percurso estudantil, deixo nessa página o meu agradecimento. Agradeço em especial:

A Deus, pelo Dom da vida, pela Capacitação e Disciplina concedida.

Aos docentes, ao corpo técnico e Administrativo do Departamento de Matemática e Informática. Muito obrigado.

Ao meu Supervisor, Manuel Joaquim Alves e a minha Co-Supervisora, Elena Vladimirovna Molchanova Alves, pelo apoio e incentivo prestados, o que tornou possível a concretização deste trabalho.

A minha família, pelo incentivo, paciência e contribuição. Em especial, aos meus irmãos Admiro e André, pelo suporte e aos meus pais, por sempre estarem do meu lado. Muito Obrigado. Aos meus amigos e colegas, que directamente e indirectamente contribuíram para o meu sucesso académico.

Também gostaria de agradecer ao Doutor José Nhavoto pela sua assistência na linguagem de programação usada neste trabalho. Muito obrigado pela assistência prestada.

Resumo

A teoria de modelação da combustão é uma área da ciência que se concentra em desenvolver modelos matemáticos e computacionais para descrever e prever os processos de combustão, que ocorrem quando um combustível reage com um oxidante, geralmente o oxigénio do ar. Neste trabalho discutimos os conceitos fundamentais para a descrição do fenómeno da combustão, nomeadamente os combustíveis, as equações de conservação de massa, energia e a cinética química. Os conceitos termodinâmicos, modelos cinéticos e os da mecânica dos fluidos são aplicados na modelação da combustão ideal em uma câmara de combustão de um motor a jacto. Resolvido o modelo, mostramos as variações da temperatura no combustor causadas pela injeção dos gases quentes na câmara e pela combustão. Também ilustramos, resolvendo o modelo, o consumo da mistura ar-combustível pela combustão. Equações diferenciais que descrevem o fenómeno da combustão, como a equação de conservação de energia e a conservação de espécies químicas desempenham um papel fundamental para o modelo, são abordadas e resolvidas numericamente. O método de diferenças finitas centrado no tempo e no espaço (Crank-Nicolson) é o principal método numérico usado para a resolução das equações do modelo.

As simulações numéricas são realizadas usando a linguagem de programação python.

A teoria de modelação de combustão visa melhorar nosso entendimento dos processos de combustão, otimizar o uso de combustíveis, reduzir as emissões poluentes e promover práticas mais seguras e eficientes em uma ampla gama de aplicações industriais e ambientais.

Palavras-chave: Combustão, Reacções Químicas, Cinética Química, Transferência de Calor, Câmara de Combustão, Motor a Jacto, Termodinâmica da Combustão, Métodos numéricos, Diferenças Finitas e Simulação Computacional.

Abstract

Combustion modeling theory is an area of science that focuses on developing mathematical and computational models to describe and predict combustion processes, which occur when a fuel reacts with an oxidant, usually oxygen in the air. In this paper we discuss the fundamental concepts for the description of the combustion phenomenon, namely fuels, mass and energy conservation equations and chemical kinetics. Thermodynamic concepts, kinetic models and fluid mechanics models are applied to model an ideal combustion process in a combustion chamber of a jet engine. Once the model has been solved, we show the temperature variations in the combustor caused by the injection of hot gases into the chamber and by combustion. We also illustrate, by solving the model, the consumption of the air-fuel mixture by combustion. Finite differences method centered in time and space (Crank-Nicolson) is the principal method used to solve the equations of the model.

The Numerical simulations were performed using python programming language.

Combustion modeling theory aims to improve our understanding of the combustion process, to optimize the use of fuels, reduce pollutants emissions and so promote safe and efficient practices in many industrial applications.

Keywords: Combustion, Chemical Reactions, Chemical Kinetics, Heat Transfer, Combustion Chamber, Jet Engine, Combustion Thermodynamics, Numerical Methods, Finite Differences and Computational Simulation.

Terminologia

Símbolo	Descrição
c_p	- Calor específico a pressão constante
D_i	- Coeficiente de difusão da espécie i
E_a	- Energia de activação
h	- Entalpia
k	- Constante de reacção, Condutividade térmica
m	- Massa
M_i	- Massa molar da espécie i
n_i	- Número de moles da espécie química i
N	- Número de espécies químicas na mistura ou no mecanismo de reacção
P	- Pressão
Q	- Termo fonte de calor
R_u	- Constante universal dos gases
t	- Tempo
T	- Temperatura
V	- Volume
$\dot{\omega}_i$	- Taxa de reacção da espécie química i
χ_i	- Fracção molar da espécie i
X_i	- Fórmula química da espécie i
$[X_i]$	- Concentração molar da espécie química i
Y_i	- Fracção mássica da espécie i
λ	- Coeficiente de excesso de ar
Φ	- Razão de equivalência
$\left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)_{est}$	- Razão estequiométrica (mássica) Ar/Combustível
EDO	- Equação Diferencial Ordinária
EDP	- Equação Diferencial Parcial
MDF	- Método de Diferenças Finitas
MVF	- Método de Volumes Finitos
MEF	- Método de Elementos Finitos

Sumário

Dedicatória	i
Declaração de Honra	i
Agradecimentos	ii
Resumo	iii
Abstract	iv
Terminologia	v
Lista de Figuras	ix
1 Introdução	1
1.1 Contextualização	1
1.2 Definição do problema	1
1.3 Objectivos	3
1.3.1 Objectivos Gerais:	3
1.3.2 Objectivos Específicos:	3
1.4 Metodologia	3
2 Revisão da Literatura	4
2.1 Conceitos Preliminares	4
2.1.1 A Linguagem Química na Combustão	4
2.1.2 Combustíveis Reais e os seus Substitutos de Pesquisa	4
2.1.3 Combustão	6
2.2 Combustão e Termoquímica	9
2.2.1 A Linguagem Termodinâmica na Combustão	9
2.2.2 O Modelo de Gás Ideal	9
2.2.3 Balanços de Energia	11
2.3 Cinética Química	13
2.3.1 Reacção Global e Reacção Elementar	14
2.3.2 A Lei da Acção de Massas: Velocidade da Reacção	15
2.3.3 Taxa de Reacção Para Mecanismos de Combustão	17
2.3.4 Limitações	18
2.4 Equações de Conservação para a Combustão	19
2.4.1 Equação de Conservação da Massa	20
2.4.2 Equação de Conservação do Momento	20
2.4.3 Equação de Conservação da Energia	21
2.4.4 Equação de Conservação da Massa da Espécie Química	22
2.4.5 Forma Cartesiana das Equações de Conservação	22
2.4.6 Limitações	23
2.5 Transferência de Calor e Condições de Contorno	23

2.5.1	Temperatura Prescrita	23
2.5.2	Fluxo Prescrito: Lei de Fourier	23
2.5.3	Convecção: Lei de Resfriamento de Newton	24
2.6	Métodos Numéricos: O Método de Diferenças Finitas	24
2.6.1	O Método de Diferenças Finitas	25
2.6.2	O Método de Crank-Nicolson	28
3	Combustão em Motores a Reacção	29
3.1	Teoria	29
3.2	Modelação. Resolução Numérica	30
4	Resultados	39
4.1	Domínio da simulação	39
4.1.1	Câmara de Combustão	39
4.1.2	Malhas Numéricas	39
4.1.3	Campo de Velocidade	41
4.1.4	Condição de Ignição	41
4.2	Resultados da simulação	42
4.2.1	Primeira malha: Campo de Velocidade Constante	42
4.2.2	Segunda malha: Campo de Velocidade Constante	48
4.2.3	Primeira malha: Campo de Velocidade Variável	54
4.2.4	Descrição das Simulações	60
4.2.5	Análise Comparativa dos Resultados das Simulações	61
5	Considerações finais e conclusão	62
	Referências Bibliográficas	63
	APÊNDICE A - Conceitos Auxiliares	65
	APÊNDICE B - Demonstrações	68
	APÊNDICE C - Códigos	72

Lista de Figuras

1.1	Câmara de combustão em uma Turbina (Motor a reacção)	2
2.1	Modelo de fluxo de calor por convecção	24
2.2	Malha 2D	25
3.1	Princípio de funcionamento do motor a reacção	29
3.2	Relação dos índices de um array 2D em python com a orientação dos eixos x e y .	34
3.3	Malha bidimensional em python	34
3.4	Estrutura de uma matriz esparsa tridiagonal (problemas em 1D)	36
3.5	Estrutura de uma matriz esparsa pentadiagonal (problemas em 2D)	36
4.1	Câmara de combustão ideal. Entrada do ar e do combustível	39
4.2	Malha numérica -1	40
4.3	Malha numérica -2 (mais refinada)	40
4.4	Campo de velocidade prescrito	41
4.5	Simulação 1: passo 0	42
4.6	Simulação 1: passo 30	42
4.7	Simulação 1: passo 60	43
4.8	Simulação 1: passo 89	43
4.9	Simulação 1: passo 90	44
4.10	Simulação 1: passo 105	44
4.11	Simulação 1: passo 120	45
4.12	Simulação 1: passo 200	45
4.13	Simulação 1: passo 300	46
4.14	Simulação 1: passo 600	46
4.15	Consumo da mistura ar-combustível ao redor da região de ignição	47
4.16	Variação média da Temperatura, do Oxigénio e do Combustível com o tempo . . .	47
4.17	Simulação 2: passo 125	48
4.18	Simulação 2: passo 186	48
4.19	Simulação 2: passo 187	49
4.20	Simulação 2: passo 200	49
4.21	Simulação 2: passo 230	50
4.22	Simulação 2: passo 300	50
4.23	Simulação 2: passo 500	51
4.24	Simulação 2: passo 800	51

4.25	Simulação 2: passo 1200	52
4.26	Consumo da mistura ar-combustível ao redor da região de ignição	52
4.27	Variação média da Temperatura, do Oxigênio e do Combustível com o tempo . . .	53
4.28	Simulação 3: passo 100	54
4.29	Simulação 3: passo 200	54
4.30	Simulação 3: passo 325	55
4.31	Simulação 3: passo 326	55
4.32	Simulação 3: passo 360	56
4.33	Simulação 3: passo 400	56
4.34	Simulação 3: passo 500	57
4.35	Simulação 3: passo 700	57
4.36	Simulação 3: passo 1000	58
4.37	Simulação 3: passo 1400	58
4.38	Consumo da mistura ar-combustível ao redor da região de ignição	59
4.39	Variação média da Temperatura, do Oxigênio e do Combustível com o tempo . . .	59

Capítulo 1

Introdução

Neste capítulo dar-se-á início á problemática da modelação matemática aplicada aos processos de combustão, desde o contexto geral à metodologia usada para elaboração da pesquisa. Nesta descrição, são definidos o problema principal da pesquisa e os objectivos da mesma.

1.1 Contextualização

A modelação matemática de processos de combustão é uma área fascinante e fundamental no âmbito da Matemática Aplicada e Engenharia. A combustão, o processo químico de oxidação rápida que libera energia, está no centro de inúmeros processos industriais e ambientais, incluindo geração de energia, transporte e formação de poluentes. Trata-se de um fenómeno complexo e altamente dinâmico que exige uma compreensão abrangente para otimizar a eficiência, reduzir as emissões e garantir a segurança.

Nesse contexto, uma revisão bibliográfica minuciosa e exaustiva desempenha um papel crucial no avanço da nossa compreensão dos processos de combustão. Ao analisar pesquisas existentes e modelos matemáticos, obtivemos insights sobre o desenvolvimento histórico do campo e descobrimos as últimas descobertas.

1.2 Definição do problema

A modelação matemática de problemas de combustão é fundamental para entender e controlar processos de combustão em uma variedade de aplicações, desde motores de automóveis até usinas de energia. Vamos desenvolver um problema simplificado de modelação matemática da combustão:

Problema: Modelação da Combustão em um Motor a Reacção (Motor a Jacto).

1. Descrição do Sistema:

Considere-se um motor a reacção, como o encontrado em uma aeronave. O motor possui uma (para modelos actuais) ou várias (para modelos antigos) câmaras de combustão onde ocorre a queima de combustível.

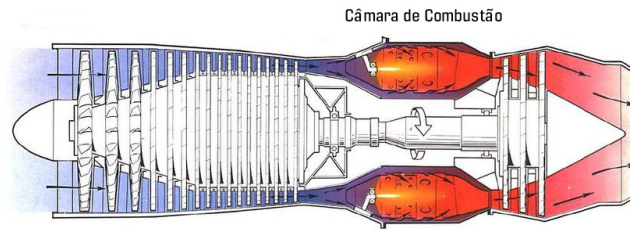


Figura 1.1: Câmara de combustão em uma Turbina (Motor a reacção)

2. Variáveis do Problema:

As principais variáveis do modelo são $Y_{C_xH_y}$, Y_{O_2} , T e $\dot{\omega}$, que são as fracções mássicas do combustível e do oxigénio, a temperatura e a taxa de reacção.

3. Equações do Problema:

As equações que descrevem a combustão podem ser representadas por um sistema de equações diferenciais parciais que levam em consideração as leis da termodinâmica e a cinética de reacção. Simplificadamente, pode-se considerar a seguinte equação de reacção:



onde C e O_2 são os reagentes.

Isso implica que o combustível (C) reage com o oxigénio do ar (O_2) para produzir produtos da combustão.

A taxa de reacção ($\dot{\omega}$) é modelada usando a Lei de Arrhenius.

As equações que governam a conservação de massa e energia também são fundamentais para o modelo.

4. Condições de Contorno:

As condições de contorno de Neumann são aplicadas para o fluxo de combustível e de calor. A Lei de Resfriamento de Newton é usada para modelar o fluxo de calor por convecção.

5. Objectivo da Modelação:

O objectivo principal da modelação é mostrar a aplicabilidade dos modelos matemáticos e dos métodos numéricos na resolução dos problemas dessa área da ciência e engenharia.

6. Solução e Análise:

As soluções das equações do modelo podem ser obtidas numericamente usando técnicas de simulação computacional. Os resultados são descritos e analisados fazendo comparações entre as simulações realizadas em diferentes condições e com o resultado esperado de acordo com a literatura usada na elaboração do trabalho.

Essa é uma descrição simplificada de um problema de modelação da combustão. Modelos mais avançados consideram uma gama mais ampla de factores, como a turbulência dentro da câmara de combustão, reacções químicas complexas e a presença de poluentes. A modelação matemática desempenha um papel fundamental no desenvolvimento de tecnologias de combustão mais eficientes e limpas.

1.3 Objectivos

1.3.1 Objectivos Gerais:

- Aprofundar o entendimento dos processos de combustão e das reacções químicas envolvidas;
- Mostrar a aplicabilidade da Matemática nessa área da ciência e engenharia.

1.3.2 Objectivos Específicos:

- Investigar a cinética química das reacções de combustão e incorporar essas informações em modelos matemáticos;
- Desenvolver modelos matemáticos simplificados para descrever sistemas de combustão complexos;
- Apresentar métodos numéricos avançados para simular processos de combustão em sistemas reactivos;
- Simular idealmente o processo de combustão no motor a reacção usando modelos matemáticos.

1.4 Metodologia

1.Revisão Bibliográfica:

Realizar uma extensa revisão da literatura para compreender os avanços recentes na teoria de modelação da combustão e estabelecer uma base sólida para a pesquisa.

2.Desenvolvimento de Modelos Matemáticos:

Formular equações matemáticas que descrevam as reacções químicas, transferência de calor, difusão e transporte de massa em sistemas de combustão. Isso inclui a aplicação de princípios de conservação, termodinâmica e cinética química.

3. Métodos Numéricos:

Implementar algoritmos numéricos avançados para resolver as equações de modelação da combustão. Isso inclui a discretização espacial e temporal, bem como a utilização de técnicas de solução numérica, como o método de diferenças finitas.

Capítulo 2

Revisão da Literatura

A revisão bibliográfica abrange áreas-chave da teoria de modelação da combustão, desde princípios básicos que regem as reacções químicas até a cinética e a termodinâmica relacionadas as equações químicas da combustão. São analisados trabalhos anteriores que se concentram em aspectos teóricos e práticos da combustão, contribuindo para a construção de uma base sólida de conhecimento para este projecto.

A seguir, apresentamos uma revisão resumida de alguns tópicos e estudos importantes relacionados a combustão e aos métodos numéricos.

2.1 Conceitos Preliminares

2.1.1 A Linguagem Química na Combustão

O fenómeno da combustão tem o seu fundamento nas reacções químicas geralmente envolvendo um combustível e um oxidante, conforme indica a equação (1.1), ocorrendo com grande libertação de calor. As reacções químicas desempenham um papel crucial na descrição do fenómeno complexo da combustão.

As substâncias químicas que participam do processo de combustão são geralmente quantificadas pela unidade *mol* (n) e pela massa em gramas correspondente a essa unidade, a *massa molar* M . (ver o Apêndice A).

A relação entre as quantidades dos reagentes e dos produtos em uma reacção química é chamada *estequiometria* e os coeficientes em uma equação balanceada são os coeficientes estequiométricos que se referem ao número de moles de cada substância que participa na reacção.

Todo processo químico em que o oxigénio é adicionado a uma outra substância é uma *oxidação*. Em processos de oxidação pelo oxigénio, este é chamado *agente oxidante* e a substância na qual ele é adicionado o *agente redutor*.

2.1.2 Combustíveis Reais e os seus Substitutos de Pesquisa

Os combustíveis são substâncias que, quando aquecidas, sofrem uma reacção química de oxidação, utilizando na maioria dos casos o oxigénio constituinte do ar, com libertação de calor.

Em muitos dos materiais que podem ser usados como combustíveis, os hidrocarbonetos (compostos constituídos somente por carbono e hidrogénio, cuja fórmula química é C_xH_y) constituem a maior parte do fornecimento do combustível por sua oxidação completa ser geralmente acompanhada por uma quantidade significativa de libertação de calor. Os combustíveis podem ser classificados de acordo com o seu estado físico em condições normais.

Os principais *combustíveis gasosos* são o gás natural e o gás de petróleo liquefeito (GPL). Esses combustíveis são compostos por misturas de diferentes hidrocarbonetos em proporções que variam com os locais de extracção e refinaria. O hidrocarboneto predominante no gás natural é o metano (CH_4), mais de 70% geralmente, e em menores quantidades, o etano (C_2H_6), o propano (C_3H_8), o butano (C_4H_{10}), o pentano (C_5H_{12}), entre outros.

A maior parte dos *combustíveis líquidos* são derivados do petróleo bruto, uma fonte de energia não renovável de origem fóssil e que é matéria prima para a indústria petrolífera e petroquímica. A composição química do petróleo bruto também varia com a região de extracção. Muitos dos combustíveis do uso corrente tais como a gasolina, o gasóleo (óleo diesel), o querosene (combustível de aviação) e os fuel-óleos (óleos-combustíveis) são obtidos a partir da destilação do petróleo bruto. A gasolina é uma mistura de hidrocarbonetos leves sendo usada principalmente nos diferentes tipos de motores de explosão. O óleo-diesel também é uma mistura de hidrocarbonetos leves, mas com gamas de temperatura de ebulição superiores à gasolina, sendo usada principalmente em motores de combustão interna com ignição por compressão (motor diesel).

Para combustíveis de aviação são usados variados tipos de querosene derivados do petróleo e estes contêm hidrocarbonetos C-10 a C-18 (número de átomos de carbono dos hidrocarbonetos)

O carvão (*combustível sólido*) é o combustível fóssil mais abundante. Prevê-se que as suas reservas mundiais conhecidas actualmente possam assegurar, ao ritmo actual de extracção, a exploração durante mais de 200 anos, em contraste com as reservas de petróleo e gás natural, cuja duração das suas reservas é prevista por vários cientistas, em particular em [12] e [18], como sendo 40 e 70 anos, respectivamente. Outros combustíveis sólidos incluem o carbono, a madeira e o lixo orgânico.

Assim, muitos combustíveis de interesse são uma mistura de várias substâncias e as suas proporções são variáveis. Esse facto implica a não existência de fórmulas químicas definidas para esses combustíveis.

Um procedimento para modelar a combustão desses combustíveis é considerar uma única espécie química como representativa da mistura, ou empregar uma mistura de um pequeno número de espécies químicas que reproduzam muitas das características mais importantes do combustível que se deseja modelar. Essa abordagem é usada por exemplo em [17] e [23] para simplificar a modelação de combustíveis, em particular a gasolina e o diesel.

O querosene é modelado em algumas pesquisas, ver por exemplo [1] e [15], como o n-decano $C_{10}H_{22}$, $C_{12}H_{23}$ ou como $C_{12}H_{24}$, por possuírem propriedades termofísicas semelhantes a combustão do querosene.

2.1.3 Combustão

Apesar da combustão ser um fenómeno comum, não é fácil, todavia, exprimir em poucas palavras exactamente o que esta é. Abaixo são apresentadas duas definições, segundo [20] e [5], respectivamente.

Definição 2.1. (*Combustão*)

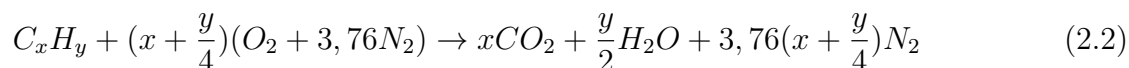
- (a). *Define-se combustão como uma oxidação rápida gerando calor, ou ambos, calor e luz.*
- (b). *Define-se combustão como a ciência das reacções químicas exotérmicas em escoamentos com transmissão de calor e massa.*

Essas definições enfatizam a importância intrínseca das reacções químicas para a combustão. Em particular nota-se a importância dos balanços de energia (em forma de calor) e da transferência de massa no estudo da combustão. Um foco especial é dado as equações de conservação neste trabalho e métodos numéricos que permitem a sua resolução. Um processo de combustão pode ser descrito por uma reacção química global descrita pela equação (1.1), reescrita como:



O combustível é frequentemente, de forma simplificada, um hidrocarboneto C_xH_y , conforme discutido no ponto 2.1.2. O oxidante mais comum é o ar, que é composto, em grandes quantidades, por oxigénio, 20,946% e nitrogénio 78,084%. Encontram-se também no ar, em pequenas porções, o argónio, o dióxido de carbono e o neónio. O ar pode ser considerado como uma *mistura ideal*¹ composto apenas por oxigénio, 21%, e nitrogénio, 79% (composição volúmica), o que corresponde a $0,79/0,21 = 3,76n_{N_2}/n_{O_2}$ (3,76 moles de N_2 por cada mol de O_2). Assim nesta pesquisa, para o estudo da combustão é considerada a composição $Ar = O_2 + 3,76N_2$, conforme a literatura, ver por exemplo [4] e [20].

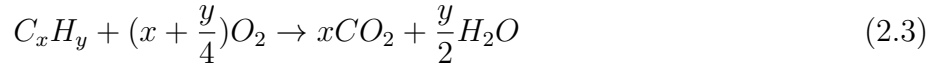
Designa-se por *mistura estequiométrica* a uma mistura combustível-oxidante quando a quantidade de oxidante nela é a teoricamente necessária e suficiente para queimar completamente todo o combustível num processo de *combustão ideal*¹. A equação química que descreve a combustão da mistura estequiométrica é também chamada equação da *combustão completa*. No caso da combustão de um hidrocarboneto em ar, a reacção de combustão completa é escrita como



A equação (2.2) pressupõe que na combustão ideal formam-se espécies completamente oxidadas (todo o carbono é oxidado para CO_2 e todo hidrogénio é oxidado para H_2O). O nitrogénio, N_2 , aparece na equação (2.2) como molécula isolada, tanto como produto assim como reagente, o que significa que este não reage durante o processo de combustão ideal (N_2 é inerte nessa reacção). Para análises mais simplificadas o oxidante é considerado como sendo apenas o oxigénio. Para aplicações que exigem queima intensa, utiliza-se o ar enriquecido com o oxigénio ou mesmo o oxigénio puro, pois, embora o nitrogénio não reaja, a libertação de calor químico em massa é

¹ O termo “ideal” é usado em ciências e engenharia para se referir a modelos teóricos e simplificados, que não levam em consideração certas complicações do fenómeno real.

reduzida devido ao gasto de energia térmica para aquecê-lo. Para esses casos a equação (2.2) pode ser reescrita como



A razão estequiométrica (mássica) Ar/Combustível para um hidrocarboneto é dada por

$$\left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)_{est} = \frac{(x + \frac{y}{4})(M_{O_2} + 3,76M_{N_2})}{M_{fu}} = 4,76(x + \frac{y}{4})\frac{M_{ar}}{M_{fu}} \quad (2.4)$$

que se reduz a

$$\left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)_{est} = (x + \frac{y}{4})\frac{M_{O_2}}{M_{fu}} \quad (2.4a)$$

se o oxidante for o oxigénio puro, onde M_{fu} é a massa molar do combustível (fuel). A razão estequiométrica indica a quantidade de ar (em kg) em relação a massa do combustível em uma mistura estequiométrica.

A equação (2.2) representa apenas um processo de combustão ideal, que é uma aproximação do processo real. Para uma mistura real de um hidrocarboneto e ar em proporções estequiométricas não ocorre combustão completa, havendo formação de espécies químicas adicionais, como poluentes (CO , NO , e hidrocarbonetos não queimados). Para garantir a combustão completa a maioria dos equipamentos de combustão opera com excesso de ar.

A proporção de oxidante (ar) e combustível numa mistura arbitrária relativamente a mistura estequiométrica é quantificada através da razão de equivalência Φ , definida como

$$\Phi = \frac{\left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)_{est}}{\left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)} \quad (2.5)$$

A partir da equação (2.5), observa-se:

- O caso $\Phi=1$, implica $\left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)_{est} = \left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)$ e corresponde a uma mistura estequiométrica.
- No caso $\Phi < 1$, $\left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)_{est} < \left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)$, equivale a quantidade de oxidante ser maior que a teoricamente necessária para queimar todo o combustível, designando-se a mistura por pobre.
- No caso $\Phi > 1$, $\left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)_{est} > \left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)$, equivale a quantidade de oxidante ser inferior a requerida pela estequiometria para queimar todo o combustível, designando-se a mistura por rica.

Motores de ignição-centelha (ignição por faísca) operam essencialmente com misturas estequiométricas quando usados em automóveis que empregam um catalisador responsável por reduzir as emissões poluentes.

No caso de o oxidante ser o ar, definem-se o coeficiente de excesso de ar λ

$$\lambda = \frac{1}{\Phi} = \frac{\left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)}{\left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)_{est}} \quad (2.6)$$

e o excesso de ar em percentagem

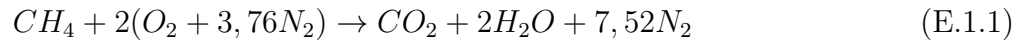
$$e[\%] = \frac{\left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right) - \left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)_{est}}{\left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)_{est}} \times 100\% = \frac{1 - \Phi}{\Phi} \times 100\% \quad (2.7)$$

Exemplo 1. Considere a combustão do metano em ar. Determine:

- a) A razão estequiométrica ar/combustível
- b) As frações molares dos produtos de combustão, considerando combustão completa com 15% de excesso de ar.

Resolução:

- a) A equação de combustão do metano, CH_4 , em ar, em condições estequiométricas é obtida usando a equação (2.2) com $x = 1$ e $y = 4$



A razão estequiométrica determina-se usando a equação (2.4)

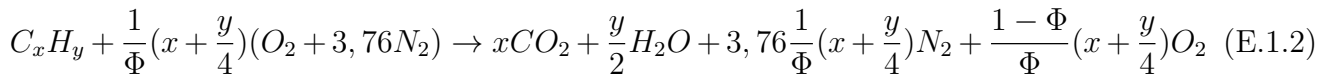
$$\left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)_{est} = 4,76 \times 2 \frac{M_{ar}}{M_{fu}} = 9,52 \frac{28,97}{16,04} = 17,2 \text{ kg de ar/kg de } CH_4$$

- b) Usando a equação (2.7), obtemos

$$e[\%] = \frac{1 - \Phi}{\Phi} \times 100\% = 15\%$$

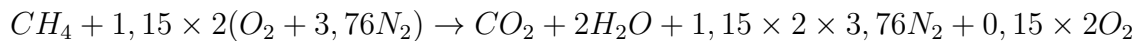
Resolvendo para Φ obtém-se $\Phi = 1/1,15$.

Da definição de Φ , equação (2.5), verifica-se que $\left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right) = \frac{1}{\Phi} \left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}}\right)_{est}$, assim escrevemos a equação da combustão completa do metano em ar como



onde $\frac{1 - \Phi}{\Phi} \left(x + \frac{y}{4}\right) O_2$ indica o oxigénio em excesso que não reagiu.

Substituindo $x = 1$, $y = 4$ e $\frac{1}{\Phi} = 1,15$ obtêm-se



ou equivalentemente,



A fracção molar do componente i em uma mistura formada por N componentes é dada por

$$\chi_i = \frac{n_i}{n_{total}} = \frac{n_i}{\sum_{j=1}^N n_j} \quad (E.1.3)$$

As frações molares dos produtos da combustão determinados usando a equação (E.1.3) são listados na tabela abaixo:

Tabela.2. Frações molares dos produtos de combustão (Exemplo 1)

<i>Produto i</i>	<i>Número de moles</i>	<i>Fracção molar χ_i</i>
CO_2	1	0,0837
H_2O	2	0,1674
N_2	8,648	0,7238
O_2	0,3	0,0251
<i>Total</i>	11,948	1

2.2 Combustão e Termoquímica

Neste subcapítulo são apresentados conceitos termodinâmicos indispensáveis no estudo da combustão: O modelo de gás ideal e a libertação de energia nas reacções de combustão expressas como entalpia de combustão e poder calorífico. Apresenta-se inicialmente a terminologia termodinâmica da combustão.

2.2.1 A Linguagem Termodinâmica na Combustão

Em termodinâmica, a região do universo de interesse para o estudo é denominada *sistema* e a região restante é a *vizinhança*. Em um *sistema aberto*, a massa e a energia podem fluir através do sistema e em um *sistema fechado* não existe fluxo de massa.

No capítulo 3, os modelos matemáticos incidirão sobre uma câmara de combustão ideal de um motor a reacção (e esta será simplificada para um domínio 2D para permitir a resolução numérica das equações diferenciais).

As propriedades de um sistema podem ser *extensivas* ou *intensivas*. O valor de uma propriedade extensiva depende da quantidade (massa ou número de moles) da substância considerada, por outro lado o valor de uma propriedade intensiva é expresso por unidade de massa ou por moles de substância e assim não depende da quantidade. Usar-se-á letras maiúsculas para propriedades extensivas, como $V(m^3)$ para o volume. A forma intensiva será representada por uma letra minúscula, como $v(m^3/mol)$ para o volume molar e $\hat{v}(m^3/kg)$ para o volume específico. As propriedades extensivas são obtidas ao multiplicar as respectivas propriedades intensivas pela massa ou pelo número de moles. Para o volume temos $V = m\hat{v}$ ou $V = nv$.

2.2.2 O Modelo de Gás Ideal

Um gás ideal é modelado usando uma equação de estado. Uma equação de estado fornece a relação entre a pressão P , a temperatura T e o volume V para uma substância:

$$PV = nR_u T \quad (2.8a)$$

onde R_u é a constante dos gases ideais ($R_u = 8,314 J/mol \cdot K$). Segundo [11] e [20], o modelo de gás ideal aplica-se a gases que admitem comportamento ideal, gases no limite de baixas pressões

e altas temperaturas. Da equação (2.8a) obtém-se as variantes:

$$PV = mRT \quad (2.8b)$$

$$P = \rho RT \quad (2.8c)$$

onde ρ é a densidade e R relaciona-se com a constante universal dos gases e a massa molar por $R = R_u/M$. Esse modelo é aplicável aos sistemas de combustão de interesse pois a altas temperaturas associadas a combustão resultam em densidades suficientemente baixas (o que equivale, pela equação (2.8c), a pressões baixas) para que o comportamento de gás ideal seja uma aproximação razoável.

