



Estudos numéricos em micropropulsão

João Maria Rebelo Cardoso de Macedo e Menezes

Dissertação de Mestrado

Orientadores:

Alexandre Miguel Prior Afonso

Pedro Miguel Rebelo Resende

**Mestrado Integrado em Engenharia Mecânica na Faculdade de Engenharia da
Universidade do Porto**

Julho de 2021, Porto

Resumo

A microcombustão tem sido um tema bastante estudado nos últimos anos devido às suas inúmeras vantagens, como por exemplo, a sua capacidade de fornecer elevada potência e densidade energética através da utilização de combustíveis à base de hidrocarbonetos. A microcombustão é aplicada em diversas áreas, nomeadamente no desenvolvimento da micropropulsão. A maioria das investigações numéricas já realizadas têm utilizado *softwares* comerciais, tais como o ANSYS Fluent® ou outro produto ANSYS, que são realmente *softwares* CFD bastante poderosos, apesar do seu preço extremamente elevado.

Neste trabalho foi utilizada uma ferramenta *solver* implementada no *open-source* OpenFOAM chamada *laminarSMOKE*. Esta ferramenta foi desenvolvida por investigadores do Politecnico di Milano e é aplicada na modelação de escoamentos e chamas laminares multidimensionais. Este *solver* foi devidamente testado para macro, meso e micro combustões e, por isso, foi utilizado nas simulações numéricas presentes neste estudo.

Assim sendo, é utilizado um microcanal ondulado com três cavidades, onde circula uma mistura de ar com hidrogénio. Em primeiro lugar, é imposta a temperatura da parede do queimador através de um perfil hiperbólico de temperatura e, posteriormente, um perfil linear. Nestes casos, a temperatura da parede é responsável pelo aquecimento da mistura e pela sua ignição. Em segundo lugar, é simulado o caso adiabático, onde não existe qualquer troca de calor entre a parede do queimador e a mistura gasosa. Aqui, a ignição da mistura é feita através da inserção de uma faísca no interior do microcanal durante um determinado intervalo de tempo. Em todos os casos é estudado o efeito da variação da velocidade de entrada U (de 4 a 12 m/s) e da razão de equivalência da mistura ϕ (mistura pobre com $\phi=0,7$ e misturas ricas com $\phi=1,1$ e $\phi=1,3$).

Numa primeira fase, ao variar estes dois parâmetros, é analisado o comportamento da chama ao longo do tempo (chamas estáveis ou dinâmicas) e a evolução de algumas propriedades físicas das chamas obtidas, tais como, a temperatura, o calor libertado pela combustão e a concentração mássica de algumas espécies. Posteriormente é utilizado um indicador de propulsão, denominado impulso específico, para analisar a influência da variação de cada parâmetro.

A utilização de um microcanal ondulado origina zonas de recirculação e o aparecimento de vórtices nas cavidades do queimador. Em alguns casos, observa-se o fenómeno de extinção e ignição repetitiva da chama (FREI). Conclui-se, assim, que a geometria do microcanal é responsável pela recirculação da energia proveniente da combustão, o que impede que a chama se extinga por levantamento de chama quando se utiliza velocidades mais elevadas. Além disso, foram construídos mapas de estabilidade com o objetivo de delimitar zonas em função dos diferentes comportamentos da chama. Em relação à capacidade de propulsão, foi concluído que, tanto o aumento da velocidade de entrada, como o aumento da razão de equivalência contribuem para um aumento do indicador de propulsão. Aqui foi demonstrado que o FREI é extremamente importante, uma vez que, as chamas pulsantes apresentam picos bastante elevados de impulso específico.

Abstract

Micro-combustion has been a widely studied topic in recent years due to its many advantages, such as its ability to provide high power and energy density using hydrocarbon-based fuels. Micro-combustion is applied in several areas, notably in the development of micro-propulsion. Most of the numerical research already done has used commercial software, such as ANSYS Fluent® or another ANSYS product, which are quite powerful CFD software, despite their extremely high price.

In this work a solver tool implemented in the open source OpenFOAM called laminarSMOKE was used. This tool was developed by researchers at Politecnico di Milano and is applied to the modeling of multidimensional laminar flows and flames. This solver has been properly tested for macro, meso and micro combustions and has therefore been used in the numerical simulations present in this study.

Therefore, a corrugated microchannel with three cavities is used, where a mixture of air and hydrogen is circulated. First, the burner wall temperature is imposed through a hyperbolic temperature profile and subsequently a linear profile. In these cases, the wall temperature is responsible for heating the mixture and igniting it. Second, the adiabatic case is simulated, where there is no heat exchange between the burner wall and the gas mixture. Here, the ignition of the mixture is done by inserting a spark inside the microchannel during a certain time interval. In all cases, the effect of varying the inlet velocity U (from 4 to 12 m/s) and the mixture equivalence ratio (lean mixtures with $\phi=0.7$ and rich mixtures with $\phi=1.1$ and $\phi=1.3$) is studied.

In a first stage, by varying these two parameters, the flame behavior over time is analyzed (stable or dynamic flames) and the evolution of some physical properties of the flames obtained, such as temperature, heat released by combustion and mass concentration of some species. Subsequently, a propulsion indicator, called specific impulse, is used to analyze the influence of the variation of each parameter.

The use of a corrugated microchannel causes recirculation zones and the appearance of vortices in the burner cavities. In some cases, the phenomenon of repetitive flame extinction and ignition (FREI) is observed in these zones. It is thus concluded that, the microchannel geometry is responsible for the recirculation of heat from combustion, which prevents the flame from being extinguished by flame lifting when using higher velocities. In addition, stability maps were constructed to delineate zones according to different flame behaviors. Regarding propulsion capacity, it was concluded that both increasing the input speed and increasing the equivalence ratio contribute to an increase in the propulsion indicator. Here it was shown that the FREI is extremely important, since, pulsating flames show quite high peaks of specific impulse.

Agradecimentos

Gostava de aproveitar esta ocasião para demonstrar a minha gratidão ao Prof. Alexandre Miguel Prior Afonso e ao Prof. Pedro Miguel Rebelo Resende por me terem dado a oportunidade de participar neste projeto, por partilharem comigo todo o seu conhecimento, por todas as reuniões e esclarecimentos ao longo do semestre e por toda a ajuda prestada no desenvolvimento desta dissertação.

Agradecer ao Dr. Alberto Cuoci e aos seus colegas de trabalho, do *Politecnico di Milano*, por terem desenvolvido a ferramenta *solver laminarSMOKE* para o OpenFOAM, cujo código foi fundamental na execução deste trabalho de investigação.

Agradecer, também, à Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto (FEUP) por me ter concedido acesso a um conjunto de computadores de alta performance (HPC), que me possibilitaram a realização de todas as simulações numéricas pretendidas, dentro do prazo estipulado para este projeto. Além disso, agradecer a esta fantástica Faculdade por tudo que fez por mim durante estes últimos cinco anos.

Agradecer a todos os docentes, professores, colaboradores, funcionários, tutores e colegas de turma que, de alguma forma me ajudaram a desenhar este longo, mas muito enriquecedor, percurso académico.

Um agradecimento especial a todos os meus amigos que partilharam comigo esta experiência maravilhosa. A todos aqueles que estiveram lá para festejar os bons momentos, mas também para me apoiar e dar confiança nos momentos menos bons. Sem eles, nada disto seria possível.

Por último, quero agradecer à minha família, principalmente aos meus pais e à minha irmã, por aquela estabilidade tão importante na vida de qualquer estudante quando chega a casa depois de um dia longo de faculdade. Muito obrigado por estarem sempre lá para me apoiar e obrigado por toda a ajuda que me deram ao longo deste percurso para tomar sempre as melhores decisões pessoais.

Muito obrigado a todos sem exceção.

Índice de Conteúdos

1	Introdução	1
1.1	Enquadramento do projeto e motivação	1
1.2	Objetivos do projeto	2
1.3	Estrutura da dissertação	3
2	Revisão Bibliográfica	5
2.1	Fenómeno de combustão: Conceitos e definições	5
2.1.1	Reações estequiométricas	5
2.1.2	Razão de equivalência	5
2.1.3	Temperatura da chama	6
2.1.4	Velocidade de chama	8
2.1.5	Classificação dos tipos de chama	9
2.1.6	Classificação dos comportamentos de uma micro chama	10
2.2	Fenómeno de propulsão: Conceitos e definições	11
2.2.1	Impulso específico	11
2.2.2	Indicadores de propulsão: EPR e ETR	12
2.3	Estado de arte	13
2.3.1	Investigações em microcombustão	13
2.3.2	Aplicações de microcombustão	18
3	Equações governativas e modelação numérica	23
3.1	Equações governativas	23
3.2	Modelação numérica	25
3.3	Mecanismo cinético	27
3.4	Notas finais	28
4	Descrição do software	29
4.1	Introdução	29
4.2	Estrutura do software	29
4.3	Pré-processamento	31
4.3.1	Geração da malha	31
4.3.2	Condições fronteira	32
4.3.3	Discretização e solução das equações	34
4.3.4	Controlo da simulação	34
4.3.5	Ignição	34
4.4	Simulação	35
4.5	Pós-processamento	35
4.6	Notas finais	36
4.7	Caso analisado neste estudo	36
4.7.1	Geometria do queimador	36
4.7.2	Malha utilizada	37
5	Resultados com perfil de temperatura hiperbólico	39
5.1	Perfil de temperatura imposto	39
5.2	Mapa de estabilidade	40

5.3	Resultados obtidos e discussão	41
5.4	Análise de micropropulsão	52
6	Resultados com perfil de temperatura linear	55
6.1	Perfil de temperatura imposto	55
6.2	Mapa de estabilidade	56
6.3	Resultados obtidos e discussão	57
6.3.1	Regime permanente e chama estável	57
6.3.2	Regime de transição entre a chama estável e o fenómeno de FREI	60
6.3.3	Regime transiente e fenómeno de extinção e ignição FREI	62
6.4	Análise de micropropulsão	71
7	Resultados para o caso adiabático utilizando uma faísca	73
7.1	Regime adiabático e faísca imposta	73
7.2	Mapa de estabilidade	74
7.3	Resultados obtidos e discussão	75
7.3.1	Regime permanente e chama estável	75
7.3.2	Regime transiente e fenómeno de extinção e ignição FREI	78
7.3.3	Retorno de chama	81
7.3.4	Duração da faísca imposta	81
7.4	Análise de micropropulsão	83
8	Conclusão e trabalhos futuros	85
8.1	Conclusão	85
8.2	Trabalho futuros	86
	Referências	89
	ANEXO A: Cinética da reação	95
	ANEXO B: Gráficos relativos à análise temporal das simulações efetuadas	100

Lista de símbolos e acrónimos

1D	Uma dimensão
2D	Duas dimensões
3D	Três dimensões
4G	Quarta geração
a_p	Significado de Planck para o coeficiente de absorção
$a_{p,k}$	coeficiente de extinção da espécie k
ASIC	<i>Application-Specific Integrated Circuit</i>
Bi	Número de <i>Biot</i>
BC	Condição fronteira
$\mathbf{C}(\varphi, t)$	Vetor da taxa de variação de φ devido à convecção
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CMOS	<i>Complementary Metal-Oxide-Semiconductor</i>
CPU	<i>Central Processing Unit</i>
Co	Número de <i>Courant</i>
C_p	Calor específico a pressão constante do fluído
$C_{p,k}$	Calor específico a pressão constante da espécie individual k
$\mathbf{D}(\varphi, t)$	Vetor da taxa de variação de φ devido à difusão
δt	Intervalo de tempo infinitesimal
δx	Dimensão da célula na direção da velocidade
Δt	Intervalo de tempo
D_k	Coeficiente de difusão ponderado da espécie k
ε	Emissividade do material
CD	Completamente desenvolvido
FREI	<i>Flame with Repetitive Extinction and Ignition</i>
$\mathbf{g}$	Vetor da aceleração gravítica
h	Coeficiente de convecção
H	Altura do queimador
HCCI	<i>Homogenous Charge Compression Ignition</i>
HPC	<i>High Performance Computing</i>
HRR	<i>Heat Recirculation Reactor</i>
h_k	Entalpia da espécie k
λ_f	Condutividade térmica do fluído
λ_s	Condutividade térmica do sólido
MEMS	<i>Micro-Electro-Mechanical System</i>

MIT	Massachusetts Institute of Technology
MOL	Método das linhas
ODE	Equação diferencial ordinária
w_i	Fração mássica da espécie i
Ω_k	Taxa de formação da espécie k
p	Pressão
ϕ	Razão de equivalência do combustível
Φ	Vetor das frações mássicas e da temperatura
p_k	Pressão parcial da espécie k
$\mathbf{q}$	Vetor do fluxo de calor
$\mathbf{q}_{\text{rad}}$	Fluxo de calor devido à radiação
$\mathbf{R}(\varphi, t)$	Vetor da taxa de variação de φ devido à radiação
ρ	Massa volúmica do fluido
ρ_s	Massa volúmica do sólido
RPM	Rotações por minuto
Re	Número de Reynolds
σ	Constante de Stefan-Boltzmann
τ	Torsor da tensão do fluido
T	Temperatura
t	Tempo
T_{ac}	Temperatura adiabática da chama
T_{amb}	Temperatura ambiente
T_c	Temperatura de chama
T_{parede}	Temperatura da parede
$\Gamma_{i,j}$	Coefficientes de difusão binários
TPV	Termofotovoltaico
U	Magnitude da velocidade
u	Componente axial da velocidade do fluxo
$\mathbf{v}$	Vetor de velocidade
v	Componente normal da velocidade do fluxo
V_c	Fator de correção constante
V_k	Velocidade de difusão da espécie k
V_c^k	Velocidade de difusão corrigida
x_i	Fração molar da espécie i

Índice de Figuras

Figura 1 – Relação entre a temperatura adiabática de chama, T_{ac} , e a razão de equivalência, ϕ , para diversos combustíveis [20].	8
Figura 2 – Evolução de uma chama desde uma condição de difusão total (1) até uma condição de pré-mistura (4) [17].	9
Figura 3 – Micro chama em regime estável [24].	10
Figura 4 – Exemplo da inserção de um degrau voltado para trás num micro queimador [44].	14
Figura 5 – Esquema do queimador, em mm, utilizado por Yang et al [48].	15
Figura 6 – Esquema do micro queimador com cavidade: (a) plano longitudinal, (b) plano transversal [51].	16
Figura 7 – Queimador inventado por Masel e Shannon [57].	17
Figura 8 – Esquema do queimador anelar [59].	18
Figura 9 – Esquerda: micromotores de turbina a gás desenvolvidos pelo MIT; Direita: rotor da turbina a gás desenvolvida por Tanaka e Esashi [64].	19
Figura 10 – Motor rotativo de meso escala (à esquerda) e o micromotor rotativo (à direita), ambos desenvolvidos na UCB [2].	19
Figura 11 – Motor de meso escala de pistão livre usando HCCI. Em cima: fotografia da montagem do cilindro e do pistão; Em baixo: esquema da montagem para o teste de um único disparo [64].	20
Figura 12 – Esquemas de queimadores com recirculação de calor desenvolvidos no laboratório de combustão da USC [73]: (a): conceito da recirculação de calor num canal em forma de U; (b): queimador “ <i>Swiss roll</i> ” bidimensional; (c) e (d): queimadores toroidais de macro e meso escala, respetivamente. [2].	21
Figura 13 – O micropropulsor “ <i>rocket chip</i> ” [76].	22
Figura 14 – Micro bipropulsor desenvolvido no MIT [78].	22
Figura 15 – Algoritmo numérico adotado no <i>software laminarSMOKE</i> [79].	27
Figura 16 – Estrutura do ficheiro em causa [85].	30
Figura 17 – Exemplo de um bloco da malha [85].	31
Figura 18 – Exemplos da aplicação da ferramenta <i>snappyHexMesh</i> : A – construção da malha de fundo; B – divisão de algumas células da malha com o objetivo de refinar certas zonas; C – ajuste da malha à geometria pretendida; D – inserção de camadas limite em zonas específicas [85].	32
Figura 19 – Exemplo da aplicação dos diferentes tipos de condições fronteira.	33
Figura 20 – Esquema do domínio computacional simulado.	36
Figura 21 – Resolução da malha.	37
Figura 22 – Perfil hiperbólico de temperatura utilizado ao longo da parede do queimador. ...	39
Figura 23 - Mapa de estabilidade das várias simulações efetuadas utilizando um perfil hiperbólico de temperatura ao longo da parede do queimador.	41
Figura 24 – Mapas de contorno da quantidade de calor libertado Q , em W/mm, para cada simulação.	42

Figura 25 – Gráfico referente aos valores máximos de calor libertado em cada simulação. ...	43
Figura 26 – Mapas de contorno da temperatura T, em Kelvin, para todas as simulações.....	44
Figura 27 – Gráfico referente aos valores máximos de temperatura em cada simulação.	45
Figura 28 – Mapas de contorno das concentrações de OH, em fração mássica, para cada simulação.	46
Figura 29 – Gráfico referente aos valores máximos da concentração de OH, em fração mássica, em cada simulação.....	47
Figura 30 – Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para as simulações com $\phi=0,7$	48
Figura 31 - Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para as simulações com $\phi=1,1$	48
Figura 32 - Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para as simulações com $\phi=1,3$	49
Figura 33 - Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, agrupados pela velocidade de entrada utilizada.....	50
Figura 34 – Gráfico referente à taxa de calor total de cada simulação.....	51
Figura 35 – Gráficos referentes ao estudo das concentrações mássicas de 5 espécies diferentes (O_2 , H_2O , H_2 , OH e N_2) ao longo do eixo central do queimador: (à esquerda) gráfico relativo à simulação HIP_02; (à direita) gráfico relativo à simulação HIP_10.....	51
Figura 36 – Gráfico dos valores de impulso específico de cada simulação com perfil hiperbólico, em função da velocidade de entrada.....	53
Figura 37 - Gráfico dos valores de impulso específico de cada simulação com perfil hiperbólico, em função da razão de equivalência.	53
Figura 38 - Perfil linear de temperatura utilizado ao longo da parede do queimador.	55
Figura 39 - Mapa de estabilidade das várias simulações efetuadas utilizando um perfil linear de temperatura ao longo da parede do queimador.....	57
Figura 40 – Mapas de contorno da quantidade de calor libertado Q, em W/mm, das simulações LIN_07 ($U=4$ m/s e $\phi=1,1$) (em cima) e LIN_12 ($U=4$ m/s e $\phi=1,3$) (em baixo).	58
Figura 41 - Mapas de contorno da temperatura T, em Kelvin, das simulações LIN_07 (em cima) e LIN_12 (em baixo).	58
Figura 42 - Mapas de contorno da concentração mássica de OH, em fração mássica, das simulações LIN_07 (em cima) e LIN_12 (em baixo).	58
Figura 43 – Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para simulação LIN_07 (a azul) e HIP_05 (a verde) (ambas com $U=4$ m/s e $\phi=1,1$).	59
Figura 44 - Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para simulação LIN_12 (a azul) e HIP_09 (a verde) (ambas com $U=4$ m/s e $\phi=1,3$).	59
Figura 45 – Gráfico da evolução da temperatura máxima e do calor máximo libertado ao longo do tempo referente à simulação LIN_02 ($U=4$ m/s e $\phi=0,7$).	60
Figura 46 – Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para simulação LIN_02 (a azul) e HIP_01 (a verde) (ambas com $U=4$ m/s e $\phi=0,7$).	61

Figura 47 – Mapa de contorno do calor libertado, em W/mm, da simulação LIN_02 ($U=4$ m/s e $\phi=0,7$).....	61
Figura 48 - Mapa de contorno da temperatura, em Kelvin, da simulação LIN_02 ($U=4$ m/s e $\phi=0,7$).	62
Figura 49 - Mapa de contorno da concentração de OH, em fração mássica, da simulação LIN_02 ($U=4$ m/s e $\phi=0,7$).	62
Figura 50 – Gráficos da evolução da temperatura máxima (linha contínua preta) e do calor máximo libertado (linha a tracejado vermelha) ao longo do tempo para as simulações onde se verifica o fenómeno FREI.	63
Figura 51 – Gráficos referentes à amplitude dos valores de temperatura máxima e calor máximo libertado em cada simulação.....	64
Figura 52 – Gráfico referente à frequência dos sinais de temperatura e calor de cada simulação.	65
Figura 53 – Mapas de contorno do calor libertado (à esquerda) e da temperatura em Kelvin (à direita), composto por 7 <i>frames</i> , do fenómeno de FREI da simulação LIN_10 ($U=8$ m/s, $\phi=1,1$), com intervalos de 10 ms.	66
Figura 54 – Mapas do calor libertado e das frações mássicas de H_2 no momento do fenómeno FREI, referentes às simulações LIN_04 ($U=6$ m/s, $\phi=0,7$), LIN_05 ($U=8$ m/s, $\phi=0,7$) e LIN_06 ($U=12$ m/s, $\phi=0,7$).	68
Figura 55 - Mapas do calor libertado e das frações mássicas de H_2 no momento do fenómeno FREI, referentes às simulações LIN_09 ($U=6$ m/s, $\phi=1,1$), LIN_10 ($U=8$ m/s, $\phi=1,1$) e LIN_11 ($U=12$ m/s, $\phi=1,1$).	69
Figura 56 - Mapas do calor libertado e das frações mássicas de H_2 no momento do fenómeno FREI, referentes às simulações LIN_14 ($U=6$ m/s, $\phi=1,3$), LIN_15 ($U=8$ m/s, $\phi=1,3$) e LIN_16 ($U=12$ m/s, $\phi=1,3$).	70
Figura 57 – Gráfico de barras referente ao valor médio e máximo do impulso específico para todas as simulações com perfil linear onde se verificou um comportamento dinâmico.	71
Figura 58 - Gráfico dos valores de impulso específico de cada simulação com perfil linear, em função da velocidade de entrada.....	72
Figura 59 - Gráfico dos valores de impulso específico de cada simulação com perfil linear, em função da razão de equivalência.....	72
Figura 60 – Esquema gráfico da faísca imposta dentro do microcanal (temperatura em Kelvin).	73
Figura 61 – Função <i>Spark</i> imposta.	73
Figura 62 - Mapa de estabilidade das várias simulações efetuadas com o microcanal em regime adiabático.....	75
Figura 63 – Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para simulação ADI_01 (a vermelho), LIN_02 (a azul) e HIP_01 (a verde) (todas com $\phi=0,7$ e $U=4$ m/s).	76
Figura 64 – Mapas de contorno do calor libertado, temperatura em K e fração mássica de OH, referentes à simulação ADI_01 ($\phi=0,7$ e $U=4$ m/s).....	76
Figura 65 - Gráficos da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para as simulações estáveis: à esquerda ADI_08 ($\phi=1,1$ e $U=8$ m/s)	

e ADI_09 ($\phi=1,1$ e $U=10$ m/s), à direita ADI_13 ($\phi=1,3$ e $U=8$ m/s) e ADI_14 ($\phi=1,3$ e $U=10$ m/s).	77
Figura 66 – Mapas de contorno de três propriedades, calor libertado, temperatura em K e fração mássica de OH, das quatro simulações estáveis ADI_08 ($\phi=1,1$ e $U=8$ m/s), ADI_09 ($\phi=1,1$ e $U=10$ m/s), ADI_13($\phi=1,3$ e $U=8$ m/s) e ADI_14 ($\phi=1,3$ e $U=10$ m/s).	78
Figura 67 – Gráfico da temperatura adiabática de chama de cada simulação.	79
Figura 68 – Gráficos da evolução temporal do calor máximo libertado das simulações onde se verificou o fenómeno FREI.	80
Figura 69 – Gráfico referente às amplitudes dos valores de calor máximo libertado no fenómeno FREI para quatro simulações lineares e adiabáticas.	81
Figura 70 – Funções <i>spark</i> utilizadas nos dois casos.	81
Figura 71 – Mapas de contorno do calor libertado (à esquerda) e da temperatura em K (à direita), compostos por 6 imagens com intervalos de 200 ms, relativos à simulação ADI_06 ($U=4$ m/s e $\phi=1,1$) com duração de faísca de 0,8 ms.	82
Figura 72 – Mapas de contorno do calor libertado (à esquerda) e da temperatura em K (à direita), relativos à simulação ADI_06 ($U=4$ m/s e $\phi=1,1$) com duração de faísca de 0,5 ms.	82
Figura 73 - Gráfico de barras referente ao valor médio e máximo do impulso específico para todas as simulações em regime adiabático onde se verificou um comportamento instável.	83
Figura 74 - Gráfico dos valores de impulso específico de cada simulação em regime adiabático, em função da velocidade de entrada.	84
Figura 75 - Gráfico dos valores de impulso específico de cada simulação em regime adiabático, em função da razão de equivalência.	84
 Figura B.1 – Evolução temporal de quatro parâmetros distintos (calor libertado, fração mássica de H ₂ , velocidade e fração mássica de OH) num ponto localizado no eixo central do microcanal e a 4,5 mm da secção de entrada. Gráficos referentes às simulações LIN_04, LIN_05 e LIN_06.	100
Figura B.2 - Evolução temporal de quatro parâmetros distintos (calor libertado, fração mássica de H ₂ , velocidade e fração mássica de OH) num ponto localizado no eixo central do microcanal e a 4,5 mm da secção de entrada. Gráficos referentes às simulações LIN_09, LIN_10 e LIN_11.	101
Figura B.3 - Evolução temporal de quatro parâmetros distintos (calor libertado, fração mássica de H ₂ , velocidade e fração mássica de OH) num ponto localizado no eixo central do microcanal e a 4,5 mm da secção de entrada. Gráficos referentes às simulações LIN_14, LIN_15 e LIN_16.	102
Figura B.4 - Evolução temporal de quatro parâmetros distintos (calor libertado, fração mássica de H ₂ , velocidade e fração mássica de OH) num ponto localizado no eixo central do microcanal e a 4,5 mm da secção de entrada. Gráficos referentes às simulações ADI_03, ADI_04 e ADI_05.	103
Figura B.5 - Evolução temporal de quatro parâmetros distintos (calor libertado, fração mássica de H ₂ , velocidade e fração mássica de OH) num ponto localizado no eixo central do microcanal e a 4,5 mm da secção de entrada. Gráficos referentes à simulação ADI_10.	104
Figura B.6 - Evolução temporal de quatro parâmetros distintos (calor libertado, fração mássica de H ₂ , velocidade e fração mássica de OH) num ponto localizado no eixo central do microcanal e a 4,5 mm da secção de entrada. Gráficos referentes à simulação ADI_15.	104

Índice de Tabelas

Tabela 1 – Temperaturas de auto-inflamação de vários combustíveis [17]	6
Tabela 2 – Limites de inflamabilidade [17].....	7
Tabela 3 – Algumas propriedades de reagentes comuns de uma reação de combustão. As temperaturas de chama referem-se a misturas estequiométricas [21]	8
Tabela 4 - Conjunto de simulações efetuadas utilizando um perfil hiperbólico de temperatura ao longo da parede do queimador.....	40
Tabela 5 - Conjunto de simulações efetuadas utilizando um perfil linear de temperatura ao longo da parede do queimador.....	56
Tabela 6 - Conjunto de simulações efetuadas em regime adiabático	74

1 Introdução

1.1 Enquadramento do projeto e motivação

Nos últimos anos tem-se assistido a uma enorme evolução tecnológica no desenvolvimento de micro e nano dispositivos, ou seja, a evolução está a ser feita no sentido da minimização da mecânica convencional, como é o caso da crescente utilização de *microchips*, sensores e atuadores de pequena escala, *drones*, microsatélites, entre outros. Estes dispositivos, tal como os já existentes hoje em dia, requerem uma fonte energética capaz de fornecer a energia necessária à sua função intrínseca. Posto isto, paralelamente à minimização das várias áreas da indústria, também se verifica o crescimento da procura de fontes energéticas eficientes capazes de fornecer a potência necessária a mecanismos cada vez mais pequenos e compactos [1-3].

Recentemente, com o avanço da microtecnologia, têm sido fabricados vários dispositivos compostos por MEMS (*Micro-Electro-Mechanical Systems*), demonstrando assim o esforço feito na integração de micro sistemas eletrónicos e mecânicos num único *chip*. Infelizmente, os MEMS atuais dependem fortemente de uma fonte externa de energia. Deste modo, a disponibilidade de micro geradores de potência eficientes irá melhorar significativamente a funcionalidade dos MEMS para diversos dispositivos portáteis.

Com o aumento da utilização de microdispositivos eletrónicos e a utilização de MEMS, os microsatélites estão a tornar-se populares e desejáveis em todo o mundo. Minimizar o tamanho e peso do satélite, bem como dos seus acessórios, tem atraído a atenção da comunidade aeroespacial. Os sistemas de micropropulsão são propostos com o objetivo de fornecer o impulso necessário ao controlo de manobras e transferência de órbita e podem ser de diversos tipos: gás frio ou quente, propulsor sólido ou líquido e sistemas de propulsão iónica ou eletrónica. O impulso necessário para conseguir controlar manobras de um microsatélite está na ordem dos mili-Newton [4]. O impulso fornecido pelos propulsores já existentes é ainda demasiado forte para poder manobrar um satélite desta escala e, por esta razão, o tema da micropropulsão tem sido alvo de inúmeros estudos. Quando se fala em micropropulsão é inevitável falar do tema da microcombustão.

Apesar do interesse da investigação da micro combustão derivar, principalmente, da necessidade crescente de micro sistemas de geração de energia para MEMS e dispositivos portáteis, a sua aplicação em sistemas de micro propulsão com o objetivo de criar uma força de impulsão devido à velocidade dos gases à saída do reator, tem proporcionado um aumento do interesse por parte da comunidade envolvida [5, 6].

Visto que a microcombustão está diretamente ligada ao estudo da micropropulsão, é importante fazer uma análise em relação a este tema. A redução do tamanho da câmara de combustão para a escala milimétrica (ou inferior) aumenta significativamente o rácio superfície-volume do queimador, o que faz aumentar as perdas de calor para o exterior. Este fator dificulta o controlo da chama e a estabilização da temperatura dentro da câmara de combustão. Devido à pequena dimensão do queimador, as taxas temporais inerentes a um processo de combustão tornam-se instáveis, o que pode levar à extinção da chama. Este fenómeno já foi intensivamente estudado apesar de não ter sido encontrada uma solução viável e aceite por toda a comunidade. Diversas soluções foram apresentadas ao longo dos últimos anos, como por exemplo, a utilização de múltiplos tubos de quartzo, por Cooley et al [7], o queimador “*Swiss roll*” com recirculação de calor, por Ronney [8] e Sitzki et al [9], e o uso de catalisadores no processo de combustão para diminuir a barreira da energia de ativação e aumentar a intensidade da reação, por Vesper [10], Vican et al [11], Chao et al [12] e Norton et al [13].

1.2 Objetivos do projeto

A utilização da micropropulsão está a ganhar cada vez mais importância na comunidade científica devido à crescente procura de dispositivos cada vez mais pequenos, ou seja, ao progressivo estudo de fenómenos a uma escala na ordem dos micrómetros. Contudo, a micropropulsão utilizando microcanais com escoamento de gases reativos está, como anteriormente referido, diretamente ligada ao fenómeno de microcombustão. Atualmente, este fenómeno ainda apresenta diversas limitações práticas, nomeadamente, a nível de design e eficiência térmica, e é essa a razão pela qual têm sido efetuados inúmeros estudos em relação a este tema tão promissor, tanto a nível energético como a nível de aceleração de gases. A maior parte dos investigadores têm vindo a utilizar o ANSYS Fluent® ou outro produto ANSYS que, de facto, são *softwares* CFD bastante poderosos. Contudo, uma licença anual deste *software* pode custar milhares de euros, tornando-o pouco acessível à maior parte da comunidade científica.

Como alternativa, um grupo de investigadores do Politecnico di Milano desenvolveu uma aplicação para o *open-source* OpenFOAM chamada *laminarSMOKE*, que consiste num *solver* capaz de modelar chamas laminares multidimensionais, para escoamentos estáveis ou instáveis, com ou sem malhas estruturadas. Esta aplicação foi disponibilizada, gratuitamente, como código aberto para toda a comunidade. Dado que, em 2016, Cova [14] validou a utilização deste código no estudo de chamas difusivas e de pré-mistura, utilizando hidrogénio e metano como combustíveis, este *solver* foi a ferramenta utilizada em todas as simulações numéricas presentes nesta tese.

Deste modo, dado que não foi necessário validar o código utilizado, a presente dissertação foca-se na análise de casos práticos utilizando sempre uma mistura de hidrogénio e ar. Em primeiro lugar, são feitos vários conjuntos de simulações numéricas utilizando um microcanal ondulado, aquecido através de um perfil de temperatura na parede exterior. É utilizado um perfil hiperbólico e, posteriormente, um perfil linear, variando sempre dois parâmetros fundamentais no fenómeno de combustão: a velocidade de entrada dos gases, U , e a razão de equivalência do combustível, ϕ . O grande objetivo desta primeira análise é perceber a influência da variação destes dois parâmetros, utilizando os dois perfis de temperaturas, tanto na dinâmica geral da chama, como no valores máximos de temperatura, energia térmica e algumas espécies importantes tais como o hidrogénio (H_2) e o hidróxido (OH) formado durante o processo de combustão. Além disso, é possível observar comportamentos de chama completamente distintos. Em segundo lugar, foi imposta uma condição de canal adiabático, ou seja, gradiente de temperatura igual a zero ao longo de toda a parede do queimador, impossibilitando a troca de calor entre a parede e a mistura, variando os mesmos parâmetros que no caso anterior. Neste caso, a ignição surge devido à presença de uma faísca no centro do microcanal. Ao utilizar esta condição adiabática, o objetivo é perceber a influência da fonte de calor no fenómeno de combustão e verificar a dinâmica da chama quando não existe qualquer fluxo de calor proveniente do exterior, visto que a faísca imposta se extingue após o início da reação química. Por último, e talvez a grande conclusão desta dissertação, é utilizado um parâmetro capaz de qualificar a capacidade de propulsão de cada escoamento simulado.

Em suma, o objetivo desta tese é estudar o efeito da variação de dois parâmetros (U e ϕ) em diferentes condições físicas, utilizando um microcanal ondulado e o hidrogénio como combustível, com possível aplicação num dispositivo de micropropulsão.

1.3 Estrutura da dissertação

Esta tese é dividida em oito capítulos e dois anexos.

No capítulo 2 é apresentada a revisão bibliográfica sobre o tema da microcombustão e da micropropulsão. São enumerados os principais conceitos e definições destes dois temas e, no final do capítulo é descrito o estado de arte constituído pelas investigações já efetuadas e as diversas aplicações.

No capítulo 3 estão descritas as equações governativas do fenómeno da microcombustão, bem como uma breve explicação da modelação numérica adotada para a resolução das mesmas.

No capítulo 4 é explicado todo o *software* utilizado, desde a parte de pré-processamento do caso em estudo até à etapa de pós-processamento dos resultados obtidos, explicando também como foram realizadas as diversas simulações.

No capítulo 5 estão presentes os resultados obtidos provenientes do caso de estudo com a implementação de um perfil hiperbólico de temperatura na parede do queimador, bem como a análise dos diversos parâmetros inerentes às chamas obtidas através da simulação numérica. Além disso, é explicado o procedimento que foi adotado na caracterização da capacidade de propulsão dos diversos escoamentos.

No capítulo 6 estão presentes os resultados obtidos provenientes do caso de estudo com a implementação de um perfil linear de temperatura na parede do queimador, bem como a análise dos diversos parâmetros inerentes às chamas obtidas. Tal como no capítulo anterior, é realizada a mesma análise relativamente à capacidade de propulsão das chamas.

No capítulo 7 estão presentes os resultados obtidos provenientes do caso de estudo com a implementação de um regime adiabático, ou seja, impedindo qualquer troca de calor através da parede do queimador, bem como a análise dos diversos parâmetros inerentes às chamas obtidas. Mais uma vez, é realizada uma análise com o objetivo de quantificar a capacidade de propulsão de cada escoamento, repetindo o procedimento adotado nos capítulos anteriores.

No capítulo 8 são apresentadas as principais conclusões retiradas deste estudo, bem como o trabalho futuro que poderá ser realizado, no âmbito de aprofundar o conhecimento em relação a este tema.

2 Revisão Bibliográfica

2.1 Fenómeno de combustão: Conceitos e definições

Neste capítulo serão apresentados os conceitos principais relativos ao fenómeno de combustão, baseados em [14-18], de modo a perceber melhor todos os resultados obtidos neste trabalho.

2.1.1 Reações estequiométricas

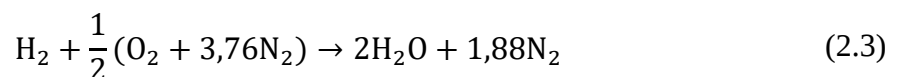
O processo de combustão acontece quando existe uma reação química entre um combustível e uma espécie oxidante, sob condições adequadas. Na maioria dos casos, o ar é utilizado como agente oxidante, sendo constituído por 21% de oxigénio (O_2) e 79% de nitrogénio (N_2) em concentrações molares:

$$Ar = 0,21O_2 + 0,79N_2 \quad (2.1)$$

ou

$$4,76Ar = O_2 + 3,76N_2 \quad (2.2)$$

A quantidade relativa de combustível e oxidante tem um papel fundamental na eficiência do processo de combustão. Para descrever este processo é crucial saber qual a reação química que caracteriza este fenómeno, a qual indica como os reagentes reagem entre si, resultando nos produtos da combustão. Deste modo, uma vez que neste estudo só serão abordados fenómenos de combustão de misturas previamente misturadas e que apenas é utilizado um tipo de combustível, o H_2 , é apresentada de seguida a reação química global relativa a interação entre o H_2 e o oxigénio presente no ar:



De salientar que o N_2 é um agente que não participa na reação química, atuando como um gás inerte. Assim, a reação anterior representa a interação entre o H_2 e o ar $\frac{1}{2}(O_2 + 3,76N_2)$, originando um único produto, H_2O .

A reação química é apresentada na forma estequiométrica, ou seja, é assumido que os reagentes são completamente consumidos através do processo químico. No entanto, sabe-se que na prática é impossível obter a combustão total dos reagentes, a não ser que a quantidade de oxidante seja maior do que a quantidade teórica necessária.

2.1.2 Razão de equivalência

A razão de equivalência do combustível, também conhecida como riqueza, é um valor adimensional que indica o desvio da mistura utilizada em relação à mistura estequiométrica. Esta razão compara as concentrações mássicas de combustível e ar da reação química real e da reação química estequiométrica.

$$\phi = \frac{\left(\frac{C}{A}\right)}{\left(\frac{C}{A}\right)_e} \quad (2.4)$$

Na equação (2.4), C/A é o rácio combustível/ar e representa o rácio da massa do combustível em relação à massa do ar. O subscrito e é referente à reação estequiométrica. A razão de equivalência define a categoria da reação de combustão. Esta pode ser rica, se $\phi > 1$, estequiométrica, se $\phi = 1$ e pobre, se $\phi < 1$.

2.1.3 Temperatura da chama

A temperatura mínima a partir da qual a reação de oxidação embala, iniciando-se a combustão viva, é chamada temperatura de auto-inflamação. Esta propriedade depende da natureza e composição da mistura explosiva. O conhecimento da temperatura de auto-inflamação é de extrema importância no domínio da segurança durante a manipulação de combustíveis. Muitos deles são relativamente voláteis e podem rapidamente formar misturas explosivas com o ar. Na Tabela 1 é apresentada esta propriedade para diversos combustíveis. Como neste trabalho é utilizado somente o H_2 como combustível, devem-se salientar as propriedades referentes a este componente na presença de oxigénio puro e ar.

Tabela 1 – Temperaturas de auto-inflamação de vários combustíveis [17]

Combustível		Temperatura de auto-inflamação [$^{\circ}C$]	
		Com oxigénio puro	Com ar
Hidrogénio	H_2	560	570
Amoníaco	NH_3	---	650
Monóxido de carbono	CO	590	630
Metano	CH_4	555	580
Propano	C_3H_8	470	480
Etileno	C_2H_4	485	520
Acetileno	C_2H_2	295	320
n-Hexano	C_6H_{14}	---	260
n-Heptano	C_7H_{16}	---	235
n-Octano	C_8H_{18}	---	220
Iso-Octano	C_8H_{18}	---	670
Benzeno	C_6H_6	---	620

Para se efetuar a ignição de uma mistura é necessária uma quantidade mínima de energia chamada energia mínima de ignição, a qual depende da composição química da mistura. Além disso, para que se verifique a propagação da chama, as misturas têm que estar compreendidas entre dois limites de composição, limite inferior e limite superior de inflamabilidade. Estes limites são apresentados na Tabela 2, para diversas combinações de reagentes (combustível e comburente).

Tabela 2 – Limites de inflamabilidade [17]

Combustível		Comburente (% de volume)			
		Ar		Oxigênio	
		Limite inferior	Limite superior	Limite inferior	Limite superior
Hidrogênio	H₂	4	74,5	4	94
Metano	CH ₄	5	15	5	60
Propano	C ₃ H ₈	2,25	9,4	2,25	45
Álcool etílico	C ₂ H ₅ OH	3,3	19	---	---
Éter etílico	(C ₂ H ₅) ₂ O	1,8	36,5	2,1	82
Cloreto de metilo	CH ₂ Cl ₂	---	---	15,5	66
Amoníaco	NH ₃	15	27	14	79

Além da temperatura de auto-inflamação da mistura e dos seus limites de concentração de reagentes, é também extremamente importante um fator denominado temperatura de chama adiabática, T_{ac} . Esta temperatura é determinada pelo balanço energético entre os reagentes e os produtos em equilíbrio. Caso a zona de reação seja muito pequena comparada com o resto do domínio, então é comum assumir que a máxima temperatura na zona de reação é a temperatura de chama, T_c . Se a combustão tem lugar num queimador adiabático, como veremos no Capítulo 7, então a temperatura de chama é referida como sendo a temperatura de chama adiabática, T_{ac} . Este fator consiste na temperatura máxima que é possível atingir num determinado processo de combustão com um determinado combustível, visto que qualquer fluxo de calor para o exterior ou qualquer combustão incompleta irá diminuir a temperatura da reação. Em muitos casos obtêm-se resultados mais precisos através de cálculos teóricos do que a nível experimental. Para muitos hidrocarbonetos, a temperatura máxima da chama verifica-se quando são utilizadas razões de equivalência ligeiramente superiores a 1 ($\phi \approx 1,05$), devido ao efeito de dissociação [19, 20]. Na Tabela 3 estão os valores de T_{ac} para diversas combinações de reagentes e na Figura 1 está ilustrado o gráfico que traduz a relação entre a T_{ac} e a razão de equivalência para diversos combustíveis.

Tabela 3 – Algumas propriedades de reagentes comuns de uma reação de combustão. As temperaturas de chama referem-se a misturas estequiométricas [21]

Reagentes	Temperatura de chama adiabática (K)	Velocidade máxima de queima (m/s)
H_2+O_2	3083	11,0
$CO+O_2(+H_2O)$	2973	1,08
CH_4+O_2	3010	4,5
$C_2H_2+O_2$	3431	11,4
H_2+ar	2380	3,1
$CO+ar$	2400	0,45
CH_4+ar	2222	0,45
C_2H_2+ar	2513	1,58

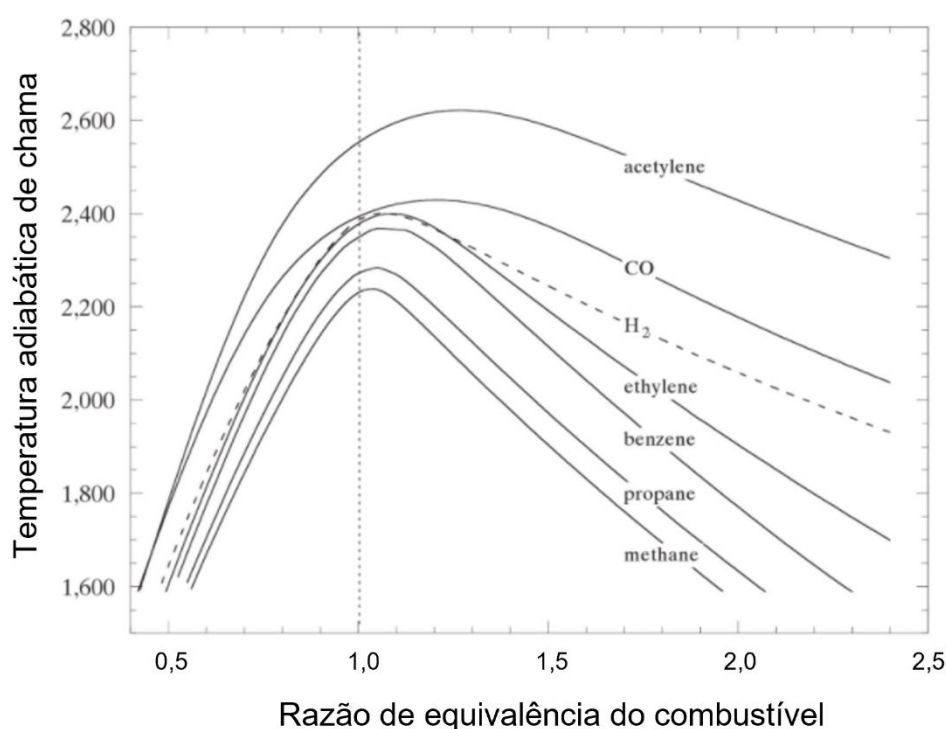


Figura 1 – Relação entre a temperatura adiabática de chama, T_{ac} , e a razão de equivalência, ϕ , para diversos combustíveis [20].

2.1.4 Velocidade de chama

A velocidade de chama é a taxa de expansão da frente da chama na câmara de combustão. Por outras palavras, a velocidade de chama representa a rapidez com que a chama se desloca em relação a um ponto de referência absoluto (fixo), enquanto a velocidade de queima representa a velocidade com que os reagentes químicos (gases ainda não queimados) se movimentam em direção à frente da chama, em relação a um ponto de referência local situado na frente da chama. A velocidade da chama depende bastante do valor da sua temperatura, ou seja, ao variar a razão de equivalência da mistura, varia consequentemente a temperatura de chama adiabática e, por conseguinte, irá variar a velocidade de chama [22].

2.1.5 Classificação dos tipos de chama

As chamas podem ser classificadas, em primeiro lugar, como laminares ou turbulentas. Dado que este estudo pressupõe uma análise em microescala dos efeitos da combustão, somente as chamas laminares serão estudadas. Conforme as condições em que o combustível e o oxidante chegam à zona imediatamente antes da reação, as chamas podem ser de pré-mistura (*premixed flames*) ou de difusão (*diffusion flames/non-premixed flames*). Apesar de neste trabalho só serem estudadas as chamas de pré-mistura, irá ser feita uma breve explicação de ambos os tipos de mistura dos reagentes, baseada em [18].

Chamas de pré-mistura

Nas chamas de pré-mistura, o combustível e o oxidante são completamente misturados antes de chegar à zona de reação, também designada como frente da chama. Na presença destas chamas, a zona de reação não é definida pela difusão dos reagentes, mas sim através do balanço entre a velocidade convectiva local dos reagentes e a taxa de consumo dos mesmos, também conhecida como velocidade de chama. Deste modo, as chamas de pré-mistura podem ter razões de equivalência diferentes de 1, o que possibilita atingir diferentes gamas de temperaturas de chama, caso que será estudado mais à frente neste trabalho.

Chamas de difusão

No caso das chamas de difusão, o combustível e o oxidante estão presentes em ambos os lados da zona de reação. Entram na zona de reação num estado não misturado, devido à difusão dos reagentes para dentro da zona de reação, e dos produtos para fora desta zona. Neste tipo de chamas, a zona de reação é definida pelo local onde a entalpia total dos reagentes está em equilíbrio com a entalpia total dos produtos gerados na reação química, adicionando quaisquer perdas de energia. Assim, idealmente, a combustão deste tipo de chamas acontece nas condições estequiométricas, produzindo a temperatura de chama máxima para um dado conjunto de reagentes.

Posto isto, é apresentada a Figura 2 onde se pode observar as principais diferenças visuais entre estes dois tipos de chamas.

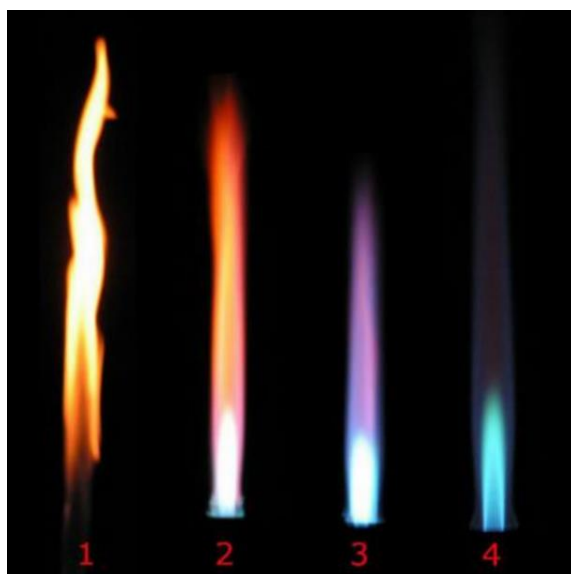


Figura 2 – Evolução de uma chama desde uma condição de difusão total (1) até uma condição de pré-mistura (4) [17].

2.1.6 Classificação dos comportamentos de uma micro chama

Uma micro chama pode comportar-se de diversas formas, dependendo de inúmeros fatores, tais como, velocidade de entrada da mistura, fluxo de calor fornecido à mistura, coeficiente de condução das paredes do queimador (condições fronteira), geometria do queimador, entre outros. Assim sendo, são apresentados em seguida os possíveis comportamentos das chamas em microcanais, presentes em estudos já realizados.

Chama estável

O comportamento mais simples que uma micro chama pode tomar é quando esta estabiliza numa determinada secção do queimador. Normalmente, é imposto um gradiente de temperatura na parede do queimador e, para certas condições de fluxo, obtêm-se chamas estáveis e perfeitamente ancoradas, como é ilustrado na Figura 3 [23].

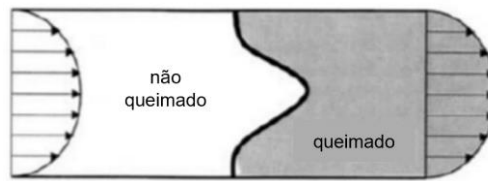


Figura 3 – Micro chama em regime estável [24].

Retorno e levantamento de chama (Flashback e Blowoff)

Nas chamas de pré-mistura, por vezes há situações em que a velocidade de entrada dos reagentes, imediatamente antes de atingirem a zona de reação, não é suficiente para se opor à velocidade de chama, ou seja, nestas condições a chama tem uma velocidade maior do que a velocidade da mistura em direção à zona de combustão. Posto isto, a chama propaga-se em direção à entrada do queimador, queimando os reagentes numa zona cada vez mais a montante no microcanal. Este fenómeno é conhecido como retorno de chama (*flashback*).

Por outro lado, também existem situações em que se verifica o contrário, isto é, situações em que a velocidade de fornecimento dos reagentes à zona de reação é maior do que a velocidade de chama. Deste modo, a chama move-se ao longo do canal, queimando os reagentes numa zona cada vez mais a jusante no queimador. A este fenómeno é chamado de levantamento de chama (*blowoff*) [18].

FREI (Flame with Repetitive Extinction and Ignition)

Na região onde se observa o fenómeno FREI, constata-se que a chama tem um comportamento invulgar: acende numa região a jusante, propaga-se em direção aos gases ainda não queimados e, finalmente, apaga numa região a montante. Após algum tempo de simulação, verifica-se que a chama ocupa sempre a mesma região e o fenómeno repete-se ciclicamente. No decorrer deste trabalho, dado que o queimador utilizado tem uma geometria ondulatória, a qual será apresentada num capítulo posterior, obteve-se um comportamento único devido ao aparecimento de vórtices na cavidade do microcanal, ou seja, após a chama acender, esta é transportada através dos vórtices para uma posição a montante, dando-se posteriormente a sua extinção.

Foram realizados inúmeros avanços na investigação deste fenómeno utilizando chamas pobres de pré-mistura de hidrogénio/ar. Em primeiro lugar, Alipoor e Mazaheri [25] fizeram um estudo bastante alargado em relação a estas chamas num microcanal aquecido com um perfil hiperbólico de temperatura. Neste estudo foram observados três comportamentos de chama diferentes, um dos quais o fenómeno de FREI. Este fenómeno foi verificado para baixas

velocidades perto do limite inferior de inflamabilidade. Para entender melhor as causas do aparecimento deste fenómeno, foram efetuadas diversas simulações variando três parâmetros: velocidade de entrada, razão de equivalência e largura do microcanal. Ao aumentar a velocidade, a intensidade da reação aumenta e a frente da chama extingue-se rapidamente. Com o aumento da razão de equivalência de 0,5 para 0,6, a velocidade de chama é maior devido ao aumento da velocidade de queima da frente da chama e, assim, é comprovado que esta extingue-se mais rápido. Num segundo trabalho, Alipoor e Mazaheri [26] fizeram uma análise do fenómeno de FREI em relação a uma única simulação, o que lhes permitiu fazer uma análise bastante mais pormenorizada do fenómeno de extinção e ignição alternada. Para isso, analisaram os mapas de contorno das concentrações do radical hidróxido (OH) ao longo do canal, para diferentes instantes de tempo. Também foi feito um estudo dos perfis da taxa de calor libertado, temperatura do fluido e da parede e concentrações molares de diversas espécies intervenientes na reação. Depois a bifurcação da chama foi estudada do ponto de vista hidrodinâmico usando os vetores de velocidade do escoamento. Por fim, os mesmos autores [27] estudaram chamas com razões de equivalência de 0,5 até à condição estequiométrica de $\phi=1$ e microcanais com larguras de 0,4 até 1 mm. Os resultados obtidos mostram que os aumentos da razão de equivalência e da largura do queimador, aumentam a amplitude do fenómeno de FREI e diminuem a sua frequência. Além disso, através deste estudo verifica-se que este fenómeno origina o aparecimento de zonas de recirculação de fluido e a bifurcação da chama devido ao aparecimento de espécies mais pesadas. Estas espécies têm a capacidade de absorver maiores quantidades de calor, o que proporciona uma redução da temperatura.

Pizza et al [28] também estudaram este tipo de chamas de hidrogénio/ar em microcanais. Neste estudo foi investigado o efeito da variação da largura do microcanal (0,3 a 1,0 mm) e da variação da velocidade de entrada da mistura (4 a 400 cm/s). Foi concluído que, para baixas velocidades, é observado o fenómeno FREI que estabelece a conexão entre a mistura fria e a mistura queimada. Neste trabalho também foram estudados outros comportamentos das chamas, mencionados anteriormente neste capítulo.

Além da utilização do hidrogénio como combustível, existe a possibilidade da utilização de outros combustíveis nos estudos da microcombustão. O fenómeno de FREI também foi observado no trabalho de Biswas [29]. Neste caso foi utilizada uma mistura de CH_4 /ar e a ignição foi feita através da inserção de uma faísca dentro do queimador. Foram estudadas as combustões desta mistura nas condições estequiométricas através de um microcanal linear e um microcanal composto por uma contração (convergente-divergente).

2.2 Fenómeno de propulsão: Conceitos e definições

2.2.1 Impulso específico

Um sistema de propulsão é um mecanismo que produz impulso para empurrar um objeto numa determinada direção. Em aviões, o impulso é normalmente explicado através da aplicação da terceira lei de Newton de ação e reação. Um gás, ou fluido de trabalho, é acelerado pelo motor, e a reação a esta aceleração produz uma força sobre o motor. A derivação geral da equação do impulso mostra que a quantidade de impulso gerada depende do caudal de massa através do motor e da velocidade de saída do gás [30].

A partir da segunda lei de Newton, podemos definir uma força como a variação do momento de um objeto no tempo. O momento é igual à massa do objeto vezes a sua velocidade. Quando se lida com um gás, a equação do impulso é dada como:

$$F = \dot{m}_s * V_s - \dot{m}_e * V_e + (p_s - p_e) * A_s \quad (2.5)$$

onde $\dot{m}_s$ e $\dot{m}_e$ são, respetivamente, os caudais mássicos à saída e à entrada do sistema de propulsão, V_s e V_e são, respetivamente, as velocidades médias do fluido à saída e à entrada do sistema de propulsão, p_s e p_e são as pressões de saída e de entrada e A_s é a área da secção de saída.

Em diversos casos, as pressões de saída e de entrada do sistema de propulsão são iguais à pressão atmosférica. Neste caso, o termo $(p_s - p_e) = 0$ e a equação pode ser simplificada da seguinte forma:

$$F = \dot{m}_s * V_s - \dot{m}_e * V_e \quad (2.6)$$

De seguida foi observado que o caudal mássico de saída é igual ao caudal mássico de entrada mais o caudal mássico de combustível. Utilizando a razão de equivalência combustível/ar, ϕ , foi obtido:

$$\dot{m}_s = (1 + \phi) * \dot{m}_e \quad (2.7)$$

Assim, utilizando alguma manipulação algébrica, é possível definir uma nova variável chamada impulso específico F_{esp} que só depende da diferença de velocidades produzida pelo motor:

$$F_{esp} = \frac{F}{\dot{m}_e} = (1 + \phi) * V_s - V_e \quad (2.8)$$

A definição desta nova variável acarreta diversas vantagens na análise de sistemas de propulsão. Em primeiro lugar, o impulso específico é um indicador da eficiência do mecanismo. Dois motores diferentes vão ter sempre valores diferentes de impulso específico. O que possuir maior impulso específico vai ser mais eficiente, uma vez que produz mais impulso para o mesmo fluxo de ar. Em segundo lugar, visto que é uma propriedade específica, é possível omitir o caudal mássico de entrada em todos os cálculos intermédios, simplificando bastante o procedimento matemático. Em terceiro lugar, é uma variável que facilita o dimensionamento do mecanismo de propulsão.

2.2.2 Indicadores de propulsão: EPR e ETR

Hoje em dia, a maior parte dos sistemas de propulsão são compostos por diversos componentes, nomeadamente, turbinas, compressores e câmara de combustão. Normalmente são utilizados diversos compressores em série com o objetivo de aumentar a pressão do ar de uma forma progressiva. De seguida surge a câmara de combustão onde é realizada a reação entre o combustível e o ar e, por fim, é montada uma turbina antes da secção de saída do propulsor. A propulsão é conseguida através da diferença entre a velocidade de saída e de entrada, originando a força de impulsão pretendida.

Posto isto, surgem dois indicadores bastante relevantes no mundo dos mecanismos de propulsão, apesar de não serem abordados nesta dissertação. O primeiro indicador é o EPR (*engine pressure ratio*). Este é definido como a razão de pressão total através do motor. Como já foi explicado anteriormente, os motores mais recentes possuem diversos componentes e, neste caso, o EPR transforma-se, simplesmente, no produto das razões de pressão em todos os

componentes do sistema de propulsão. Assim, o EPR pode ser simplificado e é calculado da seguinte forma:

$$EPR = \frac{p_{total\,saída}}{p_{total\,entrada}} \quad (2.9)$$

O segundo indicador é o ETR (*engine temperature ratio*). Por analogia ao indicador anterior, o ETR é definido como a razão de temperatura total através dos vários componentes do motor. Tal como no caso anterior, dada a complexidade dos motores de hoje em dia, o ETR passa a ser o produto das razões de temperatura dos vários componentes do motor. Deste modo, o ETR calcula-se através da seguinte expressão:

$$ETR = \frac{T_{total\,saída}}{T_{total\,entrada}} \quad (2.10)$$

2.3 Estado de arte

2.3.1 Investigações em microcombustão

Nos últimos anos, diversas investigações têm sido efetuadas com o propósito de compreender melhor o fenómeno de microcombustão e as suas possíveis aplicações. Em comparação com as pilhas químicas convencionais na alimentação de microdispositivos, o hidrogénio e os hidrocarbonetos possuem diversas vantagens em termos de densidade energética e proteção ambiental. Deste modo, os sistemas de micropotência baseados na combustão têm suscitado grande interesse nas últimas décadas. Muitas tentativas bem sucedidas foram feitas em microturbinas a gás [31], micropropulsores [32] e microaquecedores [33]. Contudo, os micro queimadores têm diversas limitações, como por exemplo as grandes perdas de calor devido ao seu pequeno tamanho e à elevada relação superfície/volume, levando à instabilidade da chama e à redução da eficiência da combustão. Estes são os grandes desafios que, nos últimos anos, têm originado diversos estudos à volta deste tema da microcombustão.

Li et al [34] investigaram numericamente as características da combustão de chamas de pré-mistura de hidrogénio/ar em micro tubos e microcanais de placas paralelas, com diâmetros hidráulicos de dimensões inferiores a um milímetro. Os resultados mostraram que o micro tubo apresenta uma temperatura de chama e uma temperatura da parede superiores relativamente ao microcanal de placas paralelas. Em estudos posteriores, Li et al [35] realizaram uma investigação semelhante utilizando o metano como combustível. Neste caso verificaram-se temperaturas superiores no microcanal de placas paralelas. Além disso, o limite superior de inflamabilidade da mistura hidrogénio/ar é superior em relação ao caso do metano devido à maior velocidade de queima do hidrogénio.

A espessura da parede do queimador, a espessura da chama e o diâmetro hidráulico têm a mesma ordem de grandeza nas microcâmaras de combustão. Posto isto, a transferência de calor através da parede e a recirculação de calor têm um efeito extremamente importante na sustentação da combustão e das suas características. Ronney [8] demonstrou que, para queimadores com zonas de contra fluxos e recirculação de calor, a condução de calor através da parede no sentido do escoamento tem um efeito importante nos limites de inflamabilidade, sobretudo em escoamentos com baixos números de Reynolds. Com o objetivo de estudar o

efeito da recirculação de calor nos limites de inflamabilidade, Kim et al [36] investigaram experimentalmente o uso de micro queimadores *Swiss-roll* com canais de largura inferior ao diâmetro de extinção para a combustão de misturas propano/ar. Os resultados mostraram que é possível observar-se uma chama de uma mistura propano/ar estável para canais com dimensões inferiores ao diâmetro de congelamento, para uma vasta gama de velocidades de entrada e razões de equivalência, principalmente devido ao facto de existir recirculação de calor. Kuo e Ronney [37] também investigaram numericamente a recirculação de calor num micro queimador *Swiss-roll*. Sugeriram que a condução de calor ao longo da parede do queimador que divide o fluxo de reagentes e o fluxo de produtos da reação química, reduz a temperatura da reação e aumenta os limites de extinção.

Recentemente, a utilização de superfícies contendo catalisadores [38, 39] foi objeto de estudo, com o objetivo de estas serem aplicadas em queimadores *Swiss-roll*. Pizza et al [40, 41] descobriram que as instabilidades das chamas de pré-mistura de hidrogénio/ar em queimadores de placas paralelas podem ser evitadas através do uso de catalisadores. Três micro queimadores com catalisadores de cobre, alumina e quartzo foram testados experimentalmente e numericamente por Zhou et al [42], que confirmaram as vantagens da utilização de catalisadores na combustão.

Zonas de recirculação do fluxo, bem como zonas de baixa velocidade que podem ser concebidas através do *design* da câmara de combustão, são técnicas bastante eficazes para estabilizar as chamas. Uma das técnicas mais comuns é a inserção de um degrau virado para trás nas paredes do queimador. A este respeito, Yang et al [43] investigaram experimentalmente o aumento do rendimento de um sistema de microcombustão termofotovoltaico utilizando um degrau virado para trás na câmara de combustão. Concluíram que a inserção deste degrau é útil para o controlo da posição da chama e estende os limites de inflamabilidade. Um estudo experimental sobre a temperatura da parede e o fluxo de calor por radiação de micro queimadores cilíndricos com um degrau virado para trás, realizado por Li et al [44], mostrou que a eficiência ótima ocorre para uma razão de equivalência 0,8 independentemente das dimensões do queimador e da velocidade do escoamento. Além disso, foi verificado que a utilização de um degrau para trás é útil para estabilizar a posição das chamas. Khandelwal et al [45] investigaram experimentalmente a estabilização da chama num micro tubo com três degraus e descobriram que os limites de inflamabilidade aumentam com o número dos degraus inseridos na zona de reação. Faramarzpour et al [46] realizaram um estudo numérico sobre os efeitos da geometria dos micro queimadores e da velocidade de entrada na posição da chama e na eficiência da radiação. Os resultados mostraram que a presença do degrau voltado para trás leva à estabilização da chama a altas velocidades, aumenta a temperatura média da parede externa e provoca a ancoragem da chama numa posição mais próxima da entrada do queimador.

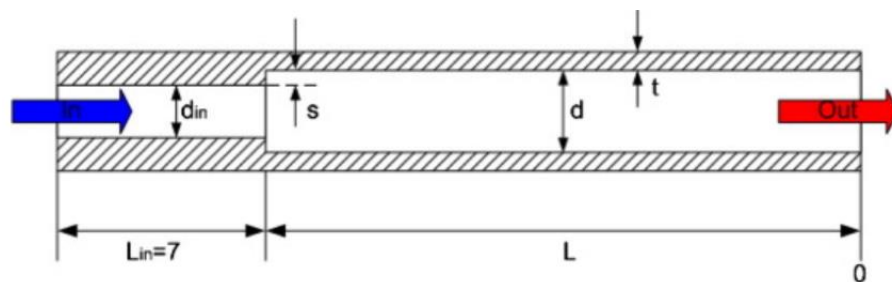


Figura 4 – Exemplo da inserção de um degrau voltado para trás num micro queimador [44].

Analisando outras soluções construtivas, Fan et al [47] realizaram um estudo sobre as chamas de pré-mistura de hidrogénio/ar na presença de um obstáculo (*bluff body*). Este estudo

debruçou-se sobre a utilização de obstáculos triangulares e circulares concluindo que, a inserção de obstáculos aumenta os limites de inflamabilidade da combustão.

Yang et al [48] investigaram as características das chamas de pré-mistura de hidrogénio/ar num micro tubo convergente-divergente. A geometria foi simplificada para uma forma bidimensional e os resultados experimentais da distribuição da temperatura na superfície externa do micro tubo foram utilizados como condição fronteira térmica na simulação numérica. Demonstraram que, para razões de equivalência de 0,6 a 2,2, pode ocorrer uma combustão estável para velocidades de entrada de 3,4 m/s a 41,4 m/s. Ao comparar estes resultados com os resultados de um micro tubo normal, concluíram que a chama tem limites de inflamabilidade mais amplos no micro tubo convergentes-divergentes. Biwas et al [49] investigaram numericamente o comportamento de extinção e propagação de chamas de pré-mistura de metano/ar através de microcanais retos e convergente-divergente. Foram estudados microcanais com diâmetros de 1 a 10 mm. Este estudo teve como objetivo estudar os efeitos da variação do diâmetro do microcanal, da razão de equivalência, da velocidade de entrada e da razão entre as áreas de saída e da garganta. Na parede foi considerado um regime adiabático com transferência de calor conjugada. Assim, demonstraram que as chamas entram em extinção mais facilmente em microcanais convergente-divergente do que em microcanais retos, para a condição adiabática.

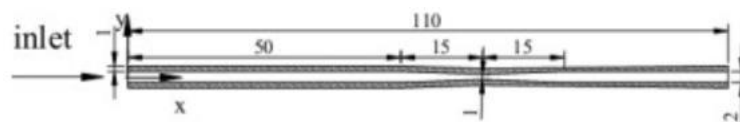


Figura 5 – Esquema do queimador, em mm, utilizado por Yang et al [48].

Recentemente, Abbaspour e Alipour [50] investigaram numericamente as características da combustão e os comportamentos das chamas de pré-mistura de hidrogénio/ar em micro tubos convergente-divergente aquecidos. De acordo com os resultados obtidos, a secção convergente-divergente provoca uma diminuição da temperatura da chama, devido ao aumento da velocidade do escoamento e da transferência de calor por convecção, originando o aparecimento de chamas oscilantes. Por outro lado, também foi descoberto que esta geometria ajuda na estabilidade da chama. Para os casos em que a chama estabiliza perto da secção de saída, verificou-se uma menor instabilidade da chama perto da parede e um aumento do limite superior de inflamabilidade, aumentando a recirculação de calor na secção convergente-divergente.

Nos últimos anos foram desenvolvidos estudos no âmbito da utilização de micro queimadores com a utilização de geometrias não lineares. Wan et al [51] estudaram numericamente a combustão de misturas de hidrogénio/ar num micro queimador com cavidades na parede do mesmo, bem como o efeito da variação da profundidade destas cavidades e de alguns outros parâmetros da reação. Foi observado que, à medida que a velocidade da mistura aumenta, a chama separa-se em duas zonas distintas, originando uma elevada fuga de combustível da zona de reação e uma diminuição acentuada da taxa de conversão do hidrogénio. Foi concluído que, cavidades demasiado profundas não são benéficas se o queimador for utilizado como fonte de calor de dispositivos termoeletrônicos ou termofotovoltaicos, uma vez que, a separação da chama origina o aparecimento de um maior número de picos de temperatura ao longo do queimador, com intensidades menores, o que faz diminuir a temperatura de chama. Yang et al [52] realizaram um estudo muito similar, apenas para o caso de queimadores com dupla cavidade.

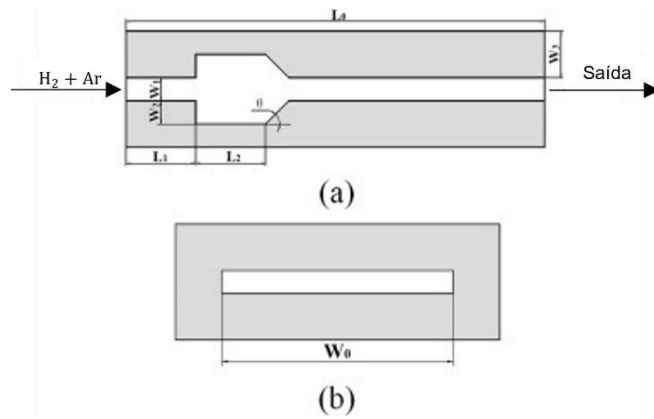


Figura 6 – Esquema do micro queimador com cavidade: (a) plano longitudinal, (b) plano transversal [51].

Diversas investigações têm sido efetuadas no âmbito do estudo da dinâmica da chama dentro de câmaras de combustão com diâmetros próximos dos diâmetros de extinção. Nestas investigações é usual considerar a espessura da parede do micro queimador como nula, de modo a existir uma grande diferença entre as taxas de propagação do calor no fluido e nas paredes. Assim, é utilizado um perfil de temperatura constante como condição de temperatura limite na parede. Pizza et al realizaram diversos estudos numéricos em relação à dinâmica das chamas de pré-mistura de hidrogénio/ar em meso canais de placas paralelas aquecidas [53], microcanaís [28] e micro tubos [54]. Foram observadas diversas dinâmicas de chamas diferentes, tais como, FREI, fenómeno já explicado anteriormente, combustão suave, chamas giratórias e chamas simétricas estáveis. Mais tarde, Alipoor e Mazaheri [25] apresentaram mapas da dinâmica das chamas de pré-mistura de hidrogénio/ar com base em três parâmetros: velocidade de entrada, razão de equivalência e largura do microcanal. Mansouri [55] estudou as características das chamas de pré mistura de metano/ar em micro canais ondulados aquecidos e chegou à conclusão que a posição e a temperatura da chama dependem do número de ondulações que constitui o microcanal, do perfil de temperatura imposto nas paredes do queimador e do mecanismo cinético utilizado na simulação.

O grande propósito deste estudo é o estudo do fenómeno da microcombustão na área da micropropulsão. De facto, a microcombustão tem sido bastante utilizada em mecanismos de propulsão de nano satélites. Chen et al [5] desenvolveram um sistema de micropropulsão, com base no fenómeno de microcombustão utilizando catalisadores. Neste estudo é demonstrada a viabilidade de um sistema de micropropulsão à base de hidrogénio com catalisadores, adequado para fornecer potência a microsatélites, com o objetivo de controlar as suas manobras. Este sistema é estudado experimentalmente e numericamente. Em relação ao desempenho do propulsor, são investigados os efeitos dos principais parâmetros, tais como: o caudal da mistura combustível/ar, a razão de equivalência e a razão de contração do bocal. É utilizado, como reator, um tubo de platina com catalisadores, com 500 μm de diâmetro e 1 cm de comprimento. Este reator é inserido dentro de um tubo de quartzo com um bocal de diferentes razões de convergência. Posto isto, são estudados os diversos comportamentos das chamas, bem como as suas propriedades intrínsecas, como por exemplo, a temperatura e a concentração mássica de algumas espécies intervenientes na reação (H_2 , OH , H_2O).

Boyarko et al [56] realizaram um estudo com o objetivo de compreender a física e a química envolvidas nos processos de combustão presentes em micro reatores para sistemas de propulsão em micro veículos espaciais. Estes micro veículos espaciais são projetados para ter uma massa inferior a 50 kg com sistemas de propulsão capazes de fornecer impulsos de 1-10 mN. Os sistemas de micropropulsão apresentam um comportamento diferente dos sistemas a uma escala maior, devido às diferenças dos caudais utilizados e às variações das perdas de calor para o exterior. Foi analisada a chama num micro tubo, uma vez que, os micro tubos podem ser

facilmente fabricados a partir de materiais catalisadores, e a sua geometria simples pode ser utilizada em simulações com o propósito de validar a situação em estudo. Experimentalmente, foi investigado o papel das superfícies do tubo à base de catalisadores, em tubos com 0,4 e 0,8 mm de diâmetro, com especial atenção na utilização de misturas ricas à base de hidrogénio e oxigénio.

Jejurkar e Mishra [57] publicaram, em 2009, um breve resumo das patentes mais recentes relacionadas com a microcombustão e as suas aplicações. Neste artigo foram enumeradas diversas patentes relacionadas com a micropropulsão, nomeadamente, a patente desenvolvida por Masel e Shannon [58]. Neste trabalho é utilizado um canal onde se dá a combustão, com a ajuda de catalisadores, sendo a força obtida à saída do canal utilizada para gerar potência ou para propulsão. Esta invenção usa um misturador em forma de Y, como se pode ver na Figura 7, para misturar o combustível com o oxidante, seguido de uma zona de reação e, posteriormente, um bocal de saída. A ignição é dada através do aquecimento elétrico de uma serpentina de platina.

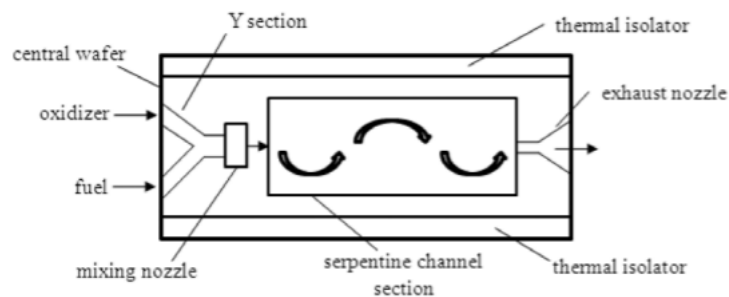


Figura 7 – Queimador inventado por Masel e Shannon [57].

Mais tarde, Jejurkar e Mishra [59] efetuaram um estudo sobre a utilização da inércia térmica dos componentes circundantes ao queimador e da disposição elaborada dos escoamentos para a recirculação externa do calor. Assim, foi concebido um micro queimador, abastecido a hidrogénio, de construção simples, que utilizava a recirculação térmica exterior através de um tubo oco preenchido com N_2 . Na Figura 8 pode observar-se a estrutura deste queimador anelar. Deste modo, este trabalho relata o comportamento de uma chama estequiométrica de H_2/ar . Verificou-se que uma combustão autossustentada poderia ser conseguida sem qualquer necessidade de catalisadores. Os resultados para diferentes caudais de entrada e condutividades térmicas da parede revelaram diversas vantagens na aplicação deste mecanismo em áreas como a micropropulsão.

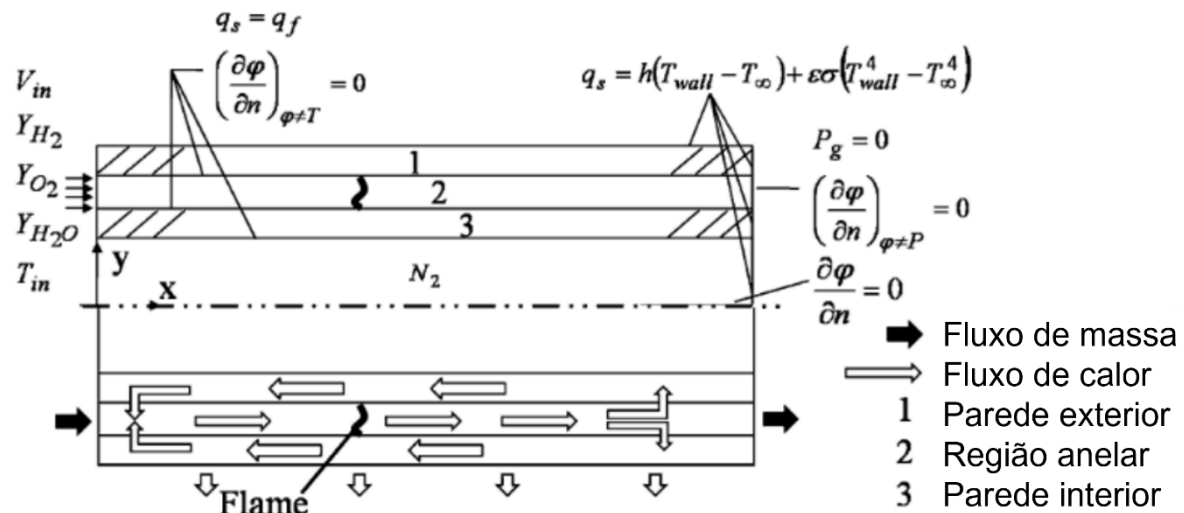


Figura 8 – Esquema do queimador anelar [59].

2.3.2 Aplicações de microcombustão

Micromotores de combustão interna

O grande avanço da microtecnologia permitiu o desenvolvimento de diversos dispositivos à base de mecanismos de microcombustão. Devido à elevada densidade energética dos combustíveis de hidrocarbonetos líquidos, foram realizados diversos estudos com o objetivo de reduzir a escala das máquinas rotativas já existentes e, também, dos motores de combustão interna para fontes de energia portáteis.

Desde o trabalho pioneiro realizado por Epstein et al [60] em 1997 sobre microturbinas a gás, diversos micro queimadores foram desenvolvidos para aplicação em propulsão, geração de potência, análise química e aquecimento. Nos laboratórios do MIT [60, 61] foram desenvolvidos micromotores de turbina a gás à base de MEMS. Epstein et al [60] desenvolveram uma turbina a gás com 10 mm de diâmetro e 3 mm de espessura, com uma potência elétrica de 50 W e com uma velocidade de rotação de $2,4 \times 10^6$ rpm, consumindo 7 g por hora de hidrogénio.

Após este estudo, Mehra e Waitz [62] demonstraram uma combustão estável, à base de hidrogénio, num micro queimador de 66 mm^3 . Os gases de exaustão atingiam temperaturas de 1800 K. Posto isto, este queimador foi integrado numa microturbina a gás, por Mehra et al [61]. Os testes efetuados a este mecanismo provaram que o sistema era capaz de fornecer 2 GW/m^3 .

Mais tarde, a utilização de microturbinas a gás para a produção de energia evoluiu da tal maneira que, em 2007, um grupo de investigação na Tohoku University, liderado por Tanaka e Esashi [63] desenvolveu a turbina a gás mais pequena do mundo, que funciona segundo um ciclo Brayton. Tem um compressor de 16 mm de diâmetro, uma turbina de 17,4 mm de diâmetro, uma câmara de combustão anelar e um gerador eletromagnético. A turbina e o compressor são ligados através de um veio de 8 mm de diâmetro, como é apresentado na Figura 9 à direita. O peso total do rotor é de, aproximadamente, 37 g. Este dispositivo tem uma velocidade de rotação de 360000 rpm e uma temperatura de combustão entre 800 e 900 °C.

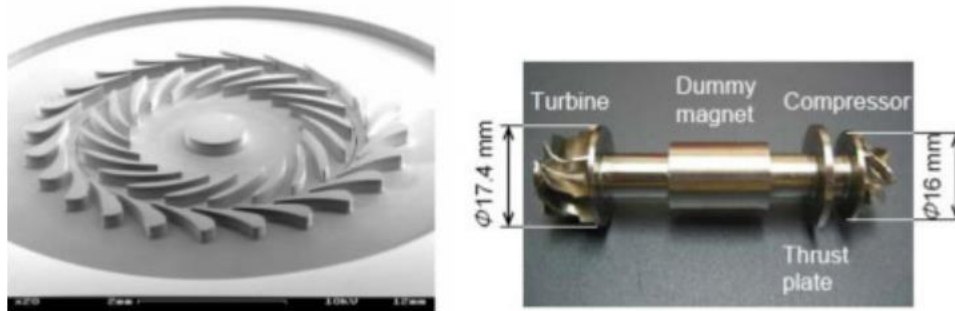


Figura 9 – Esquerda: micromotores de turbina a gás desenvolvidos pelo MIT; Direita: rotor da turbina a gás desenvolvida por Tanaka e Esashi [64].

Na *University of Berkeley*, Fu et al [65-67] desenvolveram vários motores rotativos que funcionam à base de hidrocarbonetos líquidos. Foram desenvolvidos dois motores de tamanhos diferentes: um motor rotativo de meso escala com uma potência de 30 W e um micromotor rotativo capaz de produzir alguns miliwatts de potência. Estes motores estão ilustrados na Figura 10. O motor rotativo Wankel foi inventado por um engenheiro chamado Felix Wankel [68], em 1957. Este motor utiliza o movimento de rotação de um rotor triangular, alojado numa caixa oval, para converter energia térmica em energia mecânica, sem a necessidade de utilizar os pistões convencionais. Este design extremamente compacto possibilita a produção de maior potência por unidade de peso do que um motor de pistão. Contudo, neste tipo de motores, a selagem entre as câmaras de combustão e a erosão causada pela elevada rotação do rotor são dois grandes desafios a ultrapassar. Estes motores apresentam um rendimento térmico muito baixa, na ordem dos 0,2%, devido à baixa taxa de compressão e às fugas existentes entre o rotor e a caixa que o suporta.

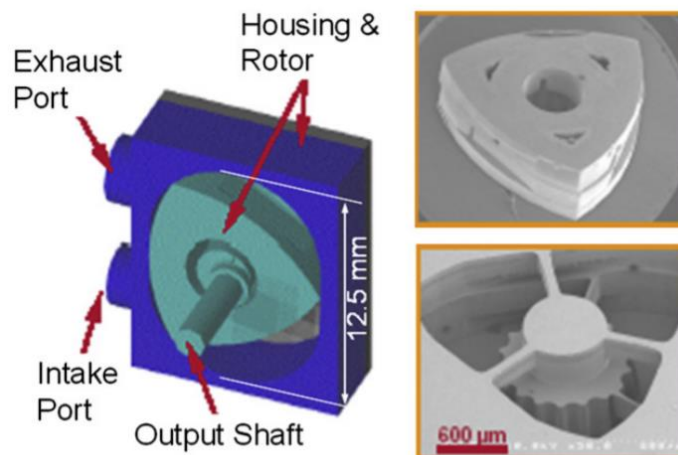


Figura 10 – Motor rotativo de meso escala (à esquerda) e o micromotor rotativo (à direita), ambos desenvolvidos na UCB [2].

Para resolver os graves problemas de vedação no motor rotativo, um motor de pistão livre de meso escala, utilizando a técnica de HCCI (*Homogeneous Charge Compression Ignition*), à base de hidrocarbonetos usados como combustível, foi desenvolvido por Aichlmayr et al [31, 69]. O objetivo é produzir 10 W de potência elétrica a partir de um volume de 1 cm³. Os testes experimentais demonstram que a combustão HCCI de heptano/ar com razões de equivalência de 0,69 e 0,25 foram bem-sucedidas, e este tipo de combustão é possível em espaços com 3 mm

de diâmetro e 0,3 mm de comprimento. Na Figura 11 é demonstrado este mecanismo. Foi concluído que, ao corrigir os problemas de fugas do mecanismo, diminuiu-se a eficiência na conversão do combustível e a vida útil do motor foi bastante reduzida, devido ao elevado desgaste dos materiais.

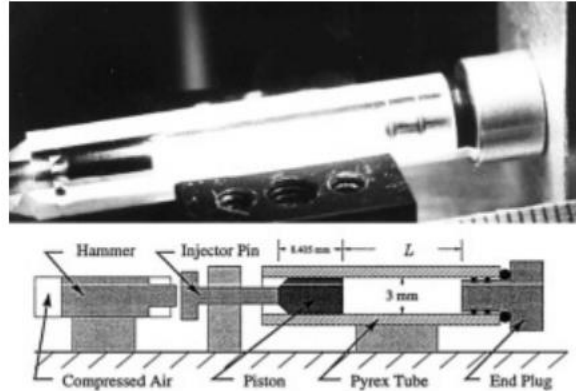


Figura 11 – Motor de meso escala de pistão livre usando HCCI. Em cima: fotografia da montagem do cilindro e do pistão; Em baixo: esquema da montagem para o teste de um único disparo [64].

Micro reatores

Outra abordagem convencional para a geração de micropotência é a combinação de micro reatores e dispositivos de conversão de energia, como por exemplo, dispositivos termoelétricos, termofotovoltaicos e piezoelétricos. A geração de micropotência através de micro reatores é extremamente vantajosa, devido ao facto de não existirem peças móveis que possam adicionar perdas por fricção ao mecanismo. Nestes casos é bastante comum o uso de mecanismos de recirculação de calor e de catalisadores para uma boa gestão térmica do fenómeno de combustão.

Como trabalho pioneiro, o laboratório de combustão da *University of Southern California* estudou a possível combinação de um queimador do tipo “*Swiss roll*” com um dispositivo termoelétrico. Para maximizar a eficiência do sistema, através da minimização das perdas de calor para o exterior, foi proposta uma configuração tridimensional toroidal baseada no queimador “*Swiss roll*” bidimensional original, que foi sugerida inicialmente por Weinberg [70, 71]. A Figura 12 apresenta um esquema do canal de recirculação de calor em forma de U, configurações do queimador “*Swiss roll*” bidimensional e queimadores tridimensionais toroidais, nos quais o calor libertado pela combustão é obrigado a retornar à zona onde se encontra a mistura ainda não queimada através de canais com paredes divididas. Apesar dos grandes esforços, o fabrico de dispositivos termoelétricos com configurações tridimensionais desta complexidade continua a ser uma tarefa extremamente difícil. A máxima eficiência de conversão de energia, por parte de dispositivos termoelétricos que operam como sistemas auxiliares em queimadores de recirculação de calor, foi estudada teoricamente [72].

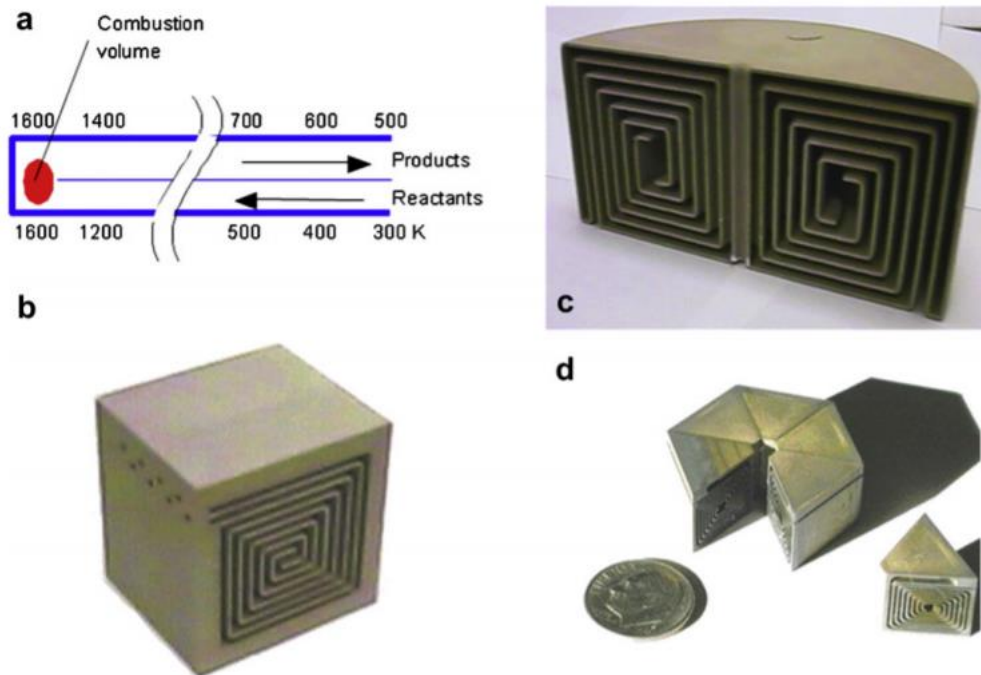


Figura 12 – Esquemas de queimadores com recirculação de calor desenvolvidos no laboratório de combustão da USC [73]: (a): conceito da recirculação de calor num canal em forma de U; (b): queimador “Swiss roll” bidimensional; (c) e (d): queimadores toroidais de macro e meso escala, respetivamente. [2].

Micropropulsores

Um micro queimador apresenta diversas vantagens em relação aos propulsores convencionais. Este é capaz de produzir pequenos impulsos ($\sim 1 \text{ mN}$) para manobras precisas e controlo de posição de um microssatélite (10-100 kg) [74]. À medida que a dimensão do queimador diminui, a ignição dos propulsores e a estabilização de uma combustão sustentável torna-se cada vez mais desafiante devido ao aumento das perdas de calor através da parede exterior. Além disso, visto que a temperatura de chama aumenta, surge outro obstáculo na escolha dos materiais utilizados. Estes materiais necessitam de ter uma excelente resistência a altas temperaturas e a pressões elevadas.