As misturas das espécies químicas envolvidas nos processos de combustão podem ser então tratadas como misturas de gases ideais. As fracções molares e mássicas do componente i na mistura são definidas como

$$\chi_i = \frac{n_i}{n_{total}} = \frac{n_i}{\sum_{j=1}^N n_j} \quad (2.9a)$$

$$Y_i = \frac{m_i}{m_{total}} = \frac{m_i}{\sum_{j=1}^N m_j} \quad (2.9b)$$

onde

$$\sum_{i=1}^N \chi_i = \sum_{i=1}^N Y_i = 1. \quad (2.10)$$

onde N é o número total de espécies químicas na mistura (passaremos a ocultar os índices contadores dos somatórios para a simplificação de notação). Para misturas de gases ideais muitas propriedades específicas mássicas $\hat{k}$ e molares k da mistura (como a entalpia h e a massa molar M) são calculadas como média ponderada pela fracção mássica ou molar das respectivas propriedades específicas dos componentes:

$$k_{mis} = \sum \chi_i k_i \quad (2.11a)$$

$$\hat{k}_{mis} = \sum Y_i \hat{k}_i \quad (2.11b)$$

$$K_{mis} = \sum n_i k_i \quad (2.11c)$$

Usando $n_i = \frac{m_i}{M_i}$ e a equação (2.9b), obtemos a massa molar da mistura em função das fracções mássicas

$$M_{mist} = \frac{m_{total}}{n_{total}} = \frac{m_{total}}{\sum n_i} = \frac{m_{total}}{\sum \frac{m_i}{M_i}} = \frac{1}{\sum \frac{Y_i}{M_i}} \quad (2.11d)$$

As fracções molares e mássicas relacionam-se pela formula

$$\chi_i = \frac{1}{\sum \frac{Y_i}{M_i}} \frac{Y_i}{M_i} = M_{mist} \frac{Y_i}{M_i} \quad (2.11e)$$

2.2.3 Balanços de Energia

A energia interna e a entalpia de um sistema em estudo são fixadas quando são conhecidas as propriedades intensivas T e v ou T e p , respectivamente. Estas propriedades podem ser determinadas por:

$$\Delta u = \int_{T_{ref}}^T c_v dT \quad (2.12a)$$

$$\Delta h = \int_{T_{ref}}^T c_p dT \quad (2.12b)$$

onde c_v e c_p são, respectivamente, os calores específicos a volume constante e pressão constante, com

$$\Delta u = u(T) - u_{ref} \quad (2.12c)$$

$$\Delta h = h(T) - h_{ref} \quad (2.12d)$$

Em geral, tanto para gases com comportamento ideal assim como para aqueles com comportamento real c_v e c_p variam com a temperatura e portanto

$$c_v = c_v(T), \quad c_p = c_p(T)$$

Expressões polinomiais $c(T)$ são geralmente ajustadas através de dados experimentais de cada substância de interesse e são geralmente encontradas na literatura, como é o caso de

$$c_p(T) = A + BT + CT^2 + DT^{-2} + ET^3 \quad (2.13)$$

encontrada em [10]. O uso de $\bar{c}_v$ ou $\bar{c}_p$ (capacidade calorífica média) entre duas temperaturas conhecidas simplifica a avaliação de (2.12) para

$$\Delta u = \bar{c}_v(T - T_{ref}), \quad \Delta h = \bar{c}_p(T - T_{ref})$$

A Primeira Lei da Termodinâmica

A primeira lei da termodinâmica enuncia que “A variação de energia de um sistema tem que ser igual a energia transferida através das suas fronteiras com as vizinhanças” [10]. A energia pode ser transferida como calor Q , como trabalho W e no caso de sistemas abertos, como a energia associada a massa que escoar para dentro e fora do sistema.

Para um sistema fechado, a expressão matemática correspondente a 1ª lei é

$$\Delta E = Q + W \quad (2.14a)$$

$$\Delta U + \Delta E_c + \Delta E_p = Q + W \quad (2.14b)$$

onde ΔU , ΔE_c e ΔE_p são as variações da energia interna, cinética e potencial do sistema, respectivamente. Q é a quantidade de energia em forma de calor que atravessa a fronteira para o sistema ($Q > 0$) ou para fora do sistema ($Q < 0$) e é definido por

$$Q = Q_{in} - Q_{out}$$

e W é o trabalho realizado, pelo sistema sobre a vizinhança ($W < 0$) ou pela vizinhança sobre o sistema ($W > 0$) e é definido por

$$W = W_{in} - W_{out}$$

A Entalpia Padrão

No tratamento de sistemas reactivos, que é o caso dos combustores, define-se a entalpia padrão como a soma da entalpia de formação h_f (associada às ligações químicas) com a variação da entalpia sensível Δh_s (associada somente com a temperatura). Para uma espécie química i temos

$$h_i(T) = h_{f,i}^\circ(T_{ref}) + \Delta h_{s,i}(T) \quad (2.15)$$

O estado de referência considerado é $T = 25^\circ C (298K)$ e $P_{ref} = P^\circ = 1atm (101325Pa)$. Os valores de $h_{f,i}^\circ$ para as substâncias de interesse para a combustão estão disponíveis na maioria das fontes consultadas. $\Delta h_{s,i}(T)$ pode ser calculada pela equação (2.12b) ou encontrada junto da entalpia de formação na literatura, a diferentes temperaturas T .

Para uma mistura de reagentes ou produtos, H_{mis} pode ser calculada pelas equações (2.11a) - (2.11c) e (2.15)

$$H_{prod}(T) = \sum_{prod} n_i h_i(T) \quad (2.16a)$$

$$H_{reag}(T) = \sum_{reag} n_i h_i(T) \quad (2.16b)$$

A Entalpia de Combustão e o Poder Calorífico

A entalpia de reacção, ou entalpia de combustão no caso de uma reacção de combustão é definida como

$$\Delta h_R(T) = q = h_{prod} - h_{reag} \quad (2.17a)$$

ou

$$\Delta H_R(T) = H_{prod}(T) - H_{reag}(T) \quad (2.17b)$$

$$\Delta H_R = \sum_{prod} n_i h_i - \sum_{reag} n_i h_i$$

$$\Delta H_R = \sum \nu_i h_i$$

$$\Delta H_R = \sum \nu_i \hat{h}_i M_i$$

onde ν_i é o coeficiente estequiométrico da espécie química i , onde definimos

$$\nu_i > 0, \text{ se } i \text{ é um produto} \quad (2.17c)$$

$$\nu_i < 0, \text{ se } i \text{ é um reagente}$$

T é comumente considerada como sendo $T = T_{ref}$. A entalpia de combustão quantifica a quantidade de calor libertado em uma reacção de combustão.

O *calor de combustão* Δh_c , também chamado *poder calorífico* é numericamente igual a entalpia de combustão, mas com o sinal contrário. Δh_c é sempre positivo para reacções de combustão,

pois estas sempre são exotérmicas ($\Delta h_R < 0$) e mede a quantidade de energia que o combustível fornece.

A Temperatura de Chama Adiabática (combustão a pressão constante)

A máxima temperatura para o processo de combustão a pressão constante (não só) ocorre quando o processo é adiabático (sem transferência de calor através das fronteiras do sistema). Essa temperatura é chamada temperatura adiabática da chama a pressão constante e é denotada por T_{ad} . Essa é a temperatura máxima que pode ser atingida pelos produtos de combustão. Se houver perda de calor através das paredes do combustor então a entalpia final dos produtos será inferior a aquela que corresponde a temperatura de chama adiabática e esta é a situação comum nos sistemas de combustão.

Aplicando a primeira lei, equação (2.15), para um processo adiabático ($Q = 0$), com ($P = \text{const.}$), negligenciando as energias cinética e potencial ($\Delta E_c = \Delta E_p = 0$) e considerando que os reagentes se encontram a uma temperatura inicial T_1 , obtém-se

$$H_{prod}(T_{ad}) = H_{reag}(T) \quad (2.18)$$

onde H é a entalpia padrão. Aplicando as equações (2.15) e (2.16) em (2.18) obtém-se

$$\sum_{\text{prod}} n_i \left[h_{f,i}^\circ(T_{ref}) + \int_{T_{ref}}^{T_{ad}} c_P(T) dT \right] = \sum_{\text{reag}} n_i \left[h_{f,i}^\circ(T_{ref}) + \int_{T_{ref}}^{T_1} c_P(T) dT \right]$$

considerando que os reagentes estão no estado padrão ($T = T_{ref}$), obtém-se

$$\left[\sum_{\text{prod}} n_i h_{f,i}^\circ(T_{ref}) - \sum_{\text{reag}} n_i h_{f,i}^\circ(T_{ref}) \right] + \sum_{\text{prod}} n_i \int_{T_{ref}}^{T_{ad}} c_P(T) dT = 0$$

$$\Delta H_R(T_{ref}) + \sum_{\text{prod}} n_i \int_{T_{ref}}^{T_{ad}} c_{P,i}(T) dT = 0 \quad (2.19)$$

A temperatura adiabática da chama, quando de interesse, pode ser determinada pela equação (2.19) e requer o conhecimento da composição química dos produtos da combustão. Para temperaturas adiabáticas típicas da combustão, ocorre dissociação dos produtos de combustão, pelo que o problema do cálculo da T_{ad} requer inicialmente o cálculo de composição química dos produtos, e para isso é usado o conceito de equilíbrio químico, que resulta num sistema de n equações não lineares, onde n é o número de espécies consideradas nos produtos da combustão.

2.3 Cinética Química

Em muitos processos de combustão as velocidades (taxas) de reacções químicas determinam a velocidade de combustão e em todos os processos de combustão é a cinética química que determina a formação e distribuição de poluentes. A ignição da mistura Ar-Combustível e a extinção de chama estão directamente ligados a processos químicos.

Neste subcapítulo é feita a distinção entre uma reacção global e uma reacção elementar, é enunciada a lei da acção de massas e é aplicada a um exemplo de um mecanismo genérico de combustão resultando num sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem não linear. Antes definimos o conceito de concentração de uma espécie química i , sobre o qual incide o estudo da cinética.

Definição 2.2. (*Concentração Molar*)

A concentração molar de uma espécie química i , cuja fórmula química é X_i e é representada por $[X_i]$ (medida em kmol/m^3) é definida em [5] como

$$[X_i] = \frac{n_i}{V} \quad (2.20)$$

Aplicando o modelo de gás ideal, equação (2.8a), na equação acima obtemos a relação entre a concentração da espécie X_i e a sua fracção molar

$$[X_i] = \chi_i \frac{P}{R_u T} \quad (2.21)$$

Aplicando a equação (2.11e) em (2.21), obtém-se

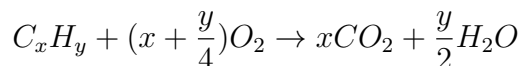
$$[X_i] = \frac{P}{R_u T} M_{mist} \frac{Y_i}{M_i}$$

e usando a equação (2.8c) com $R = R_u/M_{mist}$, obtemos a relação entre a concentração da espécie X_i e a sua fracção mássica

$$[X_i] = \frac{P}{RT} \frac{Y_i}{M_i} = \frac{\rho}{M_i} Y_i \quad (2.22)$$

2.3.1 Reacção Global e Reacção Elementar

O efeito global da reacção química entre um combustível e um oxidante, no caso de um hidrocarboneto, pode ser expressa através da reacção global (2.3)

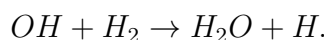


Esta equação descreve apenas o estado inicial e final do processo de combustão e não o modo como este ocorre a nível molecular. Este é o *mecanismo da reacção global*.

Uma reacção de um combustível com um oxidante envolve um certo número de reacções elementares em que participam espécies intermediárias. Uma reacção designa-se por *elementar* quando ocorre a nível molecular exactamente como descrito pela equação química. Um exemplo de uma reacção elementar que tem lugar na combustão do hidrogénio em ar (oxigénio puro)



é



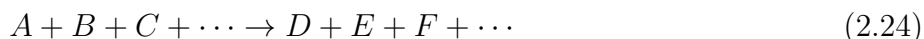
e resulta da quebra de ligação dos dois átomos da molécula de hidrogénio e da subsequente captura de um desses átomos pelo radical OH, formando-se então a molécula H_2O . Assim as moléculas de água em (2.23) não se formam mediante a colisão de três moléculas H_2 , H_2 , e O_2 , pelo contrario espécies intermediárias como H , O e OH intervêm no mecanismo da reacção.

Um conjunto de reacções elementares necessárias para descrever a reacção global é designado *mecanismo da reacção*.

2.3.2 A Lei da Acção de Massas: Velocidade da Reacção

Taxa de uma reacção global

Considere-se a reacção global



A lei empírica da acção de massas estabelece que a taxa de reacção é proporcional ao produto das concentrações dos reagentes. Para a equação global (2.24) a lei é expressa matematicamente como

$$\frac{d[A]}{dt} = -k(T)[A]^n[B]^m[C]^p \dots \quad (2.25)$$

A taxa de reacção é uma medida de velocidade a que se processa a reacção química. Quanto maior for a velocidade da reacção maior é a taxa de reacção e mais rapidamente se dá a conversão de reagentes em produtos. k é denominada constante de reacção e em geral não é constante, variando fortemente com a temperatura. O sinal negativo indica que a concentração do reagente A (combustível ou oxidante no caso da combustão) decresce com o tempo. Os expoentes $m, n, p, \dots$ são as *ordens de reacção* em relação as espécies A, B, C, ..., respectivamente. A soma $m+n+p+\dots$ é a *ordem global da reacção*.

Taxa de uma reacção elementar

A equação (2.25) aplicada directamente a equação global (2.24) não é frequentemente usada em estudos mais detalhados da combustão, pois a constante de reacção k e os expoentes $m, n, p, \dots$ são determinados experimentalmente e podem variar bastante de experimento para experimento. Em geral essa EDO é aplicada a cada reacção elementar de um mecanismo, visto que para esses casos os expoentes e a constante de reacção tem fundamento teórico. A complexidade do sistema de equações diferenciais ordinárias aumenta com o número de espécies no mecanismo. Solucionando o sistema, a velocidade do consumo de reagentes e de produção dos produtos podem ser estimadas e as concentrações podem ser escritas como $[X_i] = [X_i](t)$.

Principais reacções elementares na combustão

As reacções elementares em um mecanismo de combustão podem ser classificadas em *unimoleculares*, *bimoleculares* ou *trimoleculares*, consoante o número de moléculas dos reagentes na equação elementar. As reacções envolvendo mais de três reagentes são raras e irrelevantes na combustão.

As reacções unimoleculares



são de ordem 1, sendo a taxa de reacção correspondente, equação (2.25), dada por

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A] \quad (2.26b)$$

em que k tem a unidade de medição s^{-1} .

Reacções bimoleculares, as mais frequentes nos mecanismos de combustão, envolvem a colisão de duas espécies



e são em geral de segunda ordem, primeira ordem em relação a cada reagente. As EDOs correspondentes são

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A][B] \quad (2.28a)$$

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^2 \quad (2.28b)$$

e neste caso k tem unidade de $m^3/kmol \cdot s$

Para reacções trimoleculares as equações correspondentes são análogas. Uma situação comum nos mecanismos é a reacção trimolecular da forma



onde M permanece inerte durante a reacção. M funciona como um catalisador e é chamado 3º corpo de colisão. A taxa de reacção nesse caso é dada por

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A][B][M] \quad (2.29b)$$

A evolução da concentração de uma espécie em uma dada equação elementar ao longo do tempo pode ser determinada resolvendo a EDO correspondente, desde que sejam conhecidas as concentrações iniciais. Para a equação (2.26b) obtém-se o problema de valor inicial (P.V.I)

$$\begin{cases} \frac{d[A]}{dt} = -k[A] \\ [A](0) = [A]_0 \end{cases}$$

cuja solução é $[A](t) = [A]_0 \exp(-kt)$. Assim a concentração da espécie A decai exponencialmente nesta etapa do mecanismo. Integrando (2.28a) (ver Apêndice B) obtém-se:

$$[A](t) = [A]_0 \frac{[A]_0 - [B]_0}{[A]_0 - [B]_0 \exp([B]_0 - [A]_0)kt}$$

Esses resultados se aplicam a análise de uma etapa e não para todo o mecanismo.

O Modelo de Arrhenius: A taxa de reacção como função da temperatura

A aplicação da *teoria de colisão* (ver Apêndice A), é usada para explicar a dependência da

constante de reacção em função da temperatura. Para faixas de temperatura não muito extensas, a constante de reacção pode ser expressa pela relação empírica de Arrhenius

$$k(T) = A \exp\left(\frac{-E_a}{R_u T}\right) \quad (2.30)$$

onde A é denominado factor pré-exponencial e de acordo com a teoria de colisão depende de $\sqrt{T}$. E_a é a energia de activação. A energia de activação corresponde a energia cinética mínima que os reagentes devem adquirir antes de poderem reagir, isto é, para que haja formação dos produtos. No caso do motor de combustão interna por exemplo, a mistura ar-combustível que é armazenada em um colector de admissão não reage. Para que a reacção inicie é necessário conduzir a ela uma energia (uma faísca, uma chama), de acordo com [20] e [22].

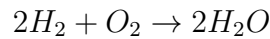
Na literatura, é mais comum o uso da expressão modificada de Arrhenius

$$k(T) = AT^b \exp\left(\frac{-E_a}{R_u T}\right) \quad (2.31)$$

onde A, b e E_a são parâmetros empíricos e tabelados para muitas das reacções elementares que compõem os mecanismos de combustão de combustíveis de interesse.

2.3.3 Taxa de Reacção Para Mecanismos de Combustão

Para determinar a taxa de reacção de uma espécie química em um mecanismo conhecido é necessário ter em conta a taxa de todas as reacções elementares em que essa espécie participa. Para ilustrar isso, consideremos um exemplo de mecanismo de combustão do hidrogénio, equação (2.23):



Para realizar essa conversão global, as seguintes reacções elementares são importantes:



Designamos por k_{fm} e k_{rm} as constantes de reacção da m-ésima reacção directa (forward) ($\rightarrow$) e reacção reversa ($\leftarrow$), respectivamente. Considerando que o mecanismo é composto por reacções elementares bimoleculares ($R_1 - R_3$) e trimolecular (R_4), para obter a EDO expressando a taxa líquida de uma espécie no mecanismo, aplicamos as equações (2.28a) e (2.29b) nas reacções directa e reversa em que a espécie participa. As taxas líquidas de produção de H_2 e H no mecanismo são:

$$\frac{d[H_2]}{dt} = -k_{f1}[H_2][O_2] - k_{f3}[OH][H_2] + k_{r1}[HO_2][H] + k_{r3}[H_2O][H]$$

$$\begin{aligned} \frac{d[H]}{dt} = & k_{f1}[H_2][O_2] - k_{f2}[H][O_2] + k_{f3}[OH][H_2] - k_{f4}[H][O_2][M] \\ & - k_{r1}[HO_2][H] + k_{r2}[OH][O] - k_{r3}[H_2O][H] + k_{r4}[HO_2][M] \end{aligned}$$

Mais 6 equações, para as espécies O_2 , HO_2 , OH , O , H_2O e M , podem ser escritas para a descrição completa das taxas de consumo e produção de cada espécie no mecanismo.

Caso geral:

Para um mecanismo constituído por M equações no qual intervém N espécies, as M equações podem ser expressas como

$$\sum_{i=1}^N v_{im}^{\cdot} X_i \leftrightarrow \sum_{i=1}^N v_{im}^{\cdot\cdot} X_i, m = 1, 2, \dots, M \quad (2.32)$$

onde $v_{im}^{\cdot}$ e $v_{im}^{\cdot\cdot}$ são, respectivamente, os coeficientes estequiométricos dos lados dos reagentes e dos produtos, para a espécie química específica i e reacção m . A taxa de reacção ω_i da espécie i num mecanismo de M reacções em $kmol/m^3 \cdot s$ é dada por

$$\omega_i = \frac{d[X_i]}{dt} = \sum_{m=1}^M v_{im} q_m \quad (2.33a)$$

onde

$$v_{im} = v_{im}^{\cdot\cdot} - v_{im}^{\cdot} \quad (2.33b)$$

$$q_m = k_{fm} \prod_{i=1}^N [X_i]^{v_{im}^{\cdot}} - k_{rm} \prod_{i=1}^N [X_i]^{v_{im}^{\cdot\cdot}} \quad (2.33c)$$

As equações em (2.33) podem ser aplicadas a qualquer mecanismo de reacção e a notação compacta permite a implementação computacional flexível quando mecanismos detalhados ou reduzidos são usados. Essas equações formam um sistema de equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem não linear que descreve a evolução do sistema químico

$$\begin{cases} \frac{d[X_i](t)}{dt} = f_i([X_1](t), [X_2](t), \dots, [X_n](t)) \\ [X_i](0) = [X_i]_0 \end{cases} \quad (2.34)$$

e pode ser resolvido numericamente desde que sejam conhecidas as concentrações iniciais.

2.3.4 Limitações

Os combustíveis de interesse na combustão, como a gasolina, o diesel e os combustíveis de aviação, são compostos por centenas a milhares de componentes, conforme mencionado na secção 2.1.2, e para permitir o seu uso em pesquisas e simulações, misturas simplificadas de hidrocarbonetos (ou um único hidrocarboneto com substituto), são usadas, desde que se mantenham as características físicas e químicas do combustível que se pretende representar.

De seguida um mecanismo cinético detalhado para o combustível substituto deve ser desenvolvido para permitir a captura dos detalhes químicos da combustão. Mecanismos detalhados podem conter varias espécies (centenas ou mais) e quando aplicados a problemas que envolvem a cinética química, como na combustão, requerem a resolução da EDP (2.42), equação de conservação das espécies, para cada espécie do mecanismo, formando assim um sistema de EDPs acoplado muito grande. No entanto devido a limitações dos recursos computacionais actuais tais mecanismos não são, geralmente, directamente aplicados, pelo que recorre-se a técnicas de redução de mecanismos.

Segundo [14], [20] e [23] é comum o uso da equação

$$\dot{\omega}_{fuel} = \frac{d[C_x H_y]}{dt} = -k(T)[C_x H_y]^m [O_2]^n [N_2]^p \quad (2.35a)$$

Para aplicações de engenharia, incluindo a combustão. Aplicando a equação (2.33) para o oxigénio, considerando $M = 1$ (mecanismo de um passo), $N = 2$ (número de espécies que reagem), e considerando apenas a taxa de reacção directa, obtemos

$$\dot{\omega}_{O_2} = \frac{d[O_2]}{dt} = -v_{O_2}' k(T)[C_x H_y]^m [O_2]^n [N_2]^p \quad (2.35b)$$

onde v_{O_2}' é o coeficiente estequiométrico de O_2 .

Essas taxas de reacção podem ser relacionadas. Dividindo a segunda equação pela primeira obtemos

$$\frac{\dot{\omega}_{O_2}}{\dot{\omega}_{fuel}} = v_{O_2}'$$

Note-se que $v_{O_2}'/v_{fuel}' = v_{O_2}'$ corresponde a razão estequiométrica molar da equação (2.2). A razão estequiométrica mássica, para que esta esteja de acordo com a unidade de medição de $\dot{\omega}$ ($kg/m^3 \cdot s$), é dada pela equação (2.4). Negligenciando o nitrogénio, da equação anterior e da equação (2.2) obtém-se

$$\dot{\omega}_{O_2} = \frac{v_{O_2}'}{v_{fuel}'} \frac{M_{O_2}}{M_{fuel}} \dot{\omega}_{fuel} \quad (2.35c)$$

$$\dot{\omega}_{O_2} = \left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}} \right)_{est} \dot{\omega}_{fuel} \quad (2.35d)$$

As equações (2.35a) e (2.35b), resultam da aplicação directa da lei da acção de massas, equação (2.25), no mecanismo global (2.3). Essa é frequentemente uma forma conveniente de aproximar o efeito de muitas reacções elementares que na verdade ocorrem, devendo no entanto, essas taxas representar de forma apropriada a média de todas as taxas de reacção individuais do mecanismo real.

Um impasse nessa abordagem, é que as ordens de reacção m , n e p nas equações (2.35) $a - b$, são determinados somente experimentalmente e podem variar bastante de experimento para experimento, o que não seria um problema se um mecanismo detalhado/reduzido fosse aplicado, pois para reacções elementares, as ordens de reacção são iguais aos coeficientes estequiométricos na equação química.

A suposição mais comum na literatura de combustão para os expoentes é que a taxa de reacção é de primeira ordem tanto para o oxidante assim como para o combustível, ($m = 1$, $n = 1$ e $p = 0$, visto que N_2 é inerte e não afecta a reacção). Segundo [23], essa suposição só é válida para o caso da mistura ar-combustível ser estequiométrica e para o caso de misturas pobres ou ricas ajustes nos expoentes m e n tornam-se necessários.

2.4 Equações de Conservação para a Combustão

A formulação matemática de fenómenos de combustão baseia-se geralmente na aplicação de princípios de conservação de massa, energia e quantidade de movimento. No caso de sistemas reactivos multi-dimensionais, como na combustão, a aplicação desses princípios dá origem a EDPs. Nesta secção

são apresentadas essas equações e de forma breve, a maneira como elas são obtidas (detalhes podem ser encontrados no Apêndice B e nas fontes referenciadas). Serão usadas ambas a notação vectorial (independente de coordenadas) e a forma cartesiana correspondente para cada equação.

Seja δ uma dada quantidade de matéria, v_δ o volume total ocupado por δ e V uma região espacial contendo v_δ (volume de controle). Seja ϕ uma propriedade intensiva ligada a δ ($\phi = 1$ para a conservação de massa e $\phi = \mathbf{v}$ para a conservação do momento).

Se $\Phi = \int_{v_\delta} \rho \phi dV$ é a propriedade extensiva correspondente a ϕ , então o lado esquerdo de cada equação de conservação para o volume de controle fixo V , pode ser escrito como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{v_\delta} \rho \phi dV = \int_V \rho \phi dV + \int_{S_V} \rho \phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.36)$$

onde S_V é a superfície limitadora de V , $\mathbf{n}$ o vector normal a S_V direcionado para fora e $\mathbf{v}$ a velocidade do fluido.

Essa equação afirma que a taxa de variação da quantidade da propriedade na massa de controle total Φ é igual a variação da propriedade dentro do volume de controle mais o fluxo líquido desta através da fronteira de V devido ao movimento do fluido em relação aos limites de V . O último termo é geralmente chamado fluxo convectivo ou advectivo.

2.4.1 Equação de Conservação da Massa

A forma integral da equação de conservação de massa é obtida da equação (2.36) definindo $\phi = 1$ e considerando $\frac{dm}{dt} = 0$ (a massa total não é criada e nem destruída)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \int_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (2.37a)$$

Aplicando o teorema da divergência de Gauss (ver Apêndice A) na integral de superfície, obtém-se a forma livre de coordenadas

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.37b)$$

Para um *fluido incompressível* (ver Apêndice A) temos

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2.38)$$

2.4.2 Equação de Conservação do Momento

A variação do momento ($m\mathbf{v}$) com o tempo obedece a equação $\frac{d(m\mathbf{v})}{dt} = \sum \mathbf{f}$. Substituindo $\phi = \mathbf{v}$ em (2.36) obtém-se a fórmula integral

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \mathbf{v} dV + \int_S \rho (\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} dS = \sum \mathbf{f} \quad (2.39a)$$

onde $\mathbf{f}$ representa forças atuando sobre o contorno de v_s e $\otimes$ é o *produto tensorial* (ver Apêndice A). Para *fluidos newtonianos* (ver Apêndice A) o lado direito da equação acima pode ser expresso como

$$\sum \mathbf{f} = \int_S \vec{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{n} dS + \int_V \rho \mathbf{b} dV \quad (2.39b)$$

onde

$$\vec{\mathbf{T}} = -(p + \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \mathbf{v}) \vec{\mathbf{I}} + 2\mu \mathbf{D}$$

é o tensor de tensões e

$$\vec{\mathbf{D}} = \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T]$$

é a taxa de deformação do tensor, μ é a viscosidade dinâmica, $\vec{\mathbf{I}}$ o tensor unitário, p a pressão e $\mathbf{b}$ representando forças de corpo.

Das equações em (2.39) e pelo teorema da divergência obtém-se

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = \nabla \cdot \vec{\mathbf{T}} + \rho \mathbf{b} \quad (2.39c)$$

Considerando um fluido incompressível, a determinação da divergência do tensor $\vec{\mathbf{T}}$ e $\mathbf{b}$ como sendo apenas a gravidade, das equações (2.39) obtém-se (ver Apêndice B)

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{g} \quad (2.39d)$$

Aplicando a propriedade do produto tensorial

$$\nabla \cdot (\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \mathbf{v}(\nabla \cdot \mathbf{v})$$

e a equação (2.38), obtém-se

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + (\rho \mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{g} \quad (2.39e)$$

que é a forma não conservada da equação de Navier-Stokes. Esta é uma equação vectorial composta por duas equações diferenciais algébricas no caso 2D.

2.4.3 Equação de Conservação da Energia

Para a conservação de escalares, como é o caso da energia e das espécies químicas, a fórmula integral geral é

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV + \underbrace{\int_S \rho \phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS}_{\text{Convecção}} = \underbrace{\sum f_\phi}_{\text{Transporte de } \phi \text{ por difusão e outros mecanismos diferentes de convecção}} \quad (2.40)$$

Quando $\phi = h$, que é a medida total de energia no sistema, a equação de energia é escrita na sua forma simplificada em [5] e [14] como

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} h) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_p} \nabla h \right) \quad (2.41a)$$

Usando a definição de entalpia em (2.12b) e a equação de conservação das espécies, obtém-se (ver Apêndice B) a forma equivalente da equação de conservação de energia em função da temperatura

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q \quad (2.41b)$$

onde

$$Q = \sum h_i M_i \dot{\omega}_i \quad (2.41c)$$

representa o termo fonte de calor por unidade de volume devido as reacções químicas. Considerando a equação estequiométrica (2.3) e a definição de ν_i dada na equação (2.17c) e usando (2.35c) mostra-se que (ver Apêndice B)

$$Q = \frac{\dot{\omega}_{fuel}}{M_{fuel}} \Delta H_{comb} \quad (2.41d)$$

onde ΔH_{comb} é a entalpia da reacção de combustão.

2.4.4 Equação de Conservação da Massa da Espécie Química

Quando $\phi = Y_i$, obtém-se de (2.40) a seguinte equação de conservação de massa da espécie i

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_i) = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) + M_i \dot{\omega}_i \quad (2.42)$$

conforme [5] e [8], onde $\dot{\omega}_i$ é dado pela equação (2.33a)

2.4.5 Forma Cartesiana das Equações de Conservação

Para fluidos incompressíveis e newtonianos em 2D, com $\mathbf{v} = (u, v)$, as equações de conservação em coordenadas cartesianas são descritas a seguir:

Equação de Conservação da Massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (2.37C)$$

para um fluido incompressível

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

Equação de Conservação da Momento

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + u \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho u)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \rho g_x \quad (2.39C)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + u \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \rho g_y$$

Equação de Conservação da Energia

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + Q \quad (2.41C)$$

Equação de Conservação da Massa da Espécie Química

$$\rho \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \frac{\partial(uY_i)}{\partial x} + \frac{\partial(vY_i)}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \rho \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_i \rho \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) + M_i \omega_i$$

Levando em consideração a equação (2.37C), para um fluido incompressível, temos:

$$\frac{\partial(uY_i)}{\partial x} + \frac{\partial(vY_i)}{\partial y} = u \frac{\partial Y_i}{\partial x} + v \frac{\partial Y_i}{\partial y} + Y_i \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = u \frac{\partial Y_i}{\partial x} + v \frac{\partial Y_i}{\partial y}$$

de onde obtém-se a equação simplificada

$$\rho \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} + u \frac{\partial Y_i}{\partial x} + v \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \rho \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_i \rho \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) + M_i \omega_i \quad (2.42C)$$

2.4.6 Limitações

Conforme mencionado na secção 2.3.4, a descrição completa dos fenómenos da combustão que envolvem cinética química requer a resolução da equação das espécies (2.42) para cada espécie i considerada no mecanismo. Além da equação das espécies, as equações de conservação de massa, momento e energia devem ser consideradas para a obtenção de resultados realísticos. A suposição de fluido incompressível reduz a equação de conservação de massa (2.37) para (2.38). Para a simplificação do modelo no capítulo 3, devido ao custo computacional e o uso do Python como ferramenta CFD (Computational Fluid Dynamics), assumiremos também um campo de velocidade $\mathbf{v}$ prescrito.

2.5 Transferência de Calor e Condições de Contorno

2.5.1 Temperatura Prescrita

Fisicamente é a condição na qual a temperatura da superfície assume um valor pré-determinado, podendo esse valor ser constante ou variável no tempo. Matematicamente esta condição pode ser escrita como a condição de contorno

$$T = T_s(t) \quad (2.43)$$

onde $T_s(t)$ é função da temperatura da superfície de interesse dependente do tempo.

2.5.2 Fluxo Prescrito: Lei de Fourier

O fluxo prescrito corresponde a condição de contorno na qual o calor trocado entre o material e o meio assume um valor pré-determinado, essa quantidade pode ser constante ou variável em função do tempo. Esta condição é representada matematicamente na forma

$$-k \frac{\partial T}{\partial n} = q_p''(t) \quad (2.44)$$

onde $q_p''(t)$ é a função do fluxo prescrito na superfície de interesse dependente de tempo em W/m^2 . O gradiente de temperatura é multiplicado pela condutividade, conforme estabelece a Lei de Fourier: O calor se propaga de forma proporcional ao gradiente de temperatura e na direcção oposta a ele.