Nos últimos 10 anos, diversos micropropulsores de diferentes escalas, materiais, propulsores e métodos de ignição foram desenvolvidos e testados com sucesso [74-76]. Neste trabalho apenas serão analisados os estudos efetuados em micropropulsores à base de misturas gasosas.

O micropropulsor digital “rocket chip” à base de MEMS foi desenvolvido na Caltech com a colaboração da TRW e da Aerospace Corporation [76]. O objetivo era demonstrar e caracterizar diferentes tipos de micropropulsores MEMS e testá-los no espaço para serem utilizados em micro veículos espaciais. Um protótipo do propulsor contém 15 propulsores individuais numa matriz de 3 por 5. Cada câmara tem aproximadamente $0,5 \text{ mm}^3$ de volume e é preenchida com estifnato de chumbo ($\text{C}_6\text{H}_3\text{N}_3\text{O}_8\text{Pb}$). Cada célula produz $0,1 \text{ mmNs}$ de impulso, $0,1 \text{ N}$ de força e 100 W de potência mecânica. Na figura 13 observa-se este dispositivo.

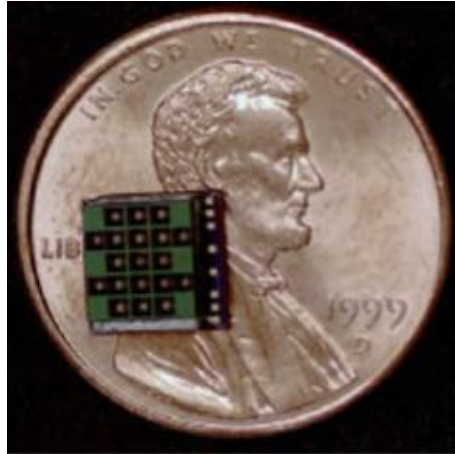


Figura 13 – O micropropulsor “rocket chip” [76].

O Honeywell Technology Center [77] desenvolveu um micropropulsor constituído por uma matriz de 512×512 células. Cada célula do micro foguete, com dimensões de $51 \mu\text{m} \times 51 \mu\text{m}$, tem a possibilidade de trabalhar individualmente ou em grupos de células. Foram utilizadas misturas de nitrocelulose como combustível para a propulsão, alcançando um impulso de 0,5-20 μNs para cada célula. No entanto, o tamanho extremamente pequeno e a pressão baixa do propulsor originam grandes perdas de calor e limitam a eficiência da propulsão.

A fim de melhorar o desempenho do micro foguete, um motor bipropulsor de alta pressão, utilizando oxigénio e metano como combustíveis, foi desenvolvido no MIT [78], presente na Figura 14. O *chip* propulsor tem 18 mm de comprimento, 13,5 mm de largura, 2,9 mm de espessura e pesa 1,2 g. A câmara tem um volume de, aproximadamente, 100 mm^3 e a pressão dentro da mesma pode chegar a 12,3 atm. Os testes efetuados a este dispositivo demonstram que é possível produzir 1 N de força, um impulso específico de 300 s e uma potência de propulsão de 750 W.

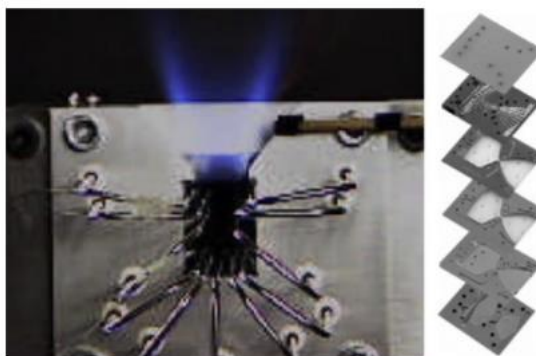


Figura 14 – Micro bipropulsor desenvolvido no MIT [78].

3 Equações governativas e modelação numérica

Este capítulo tem como propósito apresentar as equações governativas utilizadas na obtenção de todos os resultados presentes neste documento, bem como a modelação numérica necessária para suportar estes cálculos. Este assunto é apresentado de uma forma bastante genérica, mencionando somente os assuntos de maior relevância na execução deste trabalho. A informação presente neste capítulo baseia-se em [79] e [80].

3.1 Equações governativas

No presente trabalho são estudados diversos escoamentos laminares reativos. Estes escoamentos podem ser descritos matematicamente pelas equações da conservação da massa, do momento, das frações mássicas das espécies e da energia total, assumindo sempre as propriedades de um fluido newtoniano. Todas estas equações são apresentadas de seguida:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) + \nabla(\rho \mathbf{v} \mathbf{v} + p \mathbf{I}) = \nabla \tau + \rho \mathbf{g} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega_k) + \nabla(\rho \omega_k \mathbf{v}) = \nabla(\rho \omega_k \mathbf{V}_k) + \dot{\Omega}_k \quad k = 1, \dots, N_c \quad (3.3)$$

$$\rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_P \mathbf{v} \nabla T = -\nabla \mathbf{q} - \rho \sum_{k=1}^{N_c} C_{P,k} \omega_k \mathbf{V}_k - \sum_{k=1}^{N_c} h_k \dot{\Omega}_k \quad (3.4)$$

onde t é o tempo, ρ é a massa volúmica da mistura, p a pressão, $\mathbf{v}$ o vetor de velocidade da mistura, τ o tensor da tensão do fluido, $\mathbf{g}$ o vetor de aceleração devido à gravidade, ω_k a fração mássica da espécie k , $\mathbf{V}_k$ a velocidade de difusão da espécie k , $\dot{\Omega}_k$ a taxa de formação da espécie k , T a temperatura, C_P e $C_{P,k}$ são o calor específico a pressão constante da mistura e o calor específico individual da espécie k , respetivamente, $\mathbf{q}$ o vetor do fluxo de calor, h_k a entalpia da espécie k e N_c é o número total de espécies.

A massa volúmica da mistura é calculada através da equação dos gases perfeitos. O vetor do fluxo de calor, que inclui os efeitos da condução e da radiação, é calculado através da equação seguinte:

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \mathbf{q}_{rad} \quad (3.5)$$

onde λ é a condutividade térmica da mistura e $\mathbf{q}_{rad}$ é o fluxo de calor devido à radiação. As velocidades de difusão das espécies k são calculadas, considerando tanto a lei de *Fick* como a difusão térmica (também conhecida como efeito *Soret*):

$$\mathbf{V}_k = -\frac{D_k}{Y_k} \nabla Y_k - \frac{D_k \Theta_k}{X_k} \frac{1}{T} \nabla T \quad (3.6)$$

onde X_k é a fração molar da espécie k , Θ_k o coeficiente de difusão térmica da espécie k e D_k é o coeficiente de difusão ponderado da espécie k , que está relacionado com os coeficientes de difusão binários $\Gamma_{j,k}$ através da seguinte expressão:

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k}^{NC} \frac{X_k}{\Gamma_{j,k}}} \quad (3.7)$$

A abordagem proposta por Coffee e Heimerl [81] foi aqui adotada de modo a garantir a conservação da massa. Esta abordagem consiste em substituir V_k na equação (3.3) e (3.4), pela velocidade de difusão corrigida, V_k^C , definida como:

$$V_k^C = V_k + V_C \quad (3.8)$$

onde V_C é um fator de correção constante que é independente da espécie, apesar da sua variação no tempo e no espaço. Este fator é utilizado para satisfazer a conservação da massa e é calculado da seguinte forma:

$$V_k^C = - \sum_{k=1}^{NC} Y_k V_k \quad (3.9)$$

A transferência de calor por radiação foi modelada assumindo a hipótese da radiação ótica fina, na qual a auto absorção de radiação é desprezada. Só as seguintes espécies radiantes é que foram tidas em conta: H_2O , CO , CO_2 , CH_4 . A contribuição da transferência de calor por radiação presente na equação de energia é calculada do seguinte modo:

$$\nabla q_{rad} = -4\sigma a_P (T^4 - T_{env}^4) \quad (3.10)$$

onde T_{env} é a temperatura ambiente e σ é a constante de Stefan-Boltzmann. O coeficiente de absorção de Planck é aqui definido como:

$$a_P = p_{H_2O} a_{p,H_2O} + p_{CO_2} a_{p,CO_2} + p_{CO} a_{p,CO} + p_{CH_4} a_{p,CH_4} \quad (3.11)$$

onde p_k é a pressão parcial da espécie k . O coeficiente de extinção $a_{p,k}$ da espécie k é estimado segundo o *software* RADCAL [82].

3.2 Modelação numérica

As equações referidas na secção anterior são resolvidas a partir do *software Open Source Field Operation and Manipulation*, mais conhecido como OpenFOAM. Em particular, é utilizado o código *laminarSMOKE* de Cuoci et al [79], [80] que foi derivado do *solver* pisoFoam para fluxos instáveis, compressíveis e não reativos, que está disponível na biblioteca padrão do OpenFOAM. O prefixo PISO significa que é aplicado um algoritmo de pressão implícita com separação dos operadores.

Os métodos convencionais de CFD baseados em algoritmos segregados não são adequados para resolver fluxos reativos com mecanismos cinéticos detalhados devido à sua elevada rigidez e às suas não linearidades que caracterizam as equações de transporte de espécies e energia. Por outro lado, os algoritmos acoplados já apresentam várias vantagens para a solução de sistemas rígidos e de elevado número de equações não lineares, onde as duas principais abordagens conhecidas estão totalmente inseridas, para além dos métodos de divisão por operador. O problema da adoção de métodos totalmente acoplados é que, especialmente na presença de casos com mecanismos cinéticos detalhados, como os considerados neste estudo, o número de equações a resolver é muito grande e os recursos computacionais necessários podem tornar-se rapidamente proibitivos. E torna-se ainda pior quando são utilizadas aproximações de elevada ordem de grandeza às derivadas espaciais.

Dado que o objetivo é conseguir simular escoamentos reativos com mecanismos cinéticos bastante detalhados, o *solver* pisoFoam foi devidamente modificado através da introdução da técnica de separação de operadores (*operator-splitting method*). Este método consiste em dividir as equações governativas em várias subcategorias. No caso apresentado, os termos de transporte e de reação serão devidamente separados nas equações de energia e de espécies. Em particular, no caso da combustão, é muito importante separar os termos de transporte convectivos e difusivos (processos não rígidos) dos termos associados às reações químicas (processos rígidos). A principal vantagem é que, ao utilizar os métodos de separação de operadores, é possível escolher o método numérico mais apropriado para cada tipo de equação ou processo e, assim, evitar ou reduzir algumas operações matriciais extremamente complexas típicas de algoritmos totalmente acoplados.

O método de separação de operadores implementado no código do *laminarSMOKE* vai ser rapidamente apresentado e explicado. Neste caso foi adotado o método das linhas, o que significa que, após a discretização espacial, as equações de transporte de energia e das espécies podem ser reescritas da seguinte forma:

$$\frac{d\psi}{dt} = \mathbf{C}(\psi, t) + \mathbf{D}(\psi, t) + \mathbf{R}(\psi) \quad (3.12)$$

onde ψ é o vetor das frações mássicas e da temperatura (variáveis primárias), $\mathbf{C}(\psi, t)$ e $\mathbf{D}(\psi, t)$ são os vetores das taxas de variação de ψ devido ao transporte convectivo e difusivo, respetivamente, e $\mathbf{R}(\psi)$ é o vetor da taxa de variação de ψ devido às reações químicas. As soluções numéricas da equação anterior são obtidas através da discretização do tempo em incrementos de Δt , aproximando-se cada vez mais da solução em cada incremento temporal. Cada termo presente no lado direito da equação 3.12 contribui de uma certa forma para a variação global de ψ em cada Δt .

Uma vez que este estudo está na presença de mecanismos cinéticos bastante complexos, o operador rígido tem que ser o último a ser submetido ao processo de separação, a fim de garantir a estabilidade e a precisão do método numérico. Tendo isto em conta, foi adotado o esquema de separação *Strang* (*Strang splitting algorithm*) para agrupar os termos de convecção e difusão

e, ao mesmo tempo, separá-los do termo rígido referente às reações químicas. Assim, a integração numérica é realizada em três passos:

1. Em primeiro lugar, o termo da reação é integrado ao longo de $\Delta t/2$, resolvendo-se a seguinte equação diferencial ordinária (ODE):

$$\frac{d\psi^a}{dt} = \mathbf{R}(\psi^a) \quad (3.13)$$

onde a condição inicial $\psi^a(0)$ corresponde ao estado final do incremento de tempo imediatamente anterior, e a solução desta equação é denotada como $\psi^a(\Delta t/2)$.

2. Os termos de convecção e difusão são integrados ao longo de todo o Δt , resolvendo o seguinte sistema de ODE's:

$$\frac{d\psi^b}{dt} = \mathbf{C}(\psi^b, t) + \mathbf{D}(\psi^b, t) \quad (3.14)$$

onde a condição inicial $\psi^b(0)$ é igual ao estado final do sistema do passo 1, $\psi^a(\Delta t/2)$, e a solução desta nova equação é denotada como $\psi^b(\Delta t)$.

3. Este passo final é muito idêntico ao passo 1, com a diferença de que o estado inicial deste passo corresponde ao estado final do passo 2, ou seja, $\psi^b(\Delta t)$. E, assim, a solução deste último passo é utilizada como condição inicial do passo 1 para o Δt seguinte.

É de notar que os passos 1 e 3 são independentes do espaço, ou seja, nenhuns deles precisa de condições fronteira para ser processado. Contudo, os operadores $\mathbf{C}(\psi, t)$ e $\mathbf{D}(\psi, t)$ já dependem das condições espaciais, e precisam das devidas especificações das condições fronteira que irão ser mencionadas mais à frente. Através da implementação de diversos métodos numéricos, é possível a resolução de todos estes sistemas de equações.

Apenas as equações das espécies e a equação da energia é que são resolvidas através deste método numérico intitulado de algoritmo de separação de *Strang*. Uma vez que as equações de continuidade e dinâmica são resolvidas com base num método segregado, com o objetivo de assegurar a conservação da massa em cada passo temporal, aplica-se o algoritmo de pressão implícita com separação dos operadores (PISO). O incremento temporal é automaticamente ajustado durante os cálculos para ter sempre um número de Courant máximo suficientemente baixo, evitando assim problemas de estabilidade.

Por fim, na Figura 15 é apresentada a estrutura do algoritmo numérico implementado no código do *laminarSMOKE* por Cuoci et al [79] [80]:

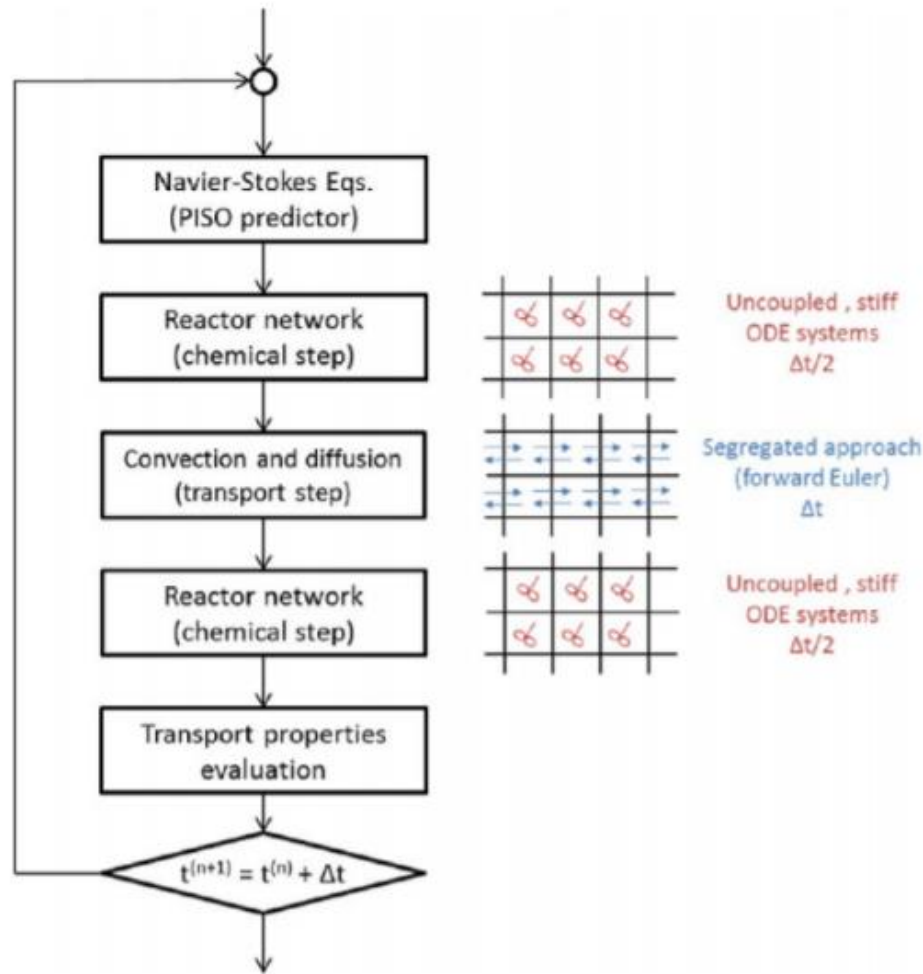


Figura 15 – Algoritmo numérico adotado no *software laminarSMOKE* [79].

3.3 Mecanismo cinético

A combustão é um fenómeno extremamente complexo que envolve inúmeras reações químicas num curto espaço de tempo. Este fenómeno não pode ser simplesmente descrito pela sua reação química estequiométrica. De facto, múltiplas espécies são produzidas devido à interação e recombinação entre radicais e espécies estáveis ao longo de todo o processo.

Deste modo, com o objetivo de resolver as várias equações acima mencionadas, todas as espécies envolvidas na reação química, juntamente com todas as propriedades termofísicas relevantes para o estudo deste fenómeno, têm de ser devidamente listadas, identificadas e disponíveis para o cálculo.

O Politecnico di Milano, nomeadamente o CRECK Modelling Group, desenvolveu vários mecanismos cinéticos extremamente detalhados, com o propósito de descrever extensivamente estas reações químicas. Estes mecanismos foram todos devidamente verificados em [83] e [84].

Neste trabalho, para uma análise extensiva de todas as espécies intervenientes na reação de combustão, todos os escamentos foram simulados utilizando o mecanismo *POLIMI_H2CO_NOX_1412*. Este é um mecanismo cinético bastante detalhado que descreve a combustão de misturas gasosas de hidrogénio e monóxido de carbono, consistindo em 32 espécies e 173 reações. Estas reações químicas são apresentadas no Anexo A.

3.4 Notas finais

O CRECK Modelling Group desenvolveu dois códigos de *laminarSMOKE* ligeiramente diferentes para aplicações diferentes e utilizados ao longo de toda a tese: *laminarSimpleSMOKE* e *laminarPimpleSMOKE*. O código *laminarPimpleSMOKE* foi desenvolvido para simular fluxos transientes, dando a possibilidade de se impor intervalos de tempo específicos, desde que não seja excedido o número de Courant. O código *laminarSimpleSMOKE* foi desenvolvido para atingir um regime estável e permanente num curto espaço de tempo e, normalmente, não contém nenhuma derivação temporal e, por isso, não possibilita análises do mesmo tipo.

4 Descrição do *software*

4.1 Introdução

Todas as simulações numéricas apresentadas neste trabalho foram realizadas através da plataforma OpenFOAM, a ferramenta de código aberta mais utilizada para a Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) em todo o mundo, principalmente nas áreas de engenharia e ciência, tanto comercial como académica. O código do OpenFOAM baseia-se numa biblioteca C++ composta por uma vasta gama de estruturas de código, tais como, a solução de sistemas lineares, solução de equações diferenciais ordinárias, malha dinâmica, modelos físicos gerais, entre outras. Todos os recursos fornecidos por esta extensa biblioteca são usados para desenvolver executáveis ou aplicativos. Estes aplicativos podem ser divididos em duas categorias: *solvers* e utilitários. Os *solvers* são responsáveis por efetuar os cálculos para resolver um problema específico da mecânica dos fluidos. Os utilitários são usados para preparar a malha, selecionar o caso da simulação, processar os resultados e para realizar outras operações, além de resolver o problema em questão, ou seja, os utilitários executam certas tarefas que envolvem a manipulação de dados.

O OpenFOAM foi concebido como um pacote facilmente extensível de funções para soluções numéricas, com base no Método dos Volumes Finitos. Este *software* não só fornece uma vasta gama de características para resolver escoamentos complexos de fluidos envolvendo escoamentos laminares e turbulentos, reações químicas e transferência de calor, mas também permite aos utilizadores manipular as características existentes, através dos *solvers* e utilitários.

Nos subcapítulos seguintes serão apresentados os vários passos na execução de uma simulação, bem como as diversas estruturas que tornam possível a manipulação de cada simulação numérica. Será apresentada toda a estrutura dos ficheiros utilizados e também as várias etapas para conseguir simular um caso específico. Para além disso, também serão expostas algumas das funcionalidades gerais do código, presentes no OpenFOAM *User Guide* [85].

4.2 Estrutura do *software*

Para executar uma simulação no OpenFOAM é necessário seguir certas normas para que o código da plataforma consiga ler toda a informação que se pretende utilizar na simulação. Por este motivo é necessário organizar toda a informação de uma forma bastante específica. Deste modo, a informação referente a cada simulação tem que estar organizada em três pastas distintas, cada uma delas contendo vários ficheiros. Na Figura 16 está ilustrada a estrutura típica dum ficheiro a correr no OpenFOAM. De seguida é apresentado um breve resumo do conteúdo que deve estar presente em cada pasta:

- Primeiro instante de tempo: normalmente esta pasta intitula-se de pasta 0, uma vez que, diz respeito ao instante imediatamente antes do início da simulação numérica. Esta pasta contém todos os ficheiros que dizem respeito à informação imposta pelo utilizador, ou seja, todas as condições iniciais do problema e, também, as condições fronteira que regem o caso a estudar. Os ficheiros normalmente encontrados nesta pasta são a temperatura, pressão, velocidade e concentrações molares das diversas espécies;

- Constant: nesta pasta estão presentes todos os parâmetros que se mantêm constantes ao longo de toda a simulação, como por exemplo as propriedades físicas presentes no ficheiro *transportProperties*. Além disso, existe uma subdiretoria intitulada de *solverOptions* onde é possível manipular as condições do escoamento através de funções. Neste ficheiro estão presentes diversos tipos de funções, tais como, a função *Spark* utilizada para estudar um dos capítulos deste trabalho. Esta função, quando ativada, insere uma faísca dentro do queimador, possibilitando a ignição da mistura quando não existe qualquer fator externo que provoque o aumento da temperatura dentro do microcanal. Para além disto, é nesta pasta que se encontra toda a descrição da malha utilizada numa subdiretoria chamada *polyMesh*;
- System: é aqui que o utilizador define os parâmetros relacionados com o desenrolar da simulação. Esta diretoria tem que conter no mínimo três ficheiros distintos: *controlDict*, onde é possível definir o tempo inicial e final da simulação e também os intervalos de tempo a simular, *fvSchemes* e *fvSolution* onde são definidos os esquemas de discretização e os *solvers* das equações, respetivamente. Além disso, a utilização do ficheiro *decomposeParDict* insere a possibilidade de dividir a malha em partes iguais, aproveitando o processamento em paralelo e, assim, diminuir o tempo necessário para uma determinada simulação.

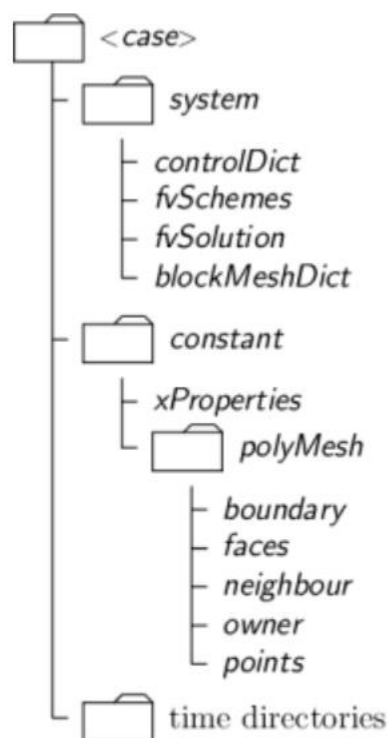


Figura 16 – Estrutura do ficheiro em causa [85].

A partir do momento em que se inicia a simulação, esta estrutura ganha uma certa dinâmica. Começam a ser criadas novas pastas no mesmo nível dos três ficheiros anteriormente apresentados. Estas pastas correspondem aos novos tempos calculados e são muito semelhantes à pasta do primeiro instante de tempo, ou seja, possuem praticamente os mesmos ficheiros, mas

com as propriedades do instante de tempo a que dizem respeito e com outros campos específicos adicionais, tais como, novas espécies provenientes da reação química.

Assim, à medida que a simulação vai sendo processada, o utilizador consegue ir verificando toda a informação dos instantes de tempo já calculados, consultando os ficheiros presentes nas novas pastas criadas. No fim da simulação é obtido um conjunto de pastas, cada uma referente a um instante de tempo com os diversos campos calculados.

4.3 Pré-processamento

4.3.1 Geração da malha

Como foi explicado anteriormente, as soluções numéricas do OpenFOAM são baseadas no método dos volumes finitos, ou seja, para poder aplicar este método é necessário decompor o domínio físico do caso em estudo numa malha discreta de volumes finitos.

Para gerar uma malha discreta, o utilizador tem duas hipóteses: pode conceber um ficheiro *blockMeshDict* desde a raiz ou manipular um ficheiro de um caso de estudo diferente. Este ficheiro encontra-se na subdiretoria *constant/polyMesh* e contém a informação acerca da geometria da malha. Primeiro o utilizador necessita de especificar todos os vértices que delimitam o volume da malha através de coordenadas cartesianas. Depois, são formados blocos constituídos por oito vértices na forma de hexaedro, como se pode observar na Figura 17. Cada bloco é constituído por um número de células especificado pelo utilizador em que, quanto mais células forem especificadas, mais refinado é o estudo dentro desse bloco. No entanto, um bloco mais refinado exige mais tempo de processamento. Todos os blocos têm um sistema de coordenadas local que tem que ser direito, ou seja, quando um observador está em linha com o eixo do z, um arco que vai desde um ponto no eixo do x até outro ponto no eixo do y tem o sentido horário. Cada bloco tem um determinado número de células, em que pode existir um gradiente de expansão relativamente ao tamanho de cada célula, ou seja, as células podem ir aumentando/diminuindo de tamanho segundo uma determinada orientação. Cada vértice do bloco é assumido, por definição, como um vértice reto, apesar de, em casos específicos, poder definir-se um vértice como curvo.

Depois de serem implementados todos os blocos da malha, é a altura de definir as faces por eles criadas que representam as condições fronteiras da malha. De seguida são apresentadas as ideias-chave que dizem respeito às condições fronteira de um caso geral.

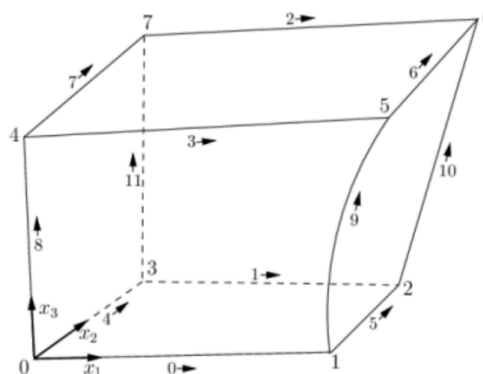


Figura 17 – Exemplo de um bloco da malha [85].

Além da ferramenta *blockMesh*, o OpenFOAM também fornece a ferramenta *snappyHexMesh* que é utilizada para “esculpir” uma malha já existente, ou seja, funciona como uma ferramenta de aperfeiçoamento da malha a uma geometria pré-definida. Consoante as intenções do utilizador, esta ferramenta, presente na pasta *system*, oferece diversas opções, tais como, refinar a malha, Figura 18-B, ajustar a malha a uma geometria já existente, Figura 18-C ou adicionar camadas limite numa zona específica, Figura 18-D.

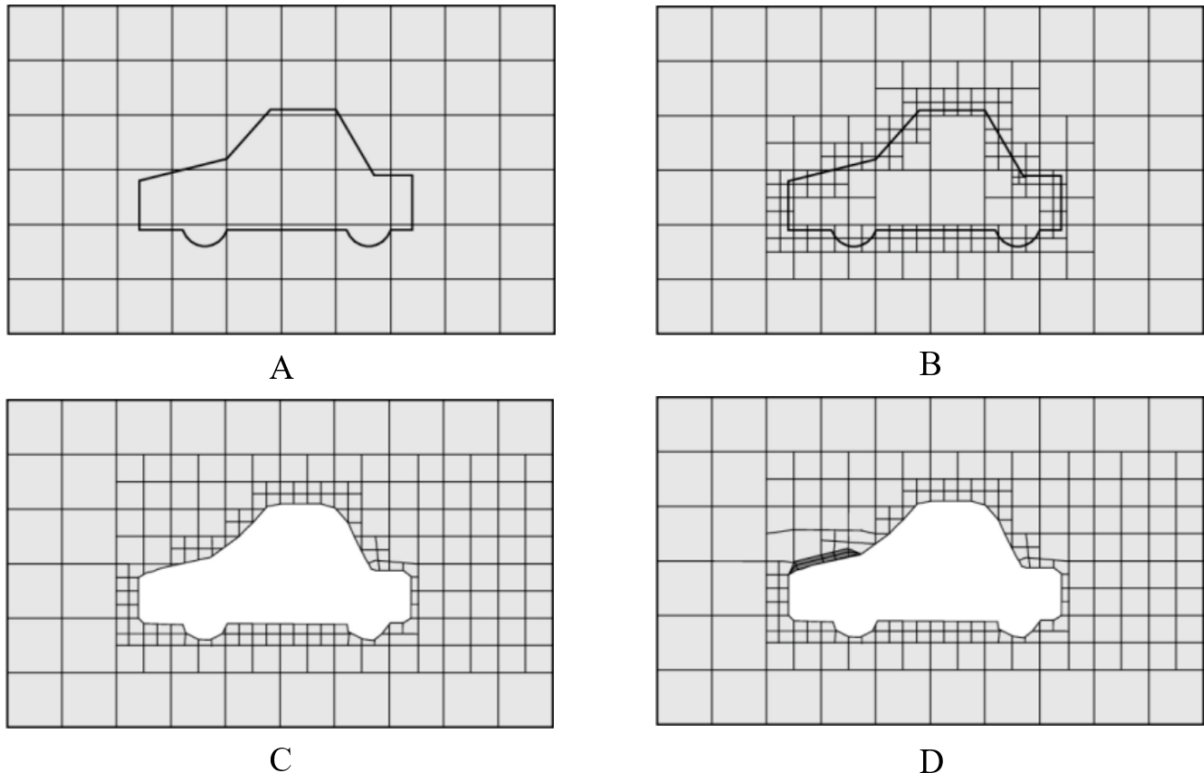


Figura 18 – Exemplos da aplicação da ferramenta *snappyHexMesh*: A – construção da malha de fundo; B – divisão de algumas células da malha com o objetivo de refinar certas zonas; C – ajuste da malha à geometria pretendida; D – inserção de camadas limite em zonas específicas [85].

4.3.2 Condições fronteira

As condições fronteira são sempre um fator extremamente importante neste tipo de problemas, uma vez que, são elas que fecham o sistema de equações que governa o caso em estudo, juntamente com as condições iniciais. Só depois de ter estes dois fatores bem definidos é que é possível dar início à simulação numérica.

Cada fronteira é dividida em regiões, e cada região tem uma palavra-chave associada, que descreve a interação que existe entre a fronteira e o meio exterior fictício. Estas palavras-chave definem o tipo de fronteira existente. Estas especificações atribuídas a cada fronteira são utilizadas mais tarde, bem como as respetivas fronteiras, para definir as condições iniciais do problema na pasta do primeiro instante de tempo, a pasta 0.

As principais condições fronteira disponibilizadas pelo código do OpenFOAM são as seguintes:

- *fixedValue*, que é usada para impor um valor fixo de uma determinada propriedade ao longo de toda a superfície, para todos os instantes de tempo simulados. É também conhecida como condição fronteira Dirichlet.

- *fixedGradient*, que é usada para impor um gradiente fixo de uma determinada propriedade ao longo de um determinado caminho ou superfície, para todos os instantes de tempo simulados. Um caso particular desta função é a função *zeroGradient*, aplicada quando o gradiente é igual a zero, ou seja, quando se quer que uma superfície seja isolada termicamente (caso adiabático). É também conhecida como condição fronteira Neumann.
- Condição fronteira Robin, que é uma combinação entre a condição Dirichlet e a Neumann.

No presente trabalho são utilizadas condições de fronteira térmicas, ou seja, a temperatura da parede é considerada uma condição inicial. Assim, podem ser deduzidas estas condições fronteira através dos exemplos anteriormente apresentados e, usando como exemplo a figura 19, obtêm-se as seguintes equações:

- Dirichlet na superfície S_1 :

$$T = f_1 \quad (4.1)$$

- Neumann na superfície S_2 :

$$q = f_2 \quad (4.2)$$

- Robin na superfície S_3 :

$$q = h(T - T_a) \quad (4.3)$$

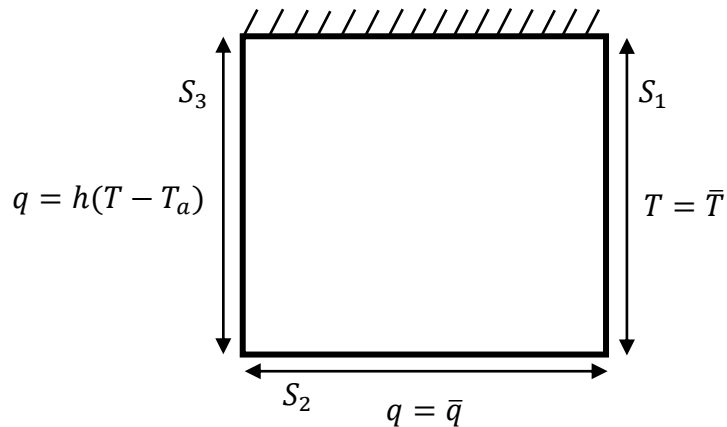


Figura 19 – Exemplo da aplicação dos diferentes tipos de condições fronteira.

Visto que o OpenFOAM não permite introduzir uma condição fronteira sob a forma de expressão ou função, foi desenvolvida uma ferramenta chamada *swak4foam* para conseguir ultrapassar esse obstáculo. Esta ferramenta possibilita a utilização de condições de fronteira mais complexas, como por exemplo, um perfil hiperbólico ou linear de temperatura. De facto,

esta ferramenta é de extrema importância no presente trabalho, como se poderá verificar mais à frente nas simulações efetuadas. Pode ser consultada mais informação sobre a ferramenta *swak4foam* em [86].

4.3.3 Discretização e solução das equações

Como mencionado no Capítulo 3, os escoamentos presentes neste estudo são descritos por uma série de equações diferenciais parciais em função do tempo e das dimensões espaciais. Uma vez que estas variáveis são contínuas, passam por uma transformação, convertendo estas variáveis em variáveis discretas, processo conhecido como discretização. Na análise CFD, essas variáveis têm de ser discretizadas para poderem ser resolvidas numericamente. Como as variáveis são discretizadas, há sempre uma percentagem de erro inerente ao processo, pelo que os métodos numéricos implementados devem reduzir estes erros a um nível insignificante.

A especificação dos esquemas de discretização dos Volumes Finitos para resolver as equações diferenciais parciais está definida no dicionário *fvSchemes* localizado na diretoria *system*. Relativamente à solução das equações, tolerâncias e controlos de algoritmos, estes são definidos no dicionário *fvSolution*, também localizado na diretoria *system*. As equações diferenciais comuns associadas aos mecanismos cinéticos são resolvidas através do *solver* OpenSMOKE.

4.3.4 Controlo da simulação

Toda a simulação tem que ser controlada através de parâmetros de controlo, presentes no ficheiro *controlDict* na subdiretoria *system*. Neste ficheiro são especificados o tempo inicial e final da simulação, o intervalo de tempo em que o *software* guarda a informação e a sua precisão.

Para conseguir obter um bom desempenho na simulação numérica, esta tem que respeitar certos requisitos de estabilidade em cada célula da malha, nomeadamente estabilidade numérica e estabilidade temporal. Posto isto, o número Courant (Co) tem que ser sempre menor do que 0,5. Este número é definido como:

$$Co = \frac{\delta t |U|}{\delta x} \quad (4.4)$$

onde δt é o intervalo de tempo da simulação, $|U|$ é o valor absoluto da velocidade numa determinada célula e δx é a dimensão da célula na direção da velocidade. Visto que é necessário obedecer à condição $Co < 0,5$, é usual determinar o δt com base no pior cenário possível da combinação entre a maior velocidade de escoamento e a menor dimensão da célula. É possível executar uma simulação num modo de intervalos de tempo ajustáveis, onde o novo intervalo de tempo é calculado para cada instante, e onde o número de Courant máximo na malha não pode exceder um valor máximo imposto.

4.3.5 Ignição

A ignição do fenómeno de combustão é o momento em que inicia a reação química típica deste processo. Para isto suceder é necessário que a mistura atinga uma certa temperatura. Deste modo, existem duas formas possíveis para se conseguir a ignição da mistura: ou existe uma fonte exterior de calor que está a fornecer calor a uma pequena porção da mistura (por exemplo,

uma faísca), ou a temperatura da mistura atinge um valor igual ou superior à sua temperatura de autoignição, o que é conseguido através da imposição de um gradiente de temperatura na parede.

Neste trabalho são estudadas as chamas provenientes de gases previamente misturados (*premixed flames*). Nas primeiras duas etapas de resultados obtidos, são impostos dois gradientes de temperatura diferentes à parede do queimador, sendo que no primeiro é imposto um perfil hiperbólico de temperatura, enquanto no segundo é imposto um perfil linear. Estes perfis são implementados através da escrita da função do perfil pretendido na secção *burnerwall* presente no ficheiro T da pasta do primeiro instante de tempo.

Na terceira etapa dá-se a ignição da mistura a partir de uma faísca localizada imediatamente antes da entrada na primeira cavidade do microcanal. A faísca é implementada através da função *spark* no ficheiro *solverOptions* localizado na pasta *constant*. Depois de ativar esta função escrevendo *on* na primeira linha do código, é necessário especificar a posição da faísca dentro do queimador, ou seja, as suas coordenadas cartesianas, quando é que acende, a sua duração, a temperatura e a dimensão traduzida pelo seu diâmetro.

4.4 Simulação

Depois de cumprir todas as etapas anteriormente apresentadas na secção de pré-processamento do caso a estudar, o utilizador está em condições de poder dar início à simulação. As aplicações OpenFOAM podem executar a simulação em primeiro plano ou como um processo de fundo. Na simulação em primeiro plano, o seu progresso será escrito na janela do terminal, dizendo ao utilizador a hora atual, o número de Courant máximo e os resíduos iniciais e finais para todos os campos. Como processo em segundo plano ou de fundo, o utilizador pode solicitar que estas informações sejam guardadas num ficheiro, enquanto utiliza a janela do terminal para outras tarefas. Foi esta última abordagem que foi adotada na execução de todas as simulações presentes neste estudo, dado que o número de simulações foi bastante elevado e houve a necessidade de realizar várias tarefas em paralelo. Assim, para consultar as simulações em curso utilizou-se o comando *squeue -u* e o devido nome de utilizador, que apresentava a lista de todas as simulações em curso ou em lista de espera.

A simulação numérica é um processo que exige bastante tempo computacional, dependendo principalmente do refinamento da malha. Por esta razão, neste trabalho foi necessário utilizar ferramentas para diminuir o tempo de processamento, como é o caso da utilização de vários processadores ligados uns aos outros, dividindo a geometria do queimador em partes iguais pelos diversos processadores utilizados. Numa primeira fase utilizaram-se conjuntos de 4 processadores e, posteriormente, aumentou-se para 8 processadores. Esta decisão deve ser tomada no pré-processamento da simulação, alterando os parâmetros no ficheiro *decomposeParDict*, localizada na pasta *system*.

4.5 Pós-processamento

A principal ferramenta disponibilizada pelo OpenFOAM para processar toda a informação recolhida a partir de uma simulação numérica é o *paraFoam*, que utiliza o ParaView. Esta aplicação é uma aplicação do tipo *opensource* que permite a visualização de todos os resultados obtidos. É um *software* bastante intuitivo que permite ao utilizador observar os resultados dos diferentes campos calculados nas diversas células, em todos os instantes de tempo. Visto que esta análise é uma análise temporal, o ParaView tem a capacidade de criar uma animação, o que permite ao utilizador compreender melhor o que está a acontecer ao longo do tempo,

principalmente na etapa da ignição da mistura. Além disso, esta aplicação também oferece uma vasta gama de ferramentas de análise de dados, tais como, a possibilidade de criar macros, gráficos temporais e gráficos de posição.

4.6 Notas finais

Visto que o tempo de realização desta tese foi extremamente curto (aproximadamente 5 meses) e que estava previsto realizar inúmeras simulações de elevada complexidade, bem como as respectivas análises de dados, foi concluído que era impossível realizar este estudo somente com um computador pessoal devido à fraca disponibilidade computacional. Além disso, foi necessário implementar diversas simulações em paralelo o que obrigou ao uso de *software* especializado para esse efeito. Deste modo, a Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto concedeu acesso a um conjunto de computadores de alto rendimento (HPC), que são utilizados para resolver problemas de elevada complexidade, como é caso deste projeto de dissertação. Este recurso computacional é intitulado de GRID@FEUP e organizado num *cluster* de máquinas destinadas ao processamento de dados. Estas máquinas são idênticas aos computadores comerciais, mas possuem um CPU bastante mais poderoso, uma maior memória RAM e a sua rede de trabalho é mais rápida.

O *cluster* utilizado foi *Avalanche*, na FEUP. Este possui 29 nós, cada um com 16 processadores com memória RAM que vai desde os 64 GB até aos 128 GB. Cada nó é ligado à rede através de 40 Gbps InfinityBand. Existem 10 TB de armazenamento global, onde cada nó tem 500 GB de armazenamento local. O *cluster* trabalha com a 6ª versão do sistema operativo científico Linux.

4.7 Caso analisado neste estudo

4.7.1 Geometria do queimador

Para todas as simulações efetuadas neste trabalho, a temperatura de entrada da mistura mantém-se inalterada, $T_{entrada}=300$ K, à pressão atmosférica. A mistura é composta sempre pelas mesmas espécies, variando a sua razão de equivalência, ou seja, as espécies presentes na mistura são o combustível H_2 e o oxidante (ar), composto por O_2 e N_2 . As restantes condições fronteira são apresentadas no esquema presente na Figura 20.

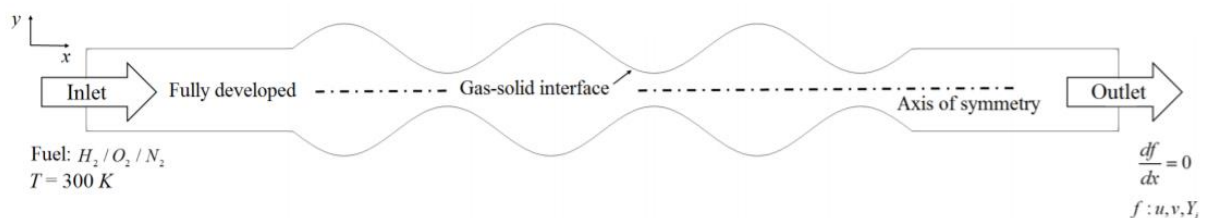


Figura 20 – Esquema do domínio computacional simulado.

4.7.2 Malha utilizada

Dado este domínio de estudo, na Figura 21 é apresentada a resolução da malha criada para efetuar a análise baseada no método dos volumes finitos. A resolução da malha utilizada neste estudo compreende 10836 células em todo o microcanal, com espaçamento equidistante no centro, resultando num refinamento das zona de menor dimensão, onde as células mais pequenas apresentam dimensões de 25 por 9 micrómetros, muito similar à resolução de malha utilizada nos estudos de Alipoor e Mazaheri [26], e também no estudo sobre o efeito da diluição de N_2 em fenómenos de combustão envolvendo misturas de H_2 e ar num microcanal, desenvolvido por Resende et al [87].

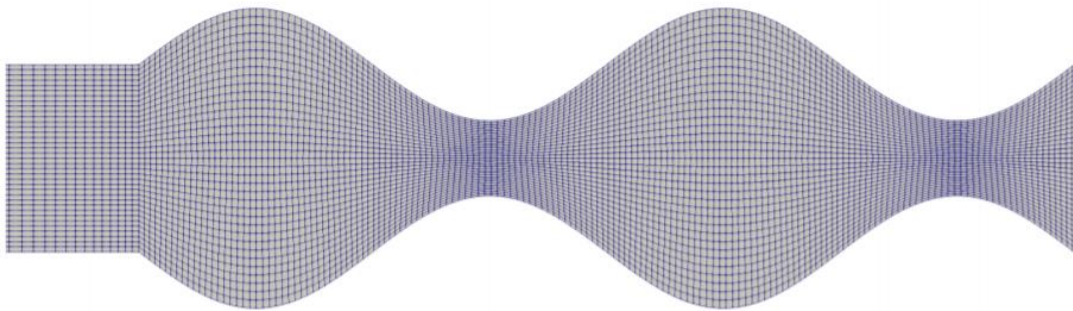


Figura 21 – Resolução da malha.

Como se pode observar na Figura 21, a malha utilizada é mais refinada nas contrações do que no seio das cavidades do microcanal. De facto, o refinamento da malha é um parâmetro extremamente importante a definir no início de cada simulação. Um baixo refinamento da malha pode originar erros demasiado elevados nos parâmetros a calcular em cada volume finito, enquanto um refinamento demasiado elevado obriga à utilização de recursos computacionais de grande potência ou origina tempos de simulação bastante extensos. A malha utilizada na presente dissertação não é uma malha com um refinamento elevado, apesar disso apresenta um erro bastante baixo.

5 Resultados com perfil de temperatura hiperbólico

5.1 Perfil de temperatura imposto

Nesta primeira fase, o aquecimento da mistura foi efetuado através de um perfil hiperbólico imposto ao longo da parede do queimador. Considerou-se uma parede com espessura nula, não existindo qualquer troca de calor da parede para o exterior. Assim, o único fluxo de calor existente é o fluxo de calor da parede para a mistura gasosa de combustível e ar. Na Figura 22 é apresentado o perfil hiperbólico de temperatura utilizado neste capítulo:

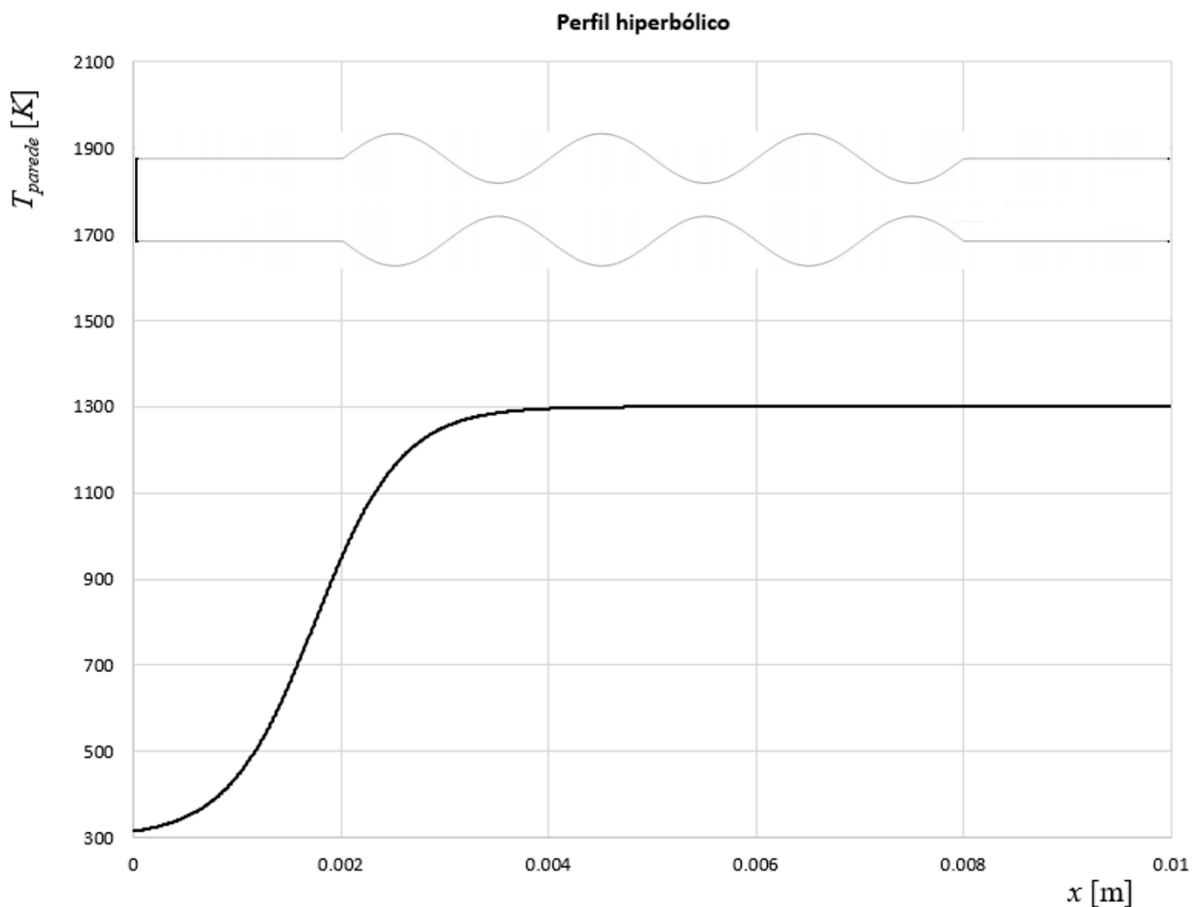


Figura 22 – Perfil hiperbólico de temperatura utilizado ao longo da parede do queimador.

É a partir deste perfil de temperaturas que se consegue atingir a temperatura de autoignição da mistura. A partir do momento que essa temperatura é atingida, dá-se a reação química de combustão e espera-se que, de alguma forma, o processo alcance o regime permanente.

5.2 Mapa de estabilidade

Foi efetuado um conjunto de 12 simulações numéricas, todas com os mesmos parâmetros geométricos e com a mesma malha, cuja informação está presente no subcapítulo 4.7. Assim, na Tabela 4 estão presentes todas as simulações efetuadas, e as devidas velocidades e razões de equivalência.

Tabela 4 - Conjunto de simulações efetuadas utilizando um perfil hiperbólico de temperatura ao longo da parede do queimador

Amostra	Razão de equivalência, ϕ [-]	Velocidade de entrada, U [m/s]
HIP_01	0,7	4
HIP_02		8
HIP_03		10
HIP_04		12
HIP_05	1,1	4
HIP_06		8
HIP_07		10
HIP_08		12
HIP_09	1,3	4
HIP_10		8
HIP_11		10
HIP_12		12

Assim, após realizar todas estas simulações através da plataforma OpenFOAM, procedeu-se a uma análise de dados bastante detalhada de modo a estudar os efeitos causados pela variação destes dois parâmetros. Posto isto, na Figura 23 está presente o mapa de estabilidade deste conjunto de simulações. Este mapa tem como objetivo definir a zona de transição do comportamento da chama, de acordo com a velocidade de entrada e a respetiva razão de equivalência.

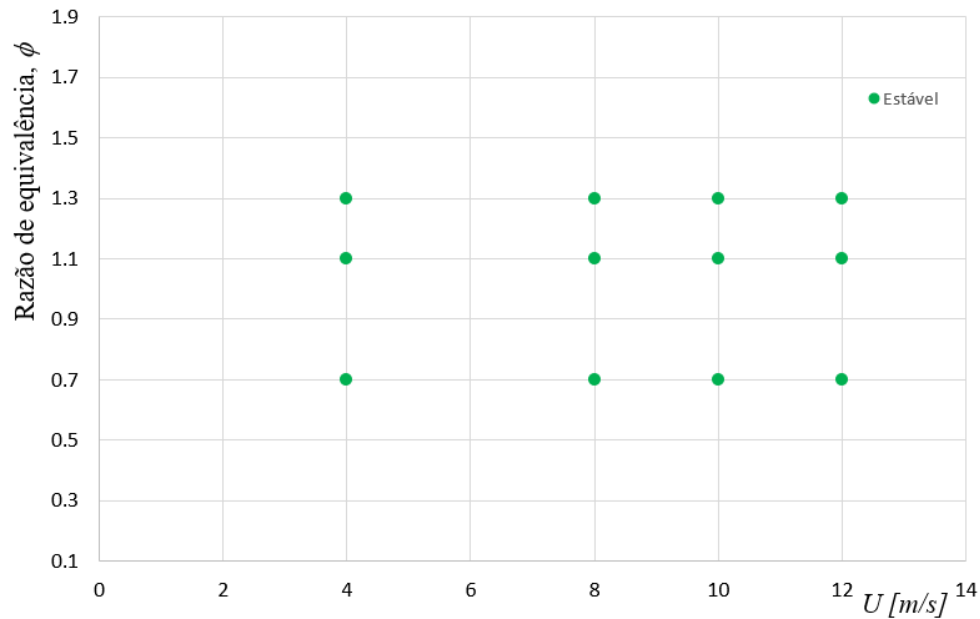


Figura 23 - Mapa de estabilidade das várias simulações efetuadas utilizando um perfil hiperbólico de temperatura ao longo da parede do queimador.

5.3 Resultados obtidos e discussão

Nesta primeira fase foi efetuado um conjunto de 12 simulações utilizando um perfil hiperbólico de temperatura, de modo a conseguir impor a temperatura da parede nas diversas secções do queimador.

Nesta secção, os resultados obtidos para a dinâmica da chama, temperaturas e taxa de libertação de calor devido à reação de combustão são discutidos em detalhe, para diferentes velocidades de entrada e diferentes razões de equivalência. Para além disso, também é feita uma análise em relação à percentagem mássica de algumas espécies importantes neste tipo de fenómeno.

A dinâmica da estrutura da chama é analisada por comparação com outros casos já estudados em trabalhos anteriores. A comparação com dados experimentais não é possível devido à dificuldade de medição das diversas características da combustão a esta escala.

Os resultados obtidos foram divididos, em primeiro lugar, quanto à razão equivalência da amostra, ou seja, $\phi=0,7$, $\phi=1,1$ e $\phi=1,3$. O impacto da velocidade de entrada na estrutura da chama para os diferentes casos pode ser observado na Figura. 24, onde são apresentados os mapas de contorno da distribuição da taxa de libertação de calor devido à reação de combustão, Q . Independentemente da velocidade de entrada e da razão de equivalência, a chama torna-se sempre estável, uma vez que, o fator que determina se a chama fica ou não estável é o perfil de temperaturas utilizado na parede do queimador. Em todas as simulações verificou-se que, à medida que aumenta a velocidade de entrada, os valores máximos da distribuição Q no eixo central do reator deslocam-se para jusante. Apesar de se verificar esta movimentação da chama, esta ancora sempre na entrada da primeira cavidade do queimador, onde se situa a subida repentina da temperatura da parede. Ao analisar os resultados obtidos para a velocidade de entrada máxima, 12 m/s, é possível deduzir que, à medida que se vai aumentando cada vez mais a velocidade, a taxa de libertação de calor é dividida em duas regiões distintas. Ao analisar o efeito do aumento da razão de equivalência da mistura gasosa, nota-se que quanto mais rica é a mistura, maior é a resistência da chama, ou seja, com o aumento da velocidade a chama não se deforma tanto e, assim, evita-se a sua separação em duas regiões diferentes.

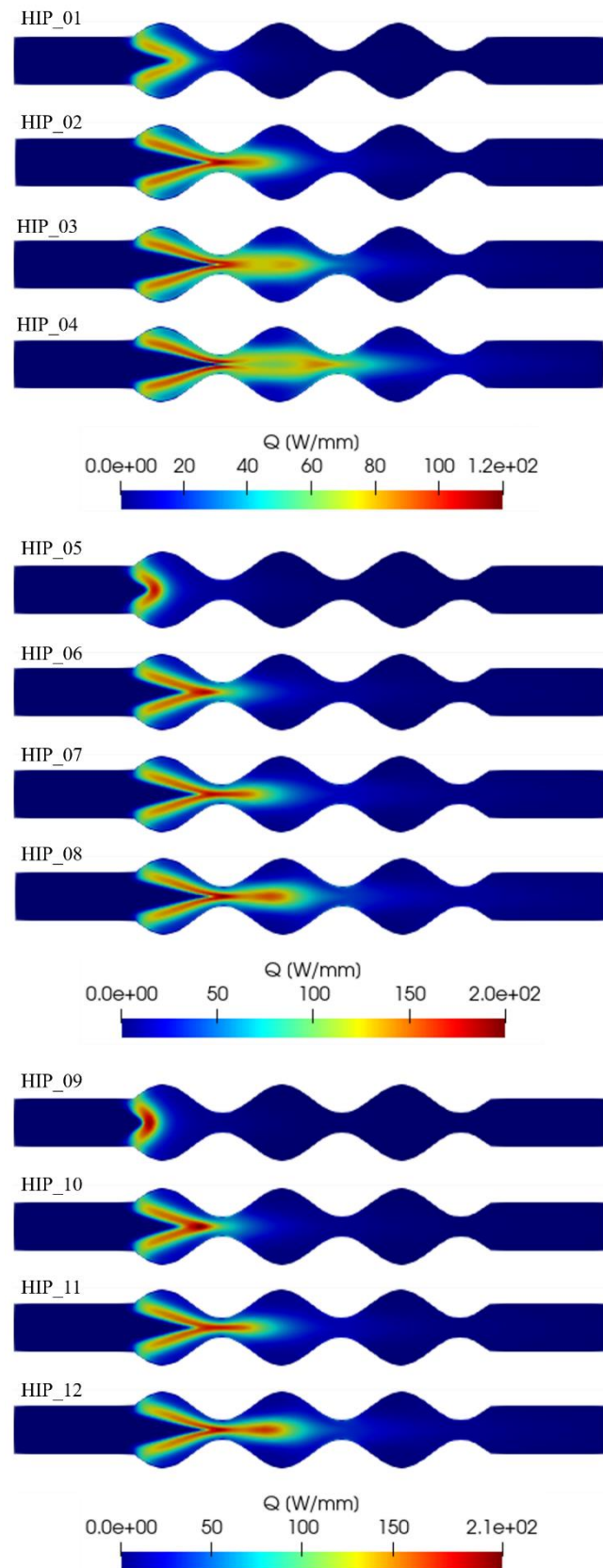


Figura 24 – Mapas de contorno da quantidade de calor libertado Q , em W/mm, para cada simulação.

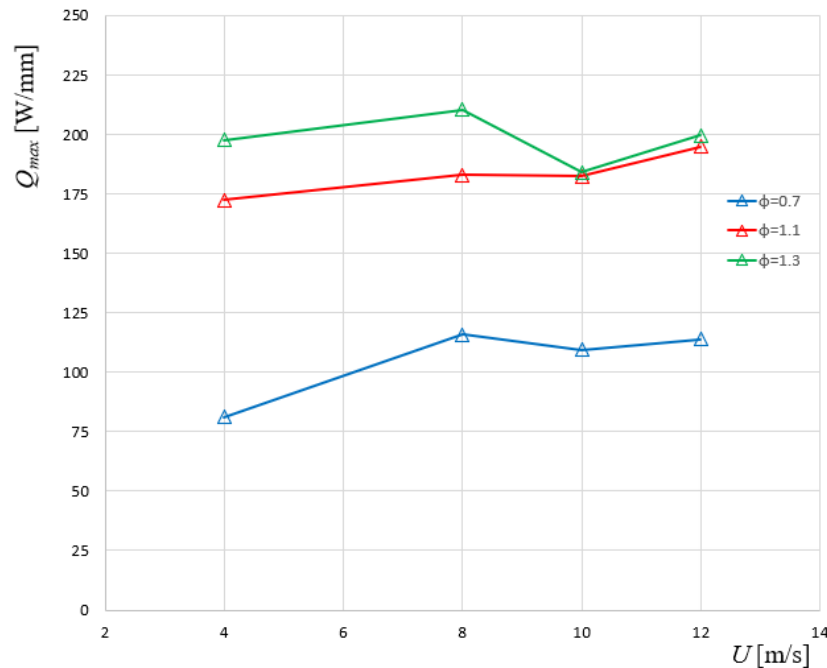


Figura 25 – Gráfico referente aos valores máximos de calor libertado em cada simulação.

No gráfico da Figura 25 observa-se um fenómeno peculiar na transição de $U=10$ m/s para $U=12$ m/s. A evolução do calor máximo libertado tende a estabilizar ou até diminuir com o aumento da velocidade de entrada. Contudo, na transição mencionada anteriormente verifica-se um ligeiro aumento dos valores obtidos. Assim verifica-se que, o aumento da velocidade de entrada a partir de 10 m/s, origina chamas de tal maneira extensas que a intensidade da chama aumenta e a zona de temperatura elevada também se expande. Assim, é de esperar que a temperatura máxima diminua devido à maior dispersão térmica dentro do microcanal.

De seguida, na Figura 26 são apresentados os mapas de contorno da temperatura dentro do microcanal. À medida que a velocidade de entrada aumenta, tal como acontece com a distribuição do calor libertado, as temperaturas máximas ao longo do eixo central do queimador deslocam-se para jusante. É de notar que, a partir de um determinado valor de velocidade, a chama começa a ocupar parte do volume da segunda cavidade e, apesar de não ter sido simulado, para velocidades mais elevadas também se estenderá à terceira cavidade do queimador. Para além disso, através da Figura 27, consegue-se observar a evolução da temperatura máxima para os diversos casos. O aumento da velocidade de entrada proporciona uma ligeira diminuição da temperatura máxima no caso de $\phi=0,7$ e uma diminuição bastante acentuada nos casos de $\phi=1,1$ e $\phi=1,3$. Esta diminuição é verificada na transição da velocidade 4 m/s para 8 m/s e, a partir deste valor, a temperatura máxima tende a estabilizar. Ao analisar a evolução da temperatura máxima com o aumento da razão de equivalência constata-se que a temperatura aumenta significativamente ao passar a barreira de $\phi=1$. Os resultados obtidos para $\phi=1,1$ e $\phi=1,3$ são bastante similares, no entanto, quando comparados com os resultados obtidos para $\phi=0,7$, estes últimos têm valores inferiores em toda a gama de velocidades.

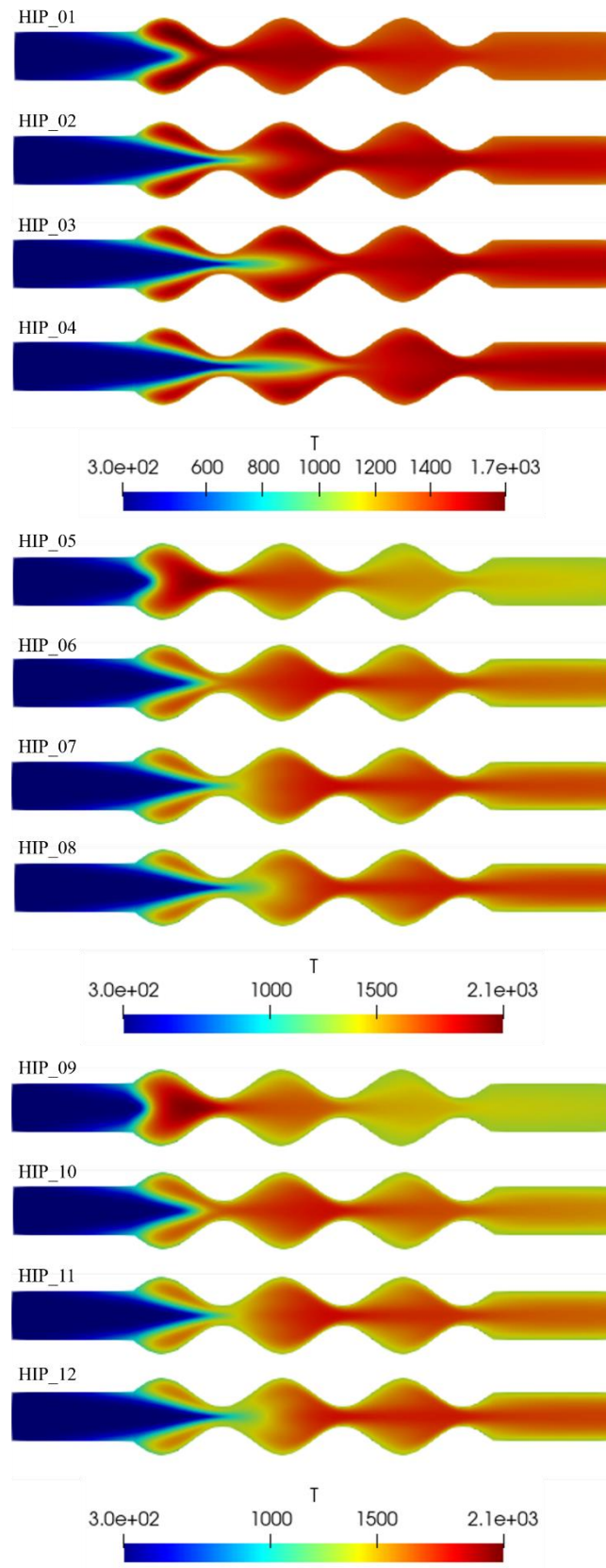


Figura 26 – Mapas de contorno da temperatura T , em Kelvin, para todas as simulações.

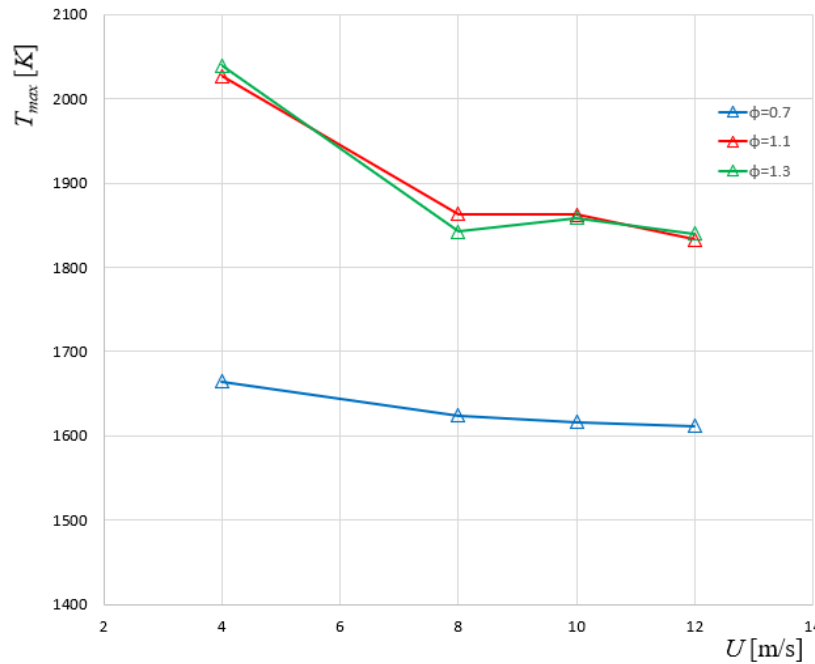


Figura 27 – Gráfico referente aos valores máximos de temperatura em cada simulação.

Nestas simulações também é possível estudar a evolução ao longo do microcanal das diferentes espécies provenientes da reação de combustão. A Figura 28 apresenta os mapas de contorno da espécie OH. Utilizamos esta espécie para identificar a frente da chama proveniente da reação química. A distribuição da concentração de OH ao longo do queimador está diretamente ligada à distribuição de temperatura e de calor libertado, analisadas anteriormente. Deste modo, conseguimos verificar que à medida que a velocidade de entrada aumenta, a fração mássica de OH estende-se a uma zona a jusante do canal, ocupando duas ou até as três micro cavidades. Com o aumento da razão de equivalência a estrutura da chama fica mais estreita e, como se pode verificar na Figura 29, as concentrações máximas de OH aumentam significativamente com a variação de $\phi=0,7$ para $\phi=1,1$.

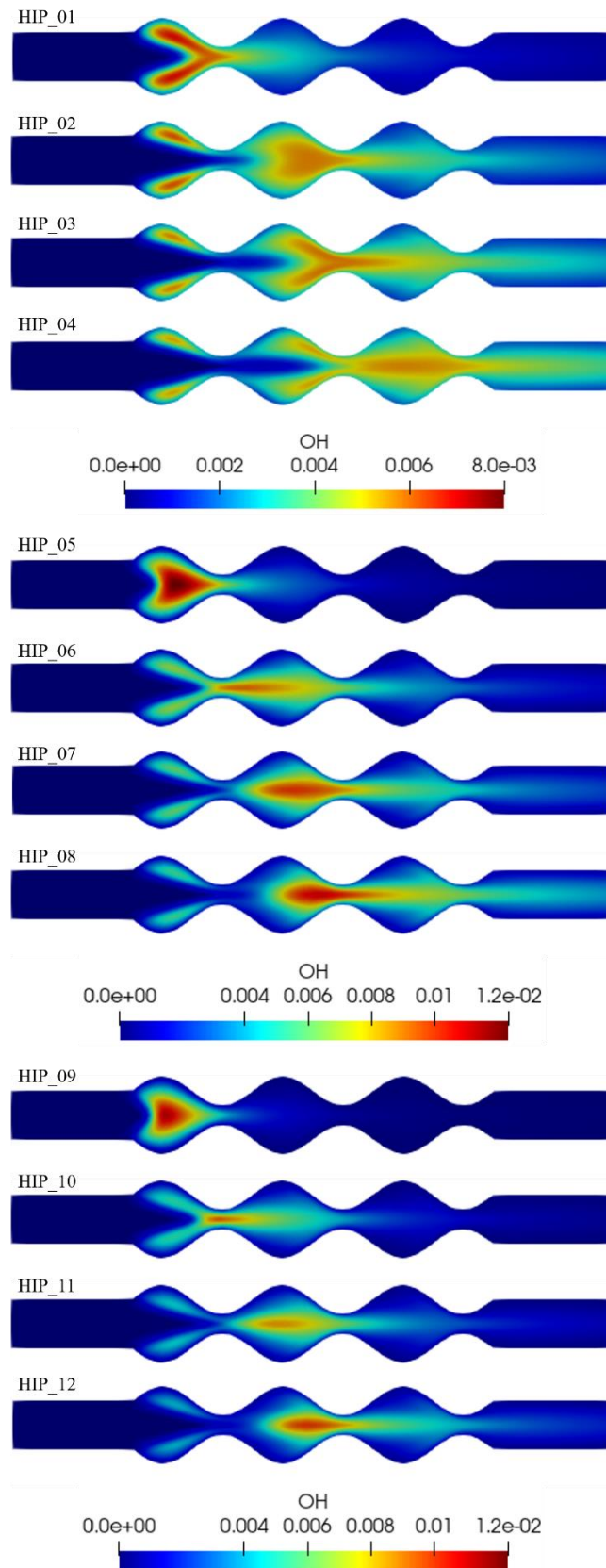


Figura 28 – Mapas de contorno das concentrações de OH, em fração mássica, para cada simulação.

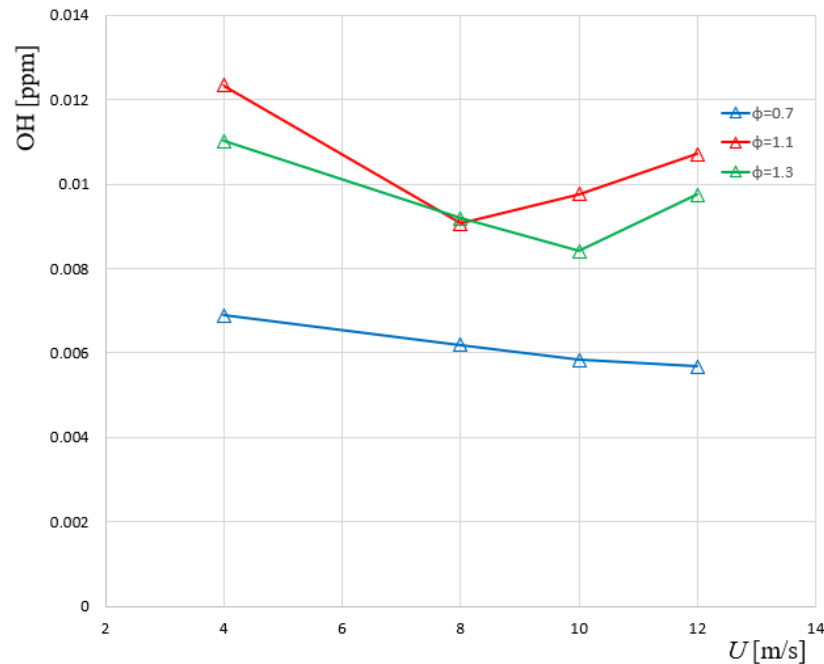


Figura 29 – Gráfico referente aos valores máximos da concentração de OH, em fração mássica, em cada simulação.

Após esta análise qualitativa da evolução da chama nos diferentes casos simulados, é agora a altura de proceder à análise quantitativa das diferentes propriedades relevantes. Para isso, foi efetuado um estudo ao longo do eixo central do microcanal com o propósito de entender melhor o efeito da variação da velocidade de entrada imposta e da variação da razão de equivalência da mistura gasosa.

Nas Figuras 30, 31 e 32 estão presentes os gráficos que contêm os resultados da temperatura e do calor libertado ao longo do eixo central do queimador e, numa primeira fase, estes resultados estão agrupados em função da razão de equivalência da mistura, ou seja, é apresentado um gráfico para cada ϕ simulado. Na generalidade dos casos, à medida que aumenta a velocidade de entrada, a subida de temperatura na zona da chama é cada vez menos abrupta. Além disso, a temperatura ao longo do queimador decresce de uma forma mais suave, atingindo o seu pico cada vez mais a jusante no microcanal. Analisando a evolução da temperatura após atingir o seu pico, observa-se que as ondulações do queimador afetam bastante o perfil de temperatura para os casos de velocidade mais baixa, perdendo esse efeito à medida que a velocidade aumenta. À medida que a distância da parede aumenta (paredes ondulatórias), há uma redução das perdas de calor para a parede, consequência da mistura de gases e produtos da combustão presentes entre a chama e a parede, que atua como resistência ao fluxo de calor e, por isso, a temperatura estabiliza. Este fenómeno é facilmente observado nos casos de $\phi=1,1$ e $\phi=1,3$, utilizando uma velocidade de 4 m/s. Nos casos de $\phi=1,1$ e $\phi=1,3$ nota-se uma maior diferença entre os resultados obtidos para a velocidade mais baixa. Para $U=4$ m/s, o perfil de temperatura apresenta claramente um pico acima dos 2000 K e, quando se avança no canal, nota-se claramente o efeito da geometria ondulatória do queimador já explicado anteriormente. Para as restantes velocidades, a temperatura atinge um pico ligeiramente abaixo dos 1900 K e, à medida que a velocidade aumenta, a temperatura tende a estabilizar num valor cada vez mais elevado. Para o caso de $\phi=0,7$ verifica-se que não existe grande diferença entre os valores absolutos dos picos de temperatura, uma vez que, para todas as velocidades o pico situa-se na ordem dos 1600 K.

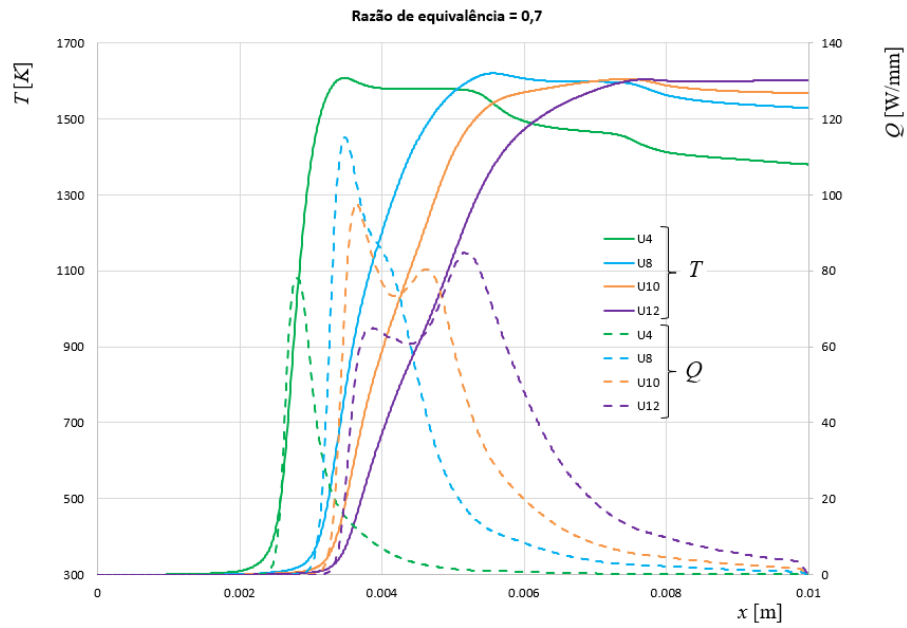


Figura 30 – Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para as simulações com $\phi=0,7$.

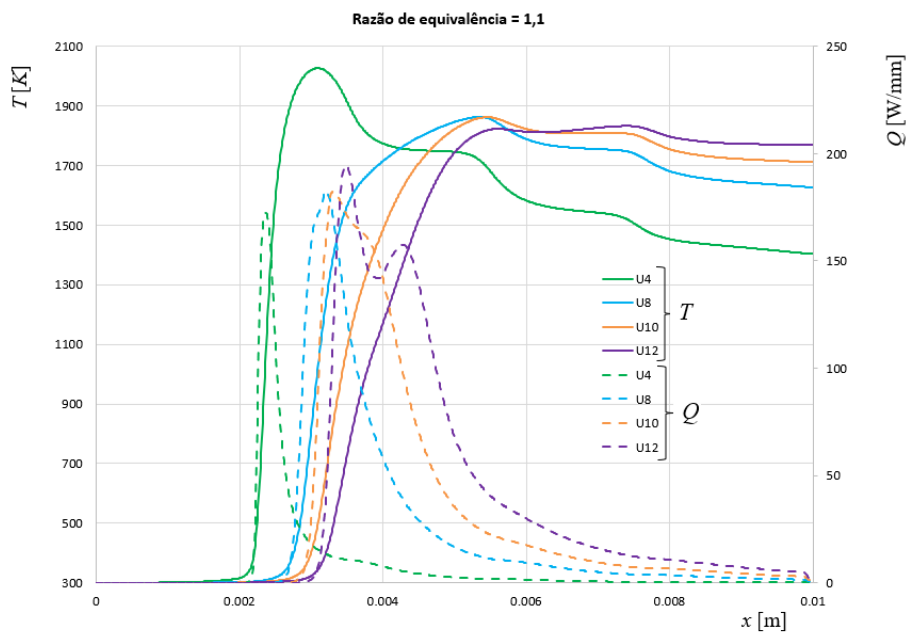


Figura 31 - Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para as simulações com $\phi=1,1$.

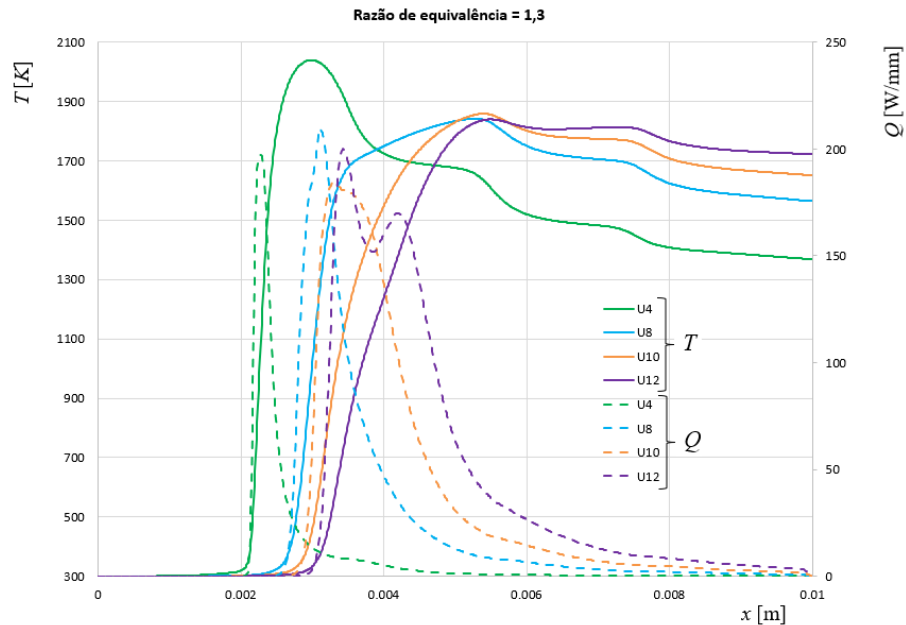


Figura 32 - Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para as simulações com $\phi=1,3$.

Ao observar a evolução do calor libertado pela reação de combustão, é de salientar que o pico de calor acompanha a evolução da temperatura, ou seja, quanto maior a velocidade de entrada, mais a jusante se localiza a curva ascendente de calor. Em termos de valor absoluto em W/mm, conclui-se que o aumento da velocidade não é um fator preponderante na taxa de libertação de calor, uma vez que, o calor libertado pela combustão depende essencialmente da composição química da mistura que entra no queimador. Contudo, para o caso de $\phi=0,7$, utilizando uma velocidade de 8 m/s, observa-se um pico de calor bastante mais elevado com um valor de mais ou menos 115 W/mm. Por fim, a variação da velocidade de entrada contribui principalmente para a alteração do perfil da curva ascendente de calor, ou seja, quanto maior a velocidade de entrada, mais o perfil se torna não monotónico e a libertação de calor é feita em duas regiões consecutivas, cada uma delas apresentando um pico.

Após analisar o efeito do aumento da velocidade de entrada para as diferentes razões de equivalência utilizadas, é também bastante interessante voltar a analisar os mesmos dados, mas agora agrupados pelas respetivas velocidades de entrada, conseguindo assim observar-se o efeito do aumento da razão de equivalência da mistura.

Na Figura 33 estão representadas as evoluções dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para as diferentes velocidades de entrada utilizadas. Em geral, o aumento do ϕ da mistura proporciona um aumento da temperatura da chama e, também, uma subida de temperatura mais repentina, ou seja, contribui para a diminuição da extensão da chama. Além disso, para todas as velocidades, verifica-se uma grande semelhança da evolução da temperatura nos casos de $\phi=1,1$ e $\phi=1,3$, distinguindo-se claramente do caso de $\phi=0,7$. Esta diferença deve-se ao facto de a mistura passar a barreira de $\phi=1$, ou seja, a mistura com $\phi=0,7$ é pobre tendo maior percentagem mássica de ar do que de combustível, enquanto as misturas com $\phi=1,1$ e $\phi=1,3$ são ricas.

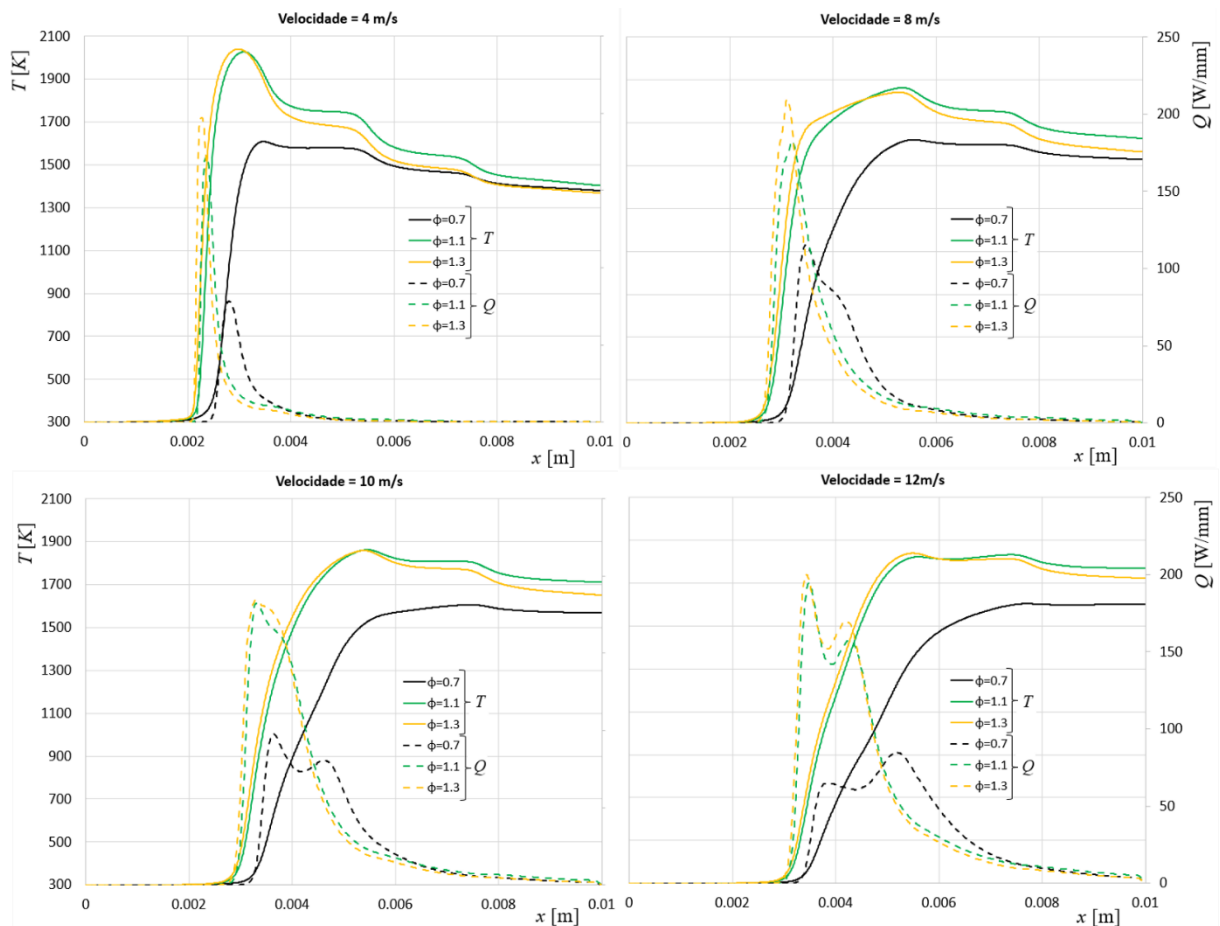


Figura 33 - Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, agrupados pela velocidade de entrada utilizada.

Dado que dentro do microcanal dá-se um conjunto de reações químicas que libertam calor, quando se altera a composição química da mistura, altera-se inevitavelmente a quantidade de calor libertado por essas reações. Deste modo verifica-se que, à medida que se aumenta a razão de equivalência da mistura, a taxa de libertação de calor em W/mm também aumenta. Este aumento é bastante significativo verificando-se, para $\phi=0,7$, valores na ordem dos 80 W/mm, enquanto, para $\phi=1,1$ e $\phi=1,3$, estes valores sobem para a ordem dos 200 W/mm.

Foi efetuada uma análise das taxas integradoras de calor libertado nos diversos casos, ou seja, através do *software* Paraview, utilizou-se um filtro chamado *Integrate Variables* que, basicamente, calcula o integral da quantidade de calor libertado em toda a malha simulada, para um determinado instante de tempo. Assim, consegue-se analisar a variação da quantidade total de calor libertado dentro do queimador para as diversas combinações de velocidade de entrada e razão de equivalência da mistura. Na Figura 34 apresenta-se um gráfico de barras onde são quantificadas as diferentes taxas de calor totais. Ao analisar este gráfico conclui-se que, a variação da velocidade de entrada tem bastante mais impacto na subida dos valores da taxa de calor total, do que a variação da razão de equivalência. De facto, ao aumentar a velocidade, os valores do calor libertado aumentam progressivamente, apresentando uma evolução mais ao menos linear. No caso do aumento da razão de equivalência, verifica-se um ligeiro aumento da taxa de calor na transição de $\phi=0,7$ para $\phi=1,1$ em toda a gama de velocidades e, na transição seguinte, estes valores tendem a estabilizar, observando-se uma ligeira diminuição.

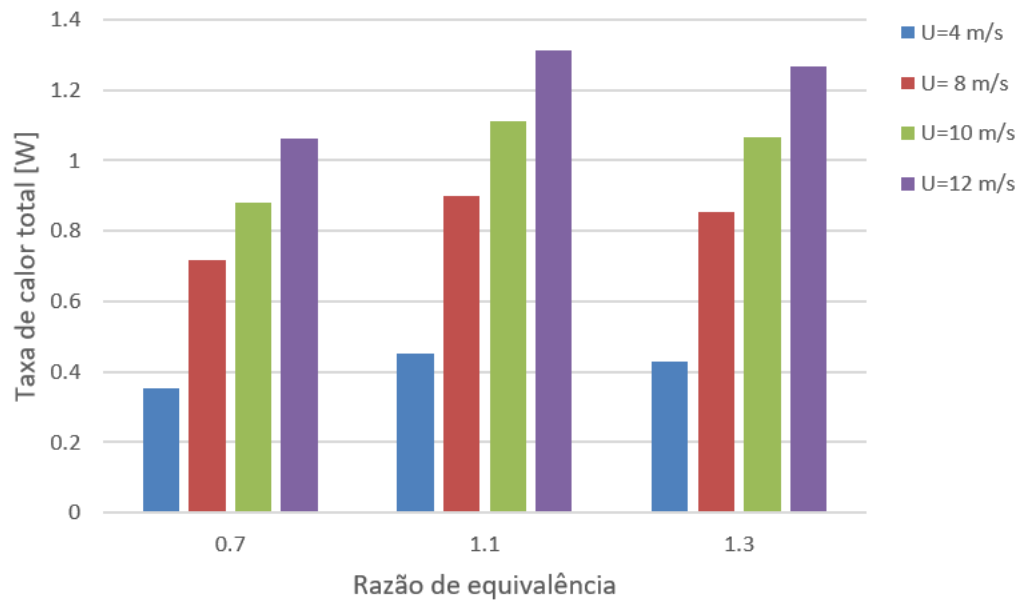


Figura 34 – Gráfico referente à taxa de calor total de cada simulação.