2.5.3 Convecção: Lei de Resfriamento de Newton

A convecção corresponde a condição de contorno em que a quantidade de calor trocado entre o material e um meio fluido depende das características, movimentação e temperatura do fluido, não podendo ser pré-estabelecido. Essa condição de contorno é descrita pela *Lei de Resfriamento de Newton*, que diz que o calor que é absorvido ou perdido por um corpo sólido é proporcional a diferença de temperatura entre o sólido e o fluido que está em contacto. Matematicamente é expressa como

$$-k \frac{\partial T}{\partial n} = h[T_{\text{superfície}} - T_{\infty}] \quad (2.45)$$

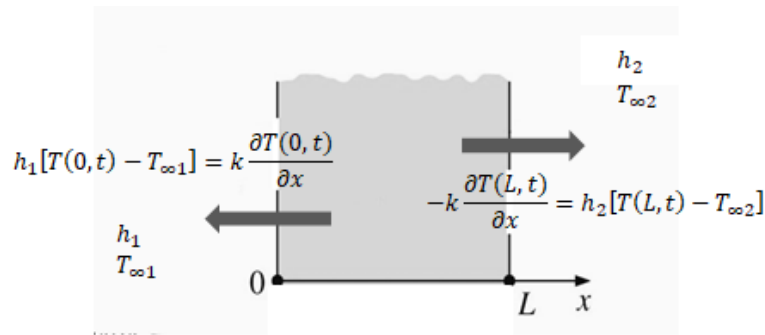


Figura 2.1: Modelo de fluxo de calor por convecção

onde h é a constante de proporcionalidade chamada coeficiente de convecção. Segundo a literatura, [3] e [16] por exemplo, h varia bastante dependendo da situação, e muitas vezes a sua determinação é um objecto de pesquisas e debates.

No modelo matemático desta pesquisa foi implementada a lei de resfriamento de Newton, equação (2.45), como condição de contorno para a equação de energia.

2.6 Métodos Numéricos: O Método de Diferenças Finitas

As EDPs descritas na secção anterior não tem, geralmente, soluções exactas (analíticas), sendo assim procedimentos numéricos usados para encontrar soluções aproximadas. A *definição do modelo matemático* corresponde o ponto de partida de um método numérico. Definido o modelo, é seleccionado o *método de discretização* adequado ao modelo, que aproxima as equações diferenciais por um sistema de equações algébricas com variáveis definidas em um conjunto de locais discretos no espaço e no tempo. Dentre as muitas abordagens possíveis, para as EDPs de interesse na combustão, se destacam as seguintes: O Método de Diferenças Finitas (MDF), Volumes Finitos (MVF) e Elementos Finitos (MEF). Nesse trabalho é aplicado o MDF. Apesar de um método poder ser mais adequado que os outros para certas classes de problemas, a princípio cada método fornece a mesma solução desde que a malha seja fina o suficiente.

A *malha*, os locais discretos do domínio nos quais as variáveis são calculadas, é determinada pelo método escolhido. A malha pode ser regular ou irregular (ou equivalentemente, uniforme ou não uniforme). Malhas irregulares são aplicadas a problemas cujas geometrias são mais complexas e as regulares para problemas de geometrias mais simples. Após a escolha da malha, *aproximações finitas* (para as derivadas nos pontos discretos, no caso do MDF e para as integrais de volume e

superfície, no caso do MVF) devem ser escolhidas. Daqui, obtém-se um largo sistema de equações algébricas, que dependendo do modelo, pode ser ou não linear. Um *método de solução* adequado deve ser seleccionado. Por fim estabelecem-se *critérios de convergência* para o método iterativo escolhido.

2.6.1 O Método de Diferenças Finitas

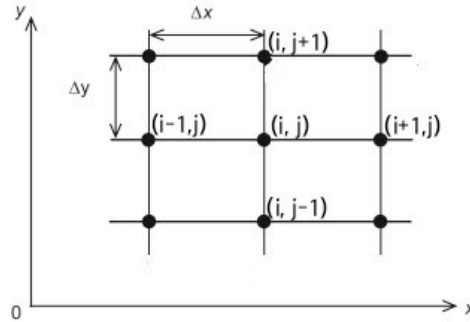


Figura 2.2: Malha 2D

O MDF substitui o termo dependente de uma EDP e todas as suas derivadas por aproximações. Este método depende fundamentalmente do *Teorema de Taylor* e substitui ainda a região sobre a qual as variáveis independentes na EDP foram inicialmente definidas pela malha de pontos discretos, onde a variável dependente será aproximada. Cada ponto (nó) da malha, se esta for regular, é unicamente identificado pelos índices (i, j) , no caso 2D (figura 2.2). O MDF é preferível para regiões de domínio simples, tais como rectângulos. As matrizes resultantes da discretização pelo MDF são bem estruturadas, sendo formadas por poucas diagonais não nulas.

Seja $\phi(x)$ uma função contínua e diferenciável na vizinhança do ponto x_i . ϕ pode ser expressa como uma série de Taylor:

$$\phi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\partial^n \phi}{\partial x^n} \right)_i \frac{(x - x_i)^n}{n!} \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} \phi(x) = & \phi(x_i) + (x - x_i) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(x - x_i)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(x - x_i)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i + \dots + \\ & \frac{(x - x_i)^{n-1}}{(n-1)!} \left(\frac{\partial^{n-1} \phi}{\partial x^{n-1}} \right)_i + O((\Delta x)^n) \end{aligned}$$

onde $O((\Delta x)^n)$ representa o erro de truncamento de ordem n , se os termos a partir da n -ésima derivada forem desconsiderados.

Aproximação da primeira derivada

Usando a equação (2.46) para obter ϕ nos pontos vizinhos x_{i+1} e x_{i-1} , temos:

$$\phi(x_{i+1}) = \phi(x_i) + (x_{i+1} - x_i) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(x_{i+1} - x_i)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i + \dots \quad (2.47)$$

$$\phi(x_{i-1}) = \phi(x_i) - (x_i - x_{i-1}) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i - \frac{(x_i - x_{i-1})^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i + \dots \quad (2.48)$$

Isolando, em (2.47) e (2.48) os segundos termos do lado direito e dividindo por $x_{i+1} - x_i$ e $x_i - x_{i-1}$, respectivamente, obtemos:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i &= \frac{\phi(x_{i+1}) - \phi(x_i)}{x_{i+1} - x_i} - \frac{x_{i+1} - x_i}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i - \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i + \dots \\ &= \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} + O(\Delta x) \end{aligned} \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i &= \frac{\phi(x_i) - \phi(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} + \frac{x_i - x_{i-1}}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i - \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i + \dots \\ &= \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x) \end{aligned} \quad (2.50)$$

Subtraindo (2.48) em (2.47) e isolando $\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i$, obtemos:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i &= \frac{\phi(x_{i+1}) - \phi(x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}} - \frac{(x_{i+1} - x_i)^2 - (x_i - x_{i-1})^2}{2!(x_{i+1} - x_{i-1})} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i + \\ &\quad + \frac{(x_{i+1} - x_i)^3 + (x_i - x_{i-1})^3}{3!(x_{i+1} - x_{i-1})} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i + \dots \\ \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i &= \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} + O((\Delta x)^2) \end{aligned} \quad (2.51)$$

onde assumimos $\Delta x = x_i - x_{i-1} = \text{const}$ e consideramos a variação na direcção x_i apenas. Truncando as séries, obtemos as aproximações para a primeira derivada.

- **Aproximação avançada (forward) da 1ª ordem:**

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} \quad (2.52)$$

- **Aproximação atrasada (backward) da 1ª ordem:**

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} \quad (2.53)$$

- **Aproximação centrada de 2ª ordem para a primeira derivada:**

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} \quad (2.54)$$

A aproximação centrada fornece uma melhor aproximação do que a avançada (forward) ou atrasada (backward), por ser de 2ª ordem tendo uma precisão de ordem $O((\Delta x)^2)$, enquanto que a precisão para avançada ou atrasada é da ordem de $O(\Delta x)$. O primeiro termo truncado é a principal fonte de erro, visto que neste o expoente de (Δx) é o menor e os termos se tornam desprezíveis à medida que o expoente aumenta. À medida que a malha é refinada, este primeiro termo também tende a zero.

Os erros relacionados às aproximações acima são aproximadamente a:

$$\epsilon = -\frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i = O(\Delta x)$$

$$\epsilon = \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i = O(\Delta x)$$

Visto que o segundo termo do segundo membro de (2.51) desaparece para uma malha igualmente espaçada, a aproximação torna-se de segunda ordem com erro

$$\epsilon = \frac{(\Delta x)^2}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i = O((\Delta x)^2)$$

Aproximação da segunda derivada

As aproximações da segunda derivada podem ser obtidas a partir das equações acima:

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i = \frac{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1} - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i}{x_{i+1} - x_i}$$

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i = \frac{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$$

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i = \frac{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1} - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}$$

Essas expressões correspondem às aproximações avançada, retardada e centrada da derivada externa. Para cada caso, a derivada interna pode ser aproximada por qualquer uma das aproximações (2.52) - (2.54). Usando o esquema avançado para a derivada externa e o atrasado para a derivada interna, obtemos um esquema centrado para a derivada de segunda ordem:

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i = \frac{\frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} - \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2} \quad (2.55)$$

cujos erros de truncamento é

$$\epsilon = -\frac{1}{12} \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right)_i = O((\Delta x)^2)$$

Define-se o esquema com aproximação *upwind* como aquele que utiliza a aproximação avançada ou atrasada da 1ª ordem para o termo convectivo na direção do fluxo (avançada se $v < 0$ e atrasada se $v > 0$) e a aproximação centrada de 2ª ordem é utilizada para o termo difusivo.

2.6.2 O Método de Crank-Nicolson

O método de Crank-Nicolson é um método implícito que é de segunda ordem tanto para as variáveis espaciais quanto no tempo. Para que tal precisão seja alcançada, as diferenças finitas são tomadas como a média dos termos espaçados no tempo n e $n + 1$. A derivada temporal é aproximada por diferenças finitas centradas no tempo.

Aplicando as aproximações centradas para as derivadas anteriormente obtidas no método de Crank-Nicolson, obtemos:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \left[\frac{\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\phi_{i+1}^{n+1} - 2\phi_i^{n+1} + \phi_{i-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} \right] \quad (2.57)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{1}{2} \left[\frac{\phi_{i+1}^{n+1} - \phi_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{2\Delta x} \right] \quad (2.58)$$

O método de Crank-Nicolson é amplamente utilizado em equações diferenciais parciais parabólicas, como a equação do calor, devido à sua estabilidade e precisão.

Capítulo 3

Combustão em Motores a Reacção

Neste capítulo descrevemos, de forma breve, os princípios fundamentais do funcionamento de uma turbina de gás (motor a reacção) e do seu componente principal: A câmara de combustão. Na secção 3.2 é apresentado de forma breve o problema que se pretende abordar, o modelo matemático, as simplificações feitas, a metodologia e as ferramentas usadas para a sua resolução.

3.1 Teoria

Os motores a jacto, comumente chamados “Turbina de Gás” tem uma ampla aplicação no sector industrial para o fornecimento de energia eléctrica como também propulsiva. A conversão de energia propulsiva nesses motores passa por diversas etapas, entre as quais a combustão. Para tal é necessária uma câmara de combustão onde ocorre todo o processo de combustão, na qual o combustível é injectado sobre ar comprimido para uma posterior queima.

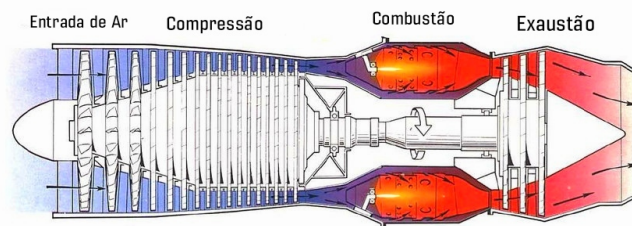


Figura 3.1: Princípio de funcionamento do motor a reacção

O sistema simplificado de uma Turbina de Gás, figura 3.1, resume-se do *compressor*, a *câmara de combustão* e a *turbina*. O trabalho desse motor é realizado quando o ar comprimido pelo compressor se mistura com o combustível para a queima na câmara de combustão, e a mistura queimada é posteriormente expandida em grande velocidade passando pela turbina que por sua vez acciona o compressor (a turbina e o compressor estão conectados por um eixo horizontal, de modo que, girando a turbina, accionada pelos gases quentes na saída do combustor, gira também o compressor). Após a extracção de energia pela turbina, o fluido vai para o conjunto de exaustão e posteriormente para a atmosfera. Esse gás de exaustão produz empuxo que é responsável pelo

movimento do jacto.

A câmara de combustão é o elemento principal de um sistema propulsivo e uma vez que todo o processo da turbina depende, em grande parte, do processo de combustão no combustor, muitas pesquisas nessa área são realizadas com enfoque no combustor, como é o caso de [1], [15] e [19]. É na câmara de combustão onde ocorre a reacção entre o combustível e o oxidante através da conversão de energia química em energia térmica.

O combustor consiste de um sistema complexo de injeção e zona de queima. A zona de queima encontra-se subdividida em três zonas: A *zona primaria* – onde ocorre a mistura do ar e do combustível, a sua ignição e queima. Dado que as temperaturas da zona primaria ultrapassam 2000 K, reacções de dissociação começam a acontecer o que resulta no aparecimento significativo de espécies intermediárias como o CO e H_2 nessa zona. Visto que essas espécies contribuem para a emissão de poluentes pelo motor e ineficiência da combustão, recorre-se a uma zona intermediária – *zona secundária* – que permite a recombinação dessas espécies e assim uma combustão completa pode ser alcançada.

Uma terceira zona – *zona de diluição*, é implementada para arrefecer, com o ar adicional, o escoamento cuja temperatura, sendo muito elevada, coloca em risco a vida útil da turbina.

Sob condições normais de operação, a combustão na turbina de gás é continua e se auto-sustenta (em contraste ao que ocorre no motor de combustão interna). No entanto, um sistema de ignição é necessário para dar início a combustão. Para isso, uma vela de ignição é implementada na região primária, que, uma vez tendo o motor alcançado o auto-sustento da combustão, é desligada. A ignição deve no entanto, poder ser retomada a qualquer instante se por qualquer razão a chama se extinguir em altitudes elevadas.

3.2 Modelação. Resolução Numérica

Como foi descrito ao longo da revisão da literatura, o processo de combustão numa câmara de combustão pode ser descrito matematicamente levando em conta os princípios de cinética química, princípios termodinâmicos e os da mecânica dos fluidos, de onde se derivam as equações de conservação. Para solucionar essa “descrição matemática” do problema fazemos uso de métodos numéricos e ferramentas computacionais devido a complexidade das equações diferenciais resultantes.

O objectivo do modelo é o de descrever a variação da energia térmica T na câmara, em diferentes condições de operação, e mostrar os gráficos de consumo do combustível e do oxidante a medida que a combustão avança.

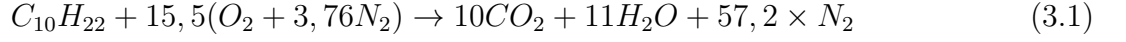
As Equações do Modelo

Combustível:

O combustível de aviação comumente usado é o querosene, conforme mencionado anteriormente. Neste modelo será usado o *n-decano* $C_{10}H_{22}$, que é uma simplificação razoável e comumente usada em pesquisas de combustão.

Mecanismo Cinético e Taxas de Reacção:

Por razões mencionadas na secção 2.3.4, será usado, para a combustão estequiométrica, o mecanismo global descrito pela equação (2.2) com $x = 10$ e $y = 22$



cujas taxas de reacção para o combustível e o oxigénio são modeladas pelas equações (2.35a) e (2.35b)

$$\dot{\omega}_{fuel} = \frac{d[C_{10}H_{22}]}{dt} = -k(T)[C_{10}H_{22}]^m[O_2]^n[N_2]^p \quad (3.2a)$$

$$\dot{\omega}_{O_2} = \frac{d[O_2]}{dt} = -15,5k(T)[C_{10}H_{22}]^m[O_2]^n[N_2]^p \quad (3.2b)$$

Na secção 1.2, foram definidas as variáveis principais do modelo: $Y_{C_xH_y}$, Y_{O_2} , T e $\dot{\omega}$. Para expressar $\dot{\omega}_i$ na equações (3.2a) e (3.2b) em fracções mássicas Y_i aplicamos a equação (2.22) nessas equações

$$[C_{10}H_{22}]^m = \left(\frac{\rho}{M_{fuel}} \right)^m Y_{C_{10}H_{22}}^m$$

$$[O_2]^n = \left(\frac{\rho}{M_{O_2}} \right)^n Y_{O_2}^n$$

de onde obtém-se

$$\dot{\omega}_{fuel} = -k(T) \left(\frac{\rho^{m+n+p}}{M_{fuel}^m M_{O_2}^n M_{N_2}^p} \right) Y_{C_{10}H_{22}}^m Y_{O_2}^n Y_{N_2}^p \quad (3.3)$$

onde $\dot{\omega}_{O_2}$ é dado pela equação (2.35d) e $k(T)$ é dada pela equação (2.30)

Equações de Conservação:

As equações (2.37C), (2.41C) e (2.42C) serão resolvidas numericamente usando as iterações de Picard, onde cada equação é resolvida sequencialmente com os valores actualizados das outras até a convergência. Considerando as simplificações da secção a seguir, obtemos:

1. Conservação de Massa

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3.4)$$

2. Conservação da Energia

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \left(\frac{\Delta H_{comb}}{\rho c_p M_{fuel}} \right) \dot{\omega}_{fuel} \quad (3.5)$$

onde $\alpha = k/\rho c_p$ é a difusibilidade térmica e $\dot{\omega}_{fuel}$ é dado pela equação (3.3) com $p = 0$.

Condições iniciais e de contorno para a equação de Energia:

Para modelar de forma simplificada a elevação inicial da temperatura pela ignição da mistura usaremos uma a função gaussiana em duas dimensões, que atinge o seu pico na região primaria:

$$T(x, y, t = 0) = T_0 + \Delta T \cdot \exp \left[-\frac{(x - x_{ign})^2 + (y - y_{ign})^2}{\sigma^2} \right] \quad (3.6)$$

onde:

- $T_0 = 320K$ é a temperatura homogénea inicial em toda a câmara de combustão.
- O produto de $\Delta T = T_{ign} - T_0$ com o termo exponencial modela a ignição da mistura ar-combustível, representando a elevação da temperatura com pico em (x_{ign}, y_{ign}) a T_{ign} .
- σ^2 controla a extensão da propagação do calor a partir do ponto de ignição (x_{ign}, y_{ign}) . Quanto maior σ , mais difusa será a ignição.

As condições de contorno são dadas pela equação (2.45):

$$\begin{cases} T|_{x=0} &= T_{entrada}, & \frac{L_y}{3} < y < \frac{2L_y}{3} \\ k \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} &= h_e(T|_{x=0} - T_\infty), & 0 < y < \frac{L_y}{3} \text{ ou } \frac{2L_y}{3} < y < L_y \end{cases} \quad (3.7a)$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=L_x} = h_d(T|_{x=L_x} - T_\infty) \quad (3.7b)$$

$$k \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0} = h_{inf}(T|_{y=0} - T_\infty) \quad (3.7c)$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=L_y} = h_{sup}(T|_{y=L_y} - T_\infty) \quad (3.7d)$$

3. Conservação das Espécies

$$\frac{\partial Y_{fuel}}{\partial t} + u \frac{\partial Y_{fuel}}{\partial x} + v \frac{\partial Y_{fuel}}{\partial y} = D \left(\frac{\partial^2 Y_{fuel}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y_{fuel}}{\partial y^2} \right) + \frac{M_{fuel}}{\rho} \dot{\omega}_{fuel} \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial Y_{O_2}}{\partial t} + u \frac{\partial Y_{O_2}}{\partial x} + v \frac{\partial Y_{O_2}}{\partial y} = D \left(\frac{\partial^2 Y_{O_2}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y_{O_2}}{\partial y^2} \right) + \frac{M_{O_2}}{\rho} \left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}} \right)_{est} \dot{\omega}_{fuel} \quad (3.9)$$

onde assumimos $D_{fuel} = D_{O_2} = D$.

Condições iniciais e de contorno para a equação das Espécies:

$$Y_i(x, y, t = 0) = 0, \quad 0 < x < L_x \text{ e } 0 < y < L_y \quad (3.10a)$$

O combustível é injectado a uma taxa definida pela condição de contorno (3.10b) após o instante $t = 0$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial Y_{fuel}}{\partial x} \Big|_{x=0} = -\frac{\dot{m}_{fuel}}{\rho u L_x} \\ Y_{fuel} = 0 \end{array} \right\} \left| \begin{array}{l} \frac{\partial Y_{O_2}}{\partial x} \Big|_{x=0} = -\frac{\dot{m}_{O_2}}{\rho u L_x}, \quad \frac{L_y}{3} < y < \frac{2L_y}{3} \\ Y_{O_2} = 0 \end{array} \right. \quad \text{nos demais contornos do domínio} \quad (3.10b)$$

onde a relação entre $\dot{m}_{fuel}$ e $\dot{m}_{O_2}$ deve obedecer a estequiometria

$$\dot{m}_{O_2} = \frac{1}{\Phi} \left(\frac{m_{ar}}{m_{fuel}} \right)_{est} \cdot \dot{m}_{fuel} \quad (3.10c)$$

Simplificações

Nesta secção são resumidas as suposições das secções 2.3.4 , 2.4.6 e outras feitas no modelo.

Termoquímica

Calor específico constante – conforme descrito na secção 2.2, o calor específico c_p é uma função da temperatura, equação (2.13). Para simplificar o modelo adoptaremos um calor específico médio $\bar{c}_p$.

A condutividade térmica k – é também uma função da temperatura T . Também adoptaremos uma aproximação constante para k .

Cinética Química

Mecanismo de reacção – Conforme mencionado na secção 2.3.4 será usado no modelo um mecanismo cinético de 1 passo, o mecanismo global dado pela equação (3.1).

Ordens de reacção – As ordens de reacção m , n , p serão simplificadas segundo o estudo feito em [23] :

- $m = n = 1$, $p = 0$ para a combustão estequiométrica ($\Phi = 1$);
- $m \approx 0.25$, $n \approx 1.5$, $p = 0$ para misturas ricas ($\Phi > 1$).

Equações de conservação:

- Fluido incompressível e newtoniano;

- Campo de velocidade pré-definido:

a) Constante no tempo e no espaço

$\mathbf{v} = (u, v)$, com $u > 0$ e $v \approx 0$

b) Constante no tempo e variável no espaço

$\mathbf{v} = (u(x, y), v(x, y))$ com

$$u(x, y) = v_{Xmax} \left[1 - \exp \left(\frac{-Ax}{L_x} \right) \right] \sin \left(\frac{\pi y}{L_y} \right)$$

$$v(x, y) = B v_{Ymax} \exp \left(\frac{-Ax}{L_x} \right) \cos \left(\frac{\pi y}{L_y} \right), \quad \text{onde } V_{Ymax} = V_{Xmax}/5 \text{ e } B = 5AL_y/L_x\pi$$

Note-se que tanto para o campo em a) assim como em b), verifica-se a conservação da massa para um fluido incompressível, equação (3.4). Este segundo campo foi elaborado e adoptado considerando a conservação da massa e os perfis de velocidade na literatura e para poder capturar características importantes do escoamento sem ter que sobrecarregar o modelo resolvendo a

equação vectorial de Navier-Stokes (ver o esboço do campo no capítulo 4).

Câmara de combustão

Para permitir a implementação computacional em python pelo MDF simplificamos a câmara por um domínio rectangular 2D (ver o capítulo 4) e não consideramos as subdivisões desta em três zonas. O fluido será injectado na câmara pelo centro do limite esquerdo, conforme a condição de contorno (3.10b) e a ignição é modelada pela condição inicial da equação de energia.

Discretização. Implementação em Python

Aproximações Finitas em Python

Para o modelo consideramos uma malha espacial 2D de N_x pontos na direcção x N_y pontos na direcção y . Por causa da orientação dos arrays em python, consideremos que as componentes x e y de cada ponto (x, y) na malha bidimensional são dadas por $x = j\Delta x$ e $y = i\Delta y$, onde $i = 0, 1, \dots, N_y - 1$ e $j = 1, 2, \dots, N_x - 1$.

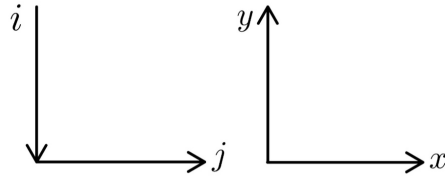


Figura 3.2: Relação dos índices de um array 2D em python com a orientação dos eixos x e y

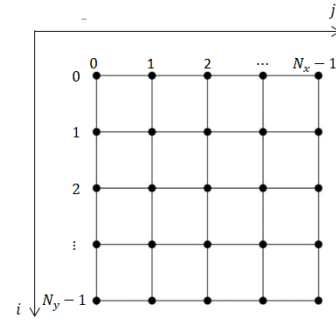


Figura 3.3: Malha bidimensional em python

As aproximações finitas, considerando a relação acima e o método de Crank-Nicolson em 2D (expandido as equações (2.53) e (2.56) - (2.58)) são

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j}^n}{\Delta t} \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \left[\frac{\phi_{i,j+1}^{n+1} - 2\phi_{i,j}^{n+1} + \phi_{i,j-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{\phi_{i,j+1}^n - 2\phi_{i,j}^n + \phi_{i,j-1}^n}{(\Delta x)^2} \right] \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = \frac{1}{2} \left[\frac{\phi_{i+1,j}^{n+1} - 2\phi_{i,j}^{n+1} + \phi_{i-1,j}^{n+1}}{(\Delta y)^2} + \frac{\phi_{i+1,j}^n - 2\phi_{i,j}^n + \phi_{i-1,j}^n}{(\Delta y)^2} \right] \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{1}{2} \left[\frac{\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta x} + \frac{\phi_{i,j}^n - \phi_{i,j-1}^n}{\Delta x} \right] \quad \text{upwind-backward} \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{1}{2} \left[\frac{\phi_{i+1,j}^{n+1} - \phi_{i-1,j}^{n+1}}{2\Delta y} + \frac{\phi_{i+1,j}^n - \phi_{i-1,j}^n}{2\Delta y} \right] \quad \text{central} \quad (3.15)$$

Equação da Energia:

Aplicamos os esquemas (3.11) – (3.15) na equação (3.5) e obtemos:

$$\begin{aligned} & \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{u_{i,j}}{2\Delta x} (T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j-1}^{n+1} + T_{i,j}^n - T_{i,j-1}^n) + \frac{v_{i,j}}{4\Delta y} (T_{i+1,j}^{n+1} - T_{i-1,j}^{n+1} + T_{i+1,j}^n - T_{i-1,j}^n) = \\ & \frac{\alpha}{2(\Delta x)^2} (T_{i,j+1}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1} + T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n) + \frac{\alpha}{2(\Delta y)^2} (T_{i+1,j}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1} + \\ & T_{i+1,j}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n) + \frac{\Delta H_{comb}}{2\rho c_p M_{fuel}} (\dot{\omega}_{fuel,i,j}^{n+1} + \dot{\omega}_{fuel,i,j}^n) \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde

$$\begin{cases} \dot{\omega}_{fuel,i,j}^n = -k(T_{i,j}^n) \frac{\rho^2}{M_{fuel} M_{O_2}} Y_{fuel,i,j} Y_{O_2,i,j}, & \text{para a combustão estequiométrica;} \\ \dot{\omega}_{fuel,i,j}^n = -k(T_{i,j}^n) \frac{\rho^{1.75}}{M_{fuel} M_{O_2}} Y_{fuel,i,j}^{0.25} Y_{O_2,i,j}^{1.5}, & \text{para uma mistura rica.} \end{cases}$$

Multiplicando (3.16) por Δt e tomando

$$Cx_{i,j} = -\frac{u_{i,j}\Delta t}{2\Delta x}, \quad Cy_{i,j} = -\frac{v_{i,j}\Delta t}{4\Delta y}, \quad Dx = \frac{\alpha\Delta t}{2(\Delta x)^2}, \quad Dy = \frac{\alpha\Delta t}{2(\Delta y)^2}, \quad q = \frac{\Delta t\Delta H_{comb}}{2\rho c_p M_{fuel}}$$

obtemos

$$\boxed{\begin{aligned} & -Smy_{i,j}T_{i+1,j}^{n+1} - Sby_{i,j}T_{i-1,i}^{n+1} + aT_{i,j}^{n+1} - Smx_{i,j}T_{i,j+1}^{n+1} - Sbx_{i,j}T_{i,j-1}^{n+1} = \\ & Smy_{i,j}T_{i+1,j}^n + Sby_{i,j}T_{i-1,i}^n + bT_{i,j}^n + Smx_{i,j}T_{i,j+1}^n + Sbx_{i,j}T_{i,j-1}^n + q(\dot{\omega}_{fuel,i,j}^{n+1} + \dot{\omega}_{fuel,i,j}^n) \end{aligned}} \quad (3.17)$$

onde

$$\begin{aligned} Smy_{i,j} &= Dy + Cy_{i,j}, \quad Sby_{i,j} = Dy - Cy_{i,j}, \quad Smx_{i,j} = Dx + 0Cx_{i,j}, \quad Sbx_{i,j} = Dx - Cx_{i,j}, \\ a_{i,j} &= 1 + 2Dx + 2Dy - Cx_{i,j}, \quad b_{i,j} = 1 - 2Dx - 2Dy + Cx_{i,j} \end{aligned} \quad (3.18)$$

o que é equivalente ao sistema matricial

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot \mathbf{T}^{n+1} &= \mathbf{M} \cdot \mathbf{T}^n + \mathbf{Q} \\ \mathbf{A} \cdot \mathbf{T}^{n+1} &= \mathbf{B} \end{aligned} \quad (3.19)$$

Equação das Espécies Químicas:

COMBUSTÍVEL:

Aplicando os esquemas (3.11) – (3.15) na equação (3.8) e obtemos:

$$\begin{aligned} & Y_{f,i,j}^{n+1} - Y_{f,i,j}^n - Cfx_{i,j}(Y_{f,i,j}^{n+1} - Y_{f,i,j-1}^{n+1} + Y_{f,i,j}^n - Y_{f,i,j-1}^n) - Cfy_{i,j}(Y_{f,i+1,j}^{n+1} - Y_{f,i-1,j}^{n+1} + Y_{f,i+1,j}^n - \\ & Y_{f,i-1,j}^n) = Dfx(Y_{f,i,j+1}^{n+1} - 2Y_{f,i,j}^{n+1} + Y_{f,i,j-1}^{n+1} + Y_{f,i,j+1}^n - 2Y_{f,i,j}^n + Y_{f,i,j-1}^n) + Dfy(Y_{f,i+1,j}^{n+1} - 2Y_{f,i,j}^{n+1} + \\ & Y_{f,i-1,j}^{n+1} + Y_{f,i+1,j}^n - 2Y_{f,i,j}^n + Y_{f,i-1,j}^n) - r_{f,i,j}(Y_{f,i,j}^{n+1} + Y_{f,i,j}^n) \end{aligned} \quad (3.20)$$

onde

$$Cfx_{i,j} = -\frac{u_{i,j}\Delta t}{2\Delta x}, \quad Cfy_{i,j} = -\frac{v_{i,j}\Delta t}{4\Delta y}, \quad Dfx = \frac{D\Delta t}{2(\Delta x)^2}, \quad Dfy = \frac{D\Delta t}{2(\Delta y)^2}, \quad r_{f,i,j} = \frac{\Delta t}{2\rho} k(T_{i,j}) \left(\frac{\rho^2}{M_{O_2}} \right) Y_{O,i,j} \quad (3.21)$$

de onde obtém-se, agrupando,

$$\boxed{\begin{aligned} & -Smy_{f,i,j}Y_{f,i+1,j}^{n+1} - Sby_{f,i,j}Y_{f,i-1,i}^{n+1} + a_fY_{f,i,j}^{n+1} - Smx_{f,i,j}Y_{f,i,j+1}^{n+1} - Sbx_{f,i,j}Y_{f,i,j-1}^{n+1} = \\ & Smy_{f,i,j}Y_{f,i+1,j}^n + Sby_{f,i,j}Y_{f,i-1,i}^n + b_fY_{f,i,j}^n + Smx_{f,i,j}Y_{f,i,j+1}^n + Sbx_{f,i,j}Y_{f,i,j-1}^n \end{aligned}} \quad (3.22)$$

onde

$$\begin{aligned} Smy_{f,i,j} &= Dfy + Cfy_{i,j}, \quad Sby_{f,i,j} = Dfy - Cfy_{i,j}, \quad Smx_{f,i,j} = Dfx + 0Cfx_{i,j}, \quad Sbx_{f,i,j} = Dfx - Cfx_{i,j}, \\ a_{f,i,j} &= 1 + 2Dx + 2Dy - Cfx_{i,j} + r_{f,i,j} \quad \text{e} \quad b_{f,i,j} = 1 - 2Dfx - 2Dfy + Cx_{i,j} - r_{f,i,j} \end{aligned} \quad (3.23)$$

OXIDANTE:

Para a simplificação de notação, tomamos $Y_{O_2} = Y_O$. Aplicando, analogamente, os esquemas (3.11) – (3.15) na equação (3.9) e introduzindo as notações (3.21) (excepto $r_{f,i,j}$) obtemos

$$\boxed{\begin{aligned} & -Smy_{O,i,j}Y_{O,i+1,j}^{n+1} - Sby_{O,i,j}Y_{O,i-1,i}^{n+1} + a_OY_{O,i,j}^{n+1} - Smx_{O,i,j}Y_{O,i,j+1}^{n+1} - Sbx_{O,i,j}Y_{O,i,j-1}^{n+1} = \\ & Smy_{O,i,j}Y_{O,i+1,j}^n + Sby_{O,i,j}Y_{O,i-1,i}^n + b_OY_{O,i,j}^n + Smx_{O,i,j}Y_{O,i,j+1}^n + Sbx_{O,i,j}Y_{O,i,j-1}^n \end{aligned}} \quad (3.24)$$

em que

$$\begin{aligned} Smy_{O,i,j} &= Smy_{f,i,j}, \quad Sby_{O,i,j} = Sby_{f,i,j}, \quad Smx_{O,i,j} = Smx_{f,i,j}, \quad Sbx_{O,i,j} = Sbx_{f,i,j}, \\ a_{O,i,j} &= 1 + 2Dfx + 2Dfy - Cfx_{i,j} + r_{O,i,j}, \quad b_{O,i,j} = 1 - 2Dfx - 2Dfy + Cfx_{i,j} - r_{O,i,j} \\ r_{O,i,j} &= \frac{\Delta t}{2\rho} k(T_{i,j}) \left(\frac{m_{ar}}{m_{fu}} \right)_{est} \left(\frac{\rho^2}{M_{fuel}} \right) Y_{f,i,j} \end{aligned} \quad (3.25)$$

As equações discretas (3.22) e (3.24) são equivalentes, respectivamente, aos sistemas matriciais

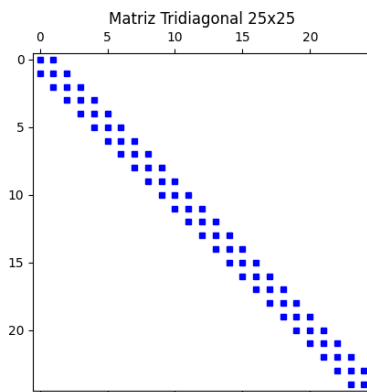


Figura 3.4: Estrutura de uma matriz esparsa tridiagonal (problemas em 1D)

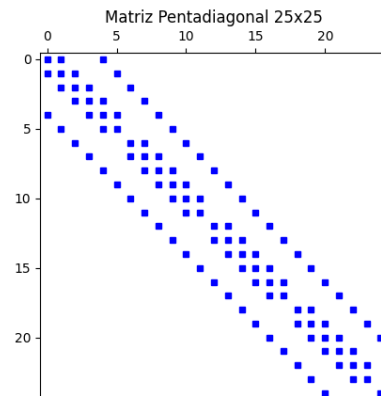


Figura 3.5: Estrutura de uma matriz esparsa pentadiagonal (problemas em 2D)

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_f \cdot Y_f^{n+1} &= \mathbf{M}_f \cdot Y_f^n \\ \mathbf{A}_f \cdot Y_f^{n+1} &= \mathbf{B}_f \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_O \cdot Y_O^{n+1} &= \mathbf{M}_O \cdot Y_O^n \\ \mathbf{A}_O \cdot Y_O^{n+1} &= \mathbf{B}_O \end{aligned} \quad (3.27)$$

As matrizes nos sistemas (3.19), (3.26) e (3.27) são esparsas pentadiagonais (figura 3.5) de ordem $N_i = (N_x - 2) \cdot (N_y - 2)$ em que N_x e N_y são, respectivamente, os números de nós em uma linha e uma coluna da malha estruturada usada.