Em todas as simulações efetuadas foi utilizada uma cinética capaz de estudar as frações mássicas das várias espécies envolvidas no processo de combustão. Na Figura 35 é possível observar a evolução da fração mássica das principais espécies ao longo do eixo central do queimador. Através desta análise, compreende-se bastante melhor o porquê de se dar a reação de combustão e quais as espécies envolvidas nessa reação. Contudo, a evolução das várias espécies estudadas é bastante similar em todas as simulações efetuadas neste capítulo. O gráfico da Figura 35 indica que o H_2 é completamente consumido na zona da chama, formando-se H_2O e OH . Além disso, o O_2 apresenta uma grande diminuição da sua fração mássica e a fração mássica do N_2 decresce ligeiramente na zona de combustão, retomando o seu valor inicial a jusante do canal.

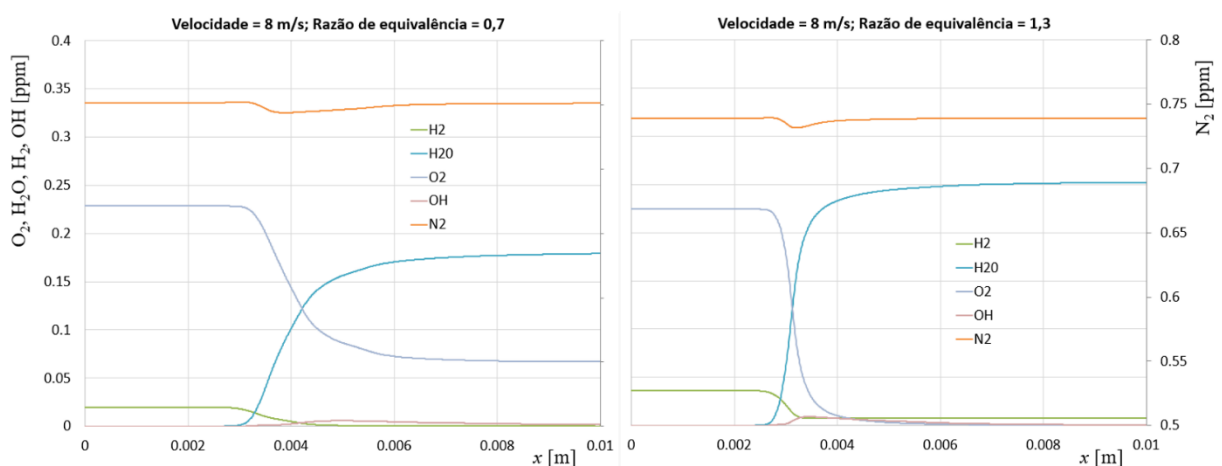


Figura 35 – Gráficos referentes ao estudo das concentrações mássicas de 5 espécies diferentes (O_2 , H_2O , H_2 , OH e N_2) ao longo do eixo central do queimador: (à esquerda) gráfico relativo à simulação HIP_02; (à direita) gráfico relativo à simulação HIP_10.

5.4 Análise de micropropulsão

A análise de todos os resultados numéricos em relação à capacidade de propulsão foi feita com base num dos indicadores mencionados na secção 2.2, o impulso específico, F_{esp} .

De seguida serão inumeradas as diversas etapas para obtenção dos valores deste indicador:

- Através do *software Paraview* foi realizada a integração da variável $U(\text{mag})$, ou seja, o valor absoluto do vetor velocidade, em toda a secção de saída do microcanal.
- Em segundo lugar, esse valor proveniente da integração foi dividido pela área da secção de saída do queimador, área essa igual a $4 \times 10^{-8} \text{ m}^2$, resultando no valor absoluto da velocidade média de saída.
- Por fim, através da equação 2.8, apresentada no capítulo 2, foi calculado o impulso específico.

Neste capítulo verificou-se que, em todas as situações simuladas foi obtida uma chama perfeitamente ancorada numa determinada secção do microcanal. Posto isto, o impulso específico é constante, tal como as restantes propriedades já analisadas no capítulo anterior, como a temperatura e o calor libertado pela reação de combustão e, assim, foi efetuada a mesma análise para todas as simulações deste capítulo.

De seguida, nas Figuras 36 e 37 são apresentados dois gráficos que contêm toda a informação referente ao impulso específico de cada simulação. O primeiro gráfico ilustra a evolução deste indicador em função da velocidade de entrada e o segundo apresenta a mesma informação, mas em função da razão de equivalência. Desta forma é possível uma melhor compreensão do efeito da variação da velocidade de entrada e, separadamente, da variação da razão de equivalência da mistura, na evolução do impulso específico.

Observando a Figura 36, à medida que aumenta a velocidade de entrada também aumenta o valor do impulso específico verificado à saída do microcanal. No caso de $\phi=0,7$ verifica-se uma evolução praticamente linear e, para valores de ϕ superiores a 1 essa evolução torna-se não linear. Para a velocidade mais baixa, 4 m/s, obtiveram-se valores entre os 20 e os 40 Ns/kg e, no caso da velocidade máxima, os valores obtidos estão entre os 80 e os 130 Ns/kg.

Na Figura 37 é apresentada a mesma informação, mas, desta vez organizada em função da razão de equivalência. Neste gráfico verifica-se que o aumento da razão de equivalência também origina o aumento dos valores do impulso específico. Além disso, ao comparar os dois gráficos, também se verifica que a velocidade de entrada é o parâmetro que mais afeta os valores de impulso específico. Neste segundo gráfico, para a velocidade de 4 m/s a evolução é praticamente linear e, para velocidades mais elevadas, a evolução aproxima-se de um perfil logarítmico.

Para concluir toda a análise dos resultados obtidos neste capítulo, ambos os parâmetros analisados (velocidade de entrada e razão de equivalência) têm um impacto positivo nos valores do impulso específico, verificando-se que, quando um dos parâmetros aumenta, também aumenta o impulso específico. Além disso, verificou-se que a velocidade de entrada é o parâmetro com maior influência na evolução deste indicador de propulsão. Posto isto, foi a simulação HIP_12 que apresentou o valor mais elevado de impulso específico.

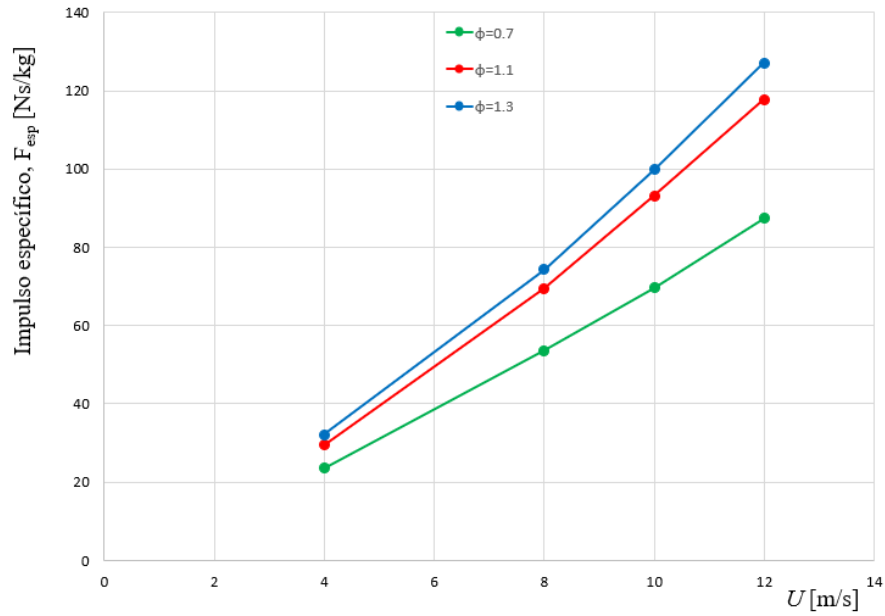


Figura 36 – Gráfico dos valores de impulso específico de cada simulação com perfil hiperbólico, em função da velocidade de entrada.

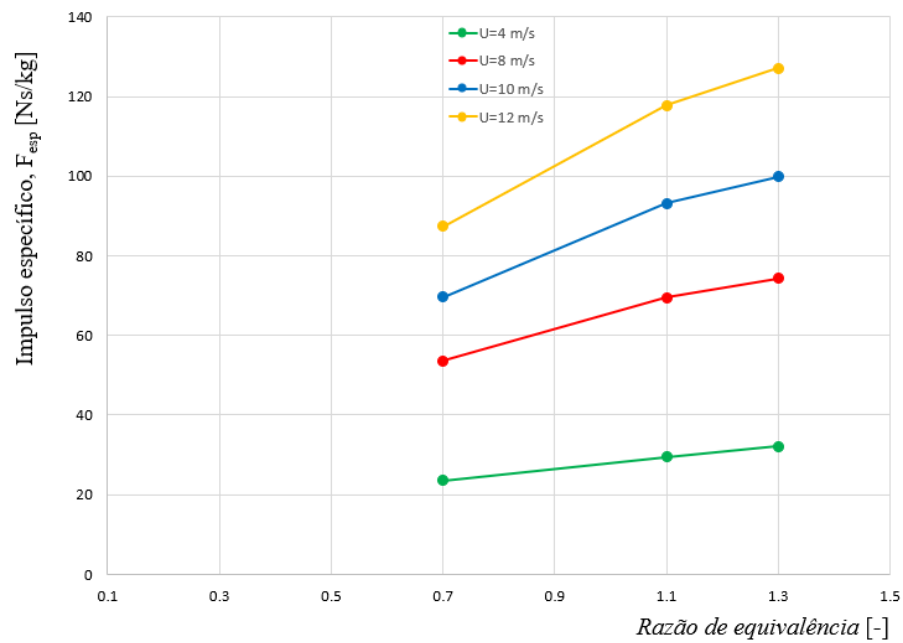


Figura 37 - Gráfico dos valores de impulso específico de cada simulação com perfil hiperbólico, em função da razão de equivalência.

6 Resultados com perfil de temperatura linear

6.1 Perfil de temperatura imposto

Neste segundo capítulo de resultados obtidos procedeu-se a uma alteração no perfil de temperatura da parede, ou seja, a evolução da temperatura da parede deixou de ser hiperbólica e passou a ser linear, estabilizando nos 1300 K. Esta mudança no aquecimento da mistura proporcionou inúmeras mudanças na dinâmica da chama e também nos valores máximos de calor libertado e de temperatura. Para além disso, foi possível observar um novo fenómeno físico de extinção e ignição alternadas chamado FREI, o qual não tinha sido analisado utilizando o perfil hiperbólico, visto que a chama estabilizou sempre numa determinada secção do microcanal. Na Figura 38 está presente o gráfico que traduz o perfil linear de temperatura utilizado neste capítulo.

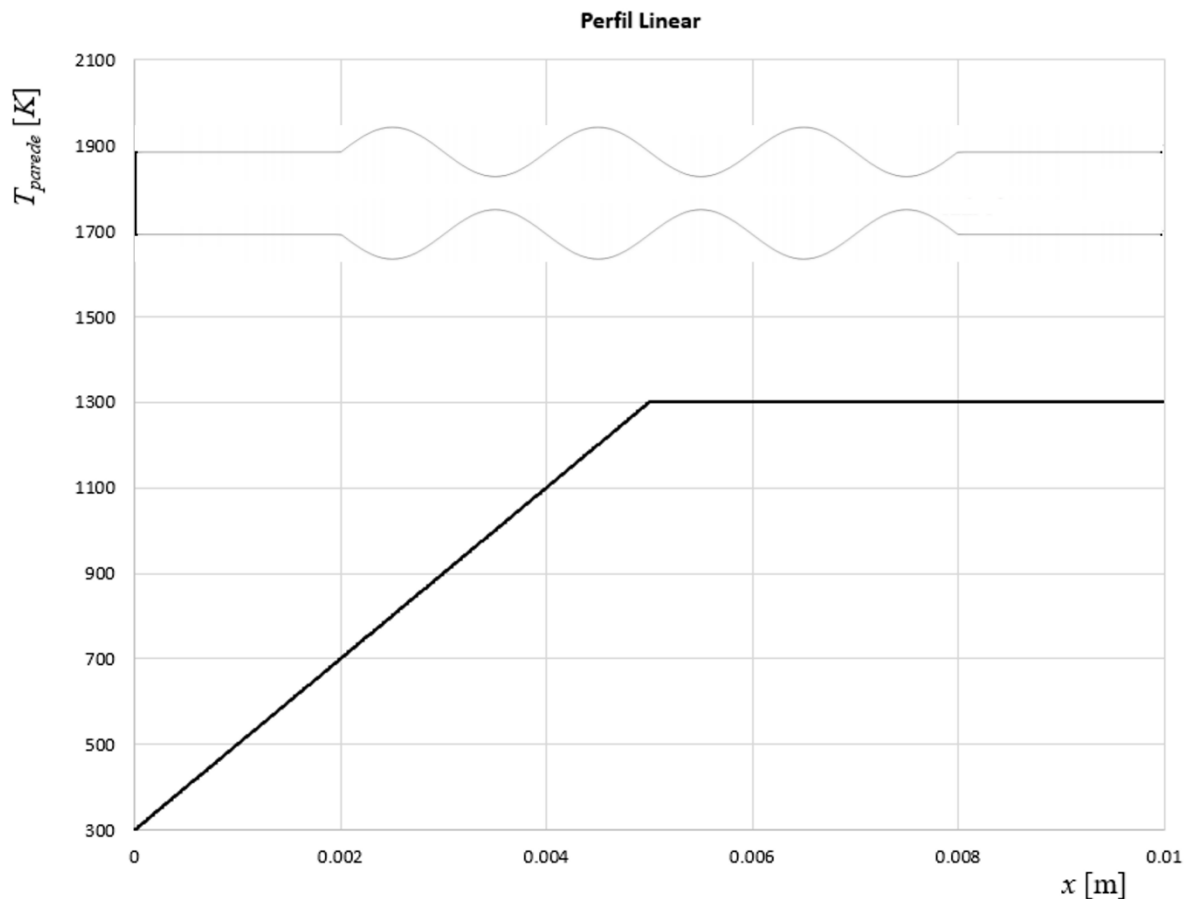


Figura 38 - Perfil linear de temperatura utilizado ao longo da parede do queimador.

6.2 Mapa de estabilidade

Foram efetuadas 16 simulações em que se estudou o efeito do aumento da velocidade de entrada de 4 m/s até 12 m/s e a influência da variação da razão de equivalência da mistura, utilizando razões de 0,7, 1,1 e 1,3. Assim, na Tabela 5 estão apresentadas todas as simulações efetuadas no estudo da utilização do perfil linear de temperatura na parede do microcanal.

Tabela 5 - Conjunto de simulações efetuadas utilizando um perfil linear de temperatura ao longo da parede do queimador

Amostra	Razão de equivalência, ϕ [-]	Velocidade de entrada, U [m/s]
LIN_01	0,7	3
LIN_02		4
LIN_03		5
LIN_04		6
LIN_05		8
LIN_06		12
LIN_07	1,1	4
LIN_08		5
LIN_09		6
LIN_10		8
LIN_11		12
LIN_12	1,3	4
LIN_13		5
LIN_14		6
LIN_15		8
LIN_16		12

Depois de terminar todas as simulações presentes na tabela anterior, foi feito um mapa de estabilidade onde é possível observar os diferentes comportamentos da chama, em função destes dois parâmetros que foram utilizados para manipular as diversas simulações. Este mapa é apresentado, de seguida, na Figura 39:

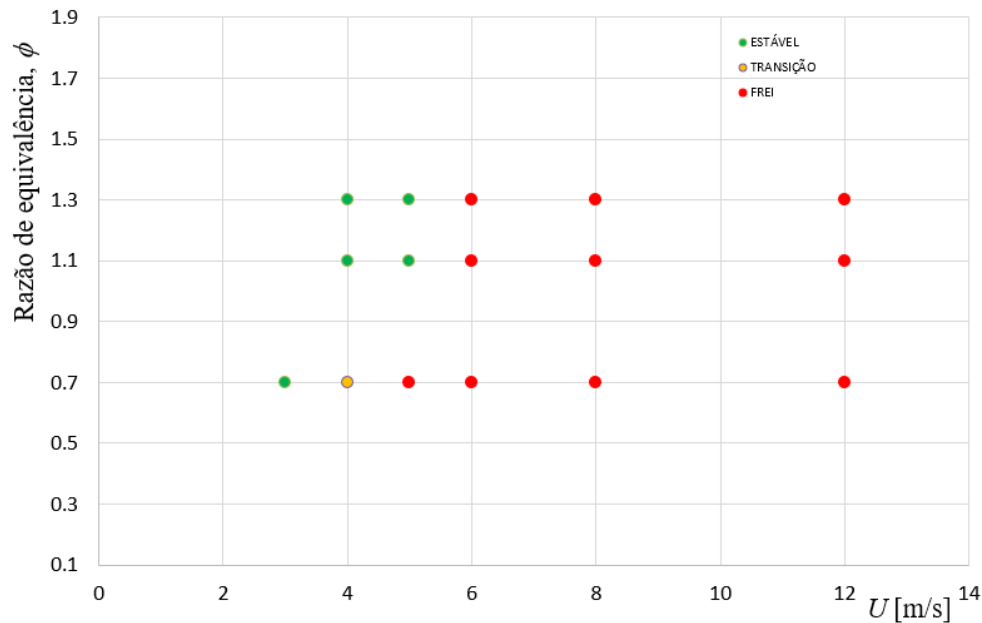


Figura 39 - Mapa de estabilidade das várias simulações efetuadas utilizando um perfil linear de temperatura ao longo da parede do queimador.

6.3 Resultados obtidos e discussão

Neste capítulo, com a utilização de um perfil linear de temperatura para a temperatura da parede, observa-se que, na maioria dos casos, a chama não estabiliza numa determinada secção do queimador, ou seja, verifica-se um fenómeno dinâmico de extinção-ignição repetitiva. Contudo, foram obtidos diversos tipos de resultados, o que é bastante interessante, uma vez que se consegue prever a zona de transição entre um regime permanente e um regime transiente ou repetitivo.

6.3.1 Regime permanente e chama estável

Ao analisar os resultados obtidos para as diferentes amostras verifica-se que para os casos LIN_01, LIN_07, LIN_08, LIN_12 e LIN_13, ou seja, para velocidade de entrada baixa, é alcançado o regime permanente. De seguida irá ser efetuada uma análise detalhada em relação às simulações LIN_07 e LIN_12, visto que foram obtidos resultados bastante semelhantes nos outros casos. Na Figura 40 observa-se que, para estes dois casos, a chama está ancorada à entrada da segunda cavidade do microcanal. Comparando os dois mapas de contorno presentes nas Figuras 40 e 41, em termos da temperatura e da taxa de calor libertado pela combustão, estes dois casos são bastante idênticos, o que já era esperado dado que a velocidade de entrada é a mesma e ambas as razões de equivalência são maiores do que 1, ou seja, trata-se de duas misturas ricas em combustível. Apesar do mapa de contorno da concentração mássica de OH ilustrado na Figura 42 também ser bastante idêntico em ambos os casos, é de notar que, para o caso de maior ϕ , a zona de libertação de OH é mais estreita e ligeiramente mais curta.

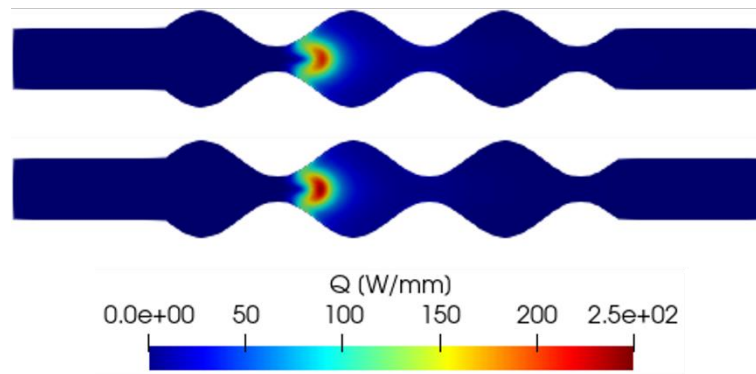


Figura 40 – Mapas de contorno da quantidade de calor libertado Q , em W/mm, das simulações LIN_07 ($U=4$ m/s e $\phi=1,1$) (em cima) e LIN_12 ($U=4$ m/s e $\phi=1,3$) (em baixo).

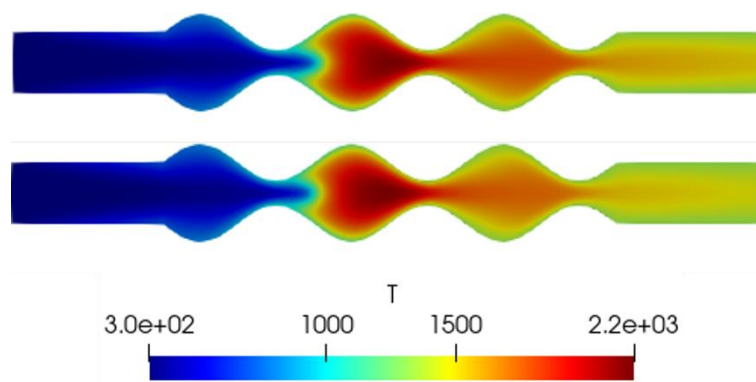


Figura 41 - Mapas de contorno da temperatura T , em Kelvin, das simulações LIN_07 (em cima) e LIN_12 (em baixo).

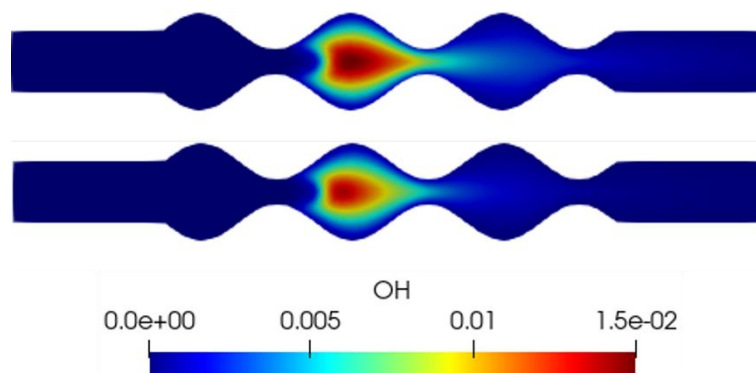


Figura 42 - Mapas de contorno da concentração mássica de OH, em fração mássica, das simulações LIN_07 (em cima) e LIN_12 (em baixo).

Visto que se verifica que estas duas simulações apresentam uma chama estável, é possível fazer uma análise bastante similar à que foi feita no caso do perfil hiperbólico. Deste modo, nas Figuras 43 e 44 está presente o perfil da temperatura e do calor libertado por unidade de comprimento ao longo do eixo central do queimador. Nestes gráficos estão presentes os registos de temperatura e calor libertado para o caso da utilização de um perfil linear da temperatura da parede, mas também do perfil hiperbólico utilizado no capítulo anterior. Através desta análise é possível fazer uma comparação bastante interessante entre os resultados obtidos para os dois perfis de temperatura da parede, utilizando as mesmas condições de velocidade de entrada e de

razão de equivalência da mistura. Afirma-se, assim, que o perfil linear de temperatura faz com que a chama se posicione mais a jusante no canal, passando a estar situada na segunda cavidade do canal. Além disso, através dos gráficos apresentados nas Figuras 43 e 44, conclui-se que, para ambos os casos, a utilização do perfil linear de temperatura origina valores máximos de temperatura e calor libertado ligeiramente mais elevados. A temperatura sofre um aumento de cerca de 100 K, enquanto o calor libertado aumenta cerca de 25 W/mm.

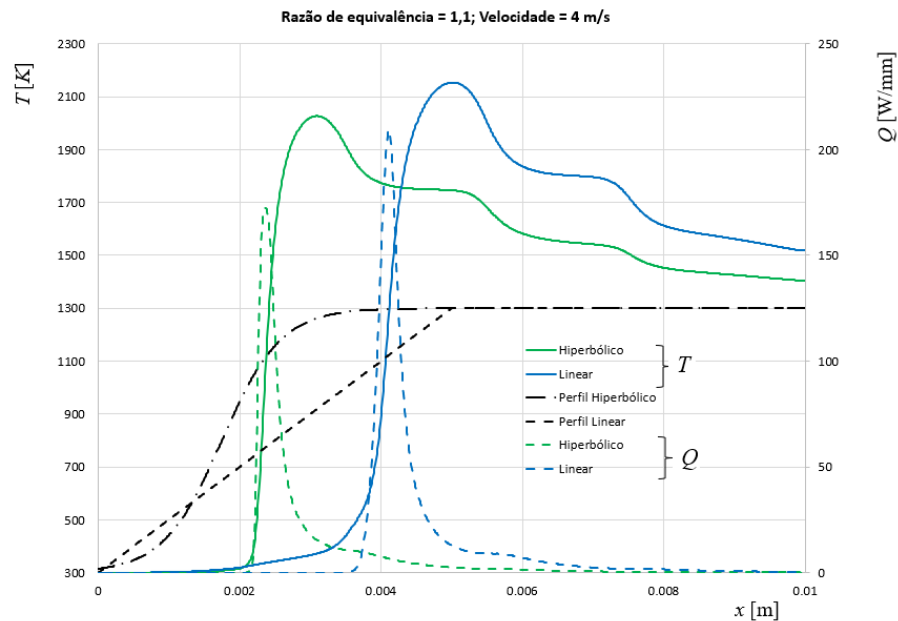


Figura 43 – Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para simulação LIN_07 (a azul) e HIP_05 (a verde) (ambas com $U=4$ m/s e $\phi=1,1$).

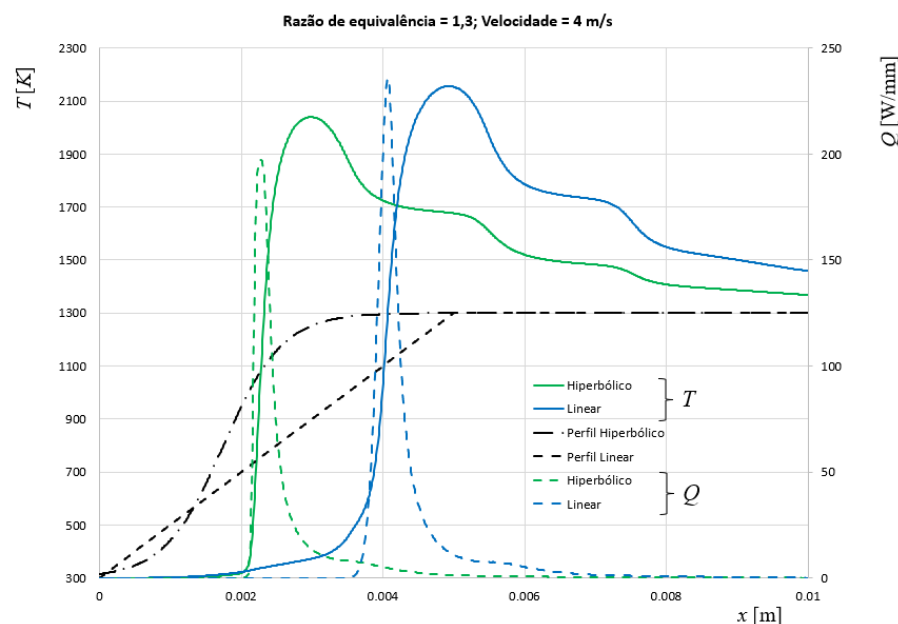


Figura 44 - Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para simulação LIN_12 (a azul) e HIP_09 (a verde) (ambas com $U=4$ m/s e $\phi=1,3$).

6.3.2 Regime de transição entre a chama estável e o fenómeno de FREI

À medida que as simulações foram efetuadas verificou-se que a amostra LIN_02 ($U=4$ m/s e $\phi=0,7$) obteve resultados bastante peculiares. De facto, ao observar a Figura 45, verifica-se que a utilização destes parâmetros origina uma dinâmica de transição, uma vez que a chama não estagna completamente, mas também não apresenta propriamente um fenómeno de extinção e ignição alternadas.

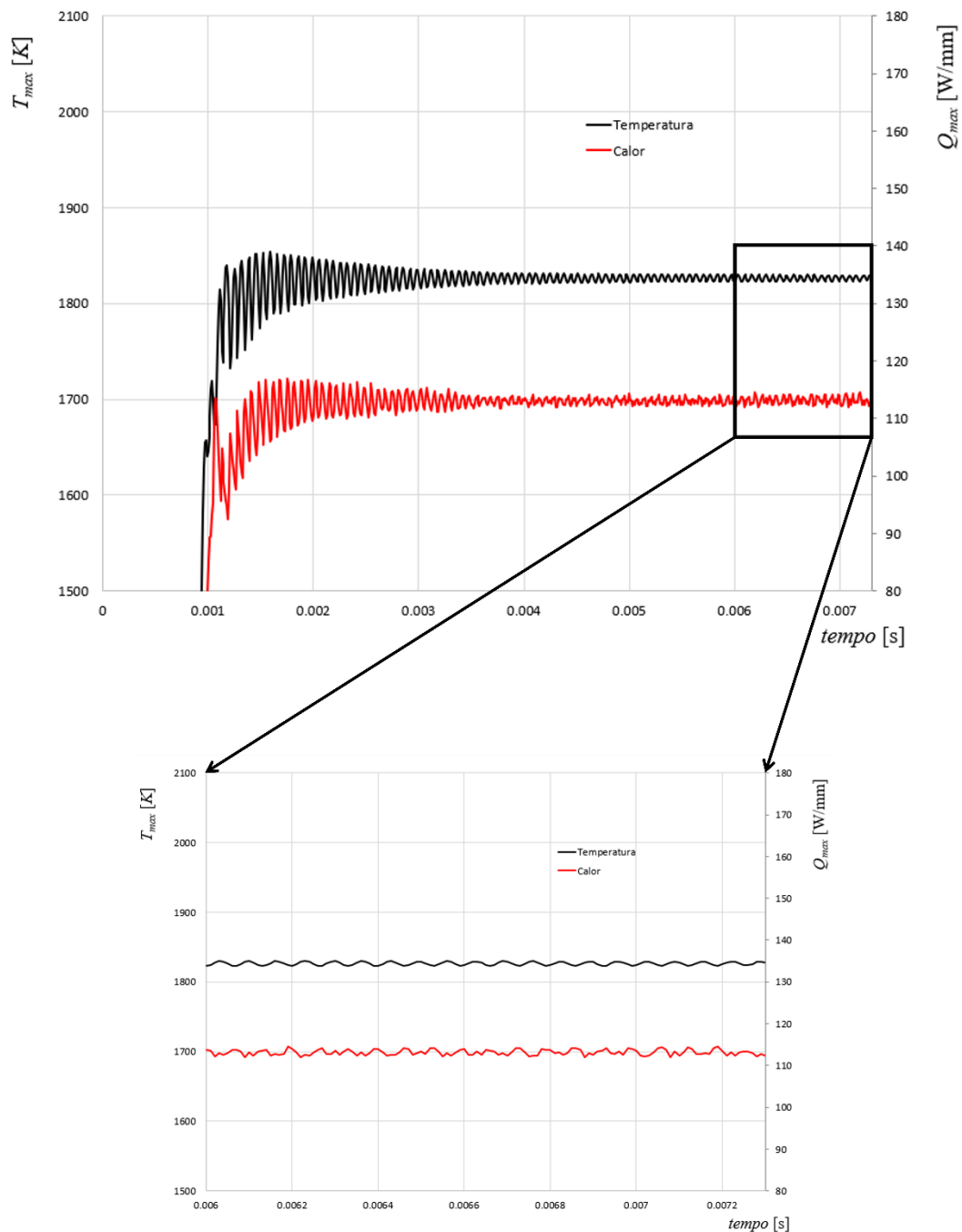


Figura 45 – Gráfico da evolução da temperatura máxima e do calor máximo libertado ao longo do tempo referente à simulação LIN_02 ($U=4$ m/s e $\phi=0,7$).

Observando todo o espectro temporal simulado é possível concluir que, de facto, os valores máximos de temperatura e calor libertado aproximam-se de um valor constante, apesar de nunca estabilizarem completamente. A temperatura máxima no microcanal aproxima-se de um valor de cerca de 1825 K, enquanto o calor libertado tende para um valor de mais ou menos 113 W/mm.

Fazendo uma observação na zona da parte final da simulação, Figura 45, verifica-se a não ancoragem da chama. Esta apresenta uma ligeira oscilação devido à velocidade constante de 4 m/s da mistura, o que se traduz na oscilação destes parâmetros analisados. Apesar da chama apresentar este comportamento peculiar, não se pode incluir esta simulação no subcapítulo de regime permanente e chama estável. Assim, este caso específico serve de introdução ao próximo capítulo que apresenta os resultados para as chamas instáveis que apresentam o fenómeno FREI.

Apesar da ligeira oscilação da chama apresentada neste caso, é possível fazer uma análise espacial, como se de um caso estável se tratasse. Assim, os valores de temperatura e calor libertado ao longo do microcanal são apresentados na Figura 46 e, posteriormente, nas Figuras 47, 48 e 49 são ilustrados os mapas de contorno referentes à temperatura, calor libertado e concentrações de OH.

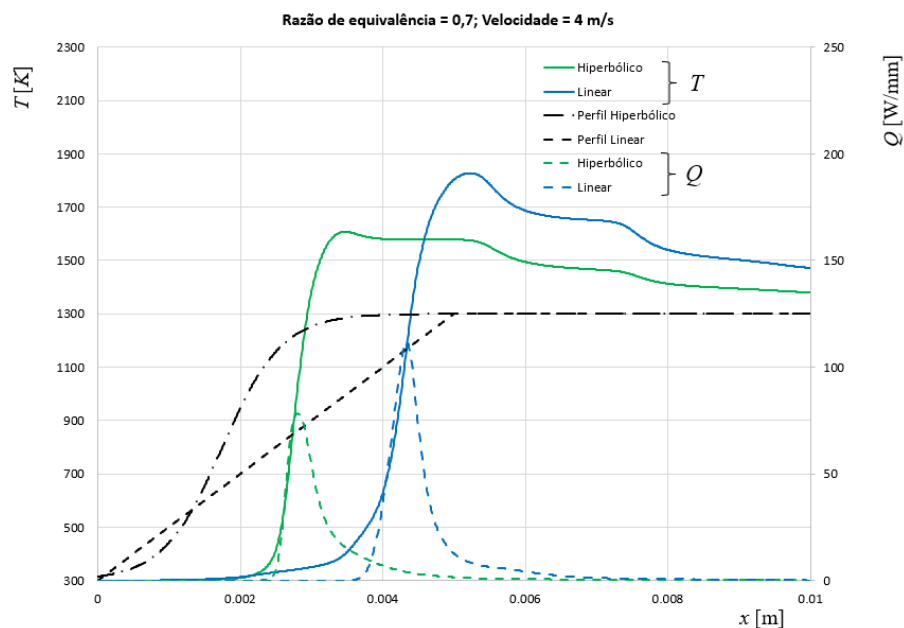


Figura 46 – Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para simulação LIN_02 (a azul) e HIP_01 (a verde) (ambas com $U=4$ m/s e $\phi=0,7$).

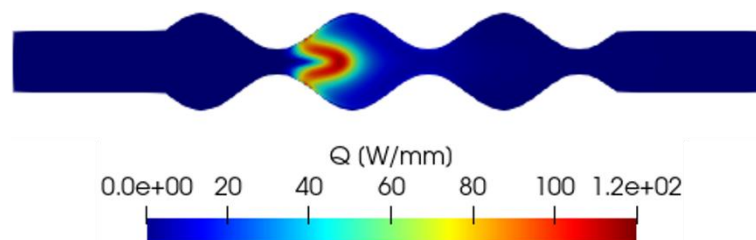


Figura 47 – Mapa de contorno do calor libertado, em W/mm, da simulação LIN_02 ($U=4$ m/s e $\phi=0,7$).

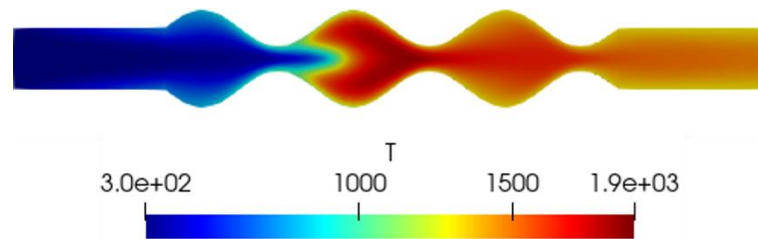


Figura 48 - Mapa de contorno da temperatura, em Kelvin, da simulação LIN_02 ($U=4$ m/s e $\phi=0,7$).

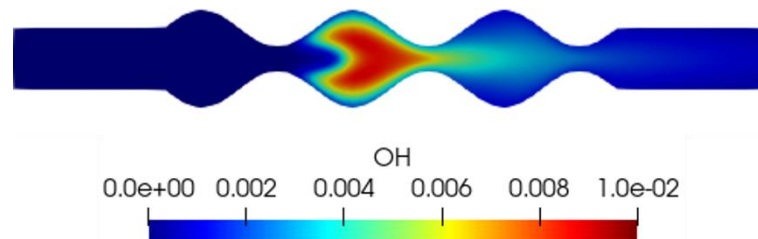


Figura 49 - Mapa de contorno da concentração de OH, em fração mássica, da simulação LIN_02 ($U=4$ m/s e $\phi=0,7$).

6.3.3 Regime transiente e fenómeno de extinção e ignição FREI

Para cada ϕ utilizado, á medida que se aumenta a velocidade de entrada (a partir de 6 m/s) verifica-se o aparecimento de um fenómeno dinâmico de extinção e ignição alternadas. Este fenómeno designa-se por FREI e traduz a interação que existe entre a dinâmica do escoamento e a reação de combustão. Além disso, a geometria do queimador tem uma grande influência no aparecimento deste fenómeno. As cavidades do queimador originam o aparecimento de vórtices com o sentido inverso ao sentido normal do escoamento. Estes vórtices contribuem para uma diminuição do fluxo de calor do fluido para o exterior (não aplicável neste caso, uma vez que, é a parede que funciona como fonte de calor) e é através destas recirculações de fluido que a energia da combustão é transportada de novo para trás, dando origem ao aparecimento de uma nova chama e repetindo o ciclo de extinção e ignição. Posto isto, neste conjunto de simulações verifica-se uma evolução periódica da temperatura e do calor libertado ao longo do tempo. No anexo B apresenta-se as evoluções temporais de quatro parâmetros, referentes às chamas instáveis utilizando esta condição fronteira, numa secção do microcanal a 4,5 mm da entrada do mesmo.

- Dinâmica geral

Em primeiro lugar, visto que se verificou um comportamento periódico da chama dentro do queimador, foi feita uma análise dinâmica da temperatura máxima e do calor máximo libertado pela reação de combustão. Assim, como se pode ver na Figura 50, apresenta-se a análise destes parâmetros em função do tempo.

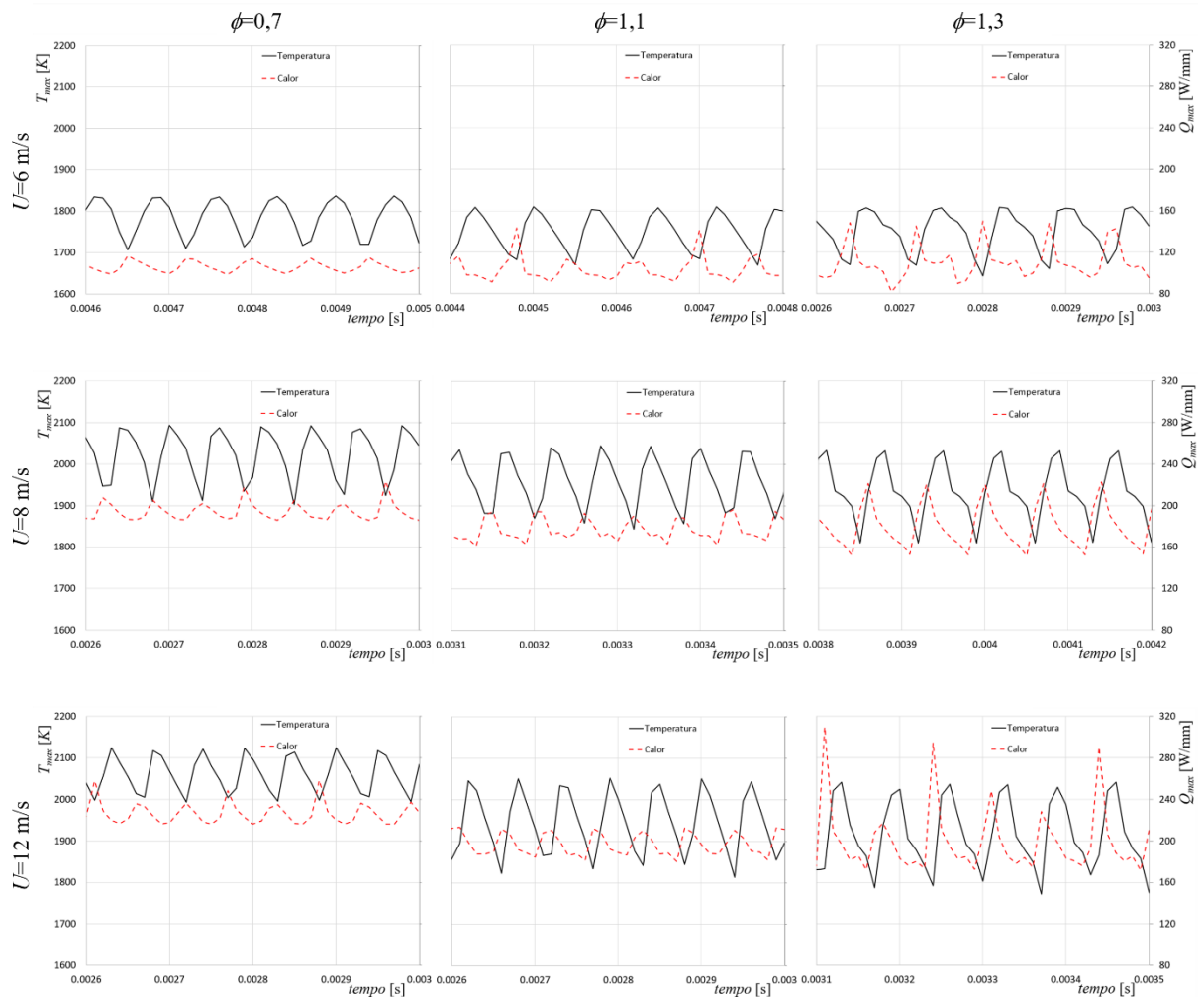


Figura 50 – Gráficos da evolução da temperatura máxima (linha contínua preta) e do calor máximo libertado (linha a tracejado vermelha) ao longo do tempo para as simulações onde se verifica o fenómeno FREI.

Observa-se que, à medida que aumenta a velocidade de entrada, o valor absoluto dos picos de temperatura máxima tende a aumentar ligeiramente, principalmente na transição de 6 m/s para 8 m/s. À medida que aumenta a razão de equivalência da mistura, cada vez é mais preponderante o efeito da velocidade na diminuição destes valores, passando de 30 K no caso de $\phi=0,7$, para quase 100 K no caso de $\phi=1,3$. Quanto à variação da razão de equivalência, esta proporciona uma diminuição substancial destes picos de temperatura máxima. No caso de $\phi=0,7$ os valores são da ordem dos 1800 K, para $\phi=1,1$ na ordem dos 2000 K, e para $\phi=1,3$ na ordem dos 2050 K. Este aumento deve-se ao facto de a mistura ser mais rica e, por isso, libertar maiores quantidades de calor. Além disso, também é possível observar a variação do perfil de ignição e extinção da chama, ou seja, das subidas e descidas periódicas da temperatura máxima. Em todos os casos verifica-se que, quanto maior é a velocidade de entrada, mais o perfil é não monotónico, ou seja, como a velocidade é maior, o fluxo de energia através dos vórtices é mais rápido e, antes da chama se extinguir, já outra está a surgir numa posição a montante do microcanal. Este fenómeno faz com que a queda de temperatura seja mais lenta e apresente um patamar de abrandamento, como se pode observar nos casos para a velocidade de 12 m/s.

Quanto ao calor libertado observam-se grandes alterações quando se procede à variação dos parâmetros iniciais das simulações efetuadas. Analisando em primeiro lugar os efeitos do aumento da velocidade de entrada, conclui-se que diferentes fenómenos acontecem para as diversas transições de velocidade. Para os casos de $\phi=1,1$ e $\phi=1,3$, Figura 50, quando se observa a transição de 6 m/s para 8 m/s, conclui-se que a extinção da chama transita para a cavidade

seguinte do queimador, o que resulta numa redução dos picos máximos de calor libertado devido à maior dispersão energética. Ao utilizar uma velocidade ainda mais elevada, um novo fenómeno ocorre. Antes da extinção da chama, que acontece mais à frente no microcanal, a nova chama surge mais tarde, consequência da maior concentração de energia no centro do queimador, o que reduz a energia transportada pelo vórtice em direção à zona da nova chama. Assim, o intervalo entre as duas chamas é maior e origina maiores concentrações de hidrogénio e, consequentemente, uma energia de reação mais elevada, especialmente na zona de contração do queimador, aumentando, assim, os valores de calor máximo libertado. Assim se explicam os elevados picos de Q_{max} para as velocidades mais elevadas. De salientar que os valores de calor máximo libertado são bastante mais elevados quanto maior for a razão de equivalência da mistura (analisando as escalas utilizadas para cada ϕ), o que faz todo o sentido visto que a quantidade de combustível é cada vez mais elevada. Para $\phi=0,7$ observam-se valores entre os 80 e 150 W/mm, enquanto para $\phi=1,3$ os valores estão entre os 170 e 310 W/mm.

Dado que este conjunto de chamas simuladas manifestam um comportamento dinâmico repetitivo, foi efetuada uma análise espectral dos sinais observados nos diversos casos. Este estudo foi feito com o auxílio do *software* MATLAB R2019. Assim, foram inseridos neste *software* os intervalos de tempo e os respetivos valores de temperatura e calor libertado apresentados na análise temporal presente na Figura 50. Assim, através de um código de análise espectral de sinais, foram obtidos os valores da amplitude máxima para os respetivos intervalos de tempo, valores estes presentes nos gráficos da Figura 51.

Através da análise destes gráficos conclui-se imediatamente que a amplitude do sinal, quer seja da temperatura ou do calor libertado, depende fortemente da velocidade de entrada da mistura. No caso da amplitude do calor libertado, a variação da razão de equivalência não tem qualquer influência na alteração deste sinal, observando-se uma evolução praticamente linear em função da velocidade. Quanto à amplitude de temperatura verifica-se que o aumento da razão de equivalência, para velocidades mais elevadas, faz com que a amplitude do sinal aumente, mantendo o declive desta evolução (retas praticamente paralelas entre a velocidade 8 m/s e 12 m/s). Quanto à influência da velocidade, a amplitude da temperatura apresenta uma evolução polinomial, diminuindo progressivamente o seu declive. Visto que, para a velocidade de 4 m/s, todas as simulações apresentaram uma chama estável ou quase estável, é de prever que a velocidade para a qual a chama entra em regime estável está compreendida entre 4 e 6 m/s, sendo que, ao utilizar um $\phi=0,7$, a chama fica estável numa velocidade ligeiramente abaixo de 4 m/s.

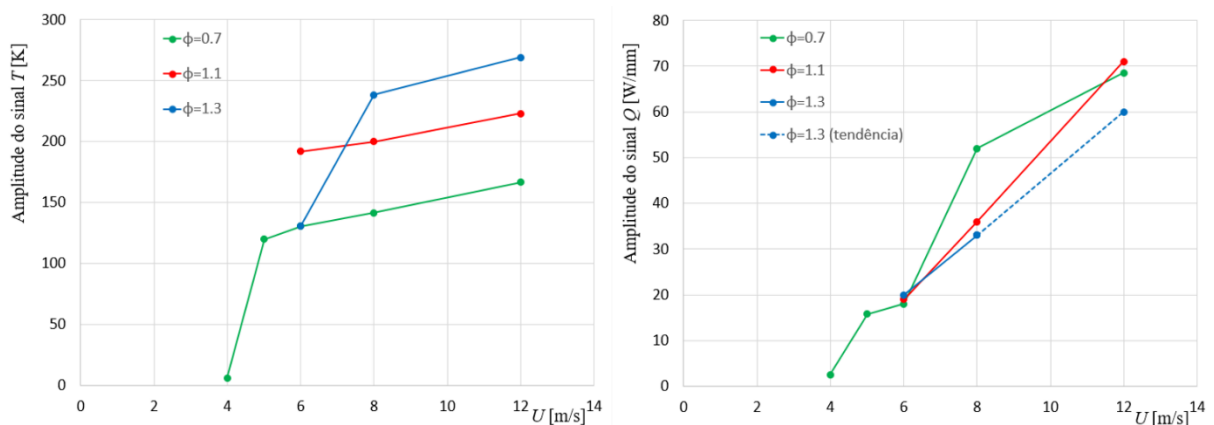


Figura 51 – Gráficos referentes à amplitude dos valores de temperatura máxima e calor máximo libertado em cada simulação.

O comportamento da amplitude do calor libertado é facilmente explicado do ponto de vista físico. À medida que aumenta a velocidade da mistura, aumenta o caudal, visto que a secção é

sempre a mesma ao longo do tempo. Posto isto, no mesmo intervalo de tempo, chega à zona de reação uma maior quantidade de gases, nomeadamente, combustível. A presença de maiores quantidades de H_2 numa zona a jusante do queimador, faz com que a ignição seja feita com uma maior intensidade, originando uma maior libertação de calor. Assim, os picos de calor libertado aumentam o seu valor absoluto, o que faz aumentar a amplitude do seu sinal. Posto isto, espera-se um acompanhamento dos valores de temperatura máxima. Se há mais calor libertado, aumenta a quantidade de energia por unidade de comprimento e, por isso, aumentam também os picos de temperatura máxima observada dentro do queimador. A variação da razão de equivalência da mistura faz com que a amplitude da temperatura máxima aumente, uma vez que na fase de ignição estão presentes maiores quantidades de combustível, o que origina maiores temperaturas de chama.

Através deste estudo espectral também foi possível calcular os valores das frequências de cada sinal obtido nas simulações numéricas. Assim, na Figura 52, está presente a evolução da frequência do sinal para cada conjunto de resultados obtidos. Para a construção deste gráfico foram retiradas as simulações onde não se verificou um regime instável da chama, ou seja, as chamas analisadas no capítulo referente ao regime estável não constam nesta análise. Observando o gráfico da evolução das frequências, concluíram-se dois comportamentos distintos. Primeiro, à medida que a velocidade aumenta, a frequência de todos os sinais tem tendência a diminuir. Em segundo lugar, o aumento da razão de equivalência faz com que a frequência do sinal aumente, uma vez que a presença de maiores concentrações de combustível origina ignições mais fortes e mais repentinas, acelerando a transição entre a ignição e a extinção da chama e, por isto, todo o ciclo é acelerado, formando-se um sinal com maior frequência.

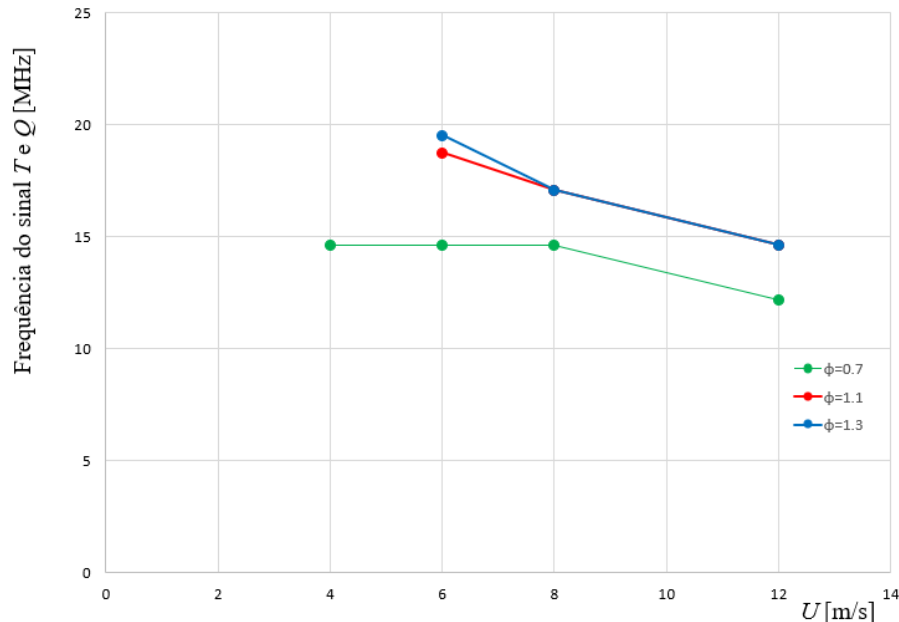


Figura 52 – Gráfico referente à frequência dos sinais de temperatura e calor de cada simulação.

De seguida, na Figura 53 são apresentadas duas sequências da dinâmica temporal, para um conjunto de 7 intervalos de tempo. À esquerda é apresentada a sequência da propagação do calor libertado pela reação de combustão ao longo do canal e, à direita, a respetiva temperatura para os mesmos instantes de tempo. Estas sequências são apresentadas como um conjunto de 7 momentos consecutivos, com intervalos de tempo de 10 ms. Assim, visto que existe uma grande semelhança entre os fenómenos de FREI das diversas simulações realizadas, foi escolhida uma

simulação intermédia, relativamente à velocidade de entrada e à razão de equivalência, ou seja, a simulação LIN_10 ($U=8$ m/s, $\phi=1,1$). A evolução temporal desta simulação está ilustrada no gráfico central presente na Figura 50. Observando os diversos instantes de tempo captados, verifica-se que a ignição da chama é feita na entrada da segunda cavidade do canal, numa zona ainda bastante estreita. A chama, devido à velocidade do escoamento, extingue-se e inicia a sua propagação ao longo da cavidade, alterando a sua geometria devido à forma da cavidade. A geometria da cavidade conduz ao aparecimento de zonas de recirculação na parte superior e inferior da cavidade, como se pode ver a partir das linhas de corrente do escoamento representadas na figura, originando uma chama em forma de coração. Assim, à medida que a chama avança no canal, parte da sua energia entra nas zonas de recirculação, caracterizadas pelos seus vórtices. Deste modo, a energia total da chama divide-se em duas partes: uma parte da energia continua a sua propagação para a cavidade seguinte, enquanto a restante inverte o sentido do escoamento através das zonas de recirculação. Quando esta última parcela de energia alcança a zona de ignição, surge uma nova chama. No instante de tempo t_6 do mapa da libertação de calor (à esquerda), observamos a presença de duas chamas dentro do microcanal. Após a nova ignição, o processo repete-se o fenómeno FREI. De facto, aplicando este escoamento num microcanal regular, onde não existem cavidades e, por consequência, também não existem zonas de recirculação, é de prever que poderia observar-se o retorno da chama.

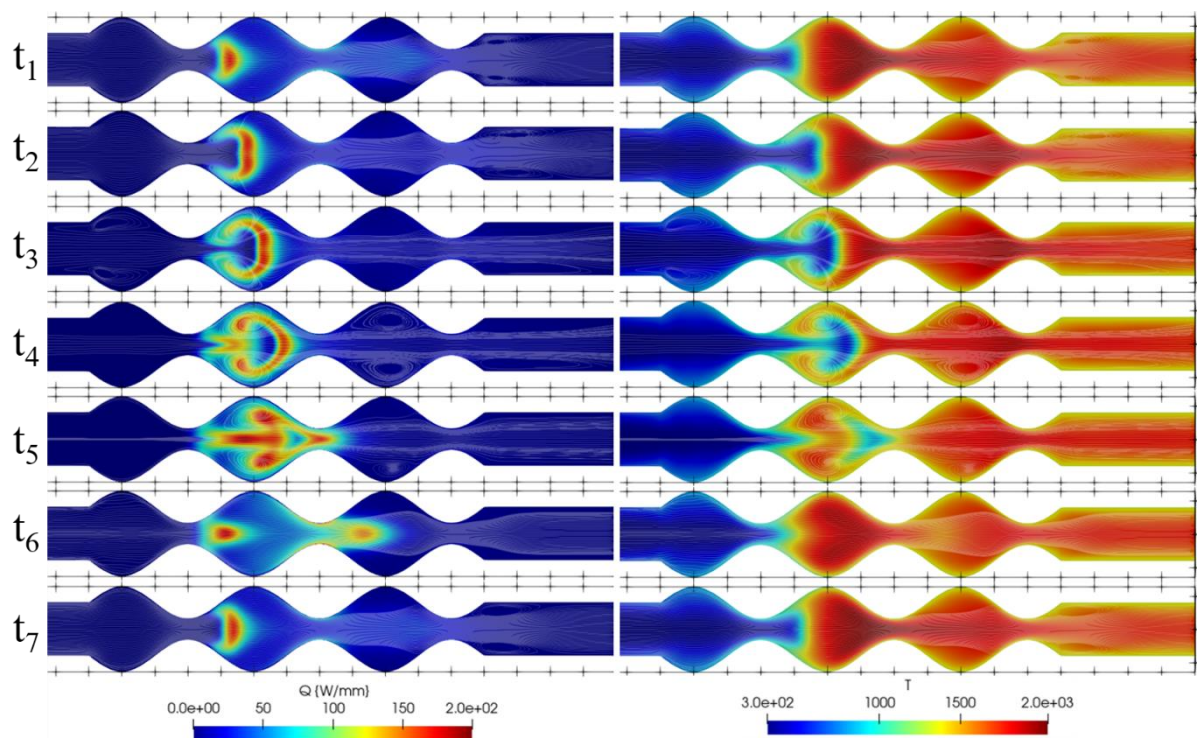


Figura 53 – Mapas de contorno do calor libertado (à esquerda) e da temperatura em Kelvin (à direita), composto por 7 frames, do fenómeno de FREI da simulação LIN_10 ($U=8$ m/s, $\phi=1,1$), com intervalos de 10 ms.

- Características do fenómeno FREI

Nestas 9 simulações onde se verificou o aparecimento do fenómeno FREI, para além da análise temporal efetuada anteriormente, é também interessante observar atentamente o comportamento da chama no exato momento onde se verifica este fenómeno. Assim, com o auxílio das capacidades do *software Paraview*, foram retiradas as Figuras 54, 55 e 56 que caracterizam o fenómeno FREI em cada simulação efetuada.

O aumento da velocidade de entrada da mistura faz com que a forma da zona de libertação de calor altere a sua geometria, passando duma forma em V para uma forma mais ampla, assemelhando-se a um coração. A zona de libertação de calor aproxima-se das paredes do queimador com a utilização de velocidades mais elevadas, o que pode originar maiores perdas de calor para o exterior, quando aplicado a um caso real com parede de espessura finita. De facto, ao aumentar a velocidade da mistura, mais longe chegam as concentrações de H_2 , aumentando a sua presença numa zona mais a jusante do queimador, já perto da contração. Além disso, é interessante observar a evolução dos vórtices na cavidade onde acontece a extinção e ignição alternada, mas também na cavidade seguinte. No momento do fenómeno de FREI verifica-se que, quanto maior a velocidade de entrada, mais linear é o escoamento a jusante da chama, diminuindo a intensidade dos vórtices na cavidade mais à frente. Posto isto, conclui-se que a libertação de calor e a presença de H_2 perto do eixo central do queimador originam vórtices que seguem a geometria da cavidade do microcanal, sendo estes vórtices que transportam toda a energia responsável pelo reacendimento da chama na contração a montante.

Analisando o efeito da variação da razão de equivalência da mistura, conclui-se que o aumento de ϕ diminui a dimensão do fenómeno de FREI. Tanto a zona de calor libertado como a zona de concentração mais elevada de H_2 são empurradas para trás, consequência do teor mais elevado em combustível, o que proporciona uma ignição mais próxima da entrada da cavidade.

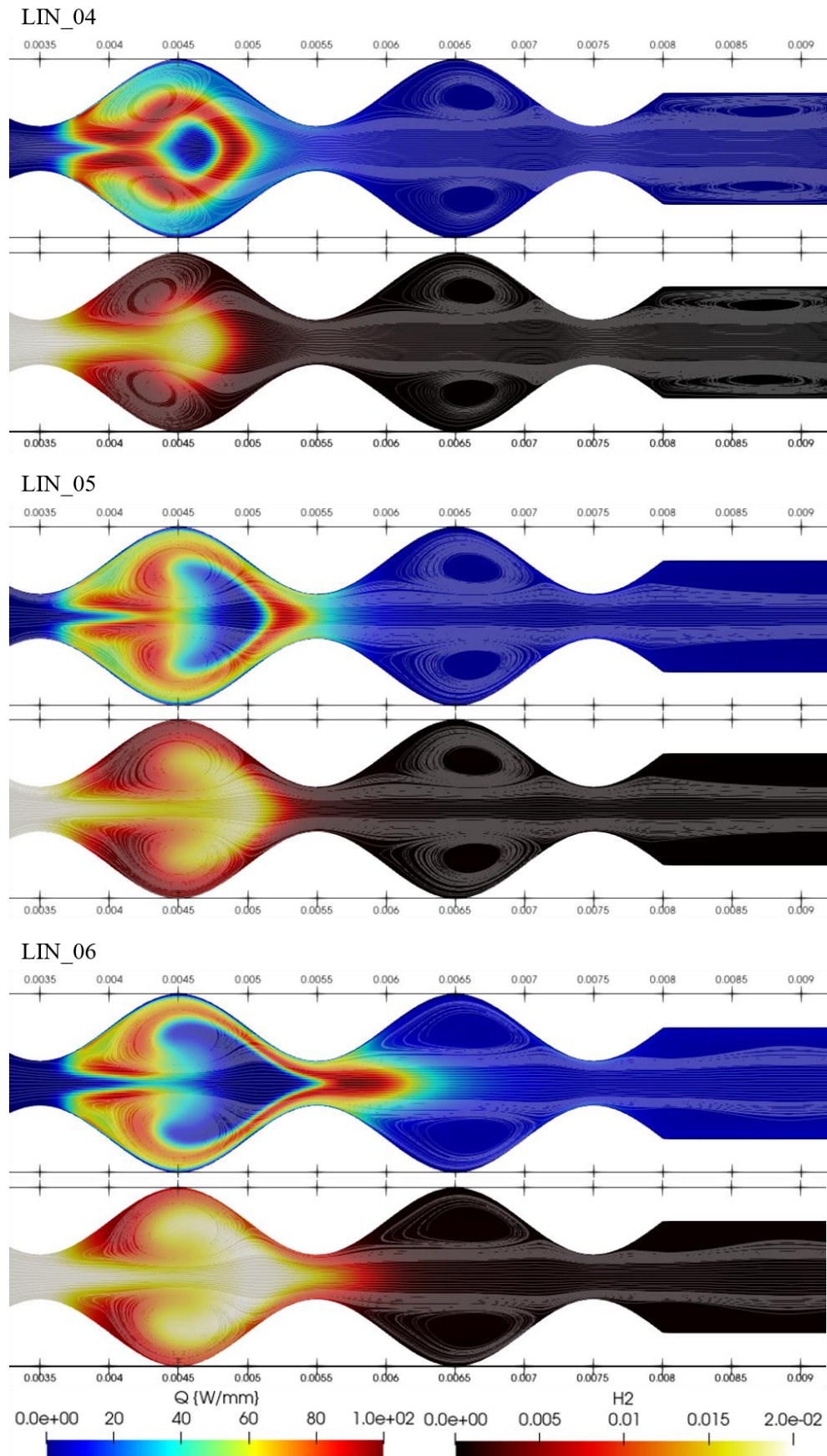


Figura 54 – Mapas do calor libertado e das frações mássicas de H_2 no momento do fenómeno FREI, referentes às simulações LIN_04 ($U=6$ m/s, $\phi=0,7$), LIN_05 ($U=8$ m/s, $\phi=0,7$) e LIN_06 ($U=12$ m/s, $\phi=0,7$).

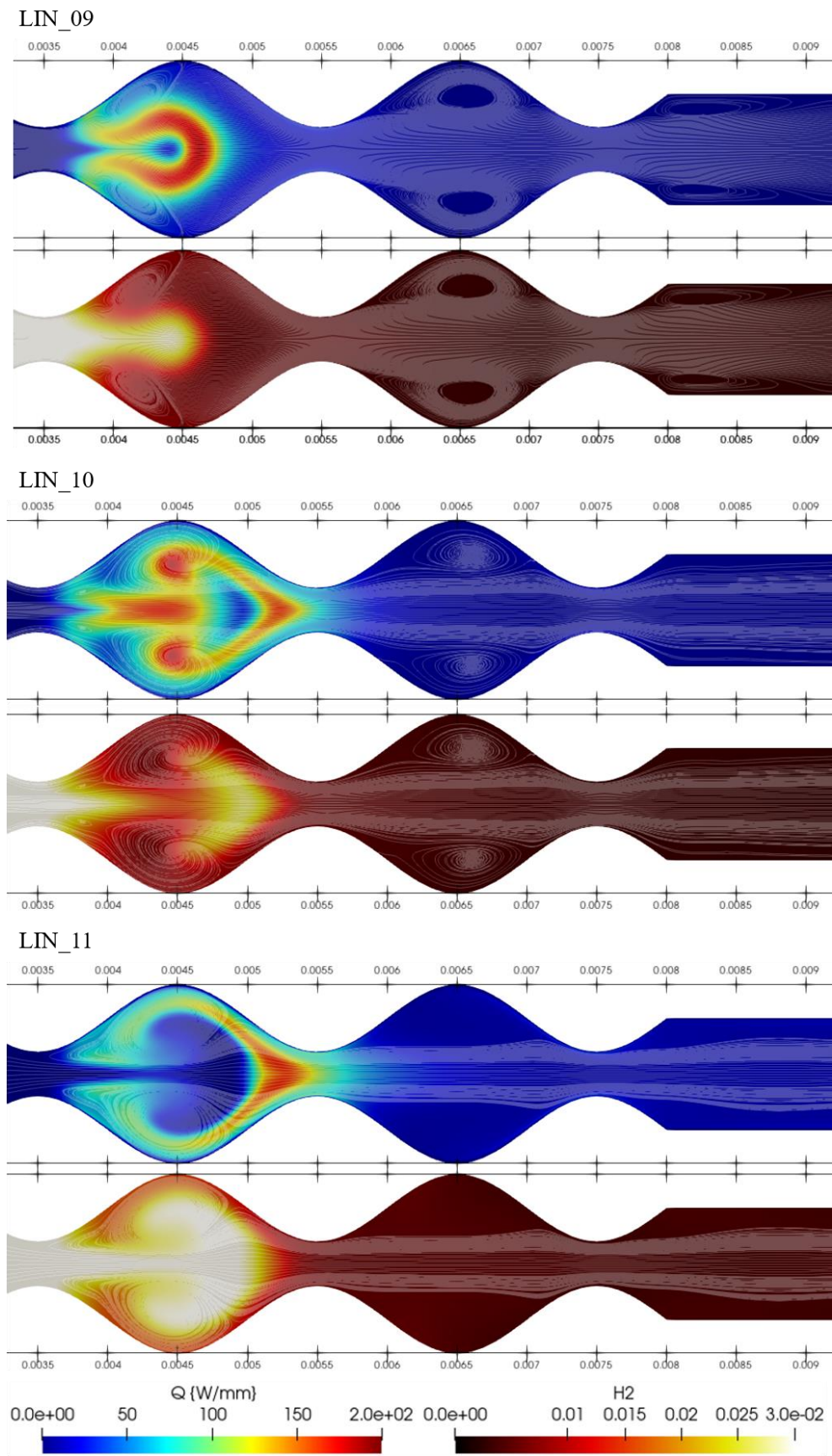


Figura 55 - Mapas do calor libertado e das frações mássicas de H_2 no momento do fenómeno FREI, referentes às simulações LIN_09 ($U=6$ m/s, $\phi=1,1$), LIN_10 ($U=8$ m/s, $\phi=1,1$) e LIN_11 ($U=12$ m/s, $\phi=1,1$).

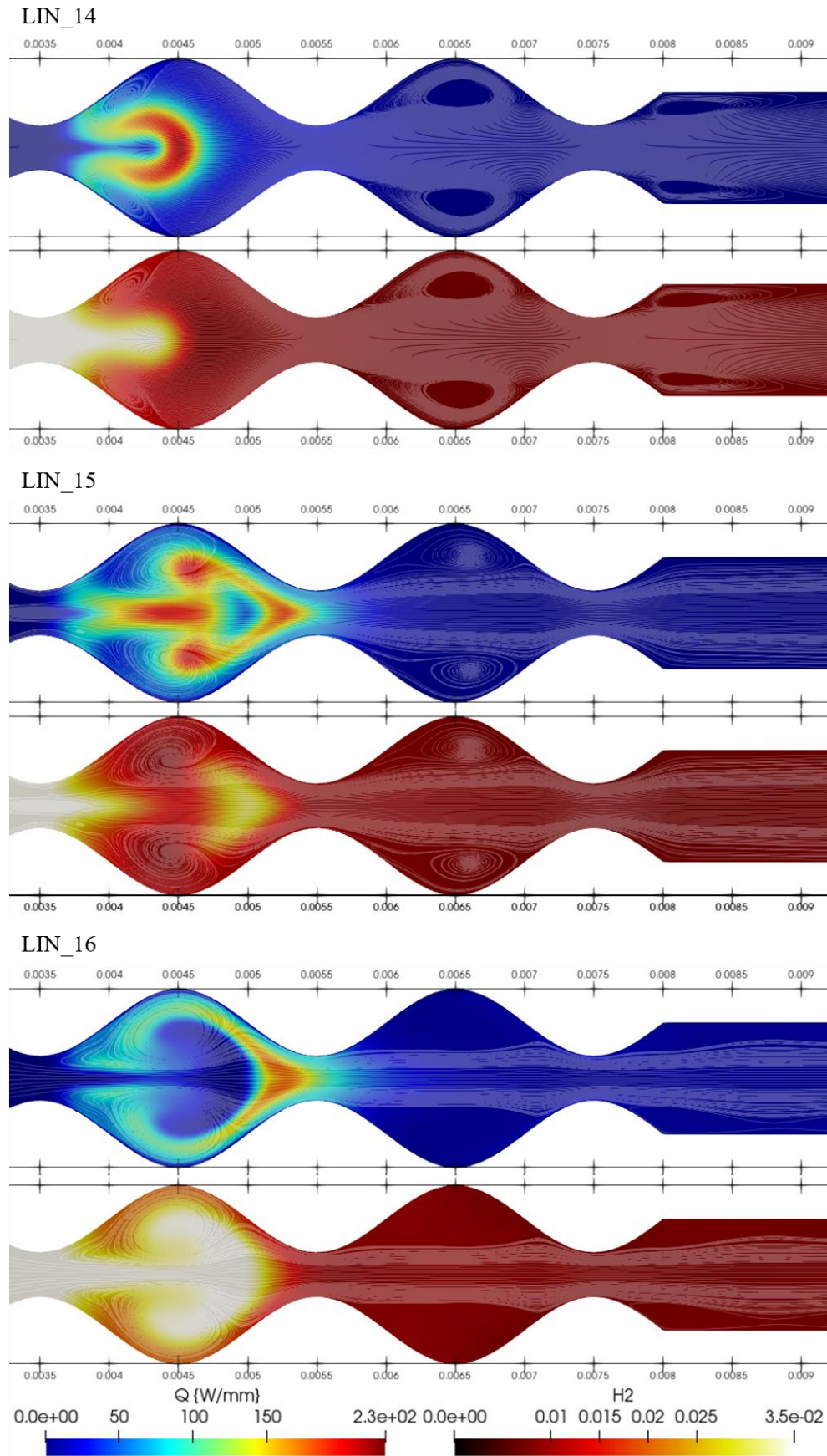


Figura 56 - Mapas do calor libertado e das frações mássicas de H_2 no momento do fenómeno FREI, referentes às simulações LIN_14 ($U=6$ m/s, $\phi=1,3$), LIN_15 ($U=8$ m/s, $\phi=1,3$) e LIN_16 ($U=12$ m/s, $\phi=1,3$).

6.4 Análise de micropropulsão

Tal como no capítulo anterior, a análise da capacidade de propulsão foi efetuada com base num único indicador, o impulso específico. Todo o procedimento adotado já foi explicado no subcapítulo 5.4 e será de novo utilizado.

Ao utilizar um perfil linear de temperatura na parede do queimador verificaram-se duas situações distintas. Consultando o mapa de estabilidade constata-se que algumas chamas estabilizaram, mas outras apresentaram um comportamento dinâmico, denominado FREI. Posto isto, foram calculados os valores médios e máximos do impulso específico nas simulações onde se observou o fenómeno FREI. Na Figura 57 são apresentados estes resultados sob a forma de gráfico de barras, onde as barras azuis representam o valor médio do impulso específico da respetiva simulação e as barras vermelhas o valor máximo verificado já numa fase bastante desenvolvida do fenómeno de extinção e ignição repetitiva. De facto, este fenómeno origina valores bastante elevados de impulso específico à saída do microcanal. Para cada simulação, quanto maior a velocidade de entrada, maior é a diferença entre o valor médio e o valor máximo. Em comparação com os resultados obtidos no caso hiperbólico, os valores máximos são cerca de duas vezes superiores, o que significa que o fenómeno FREI é extremamente vantajoso no que toca à sua aplicabilidade em sistemas de micropropulsão.

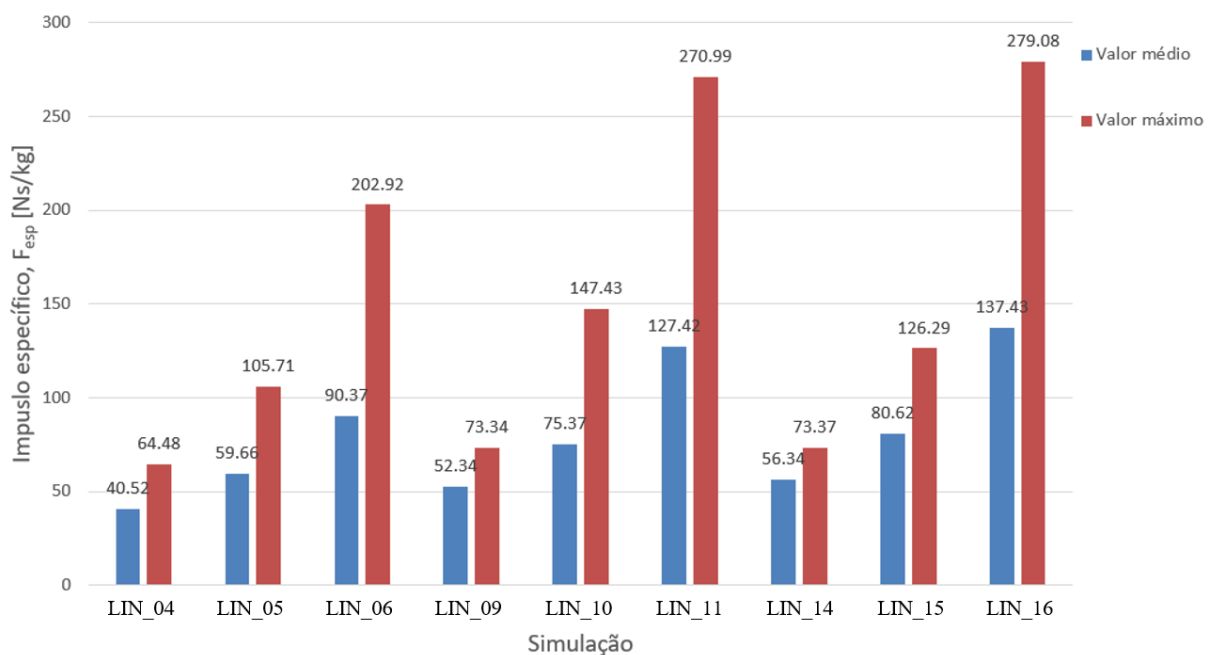


Figura 57 – Gráfico de barras referente ao valor médio e máximo do impulso específico para todas as simulações com perfil linear onde se verificou um comportamento dinâmico.

A análise dos valores do impulso específico das simulações onde se verificou uma chama estável e perfeitamente ancorada, foi idêntica à análise realizada no capítulo do perfil hiperbólico. Neste caso agruparam-se os valores do impulso específico das chamas estáveis com os valores médios das simulações presentes no gráfico de barras apresentado anteriormente. Nas Figuras 58 e 59 estão representados os gráficos onde se pode consultar a evolução destes valores em função da velocidade de entrada e da razão de equivalência, respetivamente. É evidente que o impulso específico aumenta com o aumento da velocidade de entrada. Esse aumento, para $\phi=0,7$ é aproximadamente linear e, para valores de ϕ superiores a 1, essa evolução torna-se exponencial. Para a mesma velocidade, o aumento de ϕ também proporciona um aumento do impulso específico, no entanto, este aumento é bastante ligeiro

quando comparado com o efeito da variação de velocidade. De facto, para o caso de $\phi=1,3$ (curva azul na Figura 58) existe uma variação de aproximadamente 100 Ns/kg, enquanto para o caso de $U=12$ m/s (curva amarela na Figura 59) existe uma variação de sensivelmente 50 Ns/kg. Para concluir, ao comparar os resultados obtidos neste capítulo com os resultados obtidos no capítulo do perfil hiperbólico, constata-se que os resultados são extremamente semelhantes, o que justifica a análise a partir deste indicador.

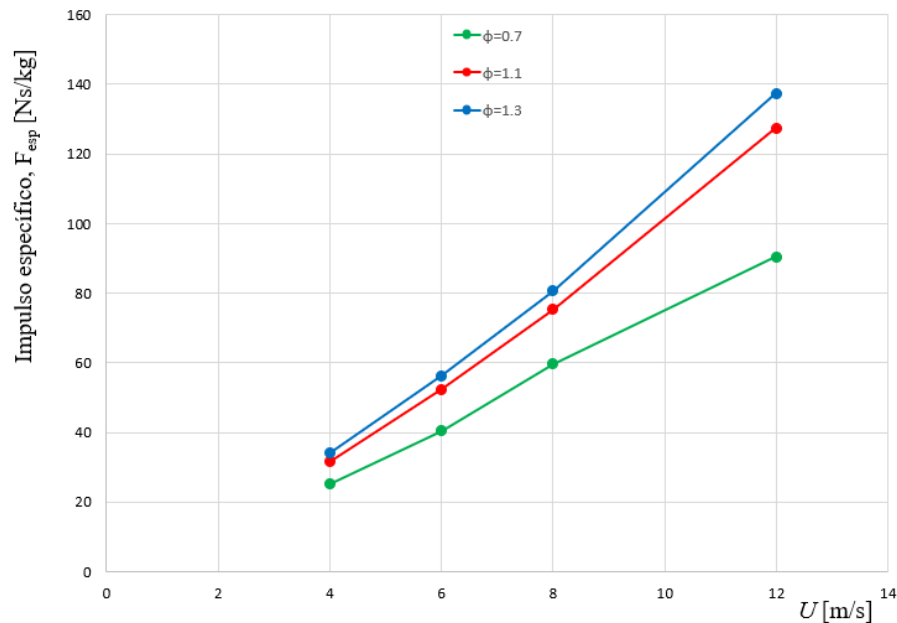


Figura 58 - Gráfico dos valores de impulso específico de cada simulação com perfil linear, em função da velocidade de entrada.

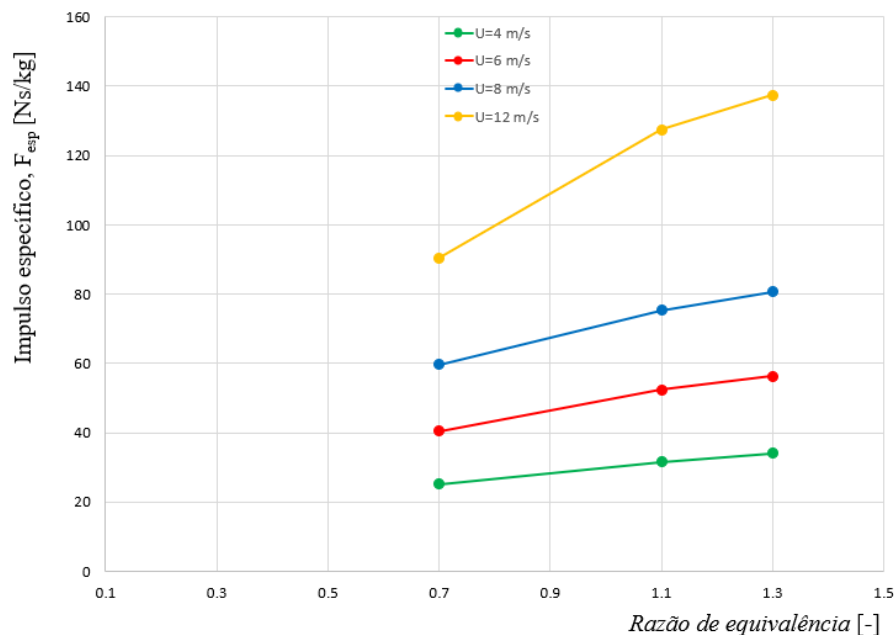


Figura 59 - Gráfico dos valores de impulso específico de cada simulação com perfil linear, em função da razão de equivalência.

7 Resultados para o caso adiabático utilizando uma faísca

7.1 Regime adiabático e faísca imposta

Dado que já foi analisado o caso onde o calor é fornecido ao escoamento através do aquecimento das paredes do microcanal, tanto pela utilização de um perfil hiperbólico de temperatura como de um perfil linear, neste capítulo irá ser analisado um caso completamente diferente. Deste modo, é agora proposto um microcanal adiabático, ou seja, é imposto um gradiente de temperatura nulo em toda a parede do queimador, o que impede qualquer troca de calor do interior do canal para o exterior e vice-versa. Assim, no processo de combustão em regime adiabático é atingida a temperatura de chama adiabática, ou seja, a temperatura de chama máxima inerente ao processo químico.

Posto isto, como não existe qualquer troca de calor através das paredes do queimador, é necessário introduzir uma fonte de calor dentro do microcanal de modo a possibilitar a ignição da mistura e que, ao mesmo tempo, não perturbe a dinâmica do escoamento. Assim, como é apresentado na Figura 60, foi introduzida uma faísca no seio do escoamento através de uma função escrita no ficheiro *solverOptions*, ficheiro este presente na pasta *constant*. Aqui, o operador pode definir diversos parâmetros da faísca imposta, como por exemplo, a sua duração, localização, dimensão (diâmetro) e temperatura. A função implementada nas simulações abordadas neste capítulo é apresentada na Figura 61.

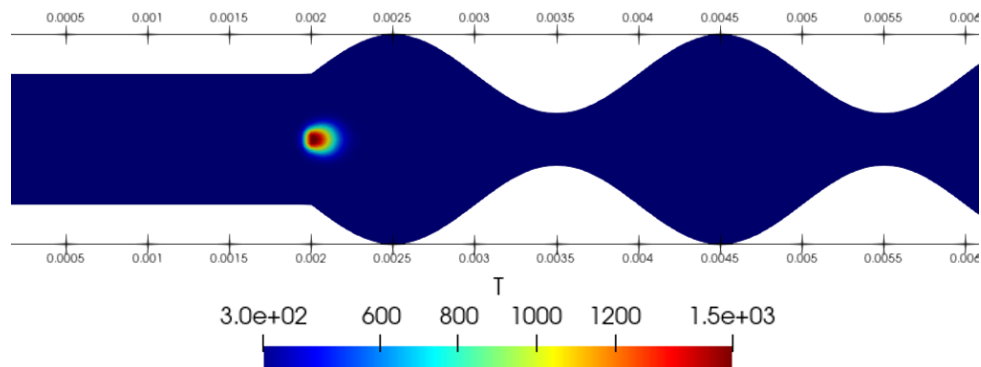


Figura 60 – Esquema gráfico da faísca imposta dentro do microcanal (temperatura em Kelvin).

```
Spark
{
    spark           on;
    position         (0.002 0.0 5e-5);
    time            0.;
    temperature      1500;
    duration         0.0005;
    diameter         0.1e-3;
}
```

Figura 61 – Função *Spark* imposta.

7.2 Mapa de estabilidade

Neste capítulo foram realizadas 15 simulações, divididas em grupos de 5 por cada ϕ utilizado. Na Tabela 6 são apresentadas estas simulações, bem como as respectivas velocidades utilizadas e razões de equivalência.

Tabela 6 - Conjunto de simulações efetuadas em regime adiabático

Amostra	Razão de equivalência, ϕ [-]	Velocidade de entrada, U [m/s]
ADI_01	0,7	4
ADI_02		6
ADI_03		8
ADI_04		10
ADI_05		12
ADI_06	1,1	4
ADI_07		6
ADI_08		8
ADI_09		10
ADI_10		12
ADI_11	1,3	4
ADI_12		6
ADI_13		8
ADI_14		10
ADI_15		12

Após realizar todas as simulações presentes na Tabela 6, foi construído um mapa de estabilidade que traduz as zonas de transição das diferentes dinâmicas da chama. No conjunto das simulações efetuadas foram observados três comportamentos distintos. Para as velocidades mais baixas e ϕ maior do que 1 há retorno de chama, aumentando a velocidade verificou-se a estabilidade da chama na primeira cavidade do canal ondulatório e, por fim, para as velocidades mais elevadas constatou-se o aparecimento do fenómeno FREI. Na Figura 62 é apresentado este mapa em função da velocidade de entrada e da razão de equivalência.

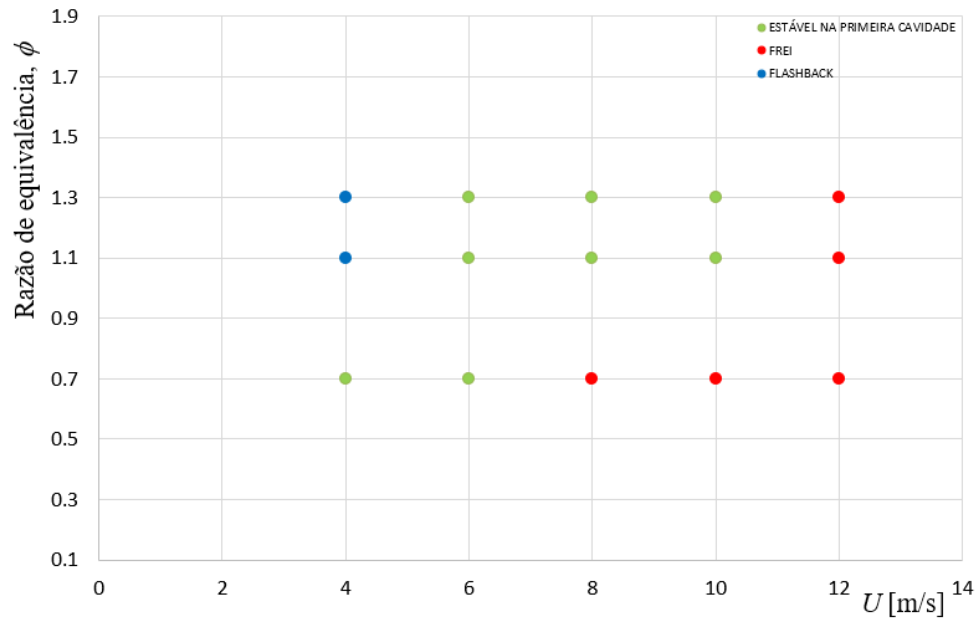


Figura 62 - Mapa de estabilidade das várias simulações efetuadas com o microcanal em regime adiabático.

7.3 Resultados obtidos e discussão

7.3.1 Regime permanente e chama estável

Através do mapa de estabilidade verifica-se que, neste capítulo de análise das chamas adiabáticas dentro de um microcanal ondulado, foram obtidos resultados bastante diversificados. Numa primeira fase será feita uma análise das chamas que apresentaram um comportamento estável, ou seja, as chamas onde se verificou uma ancoragem numa determinada secção do canal.

Em primeiro lugar, é apresentada a Figura 63 onde se pode observar a evolução da temperatura e do calor libertado, ao longo do queimador, nos resultados obtidos na simulação ADI_01 ($\phi=0,7$ e $U=4$ m/s). Aqui é feita uma comparação entre os casos equivalentes analisados em capítulos anteriores. Neste gráfico está presente a análise destas propriedades ao longo do queimador para os casos hiperbólico, linear e adiabático, com U e ϕ sempre constantes entre as simulações.

A evolução do calor libertado no caso do microcanal adiabático é idêntica à evolução desta mesma propriedade para o caso em que se utiliza um perfil hiperbólico de temperatura na parede do queimador. O perfil hiperbólico, tal como a faísca imposta, proporcionam uma variação brusca da temperatura no queimador e obrigam a chama a ancorar numa determinada secção. Assim, visto que a variação brusca do perfil hiperbólico se situa entre as secções de $x=0,001$ mm e $x=0,003$ mm e a faísca foi imposta na secção de $x=0,002$ mm, é plausível que a evolução do calor libertado esteja localizada na mesma secção em ambos os casos. Posto isto, a subida da temperatura dentro do canal acompanha a evolução do calor libertado. O aumento destas duas propriedades situa-se na secção de $x=0,0025$, tal como foi verificado no caso hiperbólico. Contudo, a temperatura ao longo do canal, numa primeira fase, evolui de uma forma exponencial e, na secção $x=0,004$ começa a traduzir um comportamento logarítmico. Assim, a temperatura máxima verifica-se na secção de saída do microcanal, tendendo para um valor de 2000 K, o que vai de acordo com todas as situações simuladas utilizando um regime adiabático.