Condições de Contorno. Discretização

Equação da Energia:

Tomando $H_i = h_i/k$, as equações de contorno (3.7a) - (3.7d) podem ser escritas na forma discreta como

$$\bullet \begin{cases} T_{i,0} = T_{\text{entrada}} & \text{se } \frac{N_y}{3} < i < \frac{2N_y}{3} \\ \frac{T_{i,1} - T_{i,0}}{\Delta x} = H_e (T_{i,0} - T_\infty) & \text{se } 0 < i < \frac{N_y}{3} \text{ ou } \frac{2N_y}{3} < i < N_y \\ T_{i,0} = T_{\text{entrada}} & \text{se } \frac{N_y}{3} < i < \frac{2N_y}{3} \\ T_{i,0} = \frac{H_e \Delta x T_\infty - T_{i,1}}{1 + H_e \Delta x} & \text{se } 0 < i < \frac{N_y}{3} \text{ ou } \frac{2N_y}{3} < i < N_y \end{cases} \quad (3.28)$$

$$\bullet \begin{aligned} \frac{T_{i,N_{x-1}} - T_{i,N_{x-2}}}{\Delta x} &= -H_d (T_{i,N_{x-1}} - T_\infty) \\ T_{i,N_{x-1}} &= \frac{H_d \Delta x T_\infty + T_{i,N_{x-2}}}{1 + H_d \Delta x} \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\bullet \begin{aligned} \frac{T_{1,j} - T_{0,j}}{\Delta y} &= H_{inf} (T_{0,j} - T_\infty) \\ T_{0,j} &= \frac{H_{inf} \Delta y T_\infty + T_{1,j}}{1 + H_{inf} \Delta y} \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\bullet \begin{aligned} \frac{T_{N_{y-1},j} - T_{N_{y-2},j}}{\Delta y} &= H_{sup} (T_{N_{y-1},j} - T_\infty) \\ T_{N_{y-1},j} &= \frac{H_{sup} \Delta y T_\infty + T_{N_{y-2},j}}{1 + H_{sup} \Delta y} \end{aligned} \quad (3.31)$$

Equação das Espécies: A forma discreta das equações dadas em (3.10b) é:

Para o combustível:

$$\bullet \begin{cases} \frac{Y_{f,i,1} - Y_{f,i,0}}{\Delta x} = -\frac{\dot{m}_{fuel}}{\rho u L_x} \begin{cases} Y_{f,i,0} = Y_{f,i,1} + \Delta x \cdot \frac{\dot{m}_{fuel}}{\rho u L_x} & \text{se } \frac{N_y}{3} < i < \frac{2N_y}{3} \\ Y_{f,i,0} = 0.0 & \text{se } 0 < i < \frac{N_y}{3} \text{ ou } \frac{2N_y}{3} < i < N_y \end{cases} \\ Y_{f,i,0} = 0.0 \end{cases}$$

$$\bullet \quad Y_{f i, N_{x-1}} = Y_{f 0, j} = Y_{f N_{y-1}, j} = 0.0 \quad (3.32)$$

Para o oxidante:

$$\bullet \quad \begin{cases} Y_{O i, 0} = Y_{O i, 1} + \Delta x \cdot \frac{\dot{m}_{O_2}}{\rho u L_x} & \text{se } \frac{N_y}{3} < i < \frac{2N_y}{3} \\ Y_{O i, 0} = 0.0 & \text{se } 0 < i < \frac{N_y}{3} \text{ ou } \frac{2N_y}{3} < i < N_y \end{cases} \quad (3.33)$$

$$\bullet \quad Y_{O i, N_{x-1}} = Y_{O 0, j} = Y_{O N_{y-1}, j} = 0.0 \quad (3.34)$$

Conforme mencionado anteriormente, os sistemas acoplados (3.19), (3.26) e (3.27) são resolvidos iterativamente em python. São usadas, principalmente, as bibliotecas *NumPy* e *SciPy*. O NumPy é empregado para armazenar e actualizar as variáveis da simulação. O SciPy armazena pelo método *sparse* as matrizes esparsas resultantes e usa o método *spsolve* para resolver sistemas $Ax = b$ em cada iteração do método iterativo.

Capítulo 4

Resultados

Neste capítulo são apresentados os principais resultados para o modelo formado pelo sistema de equações diferenciais descrito no capítulo anterior. Todos os resultados apresentados, incluindo as malhas numéricas e o combustor ideal, foram gerados usando a linguagem de programação python.

4.1 Domínio da simulação

4.1.1 Câmara de Combustão

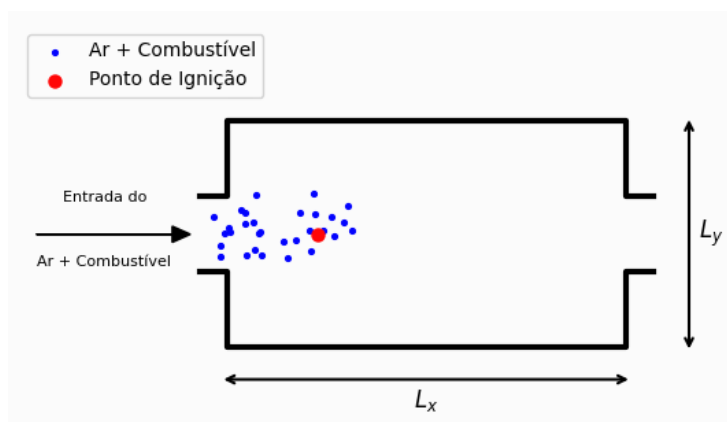


Figura 4.1: Câmara de combustão ideal. Entrada do ar e do combustível

Câmara de combustão ideal, com dimensões $L_x \times L_y = 0,6 \times 0,3m^2$, adotada para o modelo com fluxo da mistura ar-combustível pelo centro esquerdo, conforme ocorre na câmara real.

4.1.2 Malhas Numéricas

Malhas regulares adoptadas para o modelo para permitir o uso do MDF, implementado para solucionar o modelo com as seguintes características:

Primeira malha:

$N_x = 71$ (número de nós na direcção x), $N_y = 36$ (número de nós na direcção y),

$N_i = (N_x - 2)(N_y - 2) = 2346$ (número total de nos internos)

Segunda malha:

$N_x = 101$, $N_y = 51$, $N_i = (N_x - 2)(N_y - 2) = 4851$

Primeira Malha

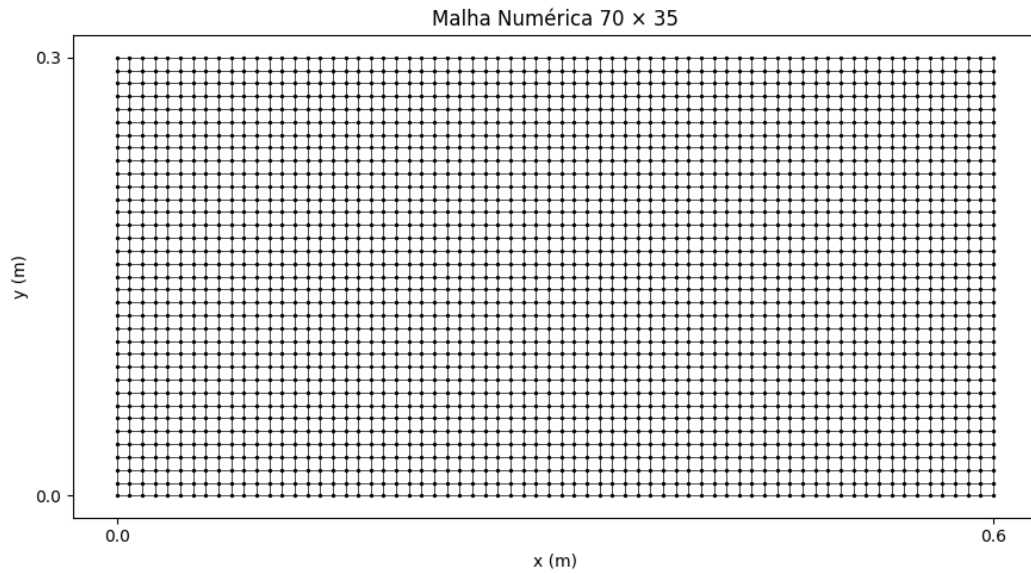


Figura 4.2: Malha numérica -1

Segunda Malha

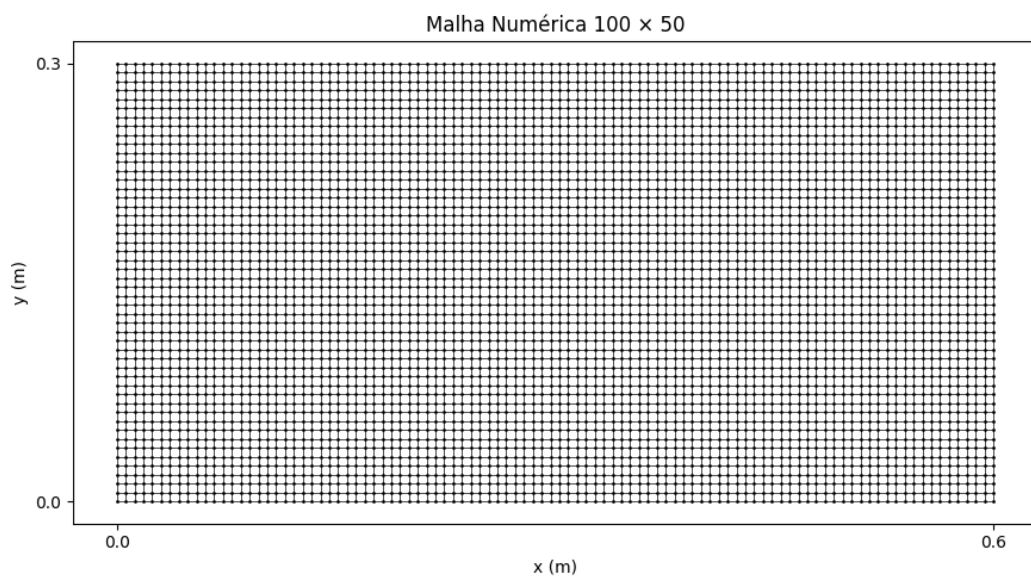


Figura 4.3: Malha numérica -2 (mais refinada)

O sistema acoplado formado pelos sistemas discretos (3.19), (3.26) e (3.27) foi resolvido iterativamente em ambas as malhas e os resultados comparados. As matrizes de cada sistema discreto são esparsas de ordem $N_i \times N_i$. Malhas mais refinadas geram matrizes ainda maiores.

4.1.3 Campo de Velocidade

- a) constante $\mathbf{v} = (u, v)$, com $u = \text{const.}$ e $v \approx 0$
b) variável no espaço $\mathbf{v} = (u, v)$ com $u = u(x, y)$ e $v = v(x, y)$

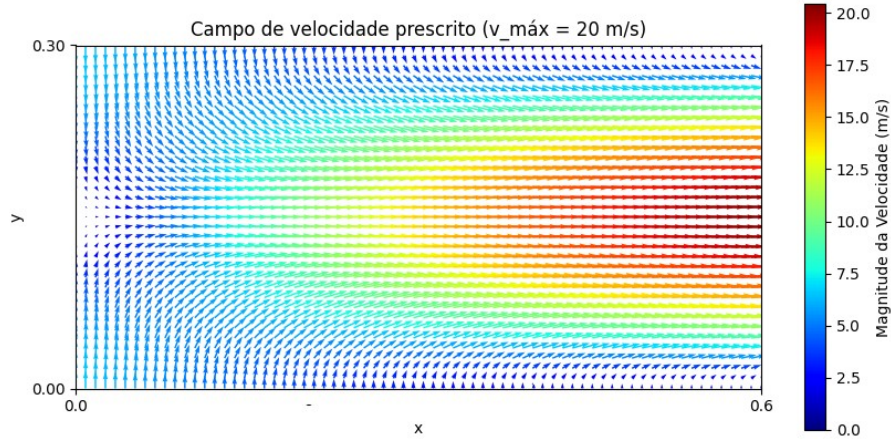


Figura 4.4: Campo de velocidade prescrito

4.1.4 Condição de Ignição

A ignição é iniciada quando a condição prescrita, de acordo com a estequiometria, é satisfeita: Pela estequiometria, a massa da mistura ar + combustível é dada por

$$\begin{aligned}
 m_{mist} &= m_{fuel} + m_{O_2} \\
 &= n_{fuel} \cdot M_{fuel} + n_{O_2} \cdot M_{O_2} \\
 &= 1 \cdot 0,142 \text{ kg/mol} + 15,5 \cdot 0,032 \text{ kg/mol} \\
 &= (0,142 \text{ kg/mol}) + (0,496 \text{ kg/mol}) \\
 &= 0,638 \text{ kg}
 \end{aligned}$$

Assim

$$\begin{aligned}
 Y_{fuel} &= \frac{m_{fuel}}{m_{mist}} = \frac{0,142 \text{ kg}}{0,638 \text{ kg}} = 0,223 \\
 Y_{O_2} &= \frac{m_{O_2}}{m_{mist}} = \frac{0,496 \text{ kg}}{0,638 \text{ kg}} = 0,777
 \end{aligned}$$

Para reduzir o tempo computacional da simulação reduzimos essas fracções, mantendo a sua proporcionalidade estequiométrica

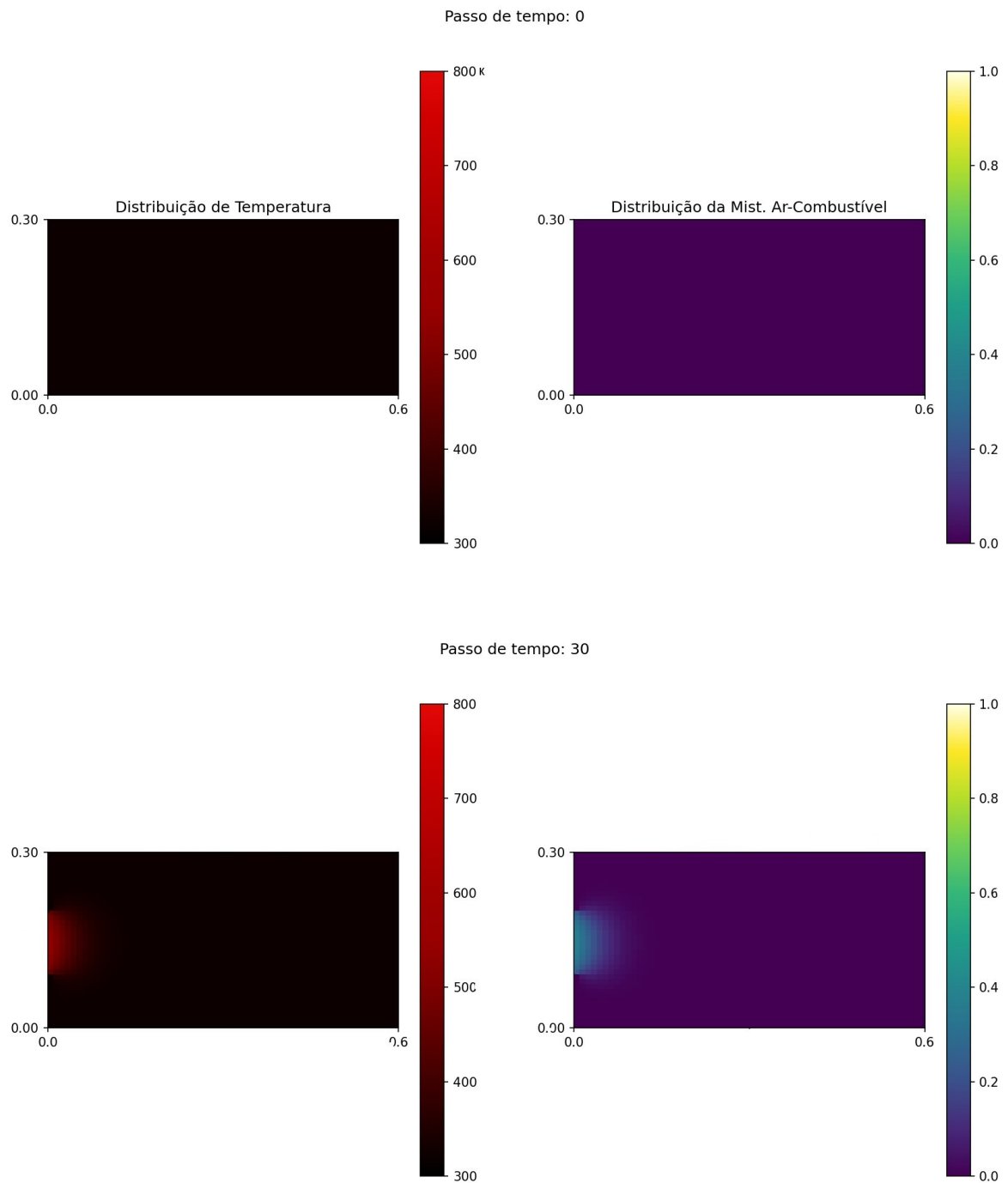
$$\begin{aligned}
 Y_{fuel, reduzido} &= \frac{0,223}{3,5} = 0,06 \\
 Y_{O_2, reduzido} &= \frac{0,777}{3,5} = 0,22
 \end{aligned}$$

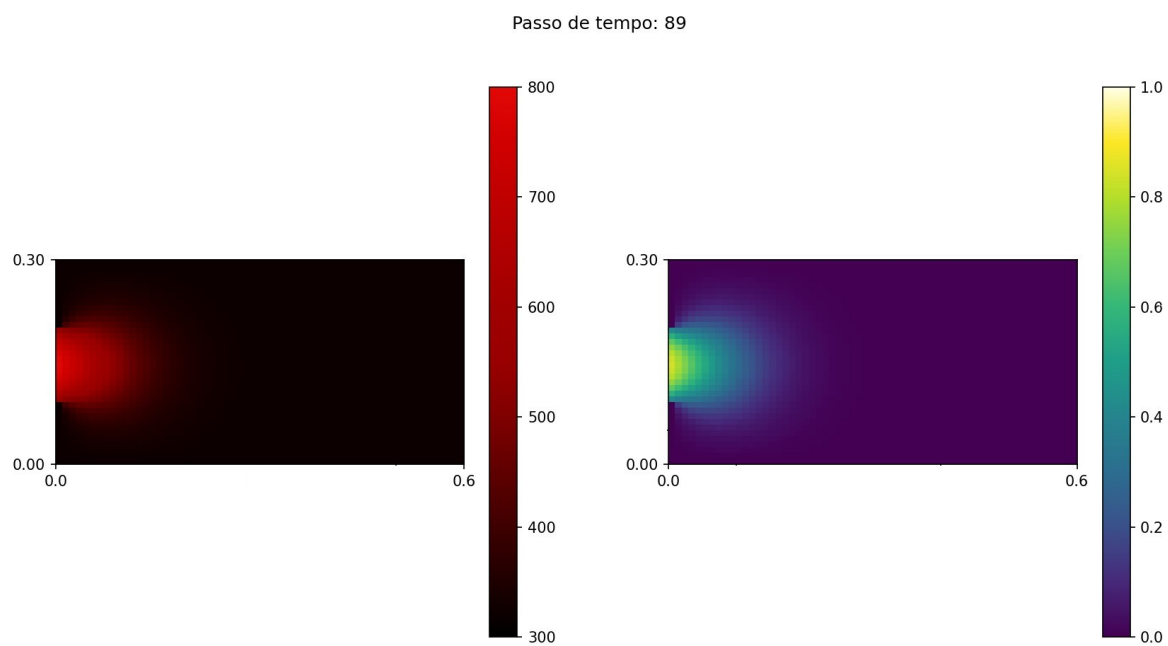
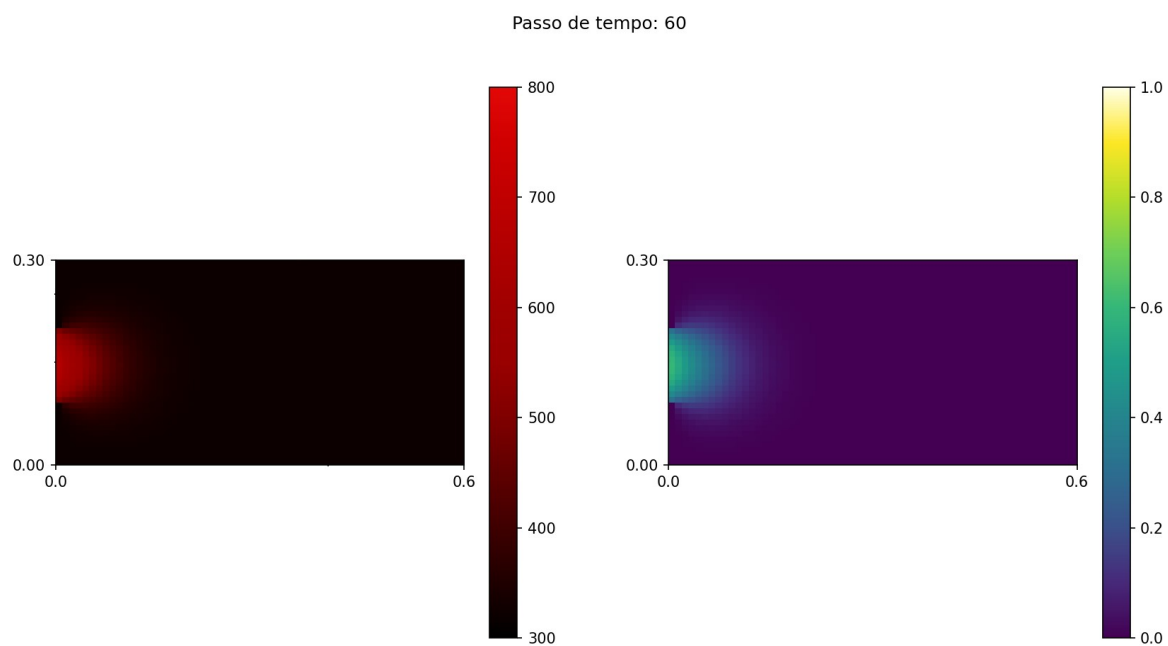
Essas são as quantidades, fracções mássicas, de combustível e oxidante, respectivamente, necessárias na região de ignição para que a combustão estequiométrica seja iniciada.

4.2 Resultados da simulação

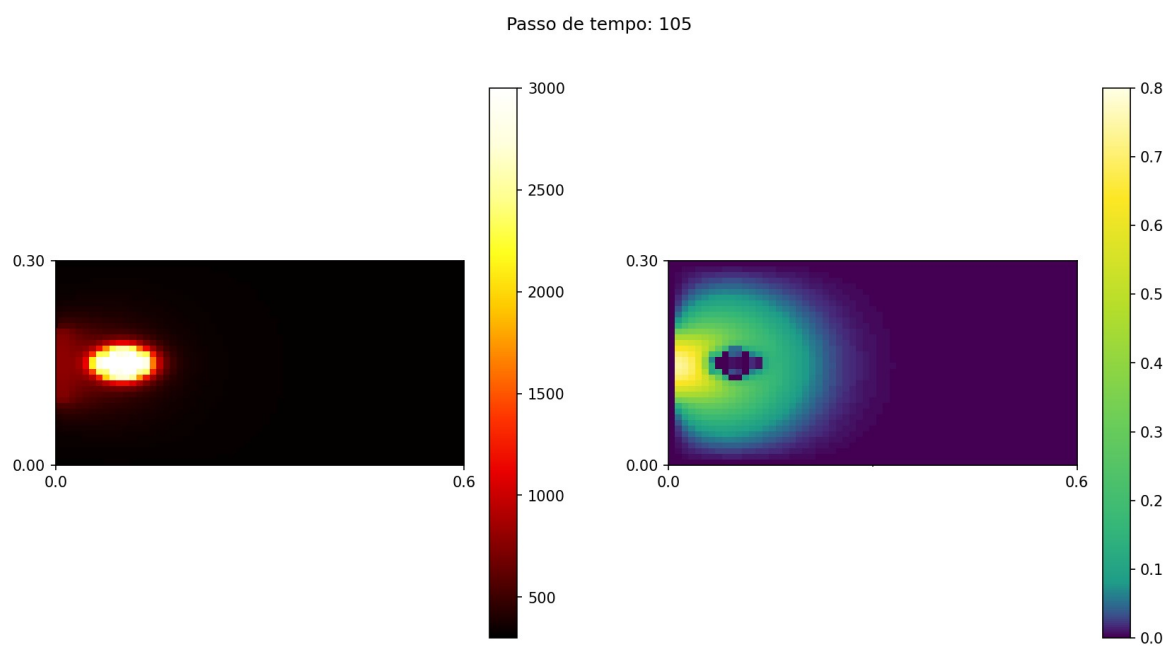
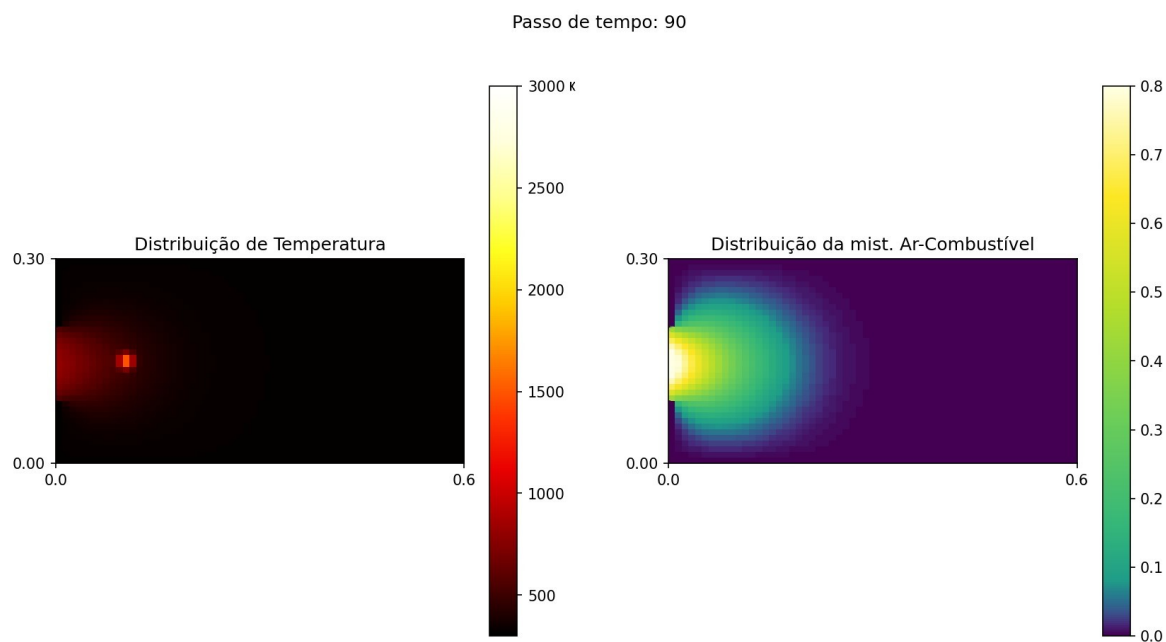
4.2.1 Primeira malha: Campo de Velocidade Constante

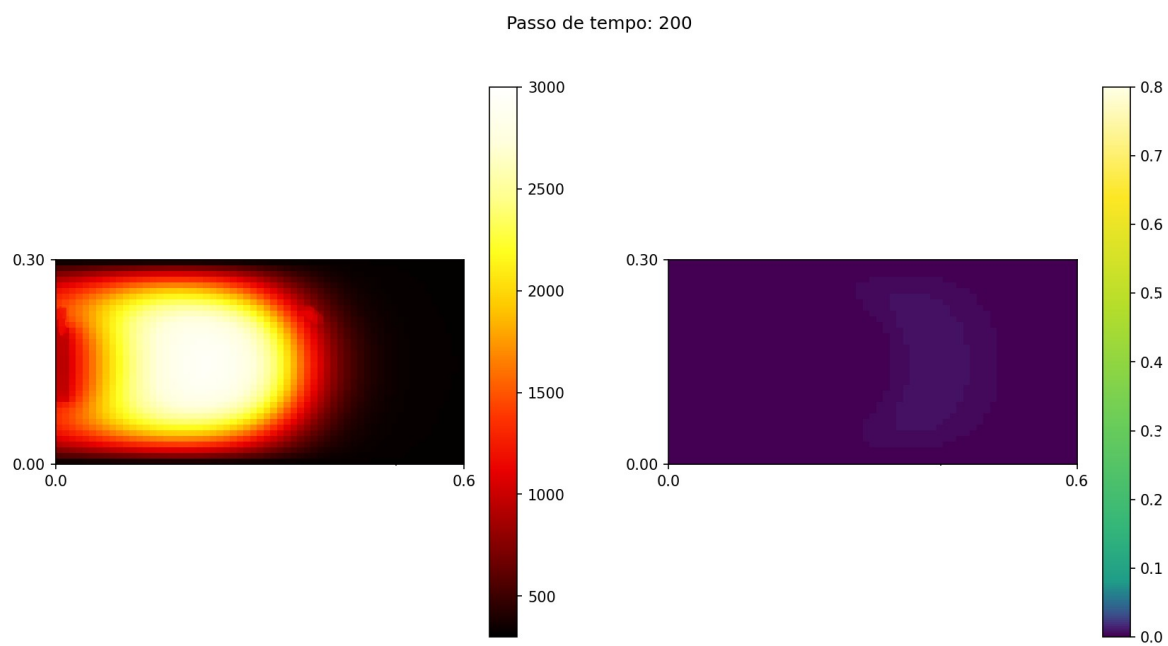
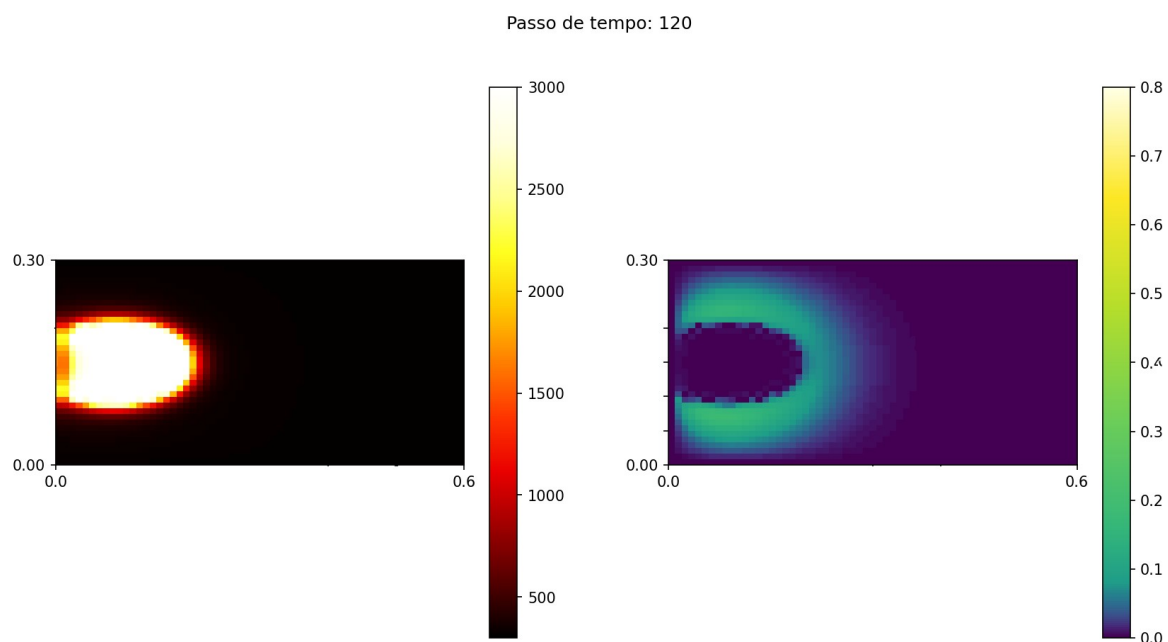
I. Injecção da mistura ar-combustível e variação da temperatura antes da ignição:

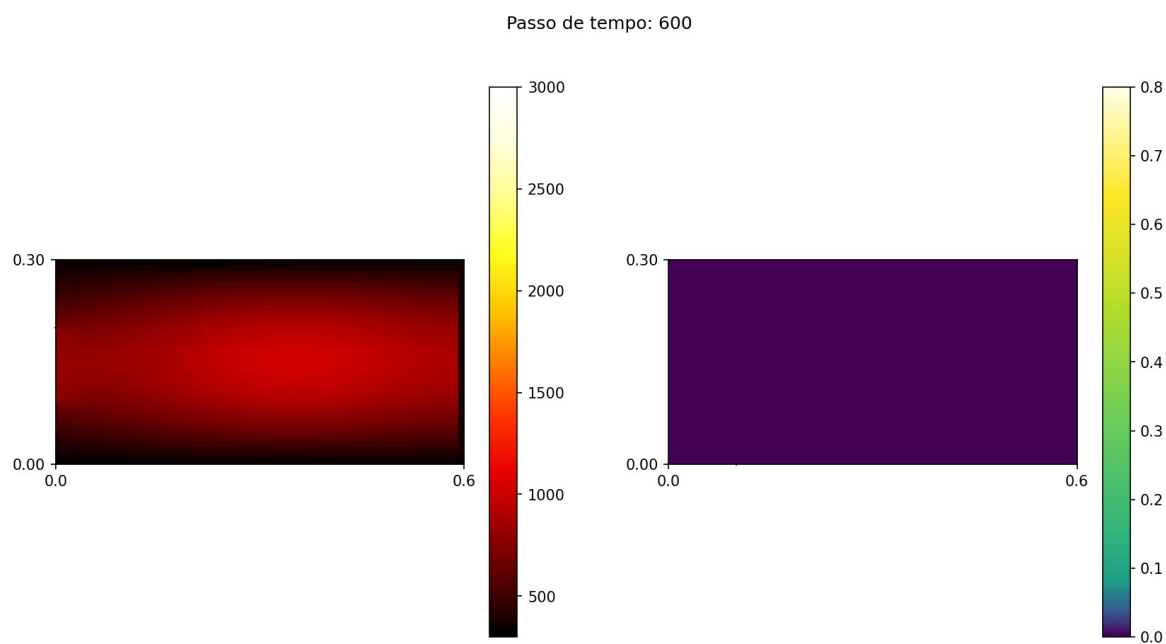
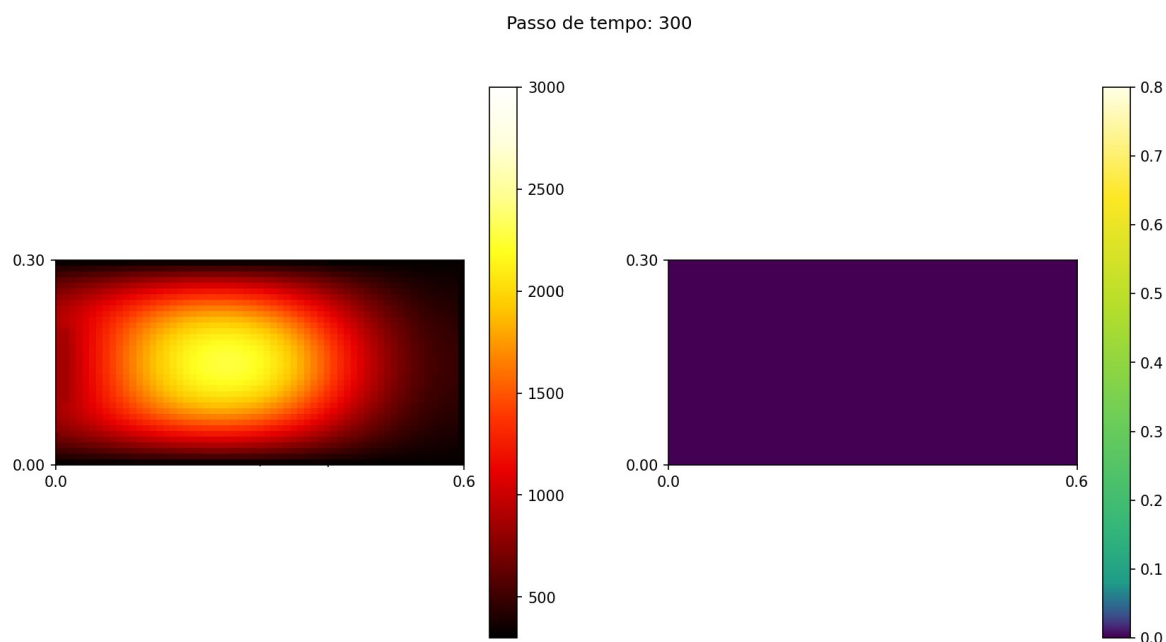




II. Ignição, consumo da mistura ar-combustível e variação da temperatura:







III. Variação da mistura ar-combustível no combustor ao longo de $y = L_y/2$ antes (esquerda) e depois (direita) da ignição:

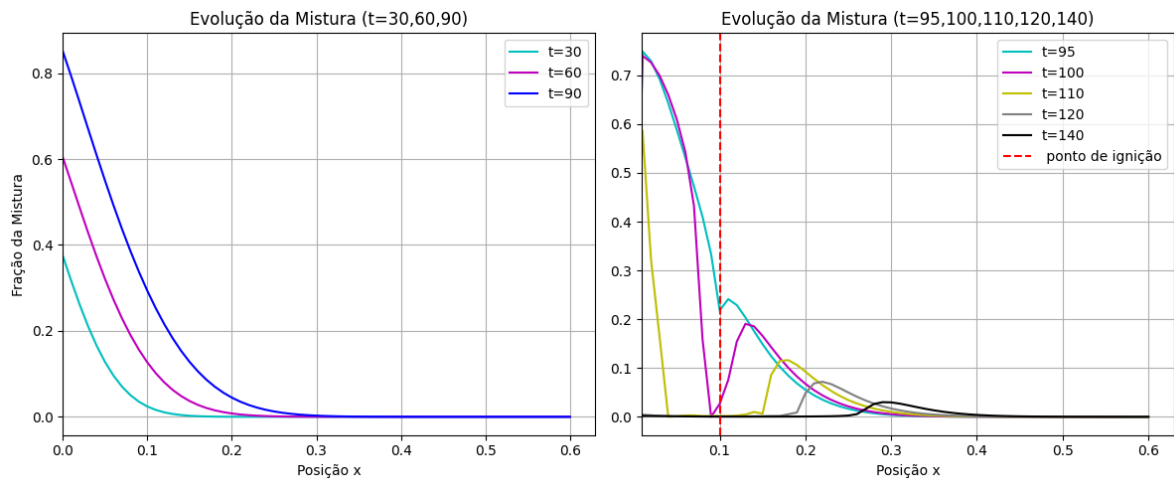


Figura 4.15: Consumo da mistura ar-combustível ao redor da região de ignição

IV. Variação média da Temperatura, do Oxidante e do Combustível no combustor ao longo do tempo:

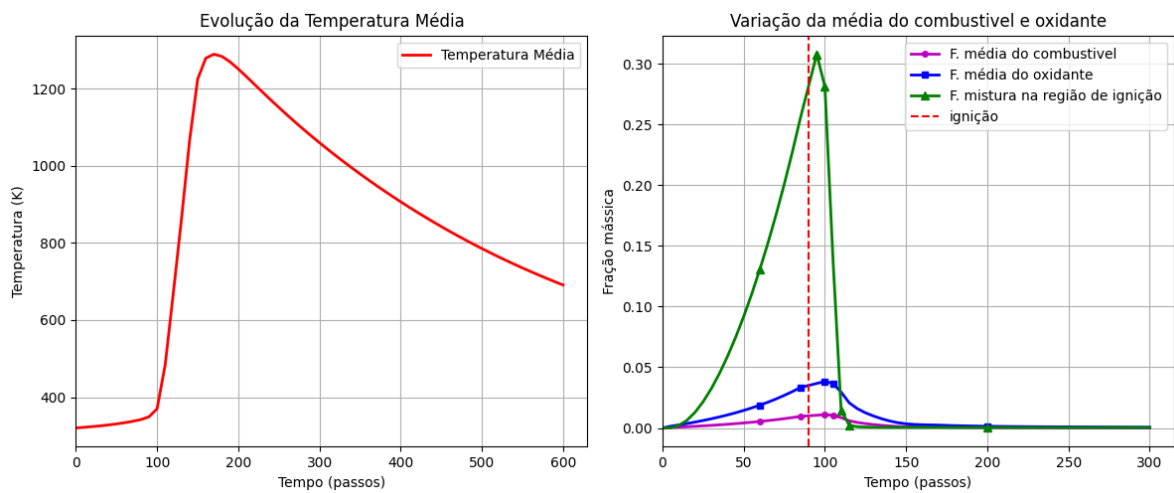
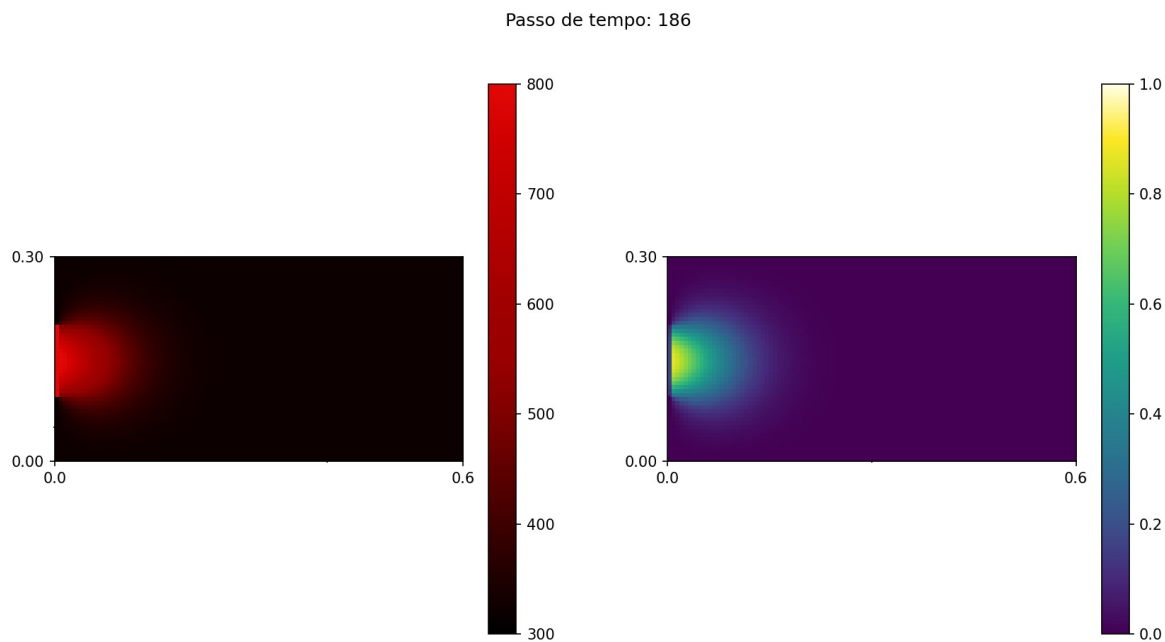
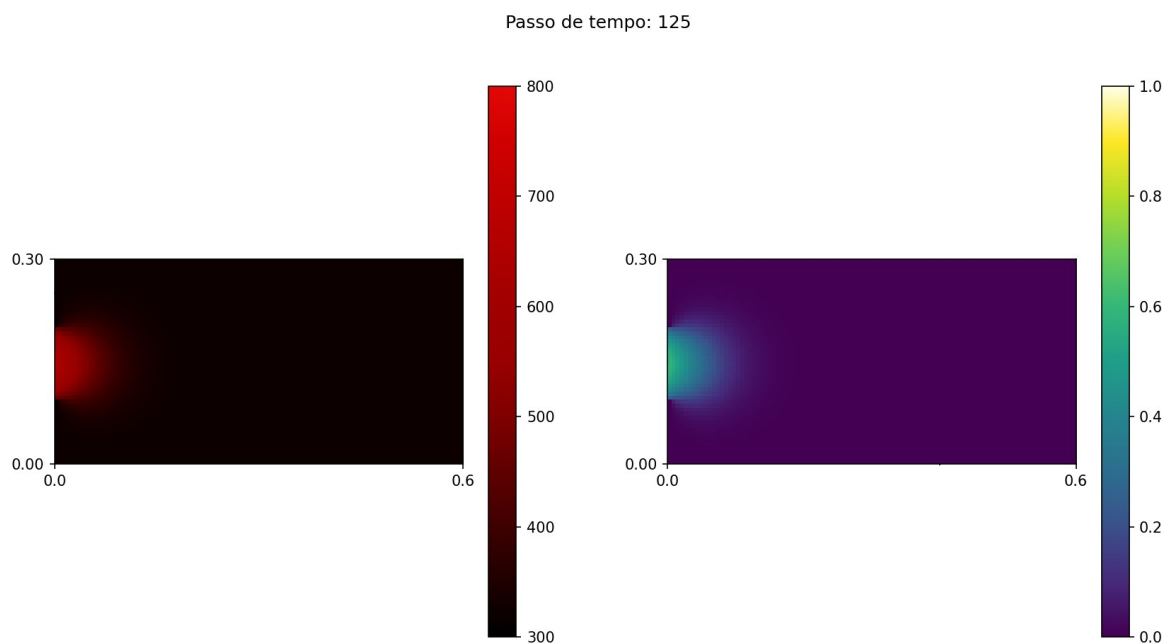


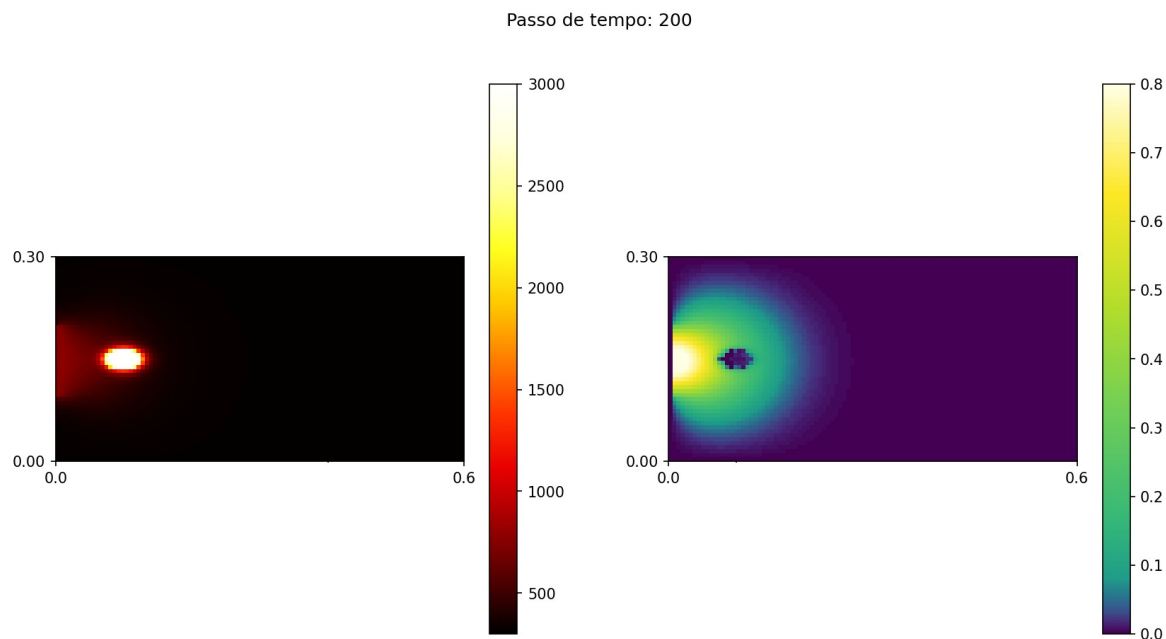
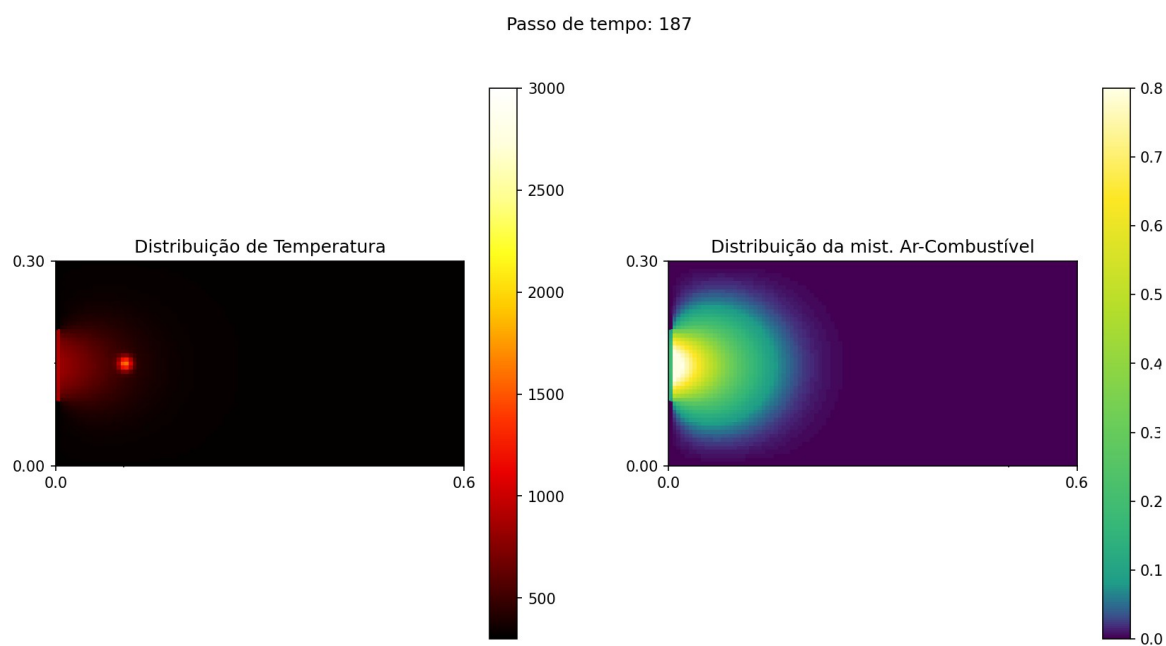
Figura 4.16: Variação média da Temperatura, do Oxigênio e do Combustível com o tempo

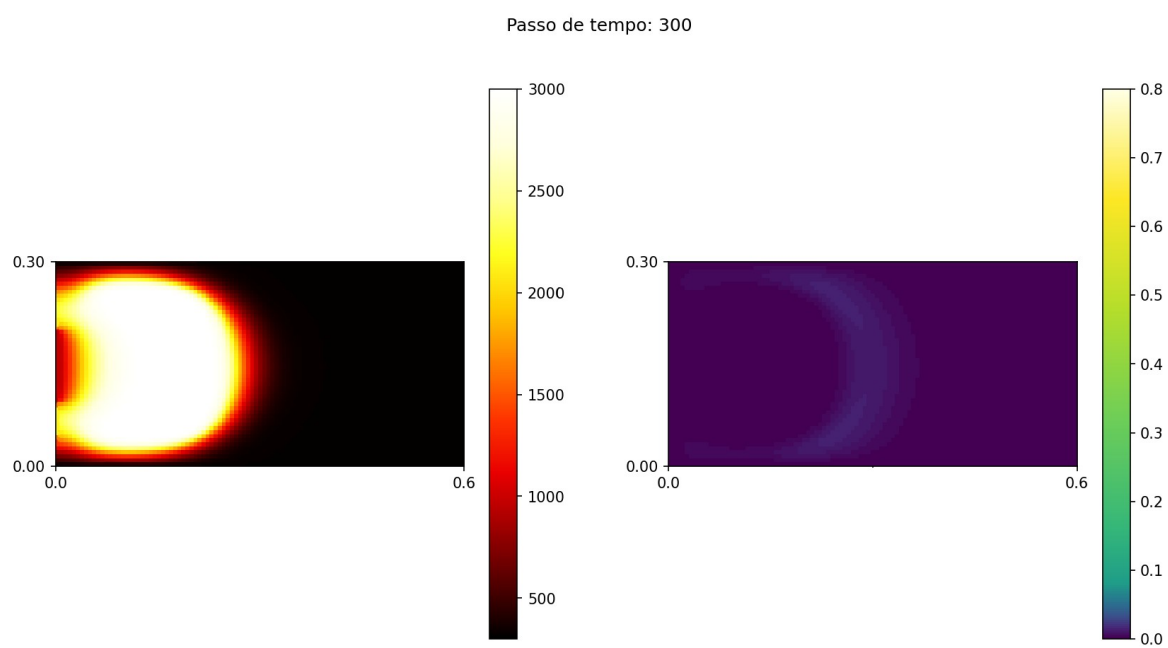
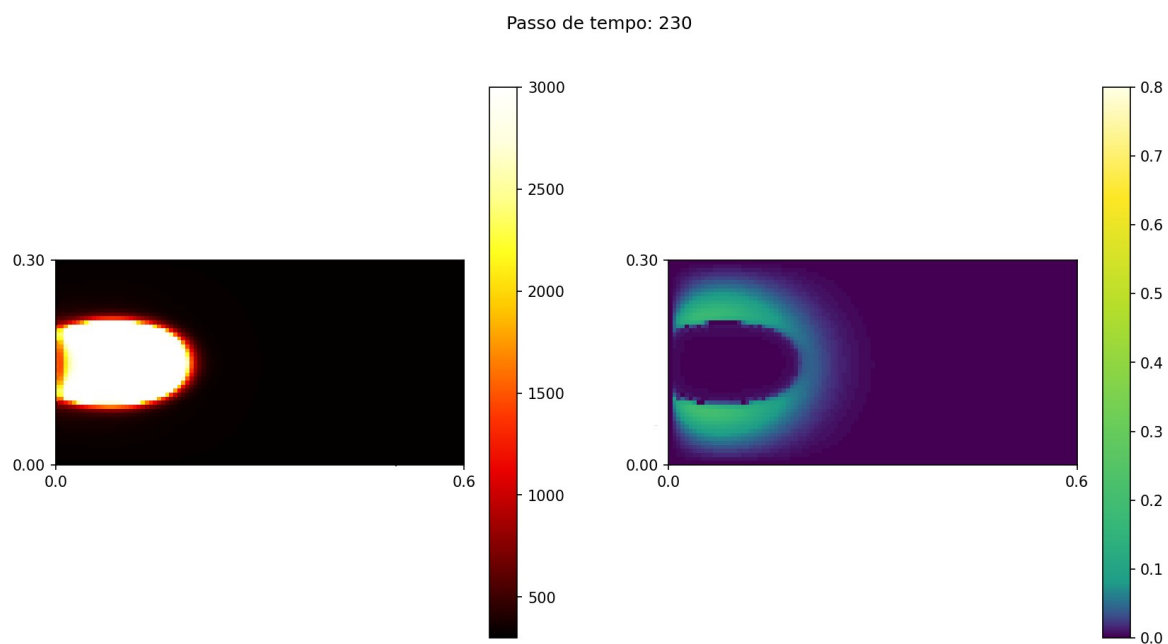
4.2.2 Segunda malha: Campo de Velocidade Constante

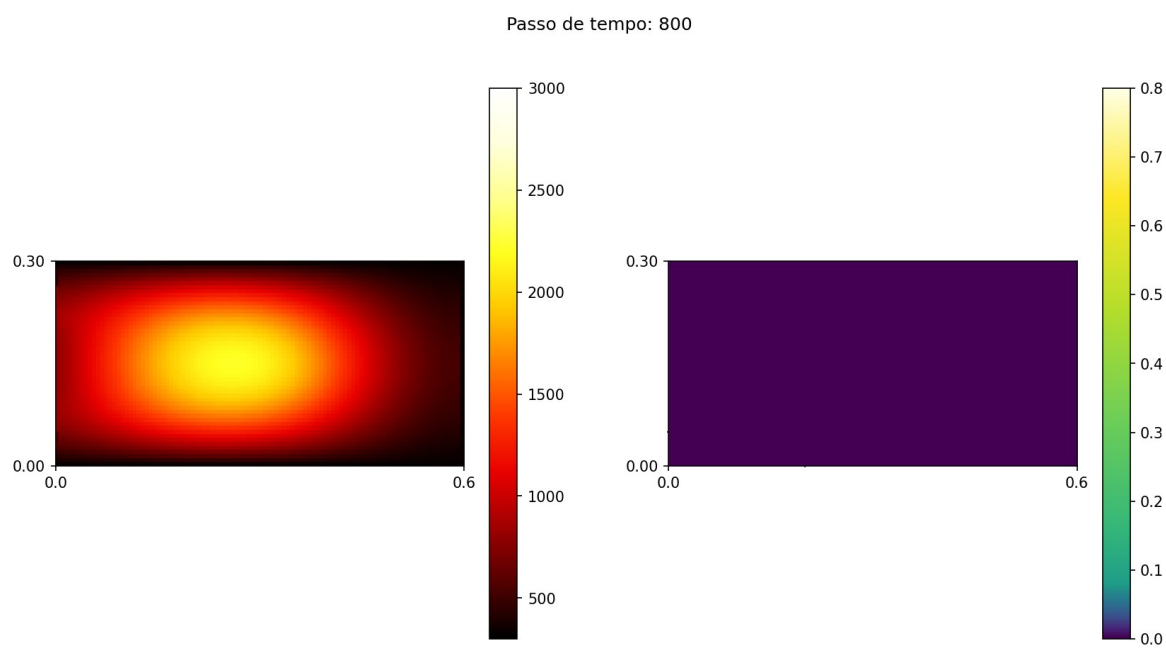
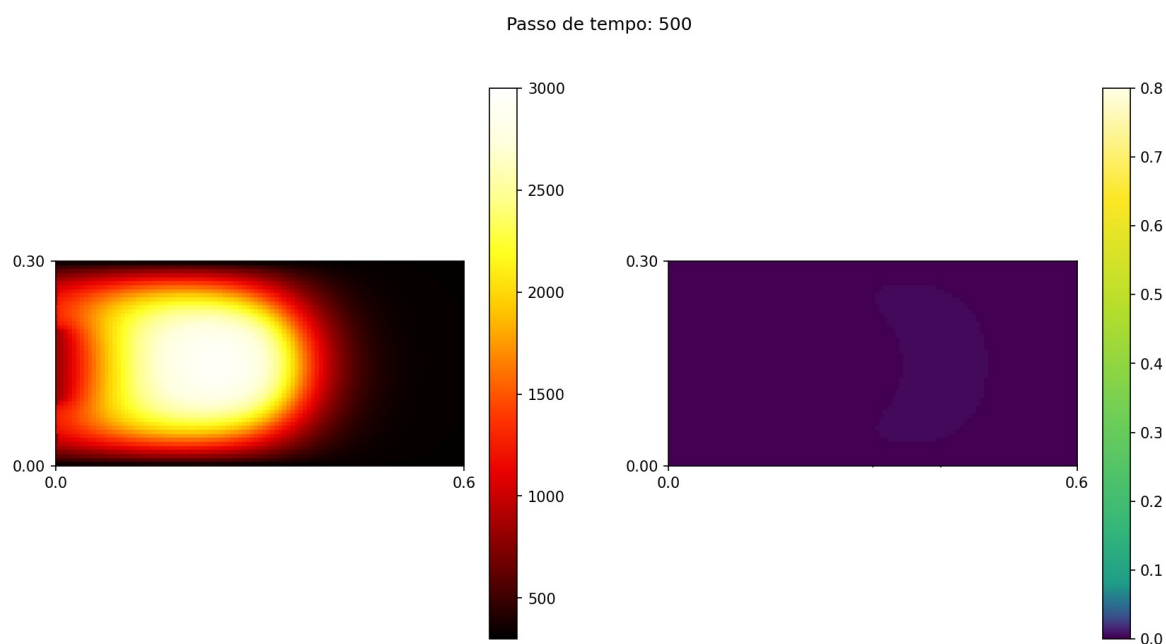
I. Injecção da mistura ar-combustível e variação da temperatura antes da ignição:

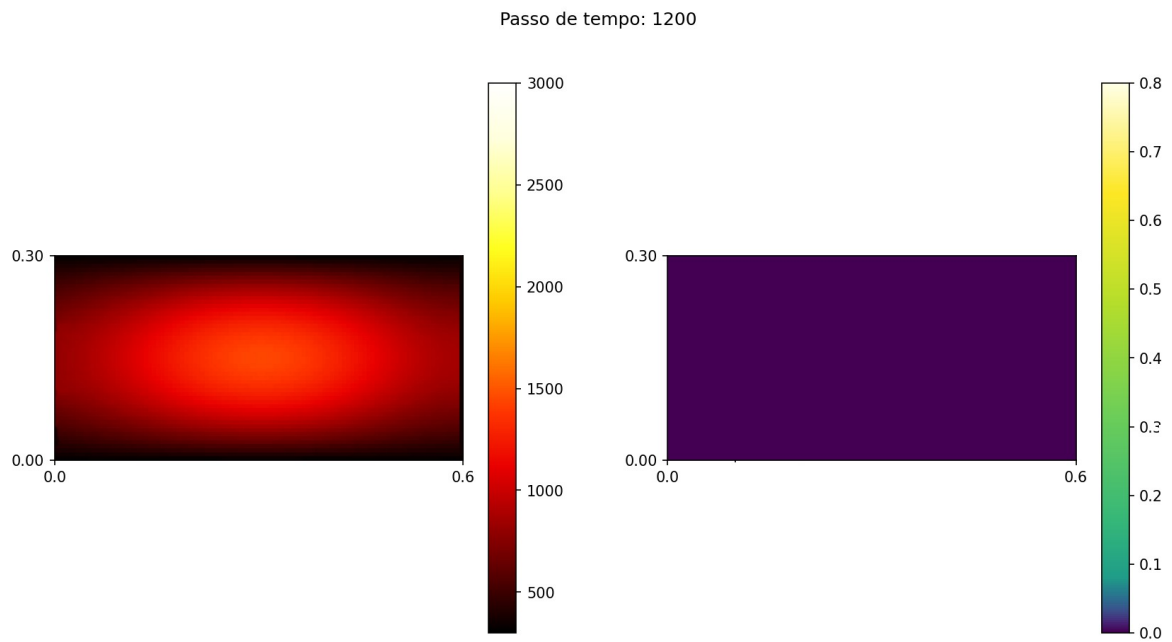


II. Ignição, consumo da mistura ar-combustível e variação da temperatura:









III. Variação da mistura ar-combustível no combustor ao longo de $y = L_y/2$ antes (esquerda) e depois (direita) da ignição:

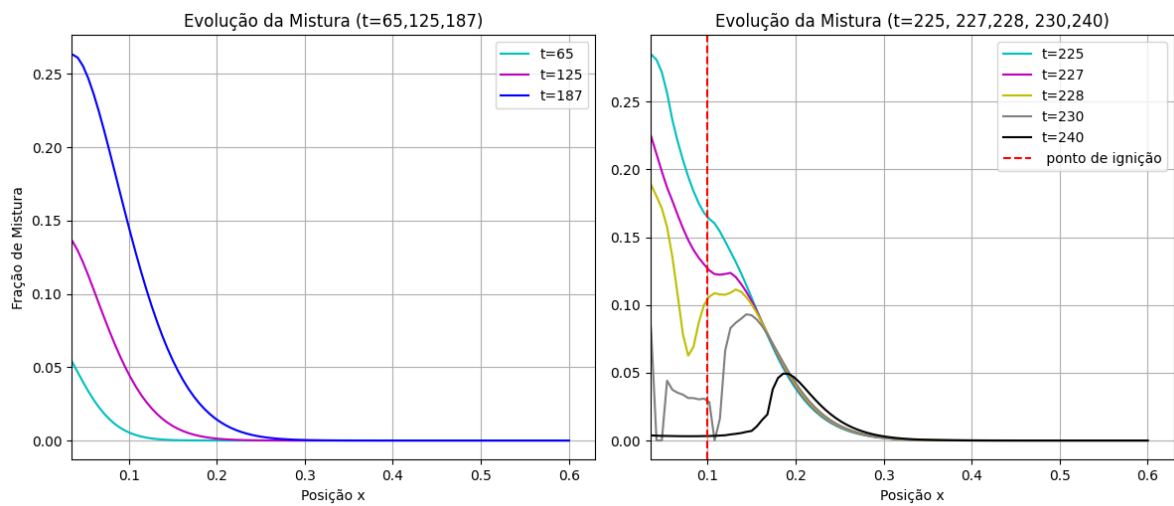


Figura 4.26: Consumo da mistura ar-combustível ao redor da região de ignição

IV. Variação média da Temperatura, do Oxidante e do Combustível no combustor ao longo do tempo:

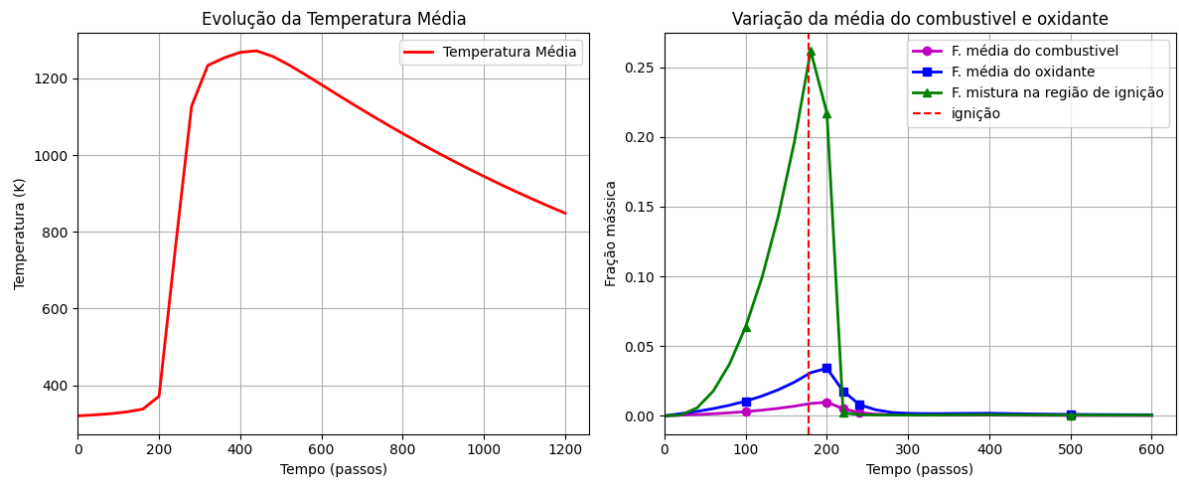
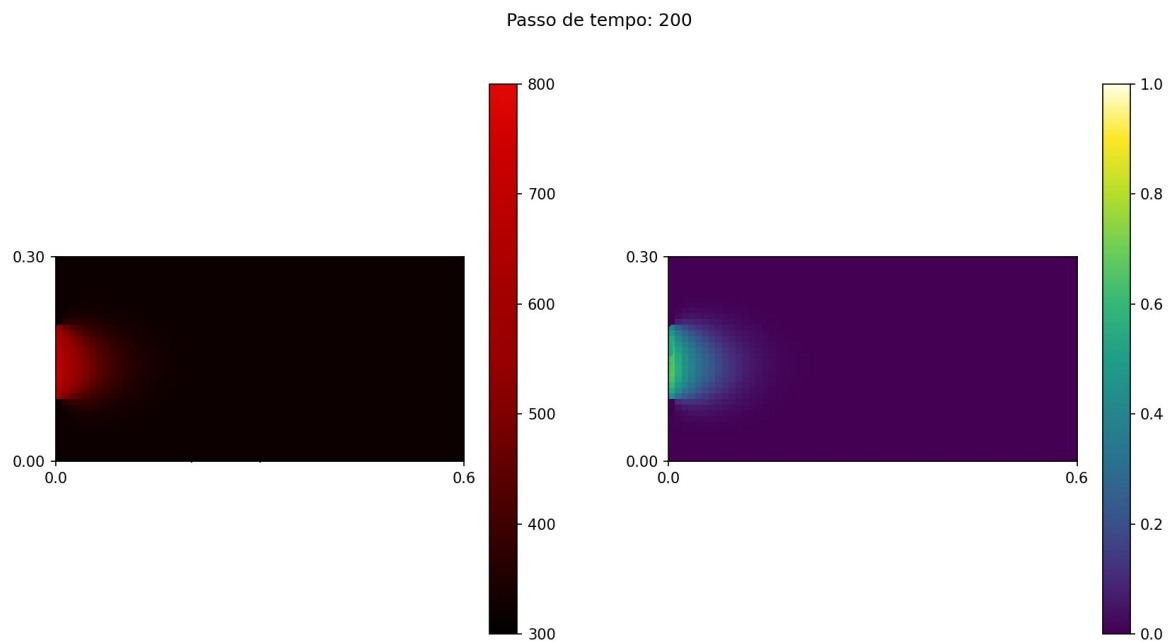
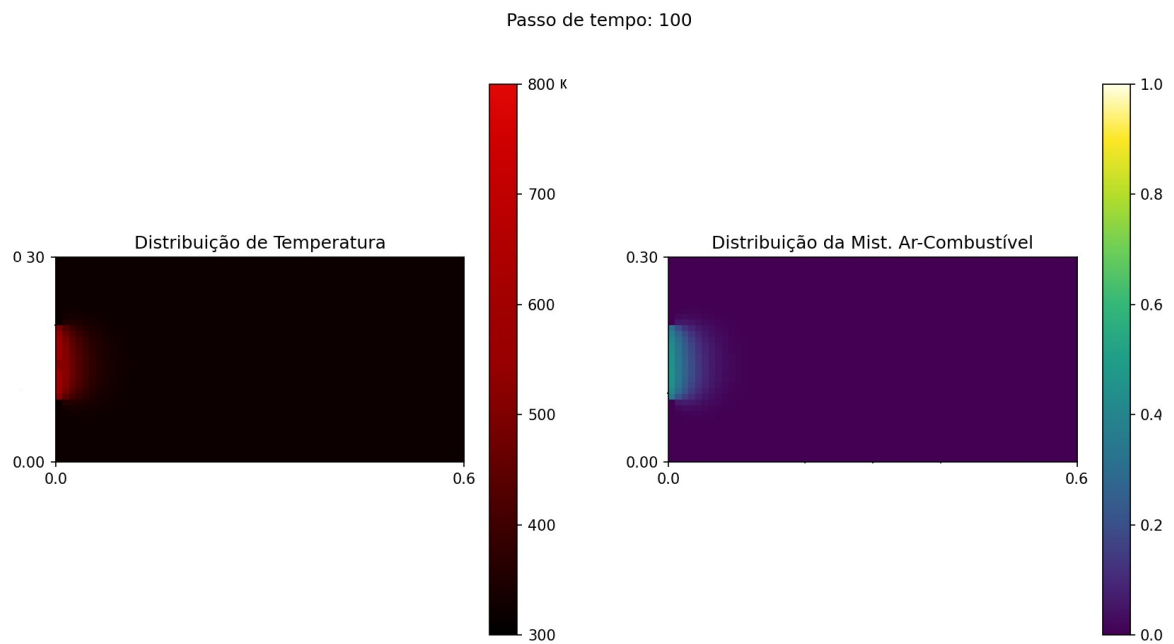
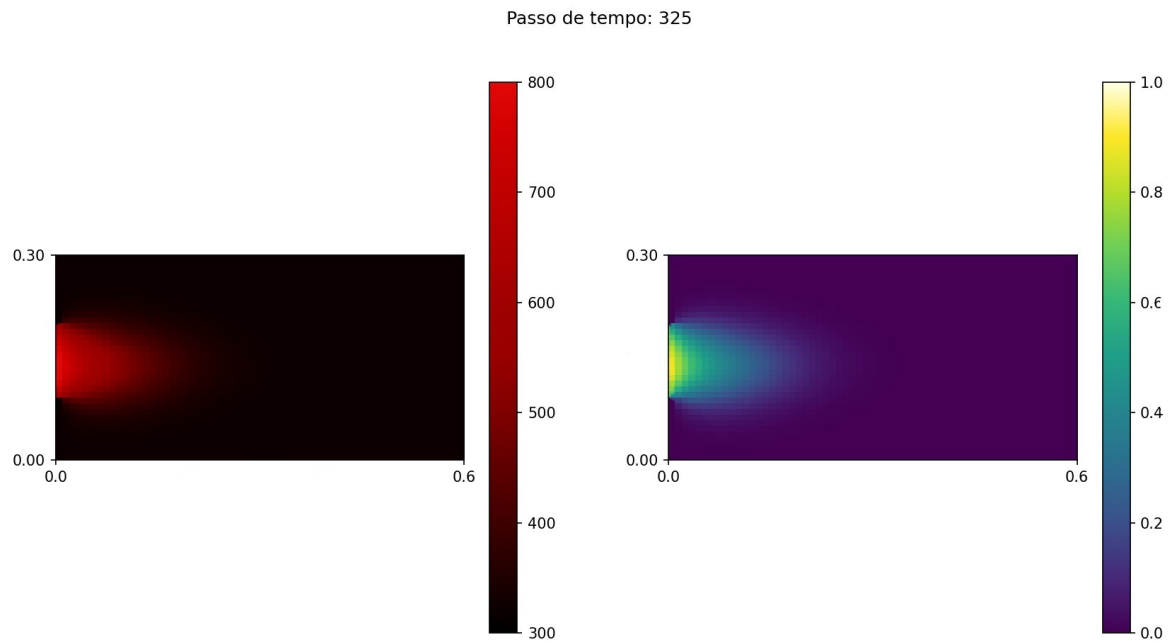


Figura 4.27: Variação média da Temperatura, do Oxigénio e do Combustível com o tempo

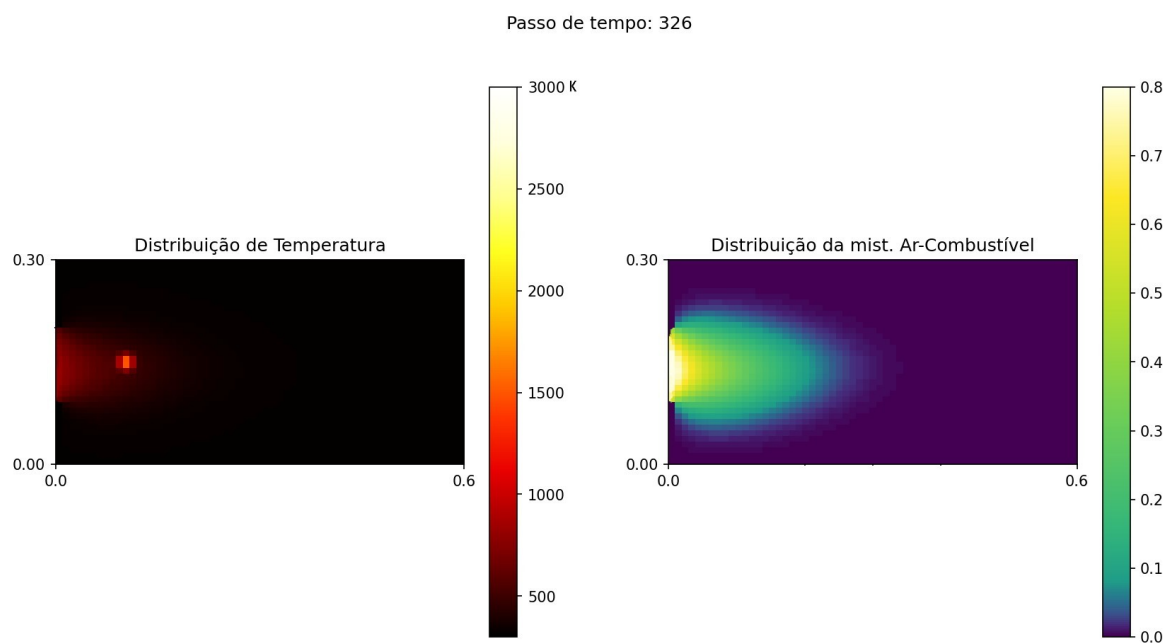
4.2.3 Primeira malha: Campo de Velocidade Variável

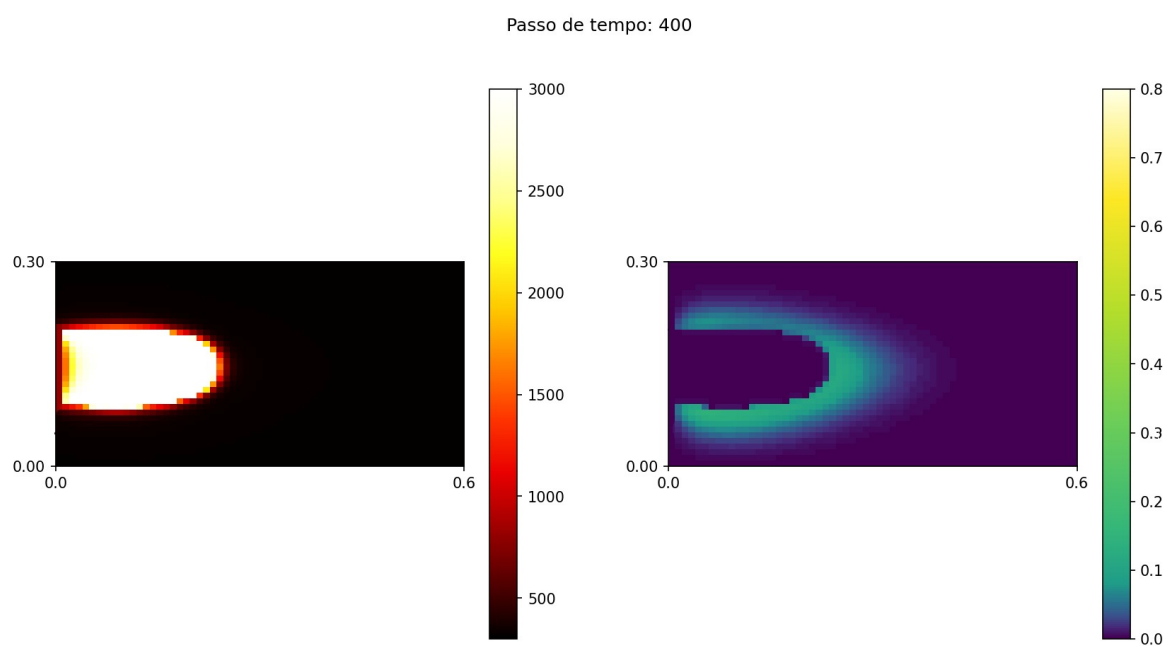
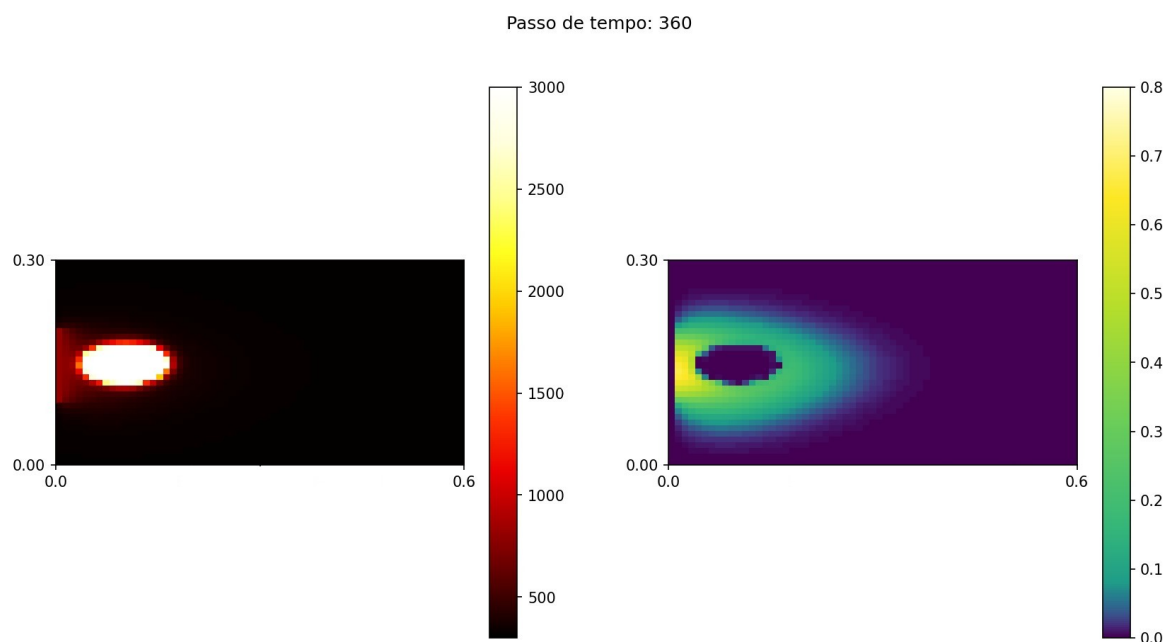
I. Injecção da mistura ar-combustível e variação da temperatura antes da ignição:

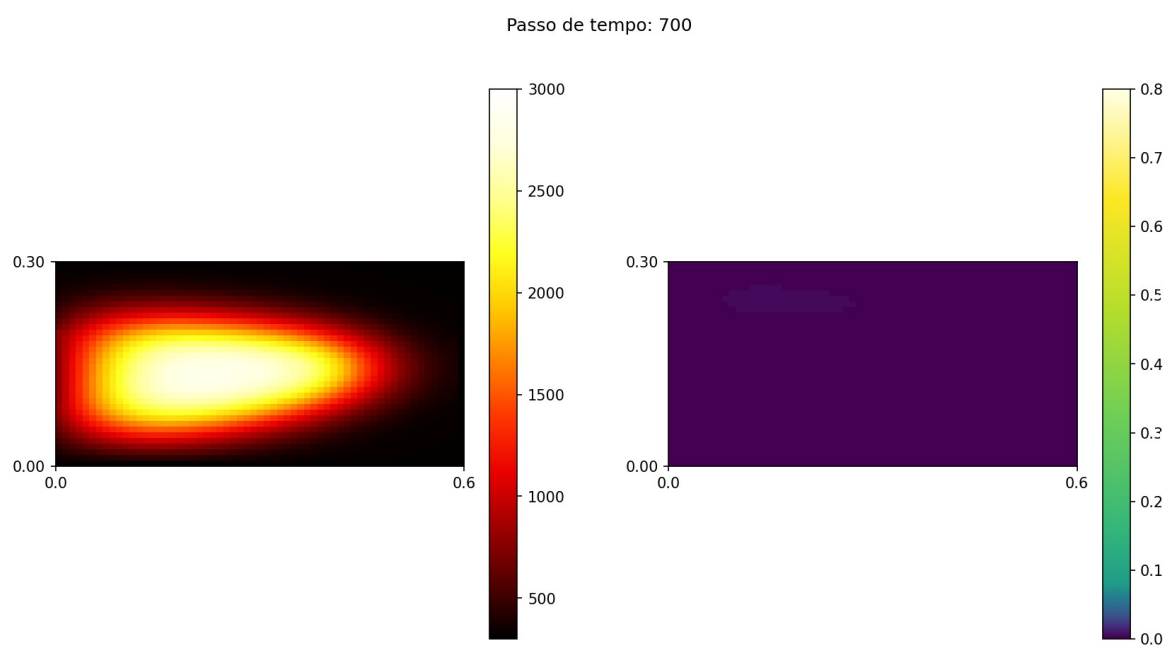
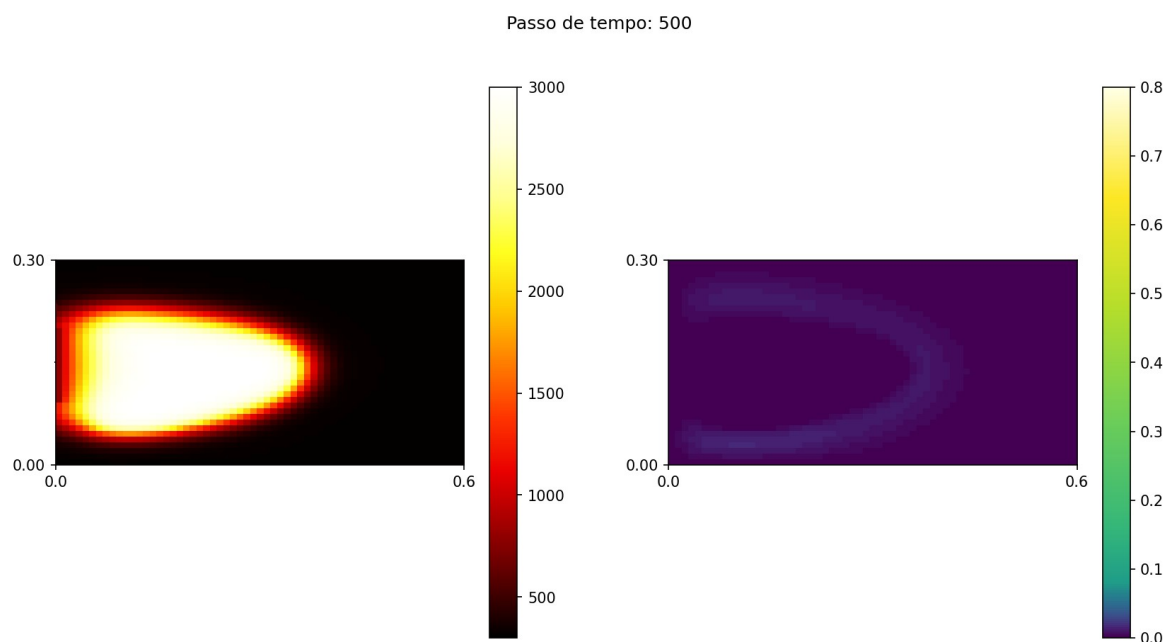


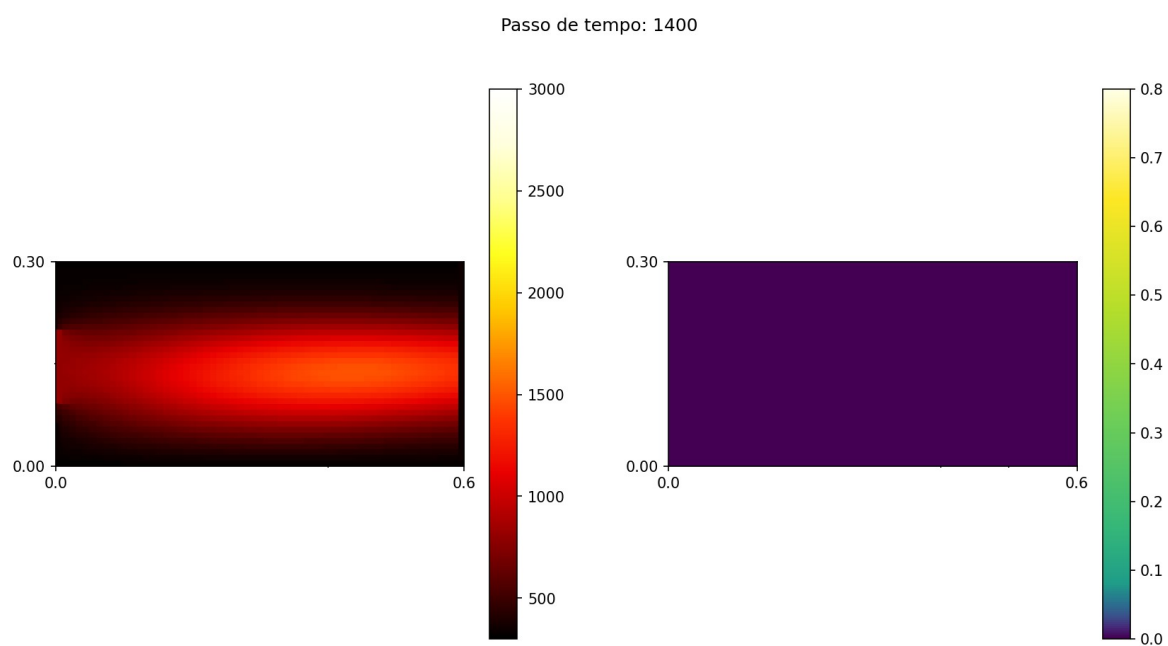
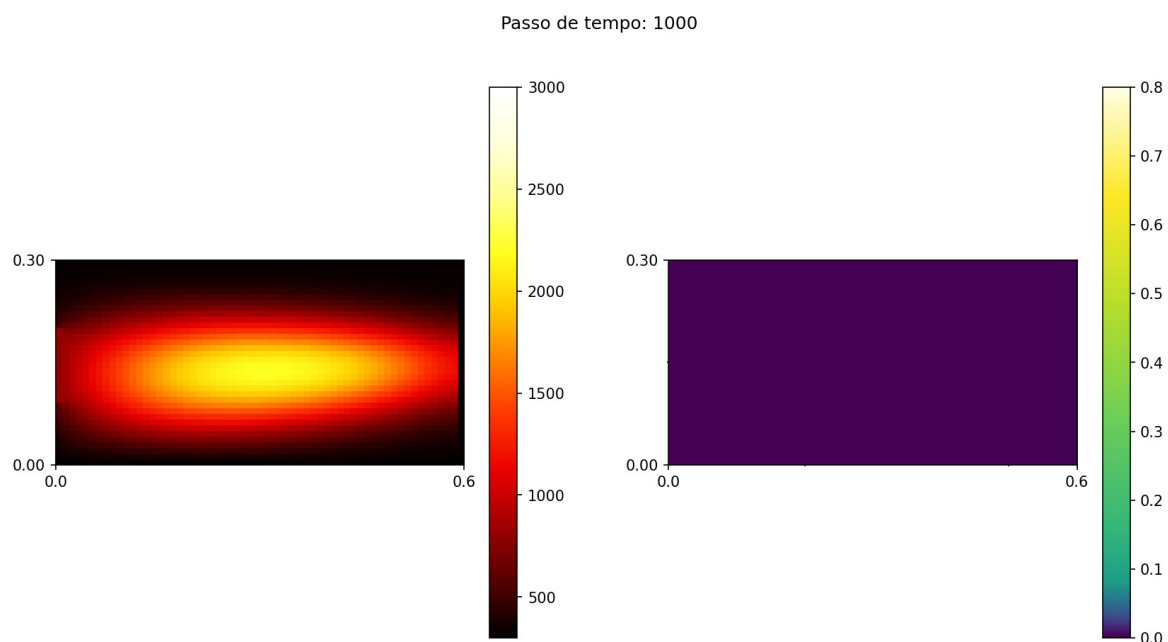


II. Ignição, consumo da mistura ar-combustível e variação da temperatura:









III. Variação da mistura ar-combustível no combustor ao longo de $y = L_y/2$ antes (esquerda) e depois (direita) da ignição:

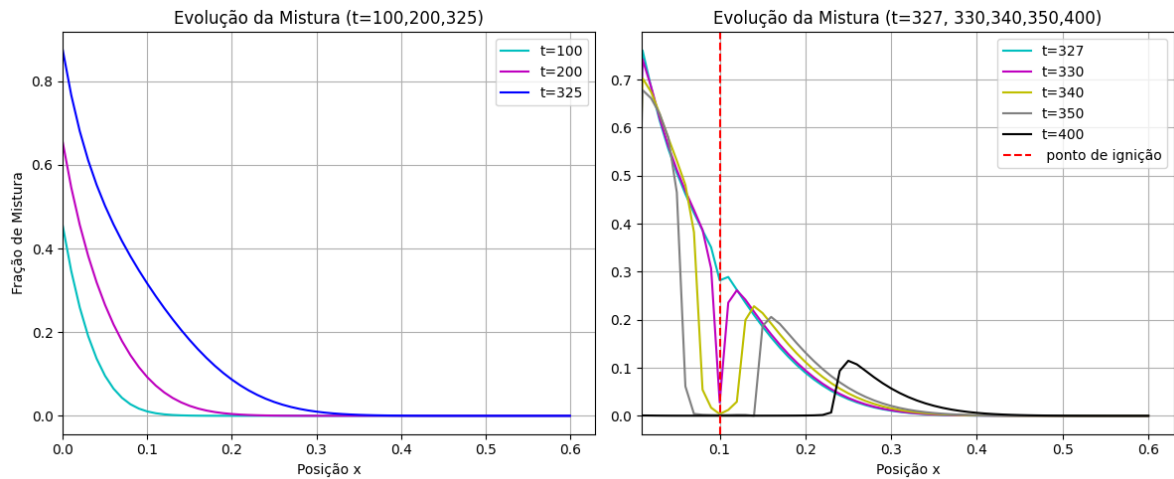


Figura 4.38: Consumo da mistura ar-combustível ao redor da região de ignição

IV. Variação média da Temperatura, do Oxidante e do Combustível no combustor ao longo do tempo:

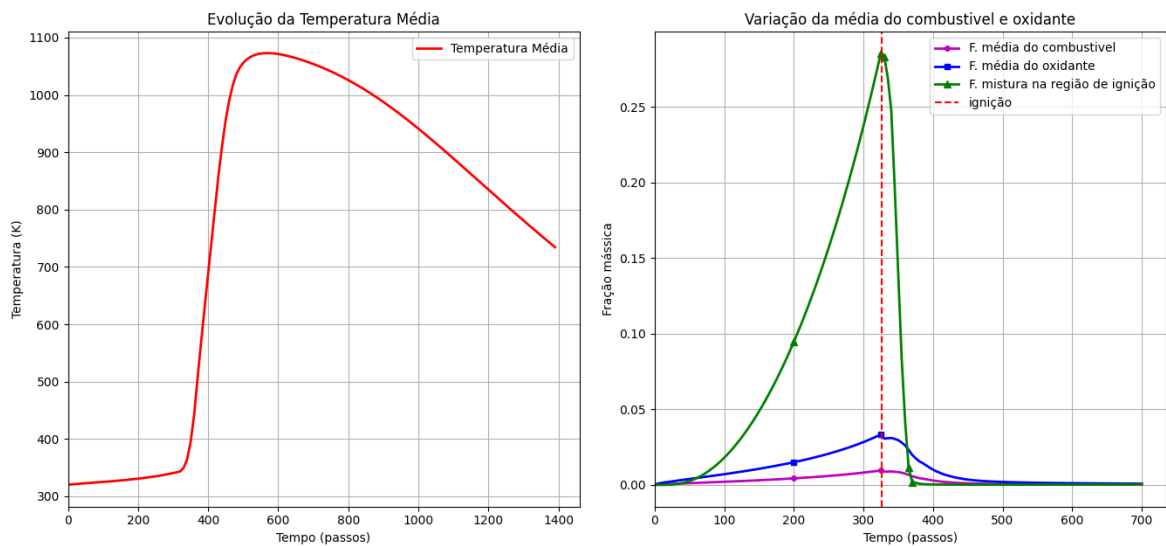


Figura 4.39: Variação média da Temperatura, do Oxigênio e do Combustível com o tempo

4.2.4 Descrição das Simulações

As figuras de 4.5 - 4.14 (Simulação 1), 4.17 - 4.25 (Simulação 2) e 4.28 - 4.37 (Simulação 3) mostram a injeção da mistura ar-combustível na câmara, o consumo da mistura e a variação da temperatura causada pela combustão, considerando as malhas 1, malha 2 (velocidade constante) e malha 1 (campo de velocidade variável), respectivamente.

O combustor está no início da simulação a $320K$ ($47^{\circ}C$) e com quantidade zero de combustível. As primeiras figuras de cada simulação mostram a variação da concentração (fracção mássica) da mistura ar-combustível no combustor antes da ignição e o aumento local da temperatura do combustor causada pelo fluido injectado a $800K$ ($527^{\circ}C$).