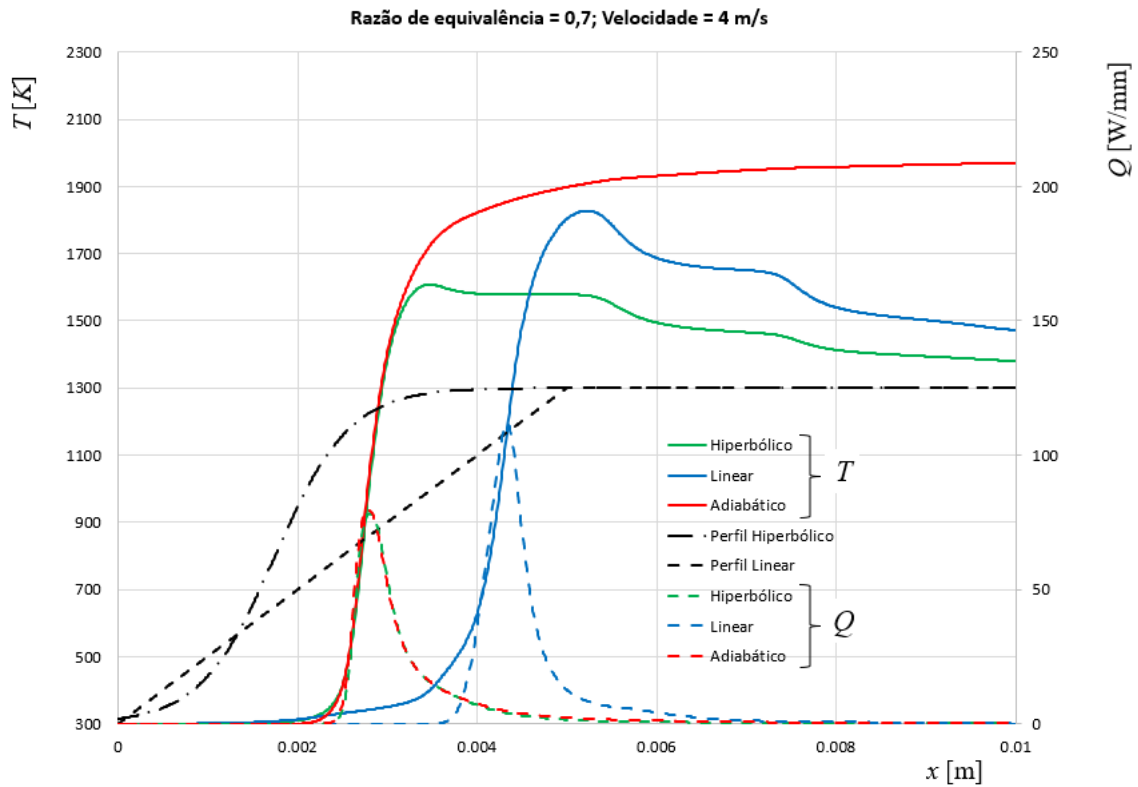


Figura 63 – Gráfico da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para simulação ADI_01 (a vermelho), LIN_02 (a azul) e HIP_01 (a verde) (todas com $\phi=0,7$ e $U=4$ m/s).

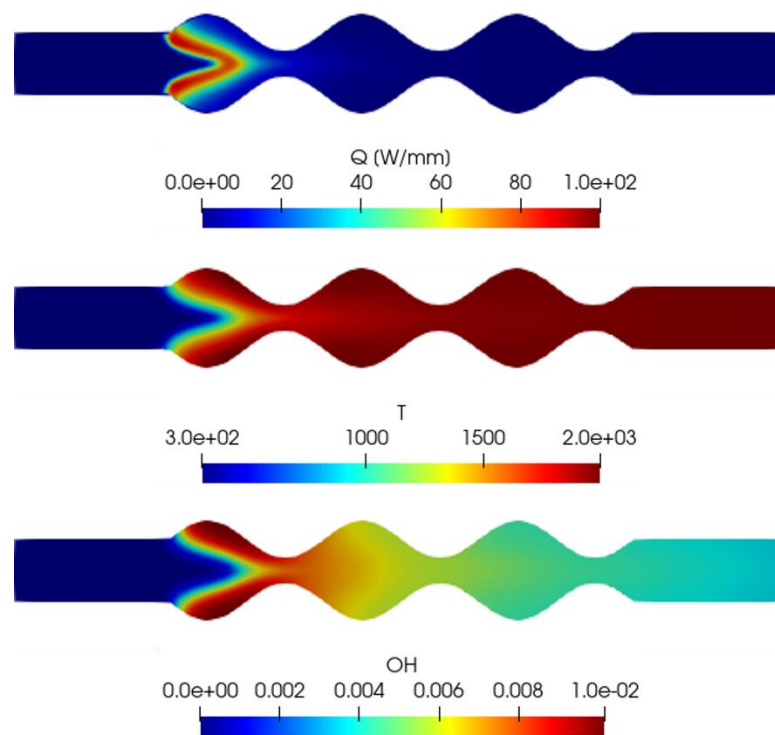


Figura 64 – Mapas de contorno do calor libertado, temperatura em K e fração mássica de OH, referentes à simulação ADI_01 ($\phi=0,7$ e $U=4$ m/s).

Em segundo lugar, foi realizada a mesma análise para as simulações ADI_08 ($\phi=1,1$ e $U=8$ m/s), ADI_09 ($\phi=1,1$ e $U=10$ m/s), ADI_13 ($\phi=1,3$ e $U=8$ m/s) e ADI_14 ($\phi=1,3$ e $U=10$ m/s), onde se verificou a estabilidade da chama. Assim, é apresentada a Figura 65, onde os resultados são agrupados em dois gráficos, consoante a razão de equivalência utilizada. Aqui é corroborada a informação obtida para a simulação analisada anteriormente, ou seja, a temperatura máxima dentro do canal verifica-se na secção de saída do mesmo e a sua evolução tem dois comportamentos distintos, inicialmente assemelhando-se a um perfil exponencial e, após a secção de $x=0,004$ mm, transitando para um perfil logarítmico. O aumento da razão de equivalência não proporciona grandes alterações nos resultados obtidos, visto que ambos os gráficos são extremamente idênticos. O aumento da velocidade de entrada empurra, ligeiramente, a chama para jusante, e origina um abrandamento da diminuição de calor libertado numa determinada secção. Isto significa que a região da chama é ligeiramente estendida com o aumento da velocidade da mistura.

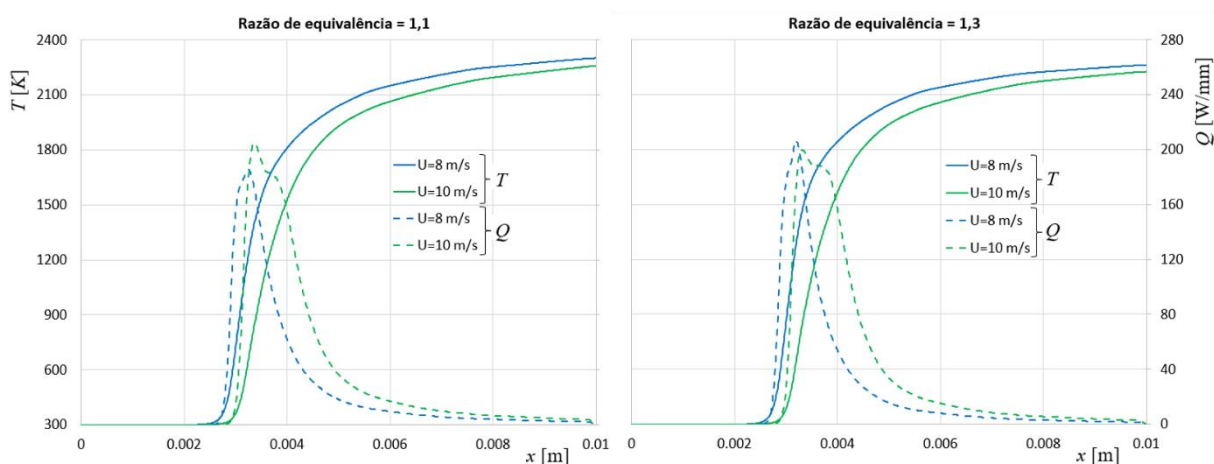


Figura 65 - Gráficos da evolução dos valores de temperatura e de calor libertado ao longo do eixo central do queimador, para as simulações estáveis: à esquerda ADI_08 ($\phi=1,1$ e $U=8$ m/s) e ADI_09 ($\phi=1,1$ e $U=10$ m/s), à direita ADI_13 ($\phi=1,3$ e $U=8$ m/s) e ADI_14 ($\phi=1,3$ e $U=10$ m/s).

Para terminar esta análise das chamas estáveis, na Figura 66 são apresentados os mapas de contorno das várias propriedades, referentes a cada simulação.

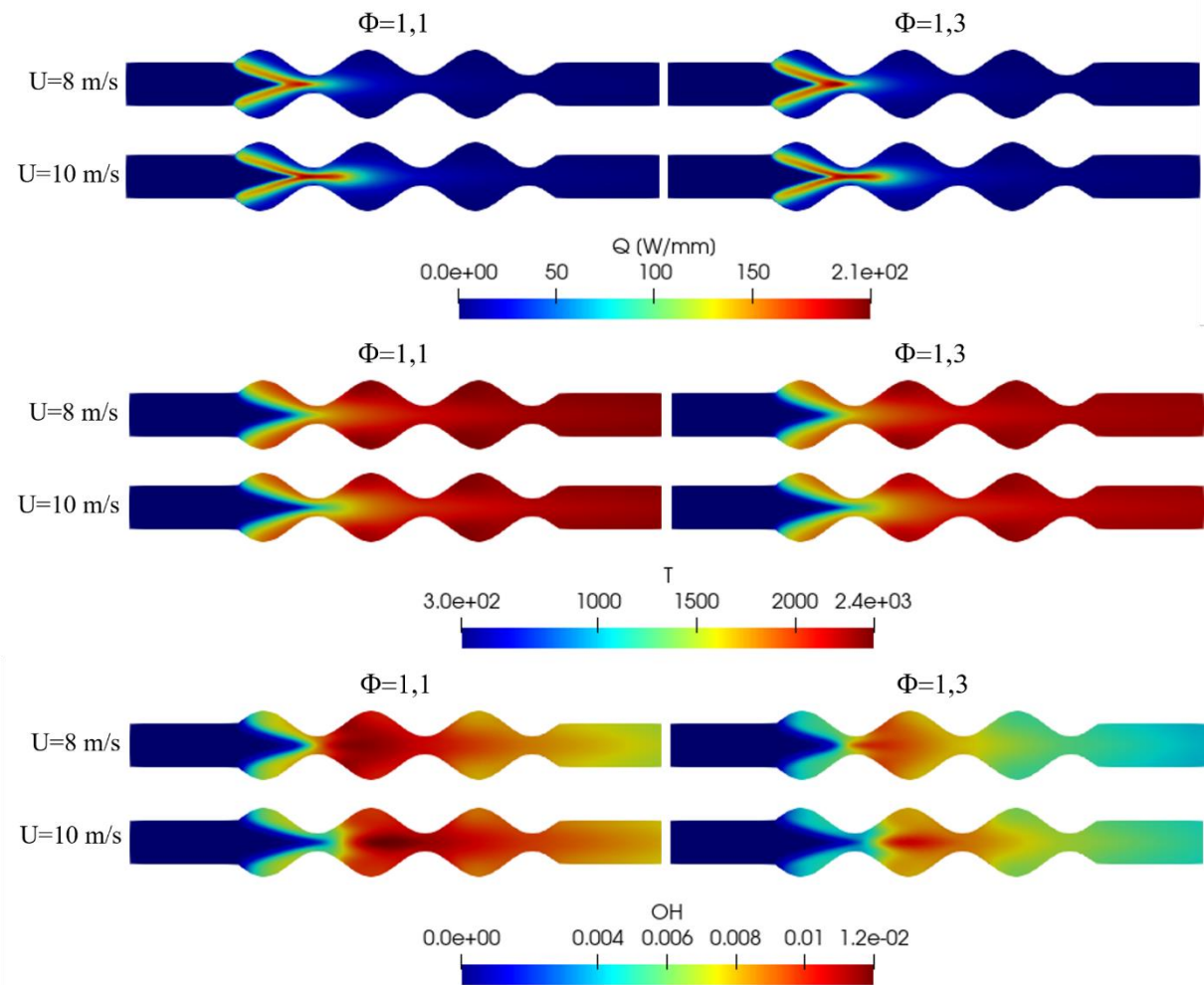


Figura 66 – Mapas de contorno de três propriedades, calor libertado, temperatura em K e fração mássica de OH, das quatro simulações estáveis ADI_08 ($\phi=1,1$ e $U=8$ m/s), ADI_09 ($\phi=1,1$ e $U=10$ m/s), ADI_13 ($\phi=1,3$ e $U=8$ m/s) e ADI_14 ($\phi=1,3$ e $U=10$ m/s).

7.3.2 Regime transiente e fenómeno de extinção e ignição FREI

Tal como no capítulo anterior referente à utilização de um perfil linear de temperatura na parede do queimador, neste caso também foi observado o aparecimento do fenómeno FREI em algumas simulações. Consultando o mapa de estabilidade presente na Figura 62, conclui-se que o fenómeno FREI surge na gama mais elevada de velocidade para ϕ superior a 1 e, para $\phi=0,7$ o fenómeno aparece para velocidades superiores a 8 m/s, inclusive. No anexo B apresenta-se as evoluções temporais de quatro parâmetros, referentes às chamas instáveis com uma condição fronteira adiabática, numa secção do microcanal a 4,5 mm da entrada do mesmo.

Apesar de ser o mesmo fenómeno, há parâmetros que apresentam algumas diferenças em relação ao caso do perfil linear, como é o caso da temperatura máxima no interior do canal. De facto, como se trata de um regime adiabático onde não existem trocas de calor para o exterior, todo o calor libertado pela combustão é transferido ao longo do canal, originando uma maior temperatura na secção final do queimador. Assim, visto que a zona de temperatura máxima é diferente da zona onde se verifica o fenómeno FREI, a temperatura máxima verificada dentro do queimador, denominada como temperatura adiabática de chama, estabiliza, apesar do comportamento oscilante da chama a montante. Posto isto, foi possível fazer uma análise da temperatura adiabática, para todas as simulações onde a chama não se extingue, independentemente da dinâmica verificada. Na Figura 67 é apresentado o gráfico que traduz a

evolução da temperatura adiabática de chama em função da variação dos dois parâmetros analisados.

Em primeiro lugar, analisando o efeito da velocidade de entrada, no caso de $\phi=0,7$ quanto maior a velocidade de entrada, maior é a temperatura adiabática de chama. Nos casos de ϕ maior do que 1 acontece a situação contrária, ou seja, quanto maior a velocidade de entrada, menor é a temperatura adiabática de chama, observando uma queda bastante acentuada na transição de 10 para 12 m/s.

Em segundo lugar, a variação da razão de equivalência tem um papel fundamental nos valores obtidos para as temperaturas adiabáticas das diversas simulações. Para cada velocidade utilizada, a temperatura adiabática máxima verifica-se para $\phi=1,1$, o que corrobora informação obtida em [20]. Nas simulações com $\phi=1,3$ observa-se valores ligeiramente inferiores e, é nas simulações com $\phi=0,7$ que se obtém os resultados mais baixos de temperatura adiabática de chama.

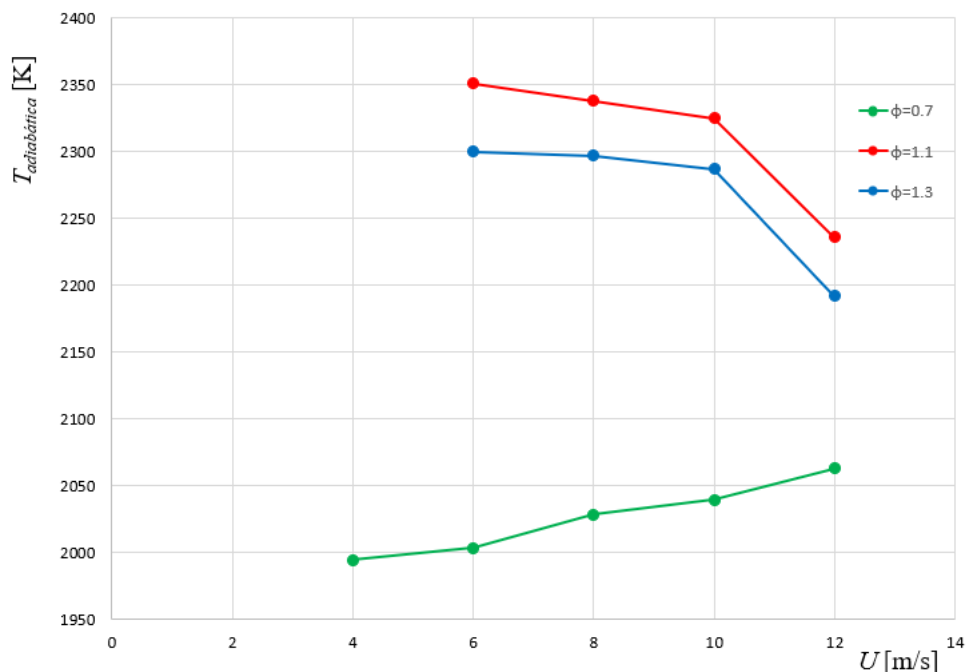


Figura 67 – Gráfico da temperatura adiabática de chama de cada simulação.

Dado que o FREI é um fenómeno dinâmico, torna-se imperativo analisar a sua evolução ao longo do tempo. Em seguida, na Figura 68, estão representados cinco gráficos nos quais é possível observar o comportamento do calor libertado nas simulações onde se verifica este comportamento.

Nos três primeiros gráficos, ADI_03 ($U=8$ m/s e $\phi=0,7$), ADI_04 ($U=10$ m/s e $\phi=0,7$) e ADI_05 ($U=12$ m/s e $\phi=0,7$) verifica-se que são constantes a gama de valores do calor libertado, estando sempre entre 100 e 140 W/mm. No entanto, com o aumento da velocidade, a evolução do calor libertado é cada vez mais irregular. Nos dois últimos gráficos, ADI_10 ($U=12$ m/s e $\phi=1,1$) e ADI_15 ($U=12$ m/s e $\phi=1,3$) observam-se valores bastante mais elevados, na ordem dos 180/200 W/mm pelo aumento da razão de equivalência. Simultaneamente, este aumento é responsável por uma reação de combustão mais energética e explosiva.

Observando os perfis de aumento e diminuição de calor em cada período do ciclo de reacendimento das várias simulações, verifica-se uma grande variedade de resultados obtidos.

Por exemplo, na simulação ADI_03 ($U=8$ m/s e $\phi=0,7$) o perfil é claramente cíclico, com um período de 0,1 ms. A subida do perfil é feita em duas etapas: a primeira na forma de parábola e a segunda exponencial. Após atingir o pico, o calor máximo diminui linearmente.

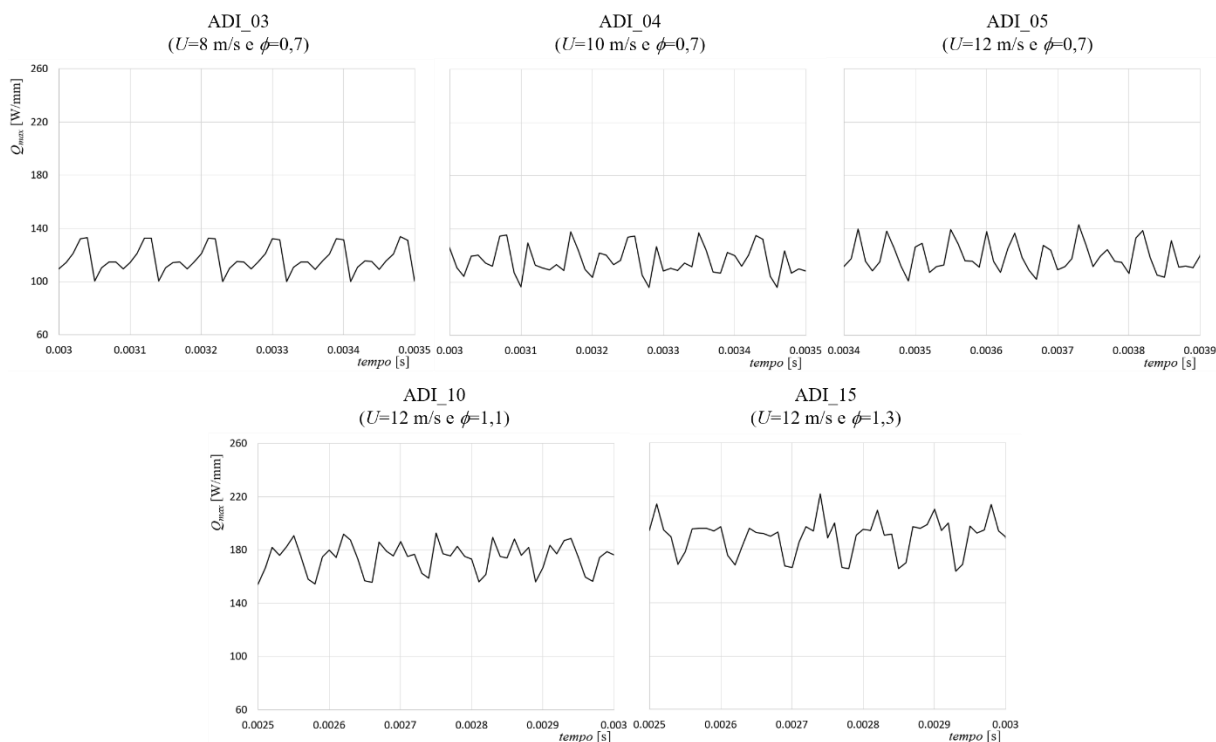


Figura 68 – Gráficos da evolução temporal do calor máximo libertado das simulações onde se verificou o fenómeno FREI.

Ao comparar os resultados obtidos no caso adiabático com os resultados obtidos no caso com perfil linear, verifica-se que, para algumas simulações foi obtida a mesma dinâmica de chama. Assim, para estes casos onde se verificou o fenómeno FREI com os mesmos parâmetros (velocidade de entrada e razão de equivalência), foi efetuada uma comparação entre as amplitudes máximas dos valores de calor libertado, verificados num intervalo de tempo onde o fenómeno já é praticamente cíclico. Na Figura 69 apresenta-se um gráfico de barras onde é quantificada a amplitude máxima de calor libertado para as quatro simulações onde se observa o fenómeno FREI, tanto no caso adiabático como no caso do perfil linear de temperatura na parede do queimador. Verifica-se que, para as simulações com $\phi=0,7$ e $\phi=1,1$ a amplitude diminui substancialmente, apesar de, no último caso, a amplitude ser praticamente igual nos dois casos. Conclui-se que, na generalidade dos casos, o fenómeno FREI em regime adiabático tem uma amplitude menor do que no caso com a parede do queimador aquecida. Isto faz sentido porque, no caso da parede aquecida, há a entrada de energia térmica inerente ao aquecimento da parede.

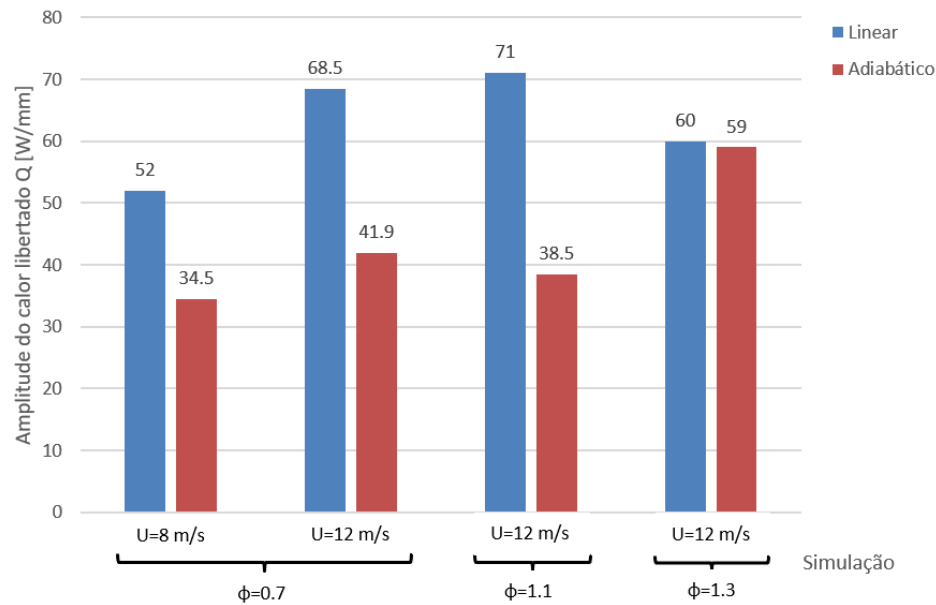


Figura 69 – Gráfico referente às amplitudes dos valores de calor máximo libertado no fenómeno FREI para quatro simulações lineares e adiabáticas.

7.3.3 Retorno de chama

Como é apresentado no mapa de estabilidade, as simulações ADI_06 ($U=4$ m/s e $\phi=1,1$) e ADI_11 ($U=4$ m/s e $\phi=1,3$) evidenciaram um comportamento indesejável na aplicação prática destes mecanismos de microcombustão. Foi observado que ambas as chamas se extinguíram por retorno de chama. Este fenómeno ocorre quando a velocidade de queima da chama é superior à velocidade dos reagentes da mistura gasosa. Assim, após a extinção da faísca, a chama movimenta-se para uma zona cada vez mais a montante no microcanal, até se extinguir através da entrada do mesmo.

7.3.4 Duração da faísca imposta

No decorrer da execução deste trabalho, verificou-se que a duração da faísca imposta dentro do microcanal é um parâmetro que afeta diretamente o comportamento da chama. De facto, foi observado que, na simulação ADI_06 ($U=4$ m/s e $\phi=1,1$), a variação do tempo da faísca imposta altera completamente a dinâmica da microcombustão. Foram efetuadas duas simulações com a mesma velocidade de entrada, 4 m/s, a mesma razão de equivalência, $\phi=1,1$ e ambas em regime adiabático. O único fator que diferenciou estas duas simulações foi a duração da faísca imposta. Posto isto, na Figura 70 são apresentadas as duas funções *spark* utilizadas:

```
Spark
{
    spark          on;
    position        (0.002 0.0 5e-5);
    time            0.;
    temperature      1500;
    duration         0.0005;
    diameter         0.1e-3;
}
```

```
Spark
{
    spark          on;
    position        (0.002 0.0 5e-5);
    time            0.;
    temperature      1500;
    duration         0.0008;
    diameter         0.1e-3;
}
```

Figura 70 – Funções *spark* utilizadas nos dois casos.

Como se pode verificar, na Figura 70 foram impostas duas faíscas na mesma posição com a mesma temperatura, mas com durações diferentes. Foi observado que a dinâmica da chama alterou completamente. Na simulação com a faísca de duração 0,5 ms verificou-se que a chama estabilizou na segunda cavidade do microcanal e na simulação com duração de 0,8 ms a chama extinguiu-se por retorno de chama.

No caso da duração de 0,5 ms verificou-se que, quando a faísca apaga, a chama ainda não apresenta uma velocidade de queima suficientemente elevada para conseguir estabilizar na entrada da primeira cavidade e, por isso, a velocidade do escoamento obriga a chama a transitar para a segunda cavidade, onde acaba por estabilizar. No outro caso, como a faísca permanece mais tempo acesa, permite que a chama se desenvolva, aumentando a sua dimensão e a sua velocidade de queima. Assim, quando a faísca apaga, a chama já apresenta uma maior proporção e consegue estabilizar durante alguns milissegundos na entrada da primeira cavidade. No entanto, após se verificar a estabilidade da chama durante mais ou menos 1 milissegundo, observa-se que a chama perde a sua simetria e propaga-se em direção à entrada do canal. Nas Figuras 71 e 72 são apresentados os mapas de contorno destas duas simulações. Em primeiro lugar é apresentado um conjunto de instantes de tempo para demonstrar o efeito do retorno de chama e, posteriormente, é apresentada a situação onde a chama estabiliza na segunda cavidade.

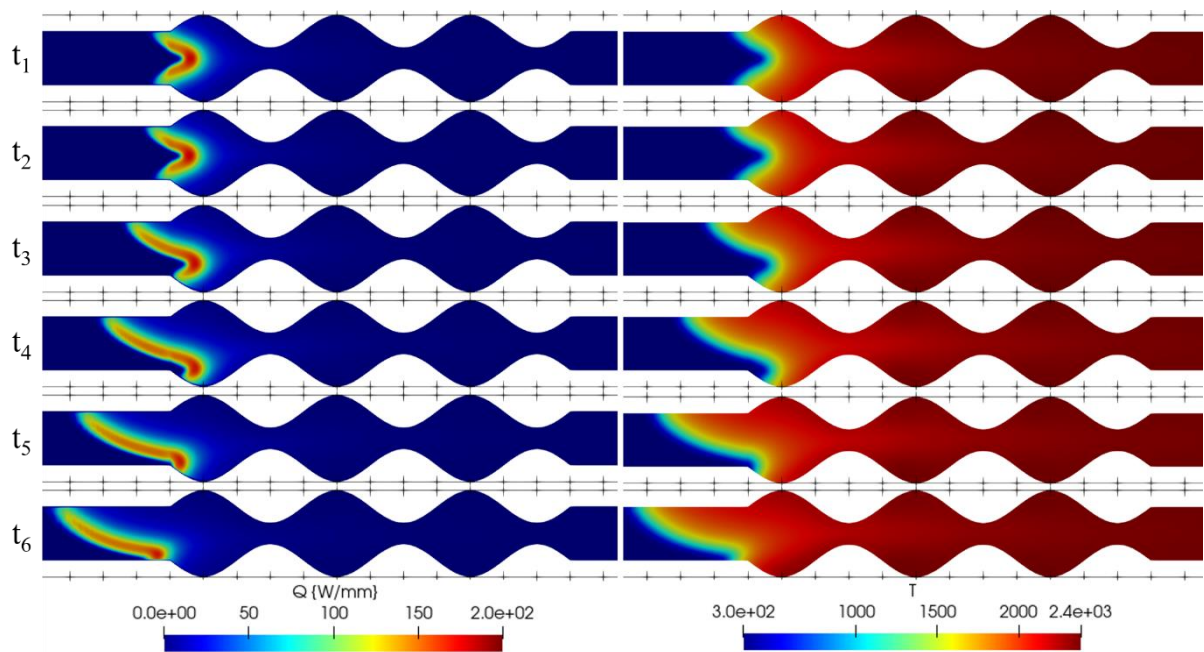


Figura 71 – Mapas de contorno do calor libertado (à esquerda) e da temperatura em K (à direita), compostos por 6 imagens com intervalos de 200 ms, relativos à simulação ADI_06 ($U=4$ m/s e $\phi=1,1$) com duração de faísca de 0,8 ms.



Figura 72 – Mapas de contorno do calor libertado (à esquerda) e da temperatura em K (à direita), relativos à simulação ADI_06 ($U=4$ m/s e $\phi=1,1$) com duração de faísca de 0,5 ms.

7.4 Análise de micropropulsão

Neste subcapítulo, tal como foi efetuado nos capítulos anteriores, foram recolhidos os valores do impulso específico das diversas simulações realizadas em regime adiabático. Tal como no caso da utilização do perfil linear de temperatura, também aqui foram verificados os dois tipos de comportamento de chamas, ou seja, chamas estáveis e chamas instáveis.

Na Figura 73 está representado o gráfico de barras com os valores médios e máximos do impulso específico das chamas dinâmicas. As três primeiras simulações presentes no gráfico, ADI_03 ($U=8$ m/s e $\phi=0,7$), ADI_04 ($U=10$ m/s e $\phi=0,7$) e ADI_05 ($U=12$ m/s e $\phi=0,7$), têm em comum a sua razão de equivalência. Assim, tendo por base esse parâmetro em comum, é possível analisar a influência da variação da velocidade de entrada nos valores do impulso específico. O valor médio aumenta de 71 Ns/kg para 98 Ns/kg à medida que aumenta a velocidade de entrada, o que traduz um aumento praticamente linear. Observando agora as três últimas simulações e consultando a Tabela 6, verifica-se que a velocidade de entrada é constante entre elas ($U=12$ m/s). Posto isto, é possível analisar a influência da variação da razão de equivalência nas simulações ADI_05 ($U=12$ m/s e $\phi=0,7$), ADI_10 ($U=12$ m/s e $\phi=1,1$) e ADI_15 ($U=12$ m/s e $\phi=1,3$). Observa-se um grande aumento dos valores máximos verificados, passando de 170 Ns/kg para 310 Ns/kg.

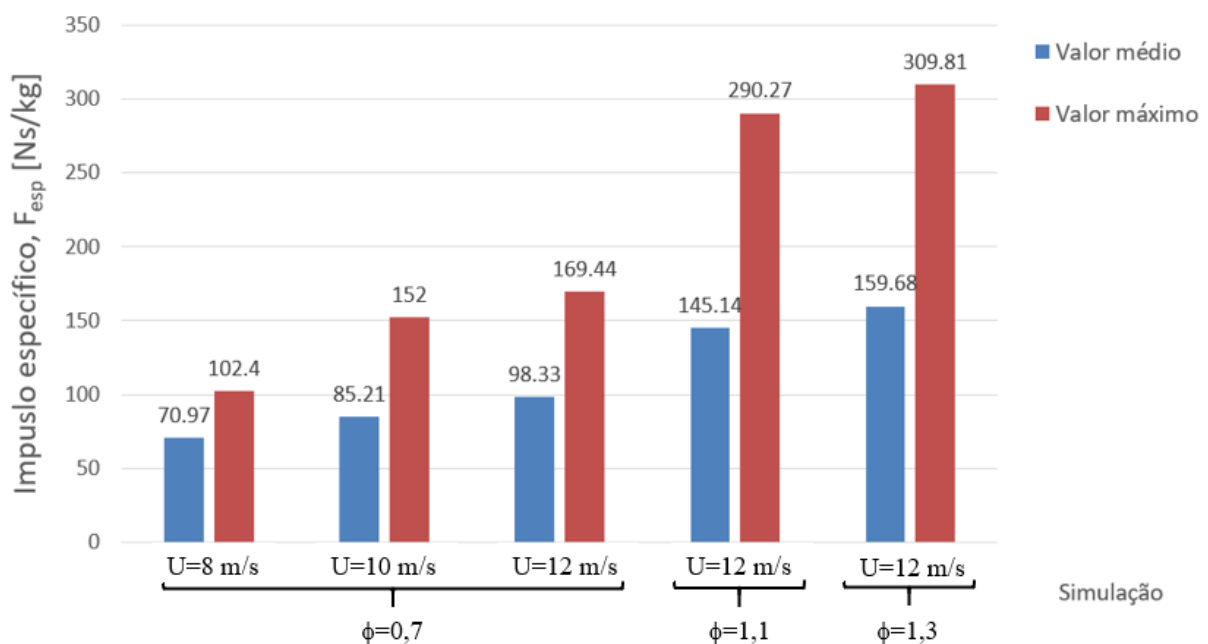


Figura 73 - Gráfico de barras referente ao valor médio e máximo do impulso específico para todas as simulações em regime adiabático onde se verificou um comportamento instável.

De modo a analisar as chamas estáveis, foi efetuado um estudo com os resultados obtidos nestes casos e também com os valores médios das chamas instáveis apresentados anteriormente. Através da análise da Figura 74 contata-se que, para o caso de $\phi=0,7$ o impulso específico é diretamente proporcional à velocidade de entrada, sendo notório o aumento deste indicador de acordo com a gama de velocidades imposta. Para valores de ϕ superiores a 1, este aumento segue uma distribuição logarítmica, como se pode observar nas curvas vermelha e azul da Figura 74. A evolução deste indicador em função da razão de equivalência encontra-se representada na Figura 75. No caso em que a velocidade é igual a 4 m/s e ϕ superior a 1, deu-se o retorno de chama e, por isso, não foi possível obter os valores de impulso específico para estes dois casos. Posto isto, no gráfico da Figura 75 aparece somente um ponto verde, que diz

respeito à simulação ADI_01 ($U=4$ m/s e $\phi=0,7$). Para as velocidades de 8, 10 e 12 m/s, a evolução é logarítmica. Deste modo, a velocidade de entrada e a razão de equivalência têm um efeito semelhante na variação do indicador de propulsão utilizado.

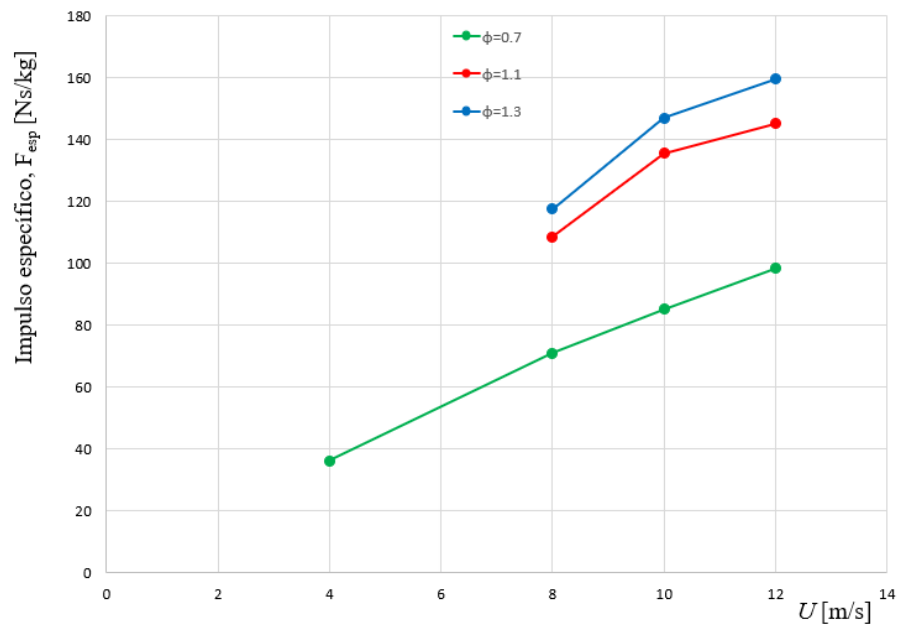


Figura 74 - Gráfico dos valores de impulso específico de cada simulação em regime adiabático, em função da velocidade de entrada.

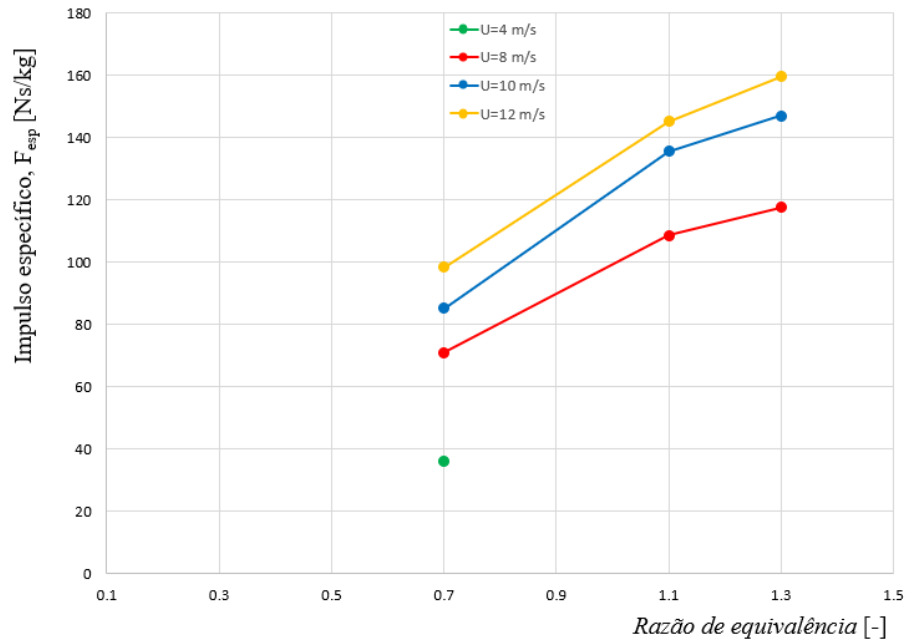


Figura 75 - Gráfico dos valores de impulso específico de cada simulação em regime adiabático, em função da razão de equivalência.

8 Conclusão e trabalhos futuros

8.1 Conclusão

Na presente dissertação foram analisadas três situações distintas em termos de condições fronteira. Em todas elas foi estudado o efeito da variação da velocidade de entrada e da razão de equivalência da mistura em diversas propriedades da chama, tais como, a temperatura, o calor libertado e a fração mássica de algumas espécies. Foi também analisado o seu impacto num indicador denominado impulso específico, o qual é utilizado para exprimir a capacidade de propulsão do escoamento reativo.

Em primeiro lugar foi imposto um perfil hiperbólico de temperatura na parede do queimador. Para toda a gama de velocidades de entrada e de razões de equivalência foram verificadas chamas estáveis, ancoradas à entrada da primeira cavidade do microcanal. Foi concluído que a secção onde a chama estabiliza está diretamente ligada ao perfil de temperatura utilizado na condição fronteira. Em relação à chama observada, conclui-se que o aumento da velocidade de entrada leva à propagação da chama para uma zona a jusante no eixo central do queimador. Com o aumento da razão de equivalência, a chama é cada vez mais intensa e a sua velocidade de queima aumenta gradualmente, o que leva à propagação da chama para uma posição cada vez mais a montante no microcanal. No entanto, o impacto do aumento da velocidade é bastante mais significativo do que o do aumento da razão de equivalência. No que toca às propriedades da chama, pode-se concluir que o aumento da velocidade de entrada faz com que os valores da temperatura máxima dentro canal diminuam, a fração mássica de OH também diminua e os valores de calor libertado fiquem relativamente constantes para a mesma razão de equivalência. Por sua vez, o aumento da razão de equivalência origina um aumento do calor libertado pela reação de combustão devido ao aumento das concentrações de H_2 . Observa-se também um aumento da temperatura máxima e da fração mássica de OH na transição de $\phi=0,7$ para $\phi=1,1$. Ao analisar a temperatura da chama ao longo do eixo central do queimador conclui-se que a geometria do canal tem uma grande influência nas simulações com $\phi=0,7$, verificando-se uma diminuição por patamares que acompanha as convergências e divergências das cavidades do microcanal. Este efeito vai desaparecendo à medida que se aumenta a razão de equivalência. Quanto ao impulso específico conclui-se que, quanto maior é a velocidade de entrada e maior a razão de equivalência, maior é a capacidade de impulsão à saída do queimador, apesar de a variação da velocidade ser o fator com mais preponderância no aumento deste indicador.

Em segundo lugar foi substituído o perfil hiperbólico por um perfil linear. Posto isto, foram observados dois comportamentos distintos das chamas obtidas. Foram obtidas chamas estáveis para as velocidades mais baixas, e chamas instáveis com FREI para as velocidades mais elevadas. As chamas estáveis ancoraram na segunda cavidade do queimador e, ao longo do eixo central, verifica-se um grande impacto da geometria do queimador na diminuição da temperatura máxima, tal como no caso hiperbólico. Para as chamas instáveis conclui-se que, o aumento da velocidade de entrada não tem grande influência na temperatura máxima nem no calor máximo libertado, apesar de aumentar bastante a amplitude deste último parâmetro. A variação da razão de equivalência faz aumentar a gama de valores destes dois parâmetros, sobretudo na transição de $\phi=0,7$ para $\phi=1,1$. Ao analisar as diferentes amplitudes dos sinais obtidos, conclui-se que o aumento da velocidade de entrada origina um aumento linear dos valores de calor libertado. O FREI é um fenómeno bastante complexo de ignição e extinção repetitiva da chama. Foi concluído que, devido à geometria do microcanal, surgiram vórtices nas cavidades onduladas, os quais responsáveis pelo transporte de energia que dá origem a uma nova ignição. Quanto ao impulso específico obteve-se resultados bastante similares com o caso

anterior. Foi concluído que o FREI, dado que é um fenómeno dinâmico, apresenta picos de impulso específico bastante elevados devido à acumulação de H_2 na zona de reacção.

Por último foi simulado o caso de um queimador adiabático, ou seja, foram impedidas quaisquer trocas de calor entre a parede do queimador e o escoamento. Aqui foram obtidas duas chamas que se extinguíram por retorno de chama devido à sua baixa velocidade de entrada e elevada razão de equivalência. Aumentando a velocidade de entrada obtém-se chamas estáveis e, para as velocidades mais altas, são verificadas chamas instáveis com FREI. Para as chamas estáveis foi verificado que, ao longo do eixo central do microcanal, a temperatura aumenta através de um perfil logarítmico, verificando-se a temperatura máxima na secção de saída. Ao analisar a evolução da temperatura adiabática de chama, no caso de $\phi=0,7$, a temperatura adiabática aumenta com o aumento da velocidade de entrada, no entanto, para o caso de ϕ maior do que 1, a temperatura adiabática diminui com o aumento dessa mesma velocidade. Para além disso, a temperatura adiabática máxima foi obtida para as misturas com $\phi=1,1$. Em termos da amplitude dos sinais de calor libertado das chamas dinâmicas com FREI foi concluído que, ao comparar os casos adiabáticos com os casos com perfil linear de temperatura na parede, a amplitude é inferior em regime adiabático em quase todas as simulações. Além disso, através deste trabalho foi provado que a duração da faísca está directamente ligada com o comportamento da chama após a faísca se extinguir. Em termos de capacidade de propulsão, ou seja, impulso específico, conclui-se, tal como no capítulo anterior, que o FREI origina picos de impulso bastante elevados e, neste caso, a variação da velocidade de entrada e da razão de equivalência têm uma influência semelhante nos valores do impulso específico, apresentando um crescimento similar a um perfil logarítmico.