Quando a condição de ignição é satisfeita, o fluxo de combustível é interrompido e a ignição é activada. O segundo grupo de imagens de cada simulação mostra as barras de cores actualizadas de $300 - 800K$ para $300 - 3000K$ e de $0.0-1.0$ para $0.0-0.8$ para poder-se capturar as temperaturas elevadas da combustão e as fracções da mistura mínimas remanescentes quando o processo de combustão ocorre. Quando a ignição é accionada verifica-se um aumento local da temperatura na região de ignição que gera o consumo contínuo da mistura nessa região e que se estende, até que toda a mistura seja consumida.

Uma vez consumida toda a mistura as temperaturas começam a baixar e a se equilibrar no combustor. Nota-se durante a combustão um decaimento significativo da temperatura a medida que nos afastamos do centro vertical da câmara para as bordas superior e inferior (isso é mais visível na simulação 3) ilustrando a perda de calor nessas bordas, modela pela lei de resfriamento de Newton. A direcção principal do fluxo de massa e fluxo térmico é da esquerda para a direita devido a direcção convectiva e difusiva, conforme ocorre na câmara real.

As figuras 4.15 , 4.26 e 4.38 mostram como varia o consumo da mistura ar-combustível com o tempo em $y = L_y/2$, ao longo do eixo x . Antes da ignição a concentração diminui da esquerda (região de injeção) para a direita, em concordância com os gráficos 2D. Uma vez activada a ignição verifica-se nessas figuras uma queda de concentração na região de ignição que se acentua a medida que o tempo avança. Para tempos avançados ($t = 95, 240, 400$), nas três simulações, verificar-se uma queda de concentração em toda a região primária em $y = L_y/2$, o que está de acordo com os gráficos 2D e conforme esperado.

As figuras 4.16 , 4.27 e 4.39 mostram a variação média da temperatura (curva vermelha), da fracção média da mistura na região de ignição (verde) e fracções médias do oxidante e do combustível em todo o combustor (azul e roxo, respectivamente). Verifica-se em cada simulação que a injeção do combustível a $800K$ gera uma variação média de $30K$, elevando o combustor de $320K$ para aproximadamente $350K$. Verifica-se também uma elevação acentuada da temperatura após a activação de ignição em $t = 90, 187, 326$, em cada simulação, causada pela ignição e posterior combustão.

Para as fracções médias da mistura na região de ignição, verifica-se um rápido decaimento de concentração após a ignição, o que concorda com o esperado uma vez que é nessa região onde se dá o início da combustão e onde a mistura começa a ser consumida. As curvas azul e roxo mostram às concentrações médias do oxidante e do combustível aumentando durante a injeção até um pico perto do tempo de ignição e então começam a decrescer, consumidos pela combustão.

4.2.5 Análise Comparativa dos Resultados das Simulações

Comparação das simulações 1 e 2

O resultado das simulações nas duas malhas mostram-se convergir para o mesmo resultado, sendo que a malha refinada mostrou uma distribuição da temperatura mais suave, o que sugere que a solução numérica seja consistente. As temperaturas médias máximas atingidas, e as variações médias das fracções da mistura são aproximadamente as mesmas para os dois casos.

Comparação das simulações 1 e 2 com a simulação 3

A simulação 3 que usa um campo de velocidade variável próximo ao do combustor real previu resultados mais precisos, comparados com os resultados em [1]. Verifica-se pouco antes da ignição, figuras 4.30 e 4.31, que a variação da concentração da mistura é mais extensa comparada com as variações correspondentes nas simulações 1 e 2, figuras 4.8 , 4.9 e 4.18, 4.19. Verifica-se também durante a combustão um perfil da variação da temperatura diferente para a simulação 3, mais direccionado da esquerda para a direita, conforme o campo de velocidade.

Comparando as figuras 4.15 , 4.26 e 4.38, nota-se que a simulação 3 mostrou um consumo da mistura mais centrado na região de ignição no início da combustão que nas outras duas, prevendo assim melhores resultados tanto para a variação da temperatura, cuja média máxima é pouco baixa em relação a das simulações 1 e 2, assim como para a injeção e consumo da mistura ar-combustível. Um facto interessante, é que a simulação 3, que implementa um campo de velocidade variável, exigiu um tempo de simulação mais extenso em relação a simulação 2, mesmo usando uma malha um pouco mais grossa (malha 1).

Capítulo 5

Considerações finais e conclusão

Verifica-se com este trabalho o papel indispensável dos modelos matemáticos na descrição dos fenómenos da combustão. “Os modelos matemáticos mostram-se como uma ponte entre o problema - a solução - e os resultados”.

O método numérico usado, Crank - Nicolson, junto do esquema upwind para fluxos com convecção dominante, possui a vantagem de ser muito estável, conforme se viu nos resultados obtidos. A sua desvantagem é o de ser computacionalmente caro (exige muita memória do computador e o tempo de simulação cresce exponencialmente a medida que a malha é refinada) devido ao número elevado de variáveis, que geram matrizes de ordens muito elevadas.

Cada código elaborado para as simulações deste trabalho levou entre 30min-3h em execução. Quanto mais reais forem os dados físicos e detalhados forem os mecanismos cinéticos, maior é o custo computacional da simulação, podendo uma simulação levar dias até ser concluída pelo computador. Espera-se com o desenvolvimento emergente de computadores mais poderosos a realização de simulações mais detalhadas e mais próximas da câmara de combustão real.

Referências Bibliográficas

- [1] Abreu, A. P. (2023). *Projeto de uma câmara de combustão anelar para um motor turbofan de pequenas dimensões*. (Tese de Mestrado, Universidade Beira Interior).
- [2] Atkins, P., De Paula, J. (2006). *Físico-química*. Rio de Janeiro, Brazil: Livros Técnicos e Científicos Editora.
- [3] Braga, W. F. (2011). *Nova abordagem do método do balanço integral: aplicação a problemas inversos de condução de calor*. (Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina). Recuperado de <https://repositorio.ufsc.br>
- [4] Brimblecombe, P. (1996). *Air composition & chemistry*. Califórnia, CA: Cambridge University Press.
- [5] Coelho, P., Costa, M. (2012). *Combustão*. Amadora, Portugal: Orion Edições
- [6] Corrêa, C. (2015) *Métodos de diferenças finitas e volumes finitos para problemas convectivos Difusivos*. (Tese de Mestrado, Universidade Federal Fluminense). Recuperado de <http://www.mcct.sites.uff.br>
- [7] Dias, F.A. (2012). Introdução a tensores. *São Paulo Research and Analysis Center (sprace)*. São Paulo, Brasil.
- [8] Fergizer, J. H., Perić, M., Street, R. L. (2020). *Computational methods for fluid dynamics*. Switzerland: Springer Editora.
- [9] Gonçalves, I. C. (2022) *Análise Matemática IV*. Notas de Aulas. Universidade Eduardo Mondlane.
- [10] Koretsky, M. D. (2007) *Termodinâmica para engenharia química*. Rio de Janeiro, Brasil: Livros Técnicos e Científicos Editora.
- [11] Kotz, J. C., Treiche, P. M. (2006). *Química geral e reacções químicas. Vol.1*. São Paulo, Brasil: Cenage Learning.
- [12] Kuo, G. (2019). *When fossil fuels will run out? what then?* <https://mahb.Stanford.edu/libray-item/fossil-fuels/>. Acessado em 15 de Novembro 2024

- [13] Law, C. K. (2006). *Combustion physics*. New York, NY: Cambridge University Press.
- [14] Maders, L. C. (2013). *Implementação do método fgm no pacote openfoam para simulação de chama laminar difusiva*. (Tese de Licenciatura, Universidade Federal do Rio Grande do Sul). Recuperado em <http://hdl.handle.net/10183/132718>
- [15] Mostafa, M. G. (2012). *3D Simulation of jet-A combustion in a model aircraft engine combustion chamber*. (Tese de Mestrado, North Carolina Agricultural and Technical State University) Recuperado em <https://digital.library.ncat.edu/theses/90>.
- [16] Nhambiu, J. (2013). *Transmissão de calor*. Notas de aula. Universidade Eduardo Mondlane.
- [17] Sarikoç, D. (2020). Fuels of diesel-gasoline engines and their proprieties. *Intech Open*. Recuperado de <http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.89044>
- [18] Shafiee, S., Topal, E. (1985). When will fossil fuel reserves be diminished. *Energy Policy*. vol.37(1):181-189. <https://doi.org/10.1016/j.enpol.2008.08.016>. Acessado em 12 de Novembro de 2024
- [19] Tavares, L. S. (2021) *Projeto de uma câmara de combustão anelar para um motor turbofan de pequenas dimensões*. Recuperado de <https://doi.org/10.1016/j.enpol.2008.08.016>
- [20] Turns, S. R. (2012). *Introduction to combustion: concepts and applications*. New York, NY: Mc Graw Hill Education.
- [21] Turns, S. R., Pauley, L.L. (2020) *Thermodynamics. concepts and applications*. Califórnia, CA: Cambridge University Press.
- [22] Vlassov, D. (2008) *Fundamentos de combustão*. Notas de aulas. (s.l.)
- [23] Westbrook, C. K., Dryer, F. L. (1980). Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combustion science and technology*. Recuperado de <https://doi.org/10.1080/00102208108946970>
- [24] Williams, F. A. (1985). *Combustion theory*. California, CA: Cummings Publishing Company.
- [25] Williams, F.A, Tarrazo, E. F., Sánchez, A. L., Liñán, A. (2006). A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion. *Combustion and flame*. Recuperado em <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2006.08.001>

APÊNDICES

APÊNDICE A - Conceitos Auxiliares

Conceitos Físico-Químicos

Um **mol** é a quantia de substância que possui um número de unidades fundamentais, átomos, moléculas ou outras partículas, igual a $6,022 \times 10^{23}$.

O número de moles da substância i será simbolizado por n_i . De acordo com a definição acima, 1 mol de hidrogénio (uma substância elementar) contém $6,022 \times 10^{23}$ átomos H , e um mol de metano (um composto químico) contém $6,022 \times 10^{23}$ moléculas CH_4 . O número $6,022 \times 10^{23}$ de partículas de 1 mol de uma substância é chamado Número de Avogrado e é simbolizado por N_A ($N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$).

A quantia de substância i (o seu número de moles) está relacionada com sua quantidade (em gramas) pelo conceito de massa molar.

A **massa molar** de um elemento químico é a massa em gramas de um mol de átomos desse elemento ($6,022 \times 10^{23}$ átomos do elemento). A massa molar da substância i é simbolizada por M_i .

A tabela a seguir apresenta a massa molar de algumas substâncias de interesse no estudo da combustão. Massas molares de outras substâncias podem ser encontradas na maioria dos livros consultados na elaboração desta pesquisa.

Tabela 1. Massas molares de algumas substâncias de interesse.

Substância	Símbolo	Massa molar(kg/kmol)
Água	H_2O	0,01802
Ar ¹	—	0,02897
Dióxido de carbono	CO_2	0,04401
Metano	CH_4	0,01604
n-Decano	$C_{10}H_{22}$	0,142
Oxigénio	O_2	0,032
Nitrogénio	N_2	0,0202

¹ A composição do ar foi descrita no ponto 2.1.3.

A **Teoria de colisão** estuda a frequência com que átomos ou moléculas colidem umas com as outras a nível molecular numa substância, estabelecendo fórmulas aproximadas para o número de colisões que moléculas em movimento sofrem por unidade de tempo. Com base nesta teoria é deduzida a equação (2.30). Mais detalhes podem ser encontrados em [2],[5] e [20].

Um **Fluido incompressível** é aquele cuja densidade ρ é assumida como sendo constante (quando a compressibilidade do fluido é negligenciável). Essa é uma suposição válida para muitos fluidos de interesse na combustão e matematicamente é expressa como $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$.

Um **Fluido newtoniano** é aquele cuja viscosidade μ (resistência ao escoamento) é constante, ou seja, a tensão de cisalhamento $\mathbf{T}$ é proporcional à taxa de deformação $\mathbf{D}$.

Conceitos Matemáticos

Tensores são uma generalização natural de vectores. Um tensor de ordem zero é um escalar, que é o caso da temperatura e da energia. Tensores de primeira ordem são vectores, como a velocidade e a força. Os de segunda ordem são matrizes $m \times n$. Tensores de ordem superiores são usados para descrever propriedades mais complexas [7]

O **Tensor de tensão** T é um tensor de segunda ordem dado por

$$T_{i,j} = \begin{bmatrix} T_{xx} & T_{xy} & T_{xz} \\ T_{yx} & T_{yy} & T_{yz} \\ T_{zx} & T_{zy} & T_{zz} \end{bmatrix}$$

O **Produto tensorial** de dois vectores é dado por

$$\mathbf{v} \otimes \mathbf{w} = \begin{bmatrix} v_x w_x & v_x w_y & v_x w_z \\ v_y w_x & v_y w_y & v_y w_z \\ v_z w_x & v_z w_y & v_z w_z \end{bmatrix}$$

A **Divergência de um tensor** T é um vector dado por

$$\nabla \cdot \vec{T} = \text{div } \vec{T} = \left(\frac{\partial T_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial T_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial T_{zx}}{\partial z} \right) \mathbf{i} + \left(\frac{\partial T_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial T_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial T_{zy}}{\partial z} \right) \mathbf{j} + \left(\frac{\partial T_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial T_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial T_{zz}}{\partial z} \right) \mathbf{k}$$

isto é, é o operador $\nabla \cdot$ aplicado à cada coluna do tensor.

O **Gradiente de um vector** $\mathbf{v}$ é um tensor de segunda ordem

$$\nabla \mathbf{v} = \text{grad } \mathbf{v} = \begin{bmatrix} \frac{\partial v_x}{\partial x} & \frac{\partial v_x}{\partial y} & \frac{\partial v_x}{\partial z} \\ \frac{\partial v_y}{\partial x} & \frac{\partial v_y}{\partial y} & \frac{\partial v_y}{\partial z} \\ \frac{\partial v_z}{\partial x} & \frac{\partial v_z}{\partial y} & \frac{\partial v_z}{\partial z} \end{bmatrix}$$

A **Divergência de um vector** $\mathbf{v}$ é

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \text{div } \mathbf{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}$$

Teorema 1. *(Da Divergência de Gauss)*

Seja R uma região fechada do espaço e limitada em relação a x , y e z e ∂T a fronteira de R , orientada pelo vector normal $\mathbf{v}$, exterior a ∂T .

Seja $F: U \subset \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ um campo vectorial de classe C^1 definido num conjunto aberto U que contem R . então

$$\begin{aligned}\int_{\partial T} F \cdot \mathbf{n} dS &= \int_R \operatorname{div} \mathbf{F} dV \\ &= \int_R \nabla \cdot \mathbf{F} dV\end{aligned}$$

APÊNDICE B - Demonstrações

Demonstração 1.

Obtenção da concentração $[A](t)$

$$[A](t) = [A]_o \frac{[A]_o - [B]_o}{[A]_o - [B]_o \exp([B]_o - [A]_o)kt}$$

a partir da equação

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A][B] \quad (2.28a)$$

Para a integração da equação (2.28a) é necessário antes relacionar as concentrações $[A]$ e $[B]$. Aplicando (2.25) em (2.28a) para A, B e prod, obtém-se

$$\frac{d[A]}{dt} = \frac{d[B]}{dt} = -\frac{d[prod]}{dt} \quad (B1)$$

Integrando de $t_o = 0$ a t , obtém-se:

$$[A] - [A]_o = [B] - [B]_o = -[prod] = -x \quad (B2)$$

Assim $[A] = [A]_o - x$, $[B] = [B]_o - x$ e $\frac{d[A]}{dt} = -\frac{dx}{dt}$ e aplicando na equação (2.28b) obtém-se a EDO equivalente

$$\frac{dx}{dt} = k([A]_o - x)([B]_o - x) \quad (B3)$$

Separando as variáveis e integrando de 0 ($t = 0$) a x (t arbitrário) obtém-se:

$$\frac{1}{[B]_o - [A]_o} \left(\ln \frac{[A]_o}{[A]_o - x} - \ln \frac{[B]_o}{[B]_o - x} \right) = kt$$

Equivalentemente

$$\ln \left(\frac{[B]}{[A]} \frac{[A]_o}{[B]_o} \right) = ([B]_o - [A]_o)kt$$

Usando $[B] = [B]_o - [A]_o + [A]$, equação (B2), obtém-se:

$$\frac{[B]_o - [A]_o + [A]}{[A]} = \frac{[B]_o}{[A]_o} \exp([B]_o - [A]_o)kt$$

Resolvendo para $[A]$ obtemos a expressão desejada. □

Demonstração 2.

Obtenção da forma livre de coordenadas da equação de conservação de massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.37b)$$

a partir da forma integral

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \int_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (2.37a)$$

Aplicando o teorema de Gauss no apêndice A obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) dV &= 0 \\ \int_V \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right) &= 0 \end{aligned}$$

de onde obtém-se a expressão desejada. $\square$

Demonstração 3.

Obtenção da forma livre de coordenadas da equação vectorial de Navier-Stokes

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{g} \quad (2.39d)$$

a partir de

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = \nabla \cdot \vec{\mathbf{T}} + \rho \mathbf{b} \quad (2.39c)$$

A divergência do tensor $\vec{\mathbf{T}}$ é dada por

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{\mathbf{T}} &= \nabla \left[\left(-p + \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \vec{\mathbf{I}} + \mu (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) \right] \\ &= -\nabla p + \frac{2}{3} \mu \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) + \mu \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) \end{aligned}$$

onde a viscosidade μ foi considerada constante. Para um fluido newtoniano e incompressível obtemos

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \\ &= \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) \end{aligned}$$

onde a notação de Einstein, quando um índice aparece duplicado, significa que deve ser somado em todos os seus valores, $\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} = \sum_j \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2}$ e $\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_j \frac{\partial u_j}{\partial x_j}$, foi aplicada.

Assim

$$[\nabla \cdot (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T)]_i = (\nabla^2 \mathbf{v})_i + [\nabla \cdot \mathbf{v}]_i$$

$$\Rightarrow [\nabla \cdot (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T)] = \nabla^2 \mathbf{v}$$

Daqui segue que

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{T}} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v}$$

onde a equação (2.38) foi usada. Substituindo na equação (2.39c) e tomando $\mathbf{b} = \mathbf{g}$ obtém-se a equação desejada. $\square$

Demonstração 4.

Obtenção da equação da energia em função da temperatura

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q \quad (2.41b)$$

a partir da equação equivalente em função da entalpia

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} h) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_p} \nabla h \right) \quad (2.41a)$$

Começamos observando que

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{v} \hat{h}) &= (\nabla \cdot \mathbf{v}) \hat{h} + (\nabla \hat{h}) \cdot \mathbf{v} \\ &= \mathbf{v} \nabla \cdot \hat{h} \end{aligned}$$

Assim da equação (2.41a) obtém-se:

$$\rho \left(\frac{\partial \hat{h}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \hat{h} \right) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_p} \nabla \hat{h} \right) \quad (B4)$$

Usando a equação (2.11b) e $dh = c_p dT$ (equação (2.12b)) obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{h}}{\partial t} &= \sum Y_i \frac{\partial \hat{h}_i}{\partial t} + \sum h_i \frac{\partial Y_i}{\partial t} \\ &= \sum Y_i c_{p,i} \frac{\partial T}{\partial t} + \sum h_i \frac{\partial Y_i}{\partial t} \\ &= c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \sum h_i \frac{\partial Y_i}{\partial t} \end{aligned} \quad (B5)$$

$$\begin{aligned} \nabla \hat{h} &= \nabla \left(\sum Y_i \hat{h}_i \right) \\ &= \sum \hat{h}_i \cdot \nabla Y_i + \sum Y_i \nabla \hat{h}_i \\ &= \sum \hat{h} \cdot \nabla Y_i + \sum Y_i c_{p,i} \cdot \nabla T \end{aligned} \quad (B6)$$

Aplicando (B5) e (B6) na equação (B4) obtemos

$$\begin{aligned} \rho \left[c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \sum \hat{h}_i \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \left(\sum h_i \nabla Y_i + c_i \nabla T \right) \right] &= \nabla \cdot \left[\frac{k}{c_i} \left(\sum \hat{h}_i \nabla Y_i + c_i \nabla T \right) \right] \\ \rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) + \rho \sum \hat{h}_i \left[\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot (\nabla Y_i) \right] &= \nabla \cdot (k \nabla T) + \frac{k}{c_p} \nabla \cdot \left(\sum \hat{h} \nabla Y_i \right) \end{aligned}$$

Usando a equação de conservação das espécies (2.42) obtemos

$$\begin{aligned} \rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) + \rho \sum \hat{h}_i \left[\nabla (D_i \nabla Y_i) + \frac{M_i}{\rho} \omega_i \right] &= \nabla (k \nabla T) + \frac{k}{c_p} \nabla \left(\sum \hat{h} \nabla Y_i \right) \\ \rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) + \sum \hat{h} M_i \omega_i + \nabla \left[\sum \left(\rho D_i \nabla Y_i \hat{h}_i - \frac{k}{c_p} \hat{h}_i \nabla Y_i \right) \right] &= \nabla (k \nabla T) \end{aligned}$$

arranjando

$$\begin{aligned} \rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) + \sum \hat{h} M_i \omega_i + \nabla \left[\sum \left(\frac{\rho D_i c_p}{k} - 1 \right) \nabla Y_i \frac{k}{c_p} \hat{h}_i \right] &= \nabla (k \nabla T) \\ \rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) + \sum \hat{h} M_i \omega_i + \nabla \left[\sum \left(\frac{1}{L_e} - 1 \right) \nabla Y_i \frac{k}{c_p} \hat{h}_i \right] &= \nabla (k \nabla T) \end{aligned}$$

onde $L_e = \frac{k}{\rho c_p D_i}$ é o número de Lewis. considerando $L_e \approx 1$, que é uma boa aproximação para a combustão e tomando $Q = - \sum h_i M_i \omega_i$ obtemos a equação desejada. $\square$

Demonstração 5.

Obtenção do termo fonte de calor

$$Q = \frac{\dot{\omega}_{fuel}}{M_{fuel}} \cdot \Delta H_{comb} \quad (2.41d)$$

a partir da equação

$$Q = - \sum h_i M_i \omega_i \quad (2.41c)$$

Considerando a equação estequiométrica (2.3) e a definição de v_i dada na equação (2.17c) e usando a equação (2.35c) temos

$$\begin{aligned} \omega_i &= \frac{v_i}{v_{fuel}} \frac{M_i}{M_{fuel}} \\ &= - \frac{v_i M_i}{M_{fuel}} \end{aligned}$$

Substituindo em (2.41c) obtemos

$$Q = \frac{\omega_{fuel}}{M_{fuel}} \sum v_i M_i h_i$$

de onde chega-se a expressão desejada considerando a definição de entalpia de reacção na equação (2.17b) $\square$

APÊNDICE C - Códigos

C1. Malhas numéricas

```
# =====
# Malhas numéricas
# =====
import numpy as np
#First:
Lx, Ly = 0.6, 0.3
delta_x = 0.6/70
delta_y = 0.3/35
Nx = int(round(Lx/delta_x)) + 1
Ny = int(round(Ly/delta_y)) + 1
Ni = (Nx-2)*(Ny-2)    # Number of internal points (Number of Unknowns: 2346 )

#Second:
Lx, Ly = 0.6, 0.3
delta_x = 0.6/100
delta_y = 0.3/50
Nx = int(round(Lx/delta_x)) + 1
Ny = int(round(Ly/delta_y)) + 1
Ni = (Nx-2)*(Ny-2)    # Number of internal points (Number of Unknowns: 4851 )

# Temporal step size.
Dt = delta_x**2/(4)    #to guarantee stability
```

C2. Parâmetros físicos

```
# =====
# Parâmetros físicos ajustados
# =====
##Fluid mechanics parameters (S.I)
rho = 1                # Density of the mixture
Cp  = 1000             # Specific heat capacity
kT   = 350             # Thermal conductivity
alpha = kT/(rho*Cp)

#constant velocity field
v_x=15
v_y = 0

#variable velocity field  v=(v_x,v_y)
```

```

vx_max = 25
vy_max = vx_max/5
A = 1.7
B = (5*A*Ly/(np.pi*Lx))
v_x = vx_max * (1 - np.exp(-A * x/(1*Lx))) * np.sin(np.pi * y / (Ly))
v_y = B*vy_max* np.exp(-A * y / Lx) *( np.cos(np.pi * y / Ly))
magnitude = np.sqrt(v_x**2 + v_y**2)
max_V_magnitude =20 #(m/s)

## parameters for species transport: Fuel C10H22(n-decane) and O_2
MW_fuel = 0.142          # Molar weight of the fuel (kg/mol)
MW_O2    = 0.032         # Molar weight of the oxygen (kg/mol)
S_ratio  = 15.5*(MW_O2/MW_fuel) #Stoichiometric ratio
Phi       = 1            # equivalent ratio
Ae        = 10**8        # Pre-exponential factor for reaction rate
E_a       = 147000        # Activation energy (J/mol)
R         = 8.314         # Universal gas constant (J/mol·K)
Delta_H   = -6345000      # Heat of combustion (J/mol)
D_fuelx   = 0.35          # adjusted diffusion coefficient for the fuel
D_fuely   = 0.17
D_Ox      = 0.35          # adjusted diffusion coefficient for the oxygen
D_Oy      = 0.17
K         = np.zeros((Ny, Nx)) #Reaction constant (updated later)

mPex = max_V_magnitude*Lx/D_fuel #Peclet number to mass diffusion
tPex = max_V_magnitude*Lx/alpha  #Peclet number to thermal diffusion

# Parameters for Heat Transfer (simplified notations)
#To follow the the oriatation of python i vertical
# index we will call i=0 baltom (Upper of the combustor)
# and i=Ny upper (bottom of the combustor)
he = 10**4          # Convective heat transfer coefficient (Left)
hi = 10**6          # (Bottom)
hd = 200            # (Right)
hs = 10**6          # (Upper)
Te = 800            # Temperature of the left side of the chamber
Tenv = 320          # Temperature of the external environment

#auxiliaries
Ce = 1+(he/kT)*delta_x
Ci = 1+(hi/kT)*delta_y
Cd = 1+(hd/kT)*delta_x
Cs = 1+(hs/kT)*delta_y
Ke = ((he/kT)*delta_x*Tenv)/Ce
Ks = ((hs/kT)*delta_y*Tenv)/Cs

```

```

Kd = ((hd/kT)*delta_x*Tenv)/Cd
Ki = ((hi/kT)*delta_y*Tenv)/Ci
#mfr_fuel = 82/7          #mass flow rate to the fuel (kg/m2*s-constant VF)
mfr_fuel = 1              #mass flow rate to the fuel (kg/m2*s - variable VF)
mfr_0 = (1/Phi)*S_ratio*mfr_fuel  #mass flow rate to the oxidizer (kg/m2*s)

```

C3. Composição das matrizes. Campo de velocidade constante

```

# =====
# Composição das matrizes (velocidade constante)
# =====

## Initializing matrices A and M for the Energy equation
A = np.zeros((Ni, Ni))
M = np.zeros((Ni, Ni))

# Function to fill matrices A and M
def filling_matrixes_temperature():
    for k in range(Ni):
        i = 1 + k // (Nx-2)
        j = 1 + k % (Nx-2)

        Dx = (Dt * alpha) / (2 * (delta_x)**2)
        Dy = (Dt * 0.4*alpha) / (2 * (delta_y)**2)
        Cx = -(u_x * Dt) / (2 * delta_x)
        Cy = -(u_y * Dt) / (4 * delta_y)

        # Coefficient for the discretized equation (energy equation)
        Sbx = Dx - Cx
        Smx = Dx + 0*Cx
        Sby = Dy - Cy
        Smy = Dy + Cy

        a = 1 + 2 * Dx + 2 * Dy - Cx
        b = 1 - 2 * Dx - 2 * Dy + Cx
        #Main Diagonal:
        if i == 1:
            if j == 1:
                # bottom boundary
                # bottom-left corner
                A[k, k] = a - Sby / Ci - Sbx/Ce
                M[k, k] = b + Sby / Ci + Sbx/Ce
            elif j == Nx - 2:
                # bottom-left corner
                A[k, k] = a - Sby / Ci - Smx / Cd
                M[k, k] = b + Sby / Ci + Smx / Cd
            else:
                # other nodes of the upper boundary
                A[k, k] = a - Sby / Ci

```

```

        M[k, k] = b + Sby / Ci

    elif i == Ny - 2:                                     # upper boundary
        if j == 1:                                       # upper-left boundary
            A[k, k] = a - Smy / Cs - Sbx/Ce
            M[k, k] = b + Smy / Cs + Sbx/Ce
        elif j == Nx - 2:                                # bottom-right corner
            A[k, k] = a - Smy / Cs - Smx / Cd
            M[k, k] = b + Smy / Cs + Smx / Cd
        else:                                             # other nodes of the bottom boundary
            A[k, k] = a - Smy / Cs
            M[k, k] = b + Smy / Cs

    elif j == 1 and i!=1 and i!=Ny-2:                    # left boundary (except corners)
        i_min = max(1, int(round(Ny / 3))-1)
        i_max = min(Ny - 2, int(round(2 * Ny / 3))+1)
        if i_min < i < i_max:
            A[k, k] = a
            M[k, k] = b
        else:
            A[k, k] = a - Sbx/Ce
            M[k, k] = b + Sbx/Ce
    elif j == Nx - 2 and i!=1 and i!=Ny-2:               #right boundary (except corners)
        A[k, k] = a - Smx / Cd
        M[k, k] = b + Smx / Cd

    else: # internal nodes
        A[k, k] = a
        M[k, k] = b

#Non-Diagonal Terms
if i != 1:                                               # Lower lone diagonal
    A[k, (i-2)*(Nx-2) + (j-1)] = -Sby
    M[k, (i-2)*(Nx-2) + (j-1)] = Sby

if i != Ny-2:                                           # Upper lone diagonal
    A[k, i*(Nx-2) + (j-1)] = -Smy
    M[k, i*(Nx-2) + (j-1)] = Smy

if j != 1:                                              # Lower main diagonal
    A[k, k-1] = -Sbx
    M[k, k-1] = Sbx

if j != Nx-2:                                          # Upper main diagonal
    A[k, k+1] = -Smx
    M[k, k+1] = Smx

```

```

## Initializing matrices for fuel and oxidizer transport (A_f, A_O, M_f and M_O)
# A_f = np.zeros((Ni, Ni))
# M_f = np.zeros((Ni, Ni))

# A_O = np.zeros((Ni, Ni))
# M_O = np.zeros((Ni, Ni))

# Function to fill matrices for fuel transport (A_f and M_f)
def filling_matrixes_f(A_f, M_f, T, Y0, D_fuelx, D_fuely, u_x):
    for k in range(Ni):
        i = 1 + k // (Nx-2)
        j = 1 + k % (Nx-2)
        #Arrhenius Model
        K[i,j]=Ae*np.exp(-E_a/(R*T[i,j]))

        #Coefficients for the discretized equation (fuel equation)
        Dfx = D_fuelx* Dt / (2 * (delta_x)**2)
        Dfy = D_fuely * Dt / (2 * (delta_y)**2)
        Cfx = -(u_x * Dt) / (2 * delta_x)
        Cfy = -(u_y * Dt) / (4 * delta_y)

        Sbx f = Dfx - Cfx
        Smx f = Dfx + 0*Cfx
        Sby f = Dfy - Cfy
        Smy f = Dfy + Cfy
        #Reaction rate term
        r_ij_fuel = ((Dt)/(2*rho))*K[i,j]*(rho**2/(MW_O2))*Y0[i,j]
        a_fij = 1 + 2 * Dfx + 2 * Dfy - Cfx +r_ij_fuel
        b_fij = 1 - 2 * Dfx - 2 * Dfy + Cfy -r_ij_fuel

        # Fuel injection limits (as part of the mixture)
        i_min = max(1, int(round(Ny / 3)) -1)
        i_max = min(Ny - 2, int(round(2 * Ny / 3))+1 )

        # only on the left boundary:
        if j == 1 and i_min < i < i_max:
            A_f[k, k] = a_fij - Sbx f
            M_f[k, k] = b_fij + Sbx f
        else:
            A_f[k, k] = a_fij
            M_f[k, k] = b_fij

        #Non-Diagonal Terms
        if i != 1:
            A_f[k, (i-2)*(Nx-2) + (j-1)] = -Sby f
            # Lower lone diagonal

```

```

        M_f[k, (i-2)*(Nx-2) + (j-1)] = Sbyf

    if i != Ny-2:                                # Upper lone diagonal
        A_f[k, i*(Nx-2) + (j-1)] = -Smyf
        M_f[k, i*(Nx-2) + (j-1)] = Smyf

    if j != 1:                                    # Lower main diagonal
        A_f[k, k-1] = -Sbxf
        M_f[k, k-1] = Sbxf

    if j != Nx-2:                                # Upper main diagonal
        A_f[k, k+1] = -Smxf
        M_f[k, k+1] = Smxf

# Function to fill matrices for 0_2 transport (A_0 and M_0)
def filling_matrixes_0(A_0, M_0, T, Yf, D_0x, D_0y, u_x):
    for k in range(Ni):
        i = 1 + k // (Nx-2)
        j = 1 + k % (Nx-2)

        #Arrhenius Model
        K[i,j]=Ae*np.exp(-E_a/(R*T[i,j]))
        #Coefficient for the discretized equation (oxidizer equation)
        D0x = D_0x* Dt / (2 * (delta_x)**2)
        D0y = D_0y * Dt / (2 * (delta_y)**2)
        C0x = -(u_x * Dt) / (2 * delta_x)
        C0y = -(u_y * Dt) / (4 * delta_y)

        Sbx0 = D0x - C0x
        Smx0 = D0x + 0*C0x
        Sby0 = D0y - C0y
        Smy0 = D0y + C0y

        # Reaction rate term
        r_ij_0 = ((Dt)/(2*rho))*K[i,j]*S_ratio*(rho**2/(MW_fuel))*Yf[i,j]
        a_0ij = 1 + 2 * D0x + 2 * D0y - C0x +r_ij_0
        b_0ij = 1 - 2 * D0x - 2 * D0y + C0y -r_ij_0

        # Oxidizer injection limits(as part of the mixture)
        i_min = max(1, int(round(Ny / 3)) -1)
        i_max = min(Ny - 2, int(round(2 * Ny / 3))+1 )

        # only on left boundary:
        if j == 1 and i_min < i < i_max:
            A_0[k, k] = a_0ij -Sbx0
            M_0[k, k] = b_0ij +Sbx0

```

```

        #M_f[k, k] = b_fij
    else:
        A_0[k, k] = a_0ij
        M_0[k, k] = b_0ij

    #Non-Diagonal Terms
    if i != 1:                                     # Lower lone diagonal
        A_0[k, (i-2)*(Nx-2) + (j-1)] = -Sby0
        M_0[k, (i-2)*(Nx-2) + (j-1)] = Sby0

    if i != Ny-2:                                   # Upper lone diagonal
        A_0[k, i*(Nx-2) + (j-1)] = -Smy0
        M_0[k, i*(Nx-2) + (j-1)] = Smy0

    if j != 1:                                       # Lower main diagonal
        A_0[k, k-1] = -Sbx0
        M_0[k, k-1] = Sbx0

    if j != Nx-2:                                   # Upper main diagonal
        A_0[k, k+1] = -Smx0
        M_0[k, k+1] = Smx0

```

C4. Composição das matrizes (Campo de velocidade variavel)

```

# =====
# Composição das matrizes (velocidade variavel)
# =====
# Initializing matrices A and M for the Energy equation
A = np.zeros((Ni, Ni))
M = np.zeros((Ni, Ni))

# Function to fill matrices A and M
def filling_matrixes_temperature(v_x,v_y):
    for k in range(Ni):
        i = 1 + k // (Nx-2)
        j = 1 + k % (Nx-2)
        # Diffusion and convection coefficients
        Dx = (Dt * alpha) / (2 * (delta_x)**2)
        Dy = (Dt * 0.4*alpha) / (2 * (delta_y)**2)
        Cxij = -(v_x[i,j] * Dt) / (2 * delta_x)
        Cyij = -(v_y[i,j] * Dt) / (4 * delta_y)

        # Coefficient for the discretized equation
        Sbx = Dx - Cxij
        Smx = Dx + 0*Cxij

```

```

Sby = Dy - Cyij
Smy = Dy + Cyij
a = 1 + 2 * Dx + 2 * Dy - Cxij
b = 1 - 2 * Dx - 2 * Dy + Cxij
#Main diagonal:
if i == 1:                                     # bottom boundary
    if j == 1:                                 #bottom-left boudary
        A[k, k] = a - Sby / Ci - Sbx/Ce
        M[k, k] = b + Sby / Ci + Sbx/Ce
    elif j == Nx - 2:                          # bottom-right boudary
        A[k, k] = a - Sby / Ci - Smx / Cd
        M[k, k] = b + Sby / Ci + Smx / Cd
    else:                                       # other nodes of the bottom boundary
        A[k, k] = a - Sby / Ci
        M[k, k] = b + Sby / Ci

elif i == Ny - 2:                             # upper boundry
    if j == 1:                                 # upper-left corner
        A[k, k] = a - Smy / Cs - Sbx/Ce
        M[k, k] = b + Smy / Cs + Sbx/Ce
    elif j == Nx - 2:                         # upper-right corner
        A[k, k] = a - Smy / Cs - Smx / Cd
        M[k, k] = b + Smy / Cs + Smx / Cd
    else:                                       # other nodes of the upper boundary
        A[k, k] = a - Smy / Cs
        M[k, k] = b + Smy / Cs

elif j == 1 and i!=1 and i!=Ny-2:             # left boundary (except corners)
    i_min = max(1, int(round(Ny / 3))-1)
    i_max = min(Ny - 2, int(round(2 * Ny / 3))+1)
    if i_min < i < i_max:
        A[k, k] = a
        M[k, k] = b
    else:
        A[k, k] = a - Sbx/Ce
        M[k, k] = b + Sbx/Ce
elif j == Nx - 2 and i!=1 and i!=Ny-2:       # right boundary (except corners)
    A[k, k] = a - Smx / Cd
    M[k, k] = b + Smx / Cd

else:                                          # internal nodes
    A[k, k] = a
    M[k, k] = b

#Non-Diagonal Terms
if i != 1:                                    # Lower lone diagonal

```

```

    A[k, (i-2)*(Nx-2) + (j-1)] = -Sby
    M[k, (i-2)*(Nx-2) + (j-1)] = Sby

    if i != Ny-2:                                # Upper lone diagonal
        A[k, i*(Nx-2) + (j-1)] = -Smy
        M[k, i*(Nx-2) + (j-1)] = Smy

    if j != 1:                                    # Lower main diagonal
        A[k, k-1] = -Sbx
        M[k, k-1] = Sbx

    if j != Nx-2:                                # Upper main diagonal
        A[k, k+1] = -Smx
        M[k, k+1] = Smx

# Initializing matrices for F and Oxidizer transport (A_f, A_0, M_f and M_0)

# Function to fill matrices for fuel transport (A_f and M_f)
def filling_matrixes_f(A_f,M_f,T, Y0,v_x,v_y):
    for k in range(Ni):
        i = 1 + k // (Nx-2)
        j = 1 + k % (Nx-2)
        #Arrhenius Model
        K[i,j]=Ae*np.exp(-E_a/(R*T[i,j]))

        #Coefficient for the discretized equation(fuel equation)
        Dfx = D_fuelx* Dt / (2 * (delta_x)**2)
        Dfy = D_fuely * Dt / (2 * (delta_y)**2)
        Cfxij = -(v_x[i,j] * Dt) / (2 * delta_x)
        Cfyij = -(v_y[i,j] * Dt) / (4 * delta_y)

        Sbx = Dfx - Cfxij
        Smx = Dfx + 0*Cfxij
        Sby = Dfy - Cfyij
        Smy = Dfy + Cfyij

        #Coefficients for fuel equation(2)
        #Reaction rate term
        r_ij_fuel = ((Dt)/(2*rho))*K[i,j]*(rho**2/(MW_O2))*Y0[i,j]
        a_fij = 1 + 2 * Dfx + 2 * Dfy - Cfxij +r_ij_fuel
        b_fij = 1 - 2 * Dfx - 2 * Dfy + Cfyij -r_ij_fuel

    # Fuel injection (as part of the mixture)
    i_min = max(1, int(round(Ny / 3)) -1)
    i_max = min(Ny - 2, int(round(2 * Ny / 3))+1 )

```

```

# Only to the left boundary:
if j == 1 and i_min < i < i_max:
    A_f[k, k] = a_fij - Sbxf
    M_f[k, k] = b_fij + Sbxf
else:
    A_f[k, k] = a_fij
    M_f[k, k] = b_fij

#Non-Diagonal Terms
if i != 1:                                     # Lower lone diagonal
    A_f[k, (i-2)*(Nx-2) + (j-1)] = -Sbyf
    M_f[k, (i-2)*(Nx-2) + (j-1)] = Sbyf

if i != Ny-2:                                   # Upper lone diagonal
    A_f[k, i*(Nx-2) + (j-1)] = -Smyf
    M_f[k, i*(Nx-2) + (j-1)] = Smyf

if j != 1:                                       # Lower main diagonal
    A_f[k, k-1] = -Sbxf
    M_f[k, k-1] = Sbxf

if j != Nx-2:                                   # Upper main diagonal
    A_f[k, k+1] = -Smxf
    M_f[k, k+1] = Smxf

# Function to fill matrices for 0_2 transport (A_0 and M_0)
def filling_matrixes_0(A_0,M_0,T, Yf,v_x,v_y):
    for k in range(Ni):
        i = 1 + k // (Nx-2)
        j = 1 + k % (Nx-2)
        #Arrhenius Model
        K[i,j]=Ae*np.exp(-E_a/(R*T[i,j]))

        #Coefficients for the discretized equation(oxidizer equation)
        D0x = D_0x* Dt / (2 * (delta_x)**2)
        D0y = D_0y * Dt / (2 * (delta_y)**2)
        C0xij = -(v_x[i,j] * Dt) / (2 * delta_x)
        C0yij = -(v_y[i,j] * Dt) / (4 * delta_y)

        Sbx0 = D0x - C0xij
        Smx0 = D0x + 0*C0xij
        Sby0 = D0y - C0yij
        Smy0 = D0y + C0yij

        #Reaction rate term
        r_ij_0 = ((Dt)/(2*rho))*K[i,j]*S_ratio*(rho**2/(MW_fuel))*Yf[i,j]

```

```

a_Oij = 1 + 2 * D0x + 2 * D0y - C0xij +r_ij_0
b_Oij = 1 - 2 * D0x - 2 * D0y + C0yij -r_ij_0

# Oxidizer injection (as part of the mixture)
i_min = max(1, int(round(Ny / 3)) -1)
i_max = min(Ny - 2, int(round(2 * Ny / 3))+1 )

# only the left boundary :
if j == 1 and i_min < i < i_max:
    A_0[k, k] = a_Oij -Sbx0
    M_0[k, k] = b_Oij +Sbx0
else:
    A_0[k, k] = a_Oij
    M_0[k, k] = b_Oij

#Non-Diagonal Terms
if i != 1:                                     # Lower lone diagonal
    A_0[k, (i-2)*(Nx-2) + (j-1)] = -Sby0
    M_0[k, (i-2)*(Nx-2) + (j-1)] = Sby0

if i != Ny-2:                                   # Upper lone diagonal
    A_0[k, i*(Nx-2) + (j-1)] = -Smy0
    M_0[k, i*(Nx-2) + (j-1)] = Smy0

if j != 1:                                       # Lower main diagonal
    A_0[k, k-1] = -Sbx0
    M_0[k, k-1] = Sbx0

if j != Nx-2:                                   # Upper main diagonal
    A_0[k, k+1] = -Smx0
    M_0[k, k+1] = Smx0

```

C5. Condições iniciais e de contorno

```

# =====
# Condições iniciais e de contorno (Species and Energy)
# =====
def define_initial_conditions_Yf():
    Yf_initial= np.zeros((Ny, Nx))
    return Yf_initial

def define_initial_conditions_Y0():
    Y0_initial= np.zeros((Ny, Nx))
    return Y0_initial

```

```

def define_initial_conditions_T():
    xign = (Lx/9+2*Lx/9)/2          # center of the
    yign = 0.5*Ly                    # ignition region
    sigma = 0.01
    delta_T = 1200
    T_initial = np.ones((Ny, Nx))*320
    #euler function to modelate the ignition
    T_ignition = delta_T*np.exp(-((x-xign)**2+(y-yign)**2)/(sigma**2))

    return T_initial, T_ignition

def apply_boundries_conditions_Yf(Yf):
    for k in range(Ni):
        i = 1 + k // (Nx-2)
        j = 1 + k % (Nx-2)
        i_min = max(1, int(np.round(Ny / 3)) - 1)
        i_max = min(Ny - 2, int(np.round(2 * Ny / 3)) + 1)
        if j == 1:
            if i_min < i < i_max:    # Fuel injected from the left boundary
                Yf[i, 0] = Yf[i, 1] + delta_x*(mfr_fuel/(v_x[i,j]*rho*Lx))
            else:
                Yf[0:i_min, 0] = Yf[i_max:-1, 0] = 0.0
        else:
            Yf[0,:] = 0.0            # No fuel on the bottom boundary
            Yf[:,-1] = 0.0           # No fuel at the right boundary
            Yf[-1,:] = 0.0           # No fuel at the upper boundary
    return Yf

def stop_injection_Yf(Yf,step): #Fuel injection stopped after ignition
    for k in range(Ni):
        i = 1 + k // (Nx-2)
        j = 1 + k % (Nx-2)
        Yf[i, 0] = 0.0              # injection stopped
        Yf[0,:] = 0.0               # No fuel at the Top side
        Yf[:,-1] = 0.0              # No fuel at the right side
        Yf[-1,:] = 0.0              # No fuel at the Bottom side
    return Yf

def apply_boundries_conditions_YO(YO)
    for k in range(Ni):
        i = 1 + k // (Nx-2)
        j = 1 + k % (Nx-2)
        i_min = max(1, int(np.round(Ny / 3)) - 1)
        i_max = min(Ny - 2, int(np.round(2 * Ny / 3)) + 1)
        if j == 1:
            if i_min < i < i_max:    # Oxidizer injected from the left boundary

```

```

        Y0[i, 0] = Y0[i, 1] + delta_x*(mfr_0/(v_x[i,j]*rho*Lx))
    else:
        Y0[0:i_min, 0] = Y0[i_max:-1, 0] = 0.0
    else:
        Y0[0,:] = 0.0      # No fuel at the Top boundary
        Y0[:,-1] = 0.0     # No fuel at the right boundary
        Y0[-1,:] = 0.0     # No fuel at the Bottom boundary
    return Y0

def stop_injection_Y0(Y0, step):    Oxidizer injection stopped after ignition
    for k in range(Ni):
        i = 1 + k // (Nx-2)
        j = 1 + k % (Nx-2)
        Y0[i, 0] = 0.0      # injection stopped
        Y0[0,:] = 0.0      # No fuel at the upper boundary
        Y0[:,-1] = 0.0     # No fuel at the right boundary
        Y0[-1,:] = 0.0     # No fuel at the Bottom boundary
    return Yf

def apply_boundries_conditions_T(T):
    for k in range(Ni):
        i = 1 + k // (Nx-2)
        j = 1 + k % (Nx-2)
        i_min = max(1, int(np.round(Ny / 3)) - 1)
        i_max = min(Ny - 2, int(np.round(2 * Ny / 3)) + 1)
        if j == 1:
            if i_min < i < i_max:
                T[i,0] = Te    #high temperature of the gas flowing to inside
                               #the chamber
            else:
                T[i,0] = Ke + (1/Ce)*T[i,1]
        else:
            T[0,:] = Ki + (1/Ci)*T[1, :] # Temperature at the bottom boundary
            T[:,-1] = Kd + (1/Cd)*T[i,-2] # Temperature at the Right boundary
            T[-1,:] = Ks + (1/Cs)*T[-2,:] # Temperature at the upper boundary
    return T

```

C6. Termo fonte. Geração de calor

```

# =====
# Modelação do termo fonte (Geração de calor)
# =====
def modelate_source_term_Q(Yf, Y0, Temp):
    #Modeling terms to be added in Q (BCs_Term)
    BCs_Term = np.zeros((Ny, Nx))

```

```

for k in range(Ni):
    i = 1 + k // (Nx - 2)
    j = 1 + k % (Nx - 2)
    # Coefficients of the energy discretized equation
    Dx = (Dt * alpha) / (2 * (delta_x)**2)
    Dy = (Dt * 0.4*alpha) / (2 * (delta_y)**2)
    Cxij = -(v_x[i,j] * Dt) / (2 * delta_x)
    Cyij = -(v_y[i,j] * Dt) / (4 * delta_y)

    Sbx = Dx - Cxij
    Smx = Dx + 0*Cxij
    Sby = Dy - Cyij
    Smy = Dy + Cyij

    if i == 1:
        if j == 1:
            BCs_Term[i, j] = 2*(Sbx*Ke + Sby*Ki)
        elif j == Nx - 2:
            BCs_Term[i, j] = 2*(Sby*Ki + Smx*Kd)
        else:
            BCs_Term[i, j] = 2*Sby*Ki

    elif i == Ny - 2:
        if j == 1:
            BCs_Term[i, j] = 2*(Sbx*Ke + Smy*Ks)
        elif j == Nx - 2:
            BCs_Term[i, j] = 2*(Smx*Kd + Smy*Ks)
        else:
            BCs_Term[i, j] = 2*Smy*Ks

    elif j == 1 and i != 1 and i != Ny - 2:
        i_min = max(1, int(Ny / 3) - 1)
        i_max = min(Ny - 2, int(2 * Ny / 3) + 1)
        if i_min < i < i_max:
            BCs_Term[i, j] = 2*Sbx*Te
        else:
            BCs_Term[i, j] = 2*Sbx*Ke

    elif j == Nx - 2 and i != 1 and i != Ny - 2:
        BCs_Term[i, j] = 2*Smx*Kd

    else: # internal nodes
        BCs_Term[i, j] = 0

Q = np.zeros((Ny, Nx))
for k in range(Ni):

```

```

        i = 1 + k // (Nx - 2)
        j = 1 + k % (Nx - 2)
        q = Dt*Delta_H / (rho*MW_fuel*Cp)
        r_ij_energy = - (q)*(rho**2/(MW_fuel*MW_O2))*Ae*Yf[i,j]*YO[i,j]*(
            np.exp(-E_a / (R * Temp[i, j])))
        Q[i, j] = r_ij_energy + BCs_Term[i,j]
    return BCs_Term, Q

#Source created by the discretization of species equation (Fuel)
BCs_Term_fuel = np.zeros((Ny, Nx))
for k in range(Ni):
    i = 1 + k // (Nx - 2)
    j = 1 + k % (Nx - 2)

    Dfx = D_fuelx* Dt / (2 * (delta_x)**2)
    Cfxij = -(v_x[i,j] * Dt) / (2 * delta_x)
    Sbx f = Dfx - Cfxij

    # Fuel injection Limits
    i_min = max(1, int(np.round(Ny / 3)) - 1)
    i_max = min(Ny - 2, int(np.round(2 * Ny / 3)) + 1)
    # Only for the left boundry and inside the corrected interval:
    if j == 1 and i_min < i < i_max:
        BCs_Term_fuel[i, j] = 2*Sbx f*(delta_x*mfr_fuel/(v_x[i,j]*rho*Lx))
    else:
        BCs_Term_fuel[i, j] = 0

#Source created by the discretization of species equation (Oxidizer)
BCs_Term_0 = np.zeros((Ny, Nx))
for k in range(Ni):
    i = 1 + k // (Nx - 2)
    j = 1 + k % (Nx - 2)

    DOx = D_0x* Dt / (2 * (delta_x)**2)
    COxij = -(v_x[i,j] * Dt) / (2 * delta_x)
    Sbx0 = DOx - COxij

    # Oxidizer injection Limits
    i_min = max(1, int(np.round(Ny / 3)) - 1)
    i_max = min(Ny - 2, int(np.round(2 * Ny / 3)) + 1)

    # Only for the left boundry and inside the corrected interval:
    if j == 1 and i_min < i < i_max:
        BCs_Term_0[i, j] = 2*Sbx0*(delta_x*mfr_0/(v_x[i,j]*rho*Lx))
    else:
        BCs_Term_0[i, j] = 0

```

C7. Resolução Iterativa dos sistemas de EDPs

```

# =====
# Resolução Iterativa dos sistemas de EDPs
# =====
from scipy.sparse import csc_matrix
from scipy.sparse.linalg import spsolve

Yfs = [] # To store the evolution of fuel fraction
YOs = [] # To store the evolution of oxidizer fraction
Ymists = []
Ts = [] # To store the evolution of temperature

# Time-stepping loop
ignition_triggered = False #To ignite the mixture
combustion_started = False #To stop air+fuel injection after ignition

for t in range(0,Nt):
    step = t

    if step == 0:
        # Initialize fuel fraction and temperature matrices
        Yf = define_initial_conditions_Yf()
        YO = define_initial_conditions_YO()
        Ymist= Yf+YO
        Yffraction_reached_in_ignition_region = 0.0
        YOfraction_reached_in_ignition_region = 0.0
        Yffraction_reached_total = 0.0 # avarage fuel fraction inside
                                      the chamber
        YOfraction_reached_total = 0.0 # avarage oxidizer fraction
                                      inside the chamber
        T_initial , T_ignition = define_initial_conditions_T()

        T = T_initial
        filling_matrixes_temperature(v_x,v_y)

        BCs_Term, Q = modelate_source_term_Q(Yf, YO, T)

    else:
        ## Solve: Fuel and oxidizer injection kept or stopped
        if not combustion_started: #INJECTION KEPT
            #1.a Solve  $A_f \cdot Yf[n+1] = M_f \cdot Yf[n]$  for Yf at time n+1
            Yf_n = Yf
            #1.1 converting matrixes into sparse form
            A_f = np.zeros((Ni, Ni))

```

```

M_f = np.zeros((Ni, Ni))
filling_matrixes_f(A_f,M_f,T, Y0, v_x,v_y)
#filling_matrixes_f(T, Y0,v_x,v_y)
A_f_sparse = csc_matrix(A_f)
M_f_sparse = csc_matrix(M_f)
#1.2 convert internal values to vector form
Yfn_vect = Yf[1:-1, 1:-1].reshape(Ni)
BCs_Term_fuel_n_vect = BCs_Term_fuel[1:-1, 1:-1].reshape(Ni)
#1.3 solve
b_f = M_f_sparse @ Yfn_vect + BCs_Term_fuel_n_vect
Yfnext = spsolve(A_f_sparse, b_f)
Yf[1:-1, 1:-1] = Yfnext.reshape(Ny-2, Nx-2)
Yf = apply_boundries_conditions_Yf(Yf)
Yf_n1= Yf

#2.a Solve  $A_0 \cdot Y[n+1] = M_0 \cdot Y[n]$  for Y0 at time n+1
#2.1 converting matrixes into sparse form
Y0_n = Y0
A_0 = np.zeros((Ni, Ni))
M_0 = np.zeros((Ni, Ni))
filling_matrixes_0(A_0,M_0,T, Yf, v_x,v_y)
A_0_sparse = csc_matrix(A_0)
M_0_sparse = csc_matrix(M_0)
#2.2 convert internal values to vector form
Y0n_vect = Y0[1:-1, 1:-1].reshape(Ni)
BCs_Term_0_n_vect = BCs_Term_0[1:-1, 1:-1].reshape(Ni)
#2.3 solve
b_0 = M_0_sparse @ Y0n_vect + BCs_Term_0_n_vect
Y0next = spsolve(A_0_sparse, b_0)
Y0[1:-1, 1:-1] = Y0next.reshape(Ny-2, Nx-2)
Y0 = apply_boundries_conditions_Y0(Y0)
Y0_n1 = Y0

#3.a Temperature
#3.1 Temperature variation due to hot gas injection
a=235.6 #parameter to adjust the gases inlet temperature
Tmixture = T_initial+(800-a)*Yf*np.ones((Ny,Nx))+(800-a)*Y0*
np.ones((Ny,Nx))
T = Tmixture

else: #INJECTION STOPPED
#1b Solve  $A_f \cdot Yf[n+1] = M_f \cdot Yf[n]$  for Yf at time n+1
#1.1 converting matrixes into sparse form
Yf_n = Yf
Yf_n = np.maximum(Yf_n, 0)

```

```

Yf_n = np.minimum(Yf_n, 1)
# filling_matrixes_f(T, Y0, D_fuelx, D_fuely, u_x)
A_f = np.zeros((Ni, Ni))
M_f = np.zeros((Ni, Ni))
filling_matrixes_f(A_f, M_f, T, Y0, v_x, v_y) #convection manually
                                              #decreased until 0 to
                                              #reactants as they are
                                              #consumed

A_f_sparse = csc_matrix(A_f)
M_f_sparse = csc_matrix(M_f)
#1.2 convert internal values to vector form
Yfn_vect = Yf[1:-1, 1:-1].reshape(Ni)
#1.3 solve:
b_f = M_f_sparse @ Yfn_vect
Yfnext = spsolve(A_f_sparse, b_f)
Yf[1:-1, 1:-1] = Yfnext.reshape(Ny-2, Nx-2)
Yf = stop_injection_Yf(Yf, step)
Yf_n1 = Yf

#2b Solve A_0·Y[n+1] = M_0·Y[n] for Y0 at time n+1
#2.1 converting matrixes into sparse form
Y0_n = Y0
Y0_n = np.maximum(Y0_n, 0)
Y0_n = np.minimum(Y0_n, 1)
A_0 = np.zeros((Ni, Ni))
M_0 = np.zeros((Ni, Ni))
filling_matrixes_0(A_0, M_0, T, Yf, v_x, v_y) #convection is manually
                                              #decreased until 0 to
                                              #reactants as they are
                                              #consumed.

A_0_sparse = csc_matrix(A_0)
M_0_sparse = csc_matrix(M_0)
#2.2 convert internal values to vector form
Y0n_vect = Y0[1:-1, 1:-1].reshape(Ni)
#2.3 solve:
b_0 = M_0_sparse @ Y0n_vect
Y0next = spsolve(A_0_sparse, b_0)
Y0[1:-1, 1:-1] = Y0next.reshape(Ny-2, Nx-2)
Y0 = stop_injection_Y0(Y0, step)
Y0 = S_ratio*Y0
Y0_n1 = Y0

Ymist = Yf+Y0
Ymist = np.maximum(Ymist, 0)
Ymist = np.minimum(Ymist, 1)

```

```

#3b Location, Parameters and conditions to start combustion
#3.1 Critical fraction of fuel and oxidizer in the ignition region to
activate the combustion
Yf_critical = 0.062
YO_critical = 0.222
# 3.2 Ignition Region
j_igmin = int(np.round(Nx/9)-1)
j_igmax = int(np.round(2*Nx/9)+1)
i_igmin = int(np.round(4*Ny/9)-2)
i_igmax = int(np.round(5*Ny/9)+2)
ignition_region = (slice(i_igmin, i_igmax), slice(j_igmin, j_igmax))
Yf_in_ignition = Yf[ignition_region]
YO_in_ignition = YO[ignition_region]

# 3.3 Fuel and oxidizer Average fraction in the ignition region and
inside the chamber
Yffraction_reached_in_ignition_region = np.mean(Yf_in_ignition)
YOfraction_reached_in_ignition_region = np.mean(YO_in_ignition)
Yffraction_reached_total = np.mean(Yf) # avarage fuel fraction
inside the chamber
YOfraction_reached_total = np.mean(YO) # avarage oxidizer
fraction inside the chamber

#3.4 conditions to ignite the spark: "combustion_started" defines
when combustion begins.
if t>=2:
    if (Yffraction_reached_in_ignition_region >= Yf_critical and
        YOfraction_reached_in_ignition_region >= YO_critical) or
        combustion_started:
        combustion_started = True
    else:
        combustion_started = False

#4.3 Ignite, Update Q and Solve  $A \cdot T[n+1] = M \cdot T[n] + Q$  for T at time n+1
if combustion_started:
    #4.3.1 Trigger ignition
    if not ignition_triggered:
        #Modeling the spark inition
        T = Tmixture + T_ignition
        ignition_triggered = True
    else:
        #4.3.2 Update the source term Q
        BCs_Term, Q = modelate_source_term_Q(Yf_n, YO_n, T)

        #4.3.3 Updadte T solving energy equation
        # converting matrixes into sparse form

```

```

A_sparse = csc_matrix(A)
M_sparse = csc_matrix(M)
Tn_vect = T[1:-1, 1:-1].reshape(Ni)
Qn_vect = Q[1:-1, 1:-1].reshape(Ni)
#solving
b_T = M_sparse @ Tn_vect + Qn_vect
Tnext = spsolve(A_sparse, b_T)
# convert internal values to vector form
T[1:-1, 1:-1] = Tnext.reshape(Ny-2, Nx-2)
T = apply_boundries_conditions_T(T)

##5 Store values to plotting later
Yfs.append(np.copy(Yf))
Y0s.append(np.copy(Y0))
Ymists.append(np.copy(Ymist))
Ts.append(np.copy(T))

T_mean = np.mean(T)
Yf_mean = Yffraction_reached_total
Y0_mean = Y0fraction_reached_total
Ymist_mean_in_ignition_region = Yffraction_reached_in_ignition_region +
                                Y0fraction_reached_in_ignition_region

T_mean_list.append(T_mean)
Yf_mean_list.append(Yf_mean)
Y0_mean_list.append(Y0_mean)
Ymist_mean_ignition_list.append(Ymist_mean_ignition)

```

C8. Visualização

```

# =====
Visualização
# =====

Import matplotlib as plt
if not combustion_started:
    colorsf = [
        (0.00, '#440154'),
        (0.10, '#472a7a'),
        (0.20, '#3b518b'),
        (0.30, '#2c6e8f'),
        (0.40, '#25858e'),
        (0.50, '#1f9e89'),
        (0.60, '#35b779'),
        (0.70, '#6ece58'),
        (0.80, '#b5de2b'),

```

```

        (0.90, '#fde725'),
        (1.00, '#ffffe5')
    ]
    custom_cmapf = mcolors.LinearSegmentedColormap.from_list("custom_fuel",
    colorsf)

    colorst = [
        (0.0, "#000000"),
        (0.1, "#200000"),
        (0.2, "#400000"),
        (0.3, "#600000"),
        (0.4, "#800000"),
        (0.5, "#990000"),
        (0.6, "#a00000"),
        (0.7, "#b00000"),
        (0.8, "#c00000"),
        (0.9, "#d00000"),
        (1.0, "#e30808")
    ]

    custom_cmapt = mcolors.LinearSegmentedColormap.from_list(
    "custom_temperature", colorst)

    T_min, T_max = 300, 800
    Ymist_min, Ymist_max = 0.0, 1

    dpi = 100
    width_inches =1366/dpi
    height_inches =673/dpi
    plt.figure(figsize=(width_inches,height_inches),dpi=dpi)
    plt.clf()

    plt.subplot(1, 2, 1)
    plt.imshow(T, cmap=custom_cmapt, extent=[0, Lx, 0, Ly], vmin=T_min
    vmax=T_max)
    plt.colorbar(label='Temperatura (K)')
    plt.title('Distribuição de Temperatura')

    plt.subplot(1, 2, 2)
    plt.imshow(Ymist, cmap=custom_cmapf, extent=[0, Lx, 0, Ly],vmin=
    Ymist_min, vmax=Ymist_max)
    plt.colorbar(label='Fracção da mistura')
    plt.title('Distribuição da Mist. Ar-Combustível')

    # Exibir passo de tempo na tela
    #plt.suptitle(f"Passo de tempo: {t}")

```

```

else:
    colorsf = [
        (0.00, '#440154'),
        (0.02, '#472a7a'),
        (0.04, '#3b518b'),
        (0.06, '#2c6e8f'),
        (0.08, '#25858e'),
        (0.10, '#1f9e89'),
        (0.20, '#35b779'),
        (0.40, '#6ece58'),
        (0.60, '#b5de2b'),
        (0.80, '#fde725'),
        (1.00, '#ffffe5')
    ]
    custom_cmapf = mcolors.LinearSegmentedColormap.from_list("custom_fuel",
    colorsf)

    colorst = [
        (0.0, "#000000"),
        (0.1, "#540000"),
        (0.2, "#9f0000"),
        (0.3, "#e90000"),
        (0.4, "#ff3500"),
        (0.5, "#ff7f00"),
        (0.6, "#ffc900"),
        (0.7, "#ffff1f"),
        (0.8, "#ffff8f"),
        (0.9, "#ffffdd"),
        (1.0, "#ffffff")
    ]
    custom_cmapt = mcolors.LinearSegmentedColormap.from_list("custom_fuel",
    colorst)

    # Definir limites fixos para temperatura e fração de combustível
    T_min, T_max = 300, 3000 # Temperatura mínima e máxima (K)
    Ymist_min, Ymist_max = 0.0, 0.8 # Fração de combustível mínima e máxima

    dpi = 100
    width_inches = 1366/dpi
    height_inches = 673/dpi
    plt.figure(figsize=(width_inches,height_inches),dpi=dpi)
    plt.clf()

    plt.subplot(1, 2, 1)

```

```
plt.imshow(T, cmap=custom_cmapt, extent=[0, Lx, 0, Ly], vmin=T_min,
vmax=T_max)
plt.colorbar(label='Temperatura (K)')
plt.title('Distribuição de Temperatura')

plt.subplot(1, 2, 2)
plt.imshow(Ymist, cmap=custom_cmapf, extent=[0, Lx, 0, Ly], vmin=
Ymist_min, vmax=Ymist_max)
plt.colorbar(label='Fracção da mistura')
plt.title('Distribuição da mist. Ar-Combustível')

# Exibir passo de tempo na tela
plt.suptitle(f"Passo de tempo: {step}")
import os
os.makedirs(f"imagens_da_simulacaoVLCTF3rd2",exist_ok=True) plt.savefig(
f"imagens_da_simulacaoVLCTF3rd2/simulation_step_{step:04d
}.png",dpi=150,bbox_inches='tight')
plt.close()
```