8.2 Trabalho futuros

Na presente dissertação foram estudados diferentes casos que, apesar da sua análise ser extremamente importante para o desenvolvimento de sistemas de microcombustão com possível aplicação a sistemas de micropropulsão, são considerados meramente teóricos e de difícil aplicação na realidade. Além disso, existe uma enorme panóplia de possíveis misturas a utilizar nestes dispositivos, todas elas com diferentes características químicas e físicas.

Em primeiro lugar, seria bastante interessante repetir toda a análise realizada neste documento, mas agora utilizando um queimador com espessura de parede finita, com um determinado material na parede. Desta forma seria possível estudar o efeito da propagação de calor através das paredes do queimador, o seu efeito na dinâmica da micro chama e analisar os possíveis materiais a serem utilizados, bem como os seus coeficientes de condução térmica. De facto, neste trabalho só foram analisados os casos em que a transferência de calor é feita no sentido da parede para o interior do microcanal e o caso em que o queimador está em regime adiabático. Posto isto, esta proposta para uma possível investigação futura seria possível através da utilização da ferramenta *solver chtlaminarSMOKE*. Esta ferramenta permite a simulação da propagação de calor dentro de um domínio sólido com dimensões finitas.

Em segundo lugar, visto que o principal parâmetro a controlar nos dispositivos de microcombustão é a perda de calor para o exterior, seria lógico analisar outras soluções construtivas para diminuir ao máximo este fluxo de energia indesejável. A construção de vários microcanais ondulados em paralelo seria uma opção viável, uma vez que, o calor perdido por um determinado microcanal iria ser aproveitado pelos microcanais adjacentes. Esta solução construtiva poderia ser uma solução extremamente eficaz na diminuição das perdas de calor na direcção radial dos diversos queimadores. Esta estratégia passa pelo aquecimento do meio circundante a um determinado queimador através da colocação de outros queimadores em seu

redor, com o objetivo de impedir a extinção da chama e maximizar a temperatura dentro do microcanal.

Outra possível solução construtiva seria a inversão do fluxo de gases à saída do queimador, de modo a conduzi-los através de uma secção em redor do micro queimador. Assim, o meio exterior ao queimador passava a ser constituído pelos gases de exaustão, estando estes a temperaturas bastante elevadas e, deste modo, as perdas de calor para o exterior eram minimizadas.

Referências

1. Chou, S.K., Yang, W.M., Chua, K.J., Li, J. and Zhang, K.L., *Development of micro power generators – A review*. Applied Energy, 2011. **88**(1): p. 1-16.
2. Ju, Y. and K. Maruta, *Microscale combustion: Technology development and fundamental research*. Progress in Energy and Combustion Science, 2011. **37**(6): p. 669-715.
3. Walther, D.C. and J. Ahn, *Advances and challenges in the development of power-generation systems at small scales*. Progress in Energy and Combustion Science, 2011. **37**(5): p. 583-610.
4. Mueller, J., Chakraborty, I., Vargo, S., Bame, D., Marrese, C. and Tang, W., *MEMS micropropulsion activities at JPL*. 1999.
5. Chen, C.-P., Chao, Y.-C., Wu, C.-Y., Lee, J.-C. and Chen, G.-B., *Development of a catalytic hydrogen micro-propulsion system*. Combustion science and technology, 2006. **178**(10-11): p. 2039-2060.
6. Norman, C. and G. Tevfik, *A review of micro propulsion technology*. AIAA Paper, 2003. **670**: p. 6-9.
7. Cooley, B.A., *Exploring the limits of microscale combustion*. 1999: University of California, Berkeley.
8. Ronney, P.D., *Analysis of non-adiabatic heat-recirculating combustors*. Combustion and Flame, 2003. **135**(4): p. 421-439.
9. Sitzki, L., Borer, K., Wussow, S., Maruta, E. and Ronney, P., *Combustion in microscale heat-recirculating burners*. in *39th Aerospace sciences meeting and exhibit*. 2001.
10. Vesper, G., *Experimental and theoretical investigation of H₂ oxidation in a high-temperature catalytic microreactor*. Chemical Engineering Science, 2001. **56**(4): p. 1265-1273.
11. Vican, J., Gajdeczko, B., Dryer, F., Milius, D., Aksay, I.A. and Yetter, R., *Development of a microreactor as a thermal source for microelectromechanical systems power generation*. Proceedings of the Combustion Institute, 2002. **29**(1): p. 909-916.
12. Chao, Y.-C., G.-B. Chen, and H.-W. Hsu, *Catalytic ignition of multi-fuels on platinum: effect of strain rate*. Catalysis today, 2003. **83**(1-4): p. 97-113.
13. Norton, D., E. Wetzel, and D. Vlachos, *Fabrication of single-channel catalytic microburners: effect of confinement on the oxidation of hydrogen/air mixtures*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2004. **43**(16): p. 4833-4840.
14. Cova, A.M.P., *Numerical studies on micro-combustion*. Dissertation, 2016.
15. Ayoobi, M., *Chemical Structure and Dynamics in Laminar Flame Propagation*. Dissertation, 2015.
16. Cova, A., Resende, P., Cuoci, A., Ayoobi, M., Afonso, A. and Pinho, C.,  *CrossMark ScienceDirect P d. Energy Procedia*, 2017. **120**: p. 673-680.
17. Pinho, C., *Sistemas Térmicos*. 2016, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto.
18. Khanna, V.K., *A study of the dynamics of laminar and turbulent fully and partially premixed flames*. 2001, Virginia Tech.

19. Günther, R., *Flames – Their Structure, Radiation and Temperature*. Von A. G. Gaydon und H. G. Wolfhard. Chapman and Hall Ltd., London 1979 4. Aufl., XIII, 449 S., zahlr. Abb. u. Tab., Ln., £ 18.00. Chemie Ingenieur Technik, 1979. **51**(7): p. 765-765.
20. Law, C.K., *Combustion physics*. 2010: Cambridge university press.
21. Griffiths, J. and J. Barnard. *Flame and combustion*. in *Fuel and Energy Abstracts*. 1996.
22. Karpetis, A.N. and S.S. Girimaji, *Kenneth Kuan-Yun Kuo (2005) Principles of combustion*. 2007, Springer Science & Business Media.
23. Maruta, K., Kataoka, T., Kim, N.I., Minaev, S. and Fursenko, R., *Characteristics of combustion in a narrow channel with a temperature gradient*. Proceedings of the Combustion Institute, 2005. **30**: p. 2429-2436.
24. Di Stazio, A., *Experimental characterization of the combustion dynamics at micro-scale*. 2016, Orléans.
25. Alipoor, A. and K. Mazaheri, *Maps of flame dynamics for premixed lean hydrogen-air combustion in a heated microchannel*. Energy, 2020. **194**: p. 116852.
26. Alipoor, A. and K. Mazaheri, *Studying the repetitive extinction-ignition dynamics for lean premixed hydrogen-air combustion in a heated microchannel*. Energy, 2014. **73**: p. 367-379.
27. Alipoor, A. and K. Mazaheri, *Combustion characteristics and flame bifurcation in repetitive extinction-ignition dynamics for premixed hydrogen-air combustion in a heated micro channel*. Energy, 2016. **109**: p. 650-663.
28. Pizza, G., Frouzakis, C.E., Mantzaras, J., Tomboulides, A.G. and Boulouchos, K., *Dynamics of premixed hydrogen/air flames in microchannels*. Combustion and Flame, 2008. **152**(3): p. 433-450.
29. Biswas, S., *Flame Propagation in Microchannels*, in *Physics of Turbulent Jet Ignition: Mechanisms and Dynamics of Ultra-lean Combustion*, S. Biswas, Editor. 2018, Springer International Publishing: Cham. p. 181-195.
30. Benson, T. *Propulsion Index*. Available from: <https://www.grc.nasa.gov/www/k-12/VirtualAero/BottleRocket/airplane/shortp.html>.
31. Aichlmayr, H., D. Kittelson, and M. Zachariah, *Micro-HCCI combustion: experimental characterization and development of a detailed chemical kinetic model with coupled piston motion*. Combustion and flame, 2003. **135**(3): p. 227-248.
32. Wu, M.-h., Wang, Y., Yang, V. and Yetter R.A., *Combustion in meso-scale vortex chambers*. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31**(2): p. 3235-3242.
33. Yuasa, S., Oshimi, K., Nose, H. and Tennichi, Y., *Concept and combustion characteristics of ultra-micro combustors with premixed flame*. Proceedings of the Combustion Institute, 2005. **30**(2): p. 2455-2462.
34. Li, J., Chou, S.K., Li, Z.W. and Yang, W.M., *A comparative study of H₂-air premixed flame in micro combustors with different physical and boundary conditions*. Combustion Theory and Modelling, 2008. **12**(2): p. 325-347.
35. Li, J., Chou, K., Yang, W.M. and Li, Z.W., *A numerical study on premixed micro-combustion of CH₄-air mixture: Effects of combustor size, geometry and boundary conditions on flame temperature*. Chemical Engineering Journal, 2009. **150**(1): p. 213-222.

36. Kim, N.I., Kato, S., Kataoka, T., Yokomori, T., Maruyama, S., Fujimori, T. and Maruta, K., *Flame stabilization and emission of small Swiss-roll combustors as heaters*. Combustion and Flame, 2005. **141**(3): p. 229-240.
37. Kuo, C.H. and P.D. Ronney, *Numerical modeling of non-adiabatic heat-recirculating combustors*. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31**(2): p. 3277-3284.
38. Kunte, A., A.K. Raghu, and N.S. Kaisare, *A spiral microreactor for improved stability and performance for catalytic combustion of propane*. Chemical Engineering Science, 2018. **187**: p. 87-97.
39. Yedala, N., A.K. Raghu, and N.S. Kaisare, *A 3D CFD study of homogeneous-catalytic combustion of hydrogen in a spiral microreactor*. Combustion and Flame, 2019. **206**: p. 441-450.
40. Pizza, G., Mantzaras, J., Frouzakis, C.E., Tomboulides, A.G., Boulouchos, K., *Suppression of combustion instabilities of premixed hydrogen/air flames in microchannels using heterogeneous reactions*. Proceedings of the Combustion Institute, 2009. **32**(2): p. 3051-3058.
41. Pizza, G., J. Mantzaras, and C.E. Frouzakis, *Flame dynamics in catalytic and non-catalytic mesoscale microreactors*. Catalysis Today, 2010. **155**(1-2): p. 123-130.
42. Zhou, J., Wang, Y., Yang, W., Liu, J., Wang, Z. and Cen, K., *Combustion of hydrogen-air in catalytic micro-combustors made of different material*. International Journal of hydrogen energy, 2009. **34**(8): p. 3535-3545.
43. Yang, W.M., Chou, S., Shu, C., Li, Z. and Xue, H., *Combustion in micro-cylindrical combustors with and without a backward facing step*. Applied Thermal Engineering, 2002. **22**(16): p. 1777-1787.
44. Li, J., Chou, K., Huang, G., Yang, W.M. and Li, Z.W., *Study on premixed combustion in cylindrical micro combustors: Transient flame behavior and wall heat flux*. Experimental Thermal and Fluid Science, 2009. **33**(4): p. 764-773.
45. Khandelwal, B., A.A. Deshpande, and S. Kumar, *Experimental studies on flame stabilization in a three step rearward facing configuration based micro channel combustor*. Applied Thermal Engineering, 2013. **58**(1): p. 363-368.
46. Faramarzpour, H., K. Mazaheri, and A. Alipoor, *Effect of backward facing step on radiation efficiency in a micro combustor*. International Journal of Thermal Sciences, 2018. **132**: p. 129-136.
47. Fan, A., Wan, J., Liu, Y., Pi, B., Yao, H. and Liu, W., *Effect of bluff body shape on the blow-off limit of hydrogen/air flame in a planar micro-combustor*. Applied Thermal Engineering, 2014. **62**(1): p. 13-19.
48. Yang, W., Deng, C., Zhou, J., Liu, J., Wang, Y. and Cen, K., *Experimental and numerical investigations of hydrogen-air premixed combustion in a converging-diverging micro tube*. International Journal of Hydrogen Energy, 2014. **39**(7): p. 3469-3476.
49. Biswas, S., Zhang, P., Wang, H. and Qiao, L., *Propagation and extinction behavior of methane/air premixed flames through straight and converging-diverging microchannels*. Applied Thermal Engineering, 2019. **148**: p. 1395-1406.
50. Abbaspour, P. and A. Alipoor, *Numerical study of combustion characteristics and oscillating behaviors of hydrogen-air combustion in converging-diverging microtubes*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020. **159**: p. 120127.

51. Wan, J., Yang, W., Fan, A., Liu, Y., Yao, H., Liu, W., Du, Y. and Zhao, D., *A numerical investigation on combustion characteristics of H₂/air mixture in a micro-combustor with wall cavities*. International Journal of Hydrogen Energy, 2014. **39**(15): p. 8138-8146.
52. Yang, W., Xiang, Y., Fan, A. and Yao, H., *Effect of the cavity depth on the combustion efficiency of lean H₂/air flames in a micro combustor with dual cavities*. International Journal of Hydrogen Energy, 2017. **42**(20): p. 14312-14320.
53. Pizza, G., Frouzakis, C.E., Mantzaras, J., Tomboulides, A.G. and Boulouchos, K., *Dynamics of premixed hydrogen/air flames in mesoscale channels*. Combustion and Flame, 2008. **155**(1): p. 2-20.
54. Pizza, G., Frouzakis, C.E., Mantzaras, J., Tomboulides, A.G. and Boulouchos, K., *Three-dimensional simulations of premixed hydrogen/air flames in microtubes*. Journal of Fluid Mechanics, 2010. **658**: p. 463-491.
55. Mansouri, Z., *Combustion in wavy micro-channels for thermo-photovoltaic applications—Part I: Effects of wavy wall geometry, wall temperature profile and reaction mechanism*. Energy Conversion and Management, 2019. **198**: p. 111155.
56. Boyarko, G.A., C.-J. Sung, and S.J. Schneider, *Catalyzed combustion of hydrogen–oxygen in platinum tubes for micro-propulsion applications*. Proceedings of the Combustion Institute, 2005. **30**(2): p. 2481-2488.
57. Jejurkar, S.Y. and D.P. Mishra, *A review of recent patents on micro-combustion and applications*. Recent Patents on Engineering, 2009. **3**(3): p. 194-209.
58. Masel, R. and M. Shannon, *Microcombustor Having Submillimeter Critical Dimensions*. The Board of Trustees of the University of Illinois; 2001. Urbana, 2001.
59. Jejurkar, S.Y. and D.P. Mishra, *Numerical characterization of a premixed flame based annular microcombustor*. International Journal of Hydrogen Energy, 2010. **35**(18): p. 9755-9766.
60. Epstein, A., Senturia, S., Al-Midani, O., Anathasuresh, G. and Ayon, A.A., *Micro-heat engines, gas turbines, and rocket engines-The MIT microengine project*. in *28th Fluid dynamics conference*. 1997.
61. Mehra, A., Zhang, X., Ayton, A.A., Waitz, I.A., Schmidt, M.A. and Spadaccini, C.M., *A six-wafer combustion system for a silicon micro gas turbine engine*. Journal of Microelectromechanical systems, 2000. **9**(4): p. 517-527.
62. Mehra, A. and I. Waitz. *Development of a hydrogen combustor for a microfabricated gas turbine engine*. in *Solid-State Sensor and Actuator Workshop, Hilton Head Island, SC*. 1998.
63. Tanaka, S., Hikichi, K., Togo, S., Murayama, M., Hirose, Y., Sakurai, T., Yuasa, S., Teramoto, S., Niino, T., Mori, T., Esashi, M. and Isomura, K., *World's smallest gas turbine establishing Brayton cycle*. in *Proc. of the 7th International Workshop on Micro and Nanotechnology for Power Generation and Energy Conversion Applications (PowerMEMS 2007), Freiburg, Germany*. 2007.
64. Maruta, K., *Micro and mesoscale combustion*. Proceedings of the Combustion Institute, 2011. **33**(1): p. 125-150.
65. Fu, K., Knobloch, A.J., Martinez, F.C., Walther, D.C., Fernandez-Pello, C., Pisano, A.P. and Liepmann, D., *Design and fabrication of a silicon-based MEMS rotary engine*. in *Proc. ASME Int'l Mech. Eng. Congress and Expo*. 2001. Citeseer.

66. Fu, K., Knobloch, A., Martinez, F.C., Walther, D.C., Fernandez-Pello, A.C., Pisano, A.P., Liepmann, D., Miyasaka, K. and Maruta, K., *Design and experimental results of small-scale rotary engines*. in *Proceedings of ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition*. 2001.
67. Fu, K., Walther, D.C., Fernandez-Pello, A.C., Liepmann, D. and Miyasaka, K., *Preliminary investigation of a small-scale rotary internal combustion engine*. in *Western States Section/Combustion Institute; fall meeting*. 1999.
68. Hege, J.B., *The Wankel rotary engine: A history*. 2006: McFarland.
69. Aichlmayr, H., D. Kittelson, and M. Zachariah, *Miniature free-piston homogeneous charge compression ignition engine-compressor concept—Part I: performance estimation and design considerations unique to small dimensions*. Chemical Engineering Science, 2002. **57**(19): p. 4161-4171.
70. Lloyd, S. and F. Weinberg, *A burner for mixtures of very low heat content*. Nature, 1974. **251**(5470): p. 47-49.
71. Weinberg, F., *Combustion temperatures: the future?* Nature, 1971. **233**(5317): p. 239-241.
72. Weinberg, F., Rowe, D., Min, G. and Ronney, P.D., *On thermoelectric power conversion from heat recirculating combustion systems*. Proceedings of the Combustion Institute, 2002. **29**(1): p. 941-947.
73. Cohen, A.L., Ronney, P.D., Frodis, U., Sitzki, L., Meiburg, E.H. and Wussow, S., *Microcombustor and combustion-based thermoelectric microgenerator*. 2005, Google Patents.
74. Wu, M.-H., R. Yetter, and V. Yang. *Development and characterization of ceramic micro chemical propulsion and combustion systems*. in *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. 2008.
75. Miesse, C.M., Masel, R.I., Jensen, C.D., Shannon, M.A. and Short, M., *Submillimeter-scale combustion*. AIChE journal, 2004. **50**(12): p. 3206-3214.
76. Lewis Jr, D.H., Janson, S.W., Cohen, R.B. and Antonsson, E.K., *Digital micropropulsion*. Sensors and Actuators A: Physical, 2000. **80**(2): p. 143-154.
77. Youngner, D., Lu, S.T., Choueiri, E., Neidert, J.B., Black, R.E., Graham, K.J., Fahey, D., Lucus, R. and Zhu, X., *MEMS mega-pixel micro-thruster arrays for small satellite stationkeeping*. 2000.
78. London, A., Ayón, A.A., Epstein, A.H., Spearing, S.M., Harrison, T., Peles, Y. and Kerrebrock, J.L., *Microfabrication of a high pressure bipropellant rocket engine*. Sensors and Actuators A: Physical, 2001. **92**(1-3): p. 351-357.
79. Cuoci, A., Frassoldati, A., Faravelli, T. and Ranzi, E., *Numerical Modeling of Laminar Flames with Detailed Kinetics Based on the Operator-Splitting Method*. Energy & Fuels, 2013. **27**(12): p. 7730-7753.
80. Cuoci, A., Frassoldati, A., Faravelli, T. and Ranzi, E., *A computational tool for the detailed kinetic modeling of laminar flames: Application to C₂H₄/CH₄ coflow flames*. Combustion and Flame, 2013. **160**(5): p. 870-886.
81. Coffee, T.P. and J.M. Heimerl, *Transport algorithms for premixed, laminar steady-state flames*. Combustion and Flame, 1981. **43**: p. 273-289.

82. Hall, R.J., *The radiative source term for plane-parallel layers of reacting combustion gases*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 1993. **49**(5): p. 517-523.
83. Ranzi, E., Frassoldati, A., Grama, R., Cuoci, A., Faravelli, T., Kelley, A.P. and Law, C.K., *Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels*. Progress in Energy and Combustion Science, 2012. **38**(4): p. 468-501.
84. Ranzi, E., Frassoldati, A., Granata, S. and Faravelli, T., *Wide-Range Kinetic Modeling Study of the Pyrolysis, Partial Oxidation, and Combustion of Heavy n-Alkanes*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2005. **44**(14): p. 5170-5183.
85. OpenFOAM. *OpenFOAM^R - The Open Source Computacional Fluid Dynamics (CFD) Toolbox*. [cited 2021 Abril]; Available from: <https://www.openfoam.com/documentation/user-guide>.
86. OpenFOAM. *swak4foam user guide*. Available from: <https://openfoamwiki.net/index.php/Contrib/swak4Foam>.
87. Resende, P., Afonso, A., Pinho, C. and Ayoobi, M., *Impacts of Dilution on Hydrogen Combustion Characteristics and NO_x Emissions*. Journal of Heat Transfer, 2019. **141**(1).

ANEXO A: Cinética da reação

POLIMI-H₂CO-NOX-1412

Elementos:

He (Hélio)

Ar (Árgon)

N (Nitrogénio)

O (Oxigénio)

H (Hidrogénio)

C (Carbono)

Espécies

He

NO

NO₂

HONO

H₂

H₂O₂

CO

O

NH

HO₂

N₂H₃

Ar

N₂O

HNO

HNO₂

N₂H₂

NH₃

CO₂

NO₃

NNH

NH₂

HCO

N₂

O₂

HNNO

HONO₂

H₂O

N₂H₄

N

H

OH

H₂NO

Reações Químicas

Unidades: [kmol, m³, s], [-], [cal/mol]

Coeficientes da equação de Arrhenius:

Fator pré-exponencial (A) / expoente de temperatura (T) / energia de ativação (E_a)

1.	O ₂ +H=O+OH	9.6000e+14	-0.200	16625.00
2.	H ₂ +O=H+OH	4.3300e+13	0.000	10000.00
3.	O ₂ +H(+M)=HO ₂ (+M)	5.5800e+12	0.400	0.00
	LOW	8.40e+17	-0.800	0.0
	TROE	0.5000	1.000e-30	1.000e+30
	H ₂ O	18.00		
	H ₂	2.50		
	N ₂	1.26		
	AR	0.80		
	HE	0.80		
	CO	1.20		
	CO ₂	2.40		
4.	OH+HO ₂ =O ₂ +H ₂ O	5.0000e+13	0.000	1000.00
5.	H+HO ₂ =2OH	2.5000e+14	0.000	1900.00
6.	O+HO ₂ =O ₂ +OH	3.2500e+13	0.000	0.00
7.	2OH=H ₂ O+O	3.5700e+04	2.400	-2110.00
8.	H ₂ +M=2H+M	1.1150e+14	0.000	96081.00
	H ₂	2.50		
	H ₂ O	12.00		
	AR	0.50		
	CO	1.90		
	CO ₂	3.80		
9.	O ₂ +M=2O+M	1.5500e+14	0.000	115120.00
	H ₂	2.50		
	H ₂ O	12.00		
	AR	0.20		
	HE	0.20		
	CO	1.90		
	CO ₂	3.80		
10.	H+OH+M=H ₂ O+M	4.5000e+22	-2.000	0.00
	H ₂ O	16.00		
	H ₂	2.00		
	CO ₂	1.90		
11.	H+HO ₂ =O ₂ +H ₂	2.5000e+13	0.000	700.00
12.	2HO ₂ =O ₂ +H ₂ O ₂	2.1100e+12	0.000	0.00
13.	2OH(+M)=H ₂ O ₂ (+M)	7.4000e+13	-0.370	0.00
	LOW	1.30e+18	-0.900	-1700.0
	TROE	0.7346	94.00	1756 5182
	H ₂	2.00		
	H ₂ O	6.00		
	CO	1.50		
	CO ₂	2.00		
	AR	0.70		
	HE	0.70		
	N ₂	0.90		
14.	O+OH+M=HO ₂ +M	1.0000e+16	0.000	0.00
15.	O ₂ +CO=CO ₂ +O	2.5300e+12	0.000	47700.00
16.	O ₂ +HCO=CO+HO ₂	3.0000e+12	0.000	0.00
17.	CO+O(+M)=CO ₂ (+M)	9.6400e+10	0.000	3800.00
	LOW	2.07e+26	-3.340	7610.0
	H ₂ O	12.00		
	H ₂	2.00		
	CO	1.50		
	CO ₂	2.00		
	AR	0.50		
18.	CO+OH=CO ₂ +H	9.6000e+11	0.140	7352.00
19.	CO+OH=CO ₂ +H	7.3200e+10	0.030	-16.00
20.	CO+HO ₂ =CO ₂ +OH	3.0000e+13	0.000	23000.00
21.	H ₂ O+CO=H ₂ +CO ₂	2.0000e+11	0.000	38000.00
22.	HCO+M=CO+H+M	1.2000e+17	-1.000	17000.00
	H ₂ O	5.00		
	CO ₂	3.00		
	H ₂	1.90		
	CO	1.90		
23.	O+HCO=CO ₂ +H	3.0000e+13	0.000	0.00
24.	H+HCO=H ₂ +CO	5.0000e+13	0.000	0.00
25.	OH+HCO=H ₂ O+CO	5.0000e+13	0.000	0.00
26.	HO ₂ +HCO=H ₂ O ₂ +CO	4.0000e+11	0.000	0.00
27.	HO ₂ +HCO=>CO ₂ +H+OH	3.0000e+13	0.000	0.00
28.	H ₂ O+H=H ₂ +OH	4.8000e+10	1.000	19000.00
29.	H ₂ O ₂ +H=H ₂ O+OH	2.4100e+13	0.000	3970.00
30.	H ₂ O ₂ +H=H ₂ +HO ₂	6.0250e+13	0.000	7950.00

31.	NH ₃ +M=H+NH ₂ +M	2.2000e+16	0.000	93470.00	57.	N+NH=N ₂ +H	3.0000e+13	0.000	0.00
32.	H+NH ₂ =H ₂ +NH	4.0000e+13	0.000	3650.00	58.	NO+NH=N ₂ +OH	2.2000e+13	-0.230	0.00
33.	O+NH ₂ =HNO+H	6.6000e+14	-0.500	0.00	59.	NO ₂ +NH=N ₂ O+OH	1.0000e+13	0.000	0.00
34.	O+NH ₂ =NH+OH	6.8000e+12	0.000	0.00	60.	N+OH=NO+H	3.8000e+13	0.000	0.00
35.	O+NH ₂ =NO+H ₂	1.3000e+08	1.025	-627.00	61.	O ₂ +N=NO+O	6.4000e+09	1.000	6280.00
36.	O ₂ +NH ₂ =HNO+OH	4.5000e+12	0.000	25000.00	62.	NO+N=N ₂ +O	3.3000e+12	0.300	0.00
37.	OH+NH ₂ =H ₂ O+NH	4.0000e+06	2.000	1000.00	63.	N ₂ H ₄ +H=H ₂ +N ₂ H ₃	1.3000e+13	0.000	2500.00
38.	HO ₂ +NH ₂ =OH+H ₂ NO	5.0000e+13	0.000	0.00	64.	N ₂ H ₄ +O=N ₂ H ₂ +H ₂ O	8.5000e+13	0.000	1200.00
39.	O+H ₂ NO=O ₂ +NH ₂	2.0000e+14	0.000	0.00	65.	N ₂ H ₄ +OH=H ₂ O+N ₂ H ₃	4.0000e+13	0.000	0.00
40.	N+NH ₂ =N ₂ +2H	7.0000e+13	0.000	0.00	66.	N ₂ H ₄ +NH ₂ =NH ₃ +N ₂ H ₃	3.9000e+12	0.000	1500.00
41.	NH+NH ₂ =N ₂ H ₂ +H	5.0000e+13	0.000	0.00	67.	N ₂ H ₃ +M=N ₂ H ₂ +H+M	3.5000e+16	0.000	46000.00
42.	2NH ₂ =H ₂ +N ₂ H ₂	8.5000e+11	0.000	0.00	68.	H+N ₂ H ₃ =2NH ₂	1.6000e+12	0.000	0.00
43.	2NH ₂ =NH ₃ +NH	5.0000e+13	0.000	10000.00	69.	O+N ₂ H ₃ =N ₂ H ₂ +OH	5.0000e+12	0.000	5000.00
44.	2NH ₂ (+M)=N ₂ H ₄ (+M)	1.5000e+13	0.000	0.00	70.	O+N ₂ H ₃ =HNO+NH ₂	1.0000e+13	0.000	0.00
	LOW	1.00e+18	0.000	0.0/	71.	OH+N ₂ H ₃ =N ₂ H ₂ +H ₂ O	1.0000e+13	0.000	1000.00
	N ₂	2.50			72.	OH+N ₂ H ₃ =HNO+NH ₃	1.0000e+12	0.000	15000.00
	H ₂ O	5.00			73.	NH+N ₂ H ₃ =N ₂ H ₂ +NH ₂	2.0000e+13	0.000	0.00
	NH ₃	10.00			74.	N ₂ H ₂ +M=H+NNH+M	5.0000e+16	0.000	50000.00
45.	NO+NH ₂ =NNH+OH	8.9000e+12	-0.350	0.00		N ₂	2.00		
46.	NO+NH ₂ =N ₂ +H ₂ O	1.7200e+19	-2.294	1058.00		H ₂	2.00		
47.	NO ₂ +NH ₂ =N ₂ O+H ₂ O	3.2000e+18	-2.200	0.00		O ₂	2.00		
48.	NO ₂ +NH ₂ =NO+H ₂ NO	3.5000e+12	0.000	0.00		H ₂ O	15.00		
49.	H+NH=H ₂ +N	3.0000e+13	0.000	0.00	75.	N ₂ H ₂ +H=H ₂ +NNH	5.0000e+13	0.000	1000.00
50.	O+NH=NO+H	9.2000e+13	0.000	0.00	76.	N ₂ H ₂ +O=NO+NH ₂	1.0000e+13	0.000	1000.00
51.	NH+OH=HNO+H	2.0000e+13	0.000	0.00	77.	N ₂ H ₂ +O=NNH+OH	2.0000e+13	0.000	1000.00
52.	NH+OH=H ₂ O+N	5.0000e+11	0.500	2000.00	78.	N ₂ H ₂ +OH=H ₂ O+NNH	1.0000e+13	0.000	1000.00
53.	NH+OH=NO+H ₂	2.0000e+13	0.000	0.00	79.	NO+N ₂ H ₂ =N ₂ O+NH ₂	4.0000e+12	0.000	11922.00
54.	O ₂ +NH=HNO+O	4.6000e+05	2.000	6500.00	80.	N ₂ H ₂ +NH=NNH+NH ₂	1.0000e+13	0.000	1000.00
55.	O ₂ +NH=NO+OH	1.3000e+06	1.500	100.00	81.	N ₂ H ₂ +NH ₂ =NH ₃ +NNH	1.0000e+13	0.000	1000.00
56.	2NH=N ₂ +2H	2.5000e+13	0.000	0.00	82.	NNH=N ₂ +H	1.0000e+07	0.000	0.00

83.	H+NNH=N ₂ +H ₂				N ₂	1.00		
	1.0000e+14	0.000	0.00		H ₂ O	4.10		
84.	O+NNH=N ₂ O+H				H ₂	1.25		
	1.0000e+14	0.000	0.00	109.	HNO+H=NO+H ₂			
85.	O+NNH=NO+NH				4.4000e+11	0.720	650.00	
	5.0000e+13	0.000	0.00	110.	HNO+O=NO+OH			
86.	NNH+OH=N ₂ +H ₂ O				1.0000e+13	0.000	0.00	
	5.0000e+13	0.000	0.00	111.	HNO+OH=NO+H ₂ O			
87.	O ₂ +NNH=N ₂ +HO ₂				3.6000e+13	0.000	0.00	
	6.6700e+13	0.000	0.00	112.	O ₂ +HNO=NO+HO ₂			
88.	O ₂ +NNH=N ₂ +O ₂ +H				1.0000e+13	0.000	25000.00	
	5.0000e+13	0.000	0.00	113.	HNO+NH ₂ =NO+NH ₃			
89.	NH+NNH=N ₂ +NH ₂				2.0000e+13	0.000	1000.00	
	5.0000e+13	0.000	0.00	114.	NO+HNO=N ₂ O+OH			
90.	NNH+NH ₂ =N ₂ +NH ₃				2.0000e+12	0.000	26000.00	
	5.0000e+13	0.000	0.00	115.	NO ₂ +HNO=NO+HONO			
91.	NO+NNH=N ₂ +HNO				6.0000e+11	0.000	2000.00	
	5.0000e+13	0.000	0.00	116.	2HNO=N ₂ O+H ₂ O			
92.	HNNO+M=N ₂ O+H+M				9.0000e+08	0.000	3100.00	
	2.2000e+15	0.000	21600.00	117.	NO ₂ +H ₂ =HONO+H			
93.	HNNO+M=N ₂ +OH+M				3.0000e+13	0.000	29000.00	
	1.0000e+15	0.000	25600.00	118.	HONO+O=NO ₂ +OH			
94.	HNNO+H=N ₂ O+H ₂				1.2000e+13	0.000	6000.00	
	2.0000e+13	0.000	0.00	119.	HONO+OH=NO ₂ +H ₂ O			
95.	HNNO+H=NNH+OH				4.0000e+12	0.000	0.00	
	1.0000e+13	0.000	0.00	120.	HONO+NH=NO ₂ +NH ₂			
96.	HNNO+O=N ₂ O+OH				1.0000e+13	0.000	0.00	
	2.0000e+13	0.000	0.00	121.	HONO+NH ₂ =NO ₂ +NH ₃			
97.	HNNO+O=O ₂ +NNH				5.0000e+12	0.000	0.00	
	1.0000e+13	0.000	0.00	122.	2HONO=NO+NO ₂ +H ₂ O			
98.	HNNO+OH=N ₂ O+H ₂ O				1.0200e+13	0.000	8540.00	
	2.0000e+13	0.000	0.00	123.	H ₂ NO+M=HNO+H+M			
99.	HNNO+OH=NNH+HO ₂				1.0000e+16	0.000	50000.00	
	1.0000e+13	0.000	0.00	124.	H+H ₂ NO=HNO+H ₂			
100.	NO+HNNO=N ₂ O+HNO				3.0000e+07	2.000	2000.00	
	1.0000e+12	0.000	0.00	125.	H+H ₂ NO=OH+NH ₂			
101.	NO+HNNO=NO ₂ +NNH				5.0000e+13	0.000	0.00	
	3.2000e+12	0.000	270.00	126.	O+H ₂ NO=HNO+OH			
102.	NO ₂ +HNNO=NO ₃ +NNH				3.0000e+07	2.000	2000.00	
	1.0000e+13	0.000	0.00	127.	OH+H ₂ NO=HNO+H ₂ O			
103.	NO ₂ +HNNO=N ₂ O+HONO				2.0000e+07	2.000	1000.00	
	1.0000e+12	0.000	0.00	128.	NO+H ₂ NO=2HNO			
104.	NO+HO ₂ =NO ₂ +OH				2.0000e+04	2.000	13000.00	
	2.1000e+12	0.000	-480.00	129.	NH ₂ +H ₂ NO=HNO+NH ₃			
105.	NO+O+M=NO ₂ +M				3.0000e+12	0.000	1000.00	
	7.5000e+19	-1.410	0.00	130.	NO ₂ +H ₂ NO=HNO+HONO			
	N ₂	1.70			6.0000e+11	0.000	2000.00	
	O ₂	1.50		131.	NO ₃ +H=NO ₂ +OH			
	H ₂ O	10.00			6.0000e+13	0.000	0.00	
106.	NO+OH(+M)=HONO(+M)			132.	O+NO ₃ =O ₂ +NO ₂			
	2.0000e+13	0.000	0.00		1.0000e+13	0.000	0.00	
	LOW	2.33e+23	-2.400	133.	NO ₃ +OH=NO ₂ +HO ₂			
			0.0		1.4000e+13	0.000	0.00	
107.	NO+HCO=HNO+CO			134.	NO ₃ +HO ₂ =O ₂ +NO ₂ +OH			
	7.2000e+12	0.000	0.00		1.5000e+12	0.000	0.00	
108.	NO+H+M=HNO+M							
	4.0000e+20	-1.750	0.00					

135.	NO ₂ +NO ₃ =NO+O ₂ +NO ₂ 5.0000e+10 0.000 2940.00	160.	NO ₂ +OH(+M)=HONO ₂ (+M) 2.4000e+13 0.000 0.00
136.	NO ₃ =NO+O ₂ 2.5000e+06 0.000 12000.00		LOW 6.42e+32 -5.490 2351.0
137.	2NO ₃ =O ₂ +2NO ₂ 5.1000e+11 0.000 6750.00		TROE 0.5250 1.000e-15 1.000e-15
138.	NO ₂ +HCO=NO+CO ₂ +H 8.4000e+15 -0.750 1930.00		1.000e+15
139.	NO ₂ +H=NO+OH 1.3200e+14 0.000 360.00		H ₂ O 5.00
140.	NO ₂ +O=NO+O ₂ 3.9000e+12 0.000 -238.00	161.	HONO ₂ +OH=H ₂ O+NO ₃ 1.0300e+10 0.000 -1240.00
141.	NO ₂ +O+M=NO ₃ +M 2.9400e+21 -2.000 0.00	162.	H ₂ +NH ₂ =>NH ₃ +H 1.5760e+05 2.000 3954.86
142.	NO ₂ +HO ₂ =O ₂ +HONO 6.3100e+08 1.250 5000.00	163.	H ₂ O+HO ₂ =>H ₂ O ₂ +OH 5.3880e+05 2.000 28780.05
143.	2NO ₂ =2NO+O ₂ 1.6000e+12 0.000 26123.00	164.	H ₂ O+NH ₂ =>NH ₃ +OH 1.1260e+05 2.000 8169.13
144.	2NO ₂ =NO+NO ₃ 9.6000e+09 0.730 20923.00	165.	NO ₂ +H ₂ O ₂ =>HONO+HO ₂ 6.8310e+05 2.000 14711.89
145.	2NO ₂ =NO+NO ₃ 1.6000e+12 0.000 26123.00	166.	H ₂ O ₂ +OH=>H ₂ O+HO ₂ 3.1950e+05 2.000 -4169.95
146.	NO ₂ +CO=NO+CO ₂ 9.0400e+13 0.000 33800.00	167.	H ₂ O ₂ +O=>OH+HO ₂ 1.0830e+06 2.000 -1657.32
147.	NO ₂ +HCO=HONO+CO 1.2000e+23 -3.290 2355.00	168.	H ₂ O ₂ +NH ₂ =>NH ₃ +HO ₂ 9.0050e+03 2.000 -1507.20
148.	CO ₂ +N=NO+CO 1.9000e+11 0.000 3400.00	169.	O ₂ +NH ₃ =>HO ₂ +NH ₂ 5.1110e+07 2.000 60086.33
149.	N ₂ O+M=N ₂ +O+M 4.0000e+14 0.000 56100.00	170.	NH ₃ +H=>H ₂ +NH ₂ 7.2200e+07 2.000 15302.86
	N ₂ 1.70	171.	NH ₃ +OH=>H ₂ O+NH ₂ 1.1980e+07 2.000 4067.13
	O ₂ 1.40	172.	NH ₃ +O=>OH+NH ₂ 4.0600e+07 2.000 13586.66
	H ₂ O 12.00	173.	NH ₃ +HO ₂ =>H ₂ O ₂ +NH ₂ 1.6160e+06 2.000 27340.80
	CO 1.50		
	CO ₂ 3.00		
150.	N ₂ O+H=N ₂ +OH 3.3000e+10 0.000 4729.00		
151.	N ₂ O+H=N ₂ +OH 4.4000e+14 0.000 19254.00		
152.	NO+NH=N ₂ O+H 3.1900e+14 -0.455 0.00		
153.	N ₂ O+O=2NO 2.9000e+13 0.000 23150.00		
154.	N ₂ O+O=N ₂ +O ₂ 1.4000e+12 0.000 10800.00		
155.	N ₂ O+OH=N ₂ +HO ₂ 2.0000e+12 0.000 40000.00		
156.	HNO ₂ +H=NO ₂ +H ₂ 2.4000e+08 1.500 5087.00		
157.	HNO ₂ +O=NO ₂ +OH 1.7000e+08 1.500 3020.00		
158.	HNO ₂ +OH=NO ₂ +H ₂ O 1.2000e+06 2.000 -596.00		
159.	HNO ₂ =HONO 1.3000e+29 -5.470 52814.00		

ANEXO B: Gráficos relativos à análise temporal das simulações efetuadas

B.1 Com perfil linear de temperatura na parede do queimador

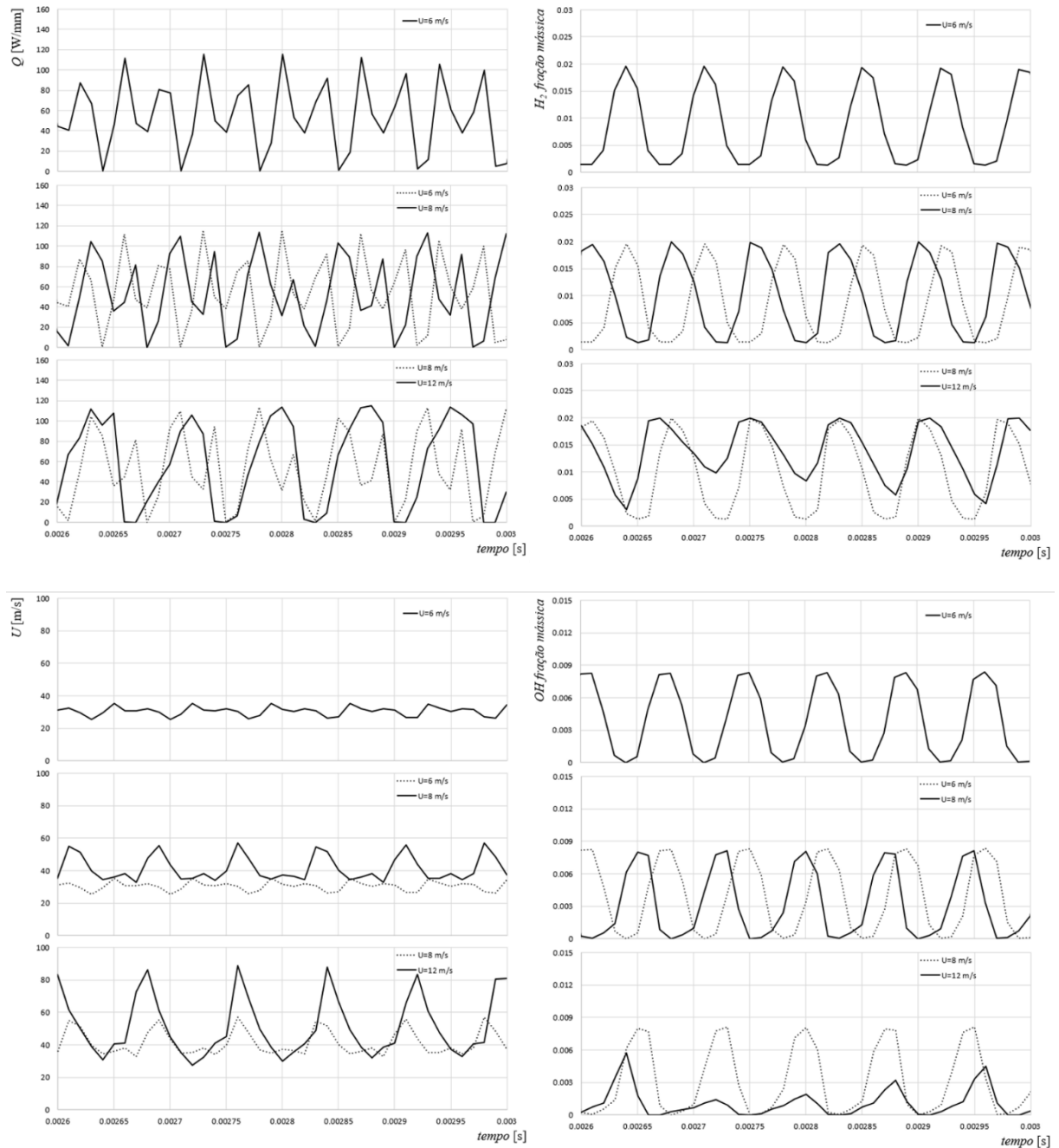


Figura B.1 – Evolução temporal de quatro parâmetros distintos (calor libertado, fração mássica de H_2 , velocidade e fração mássica de OH) num ponto localizado no eixo central do microcanal e a 4,5 mm da secção de entrada. Gráficos referentes às simulações LIN_04, LIN_05 e LIN_06.

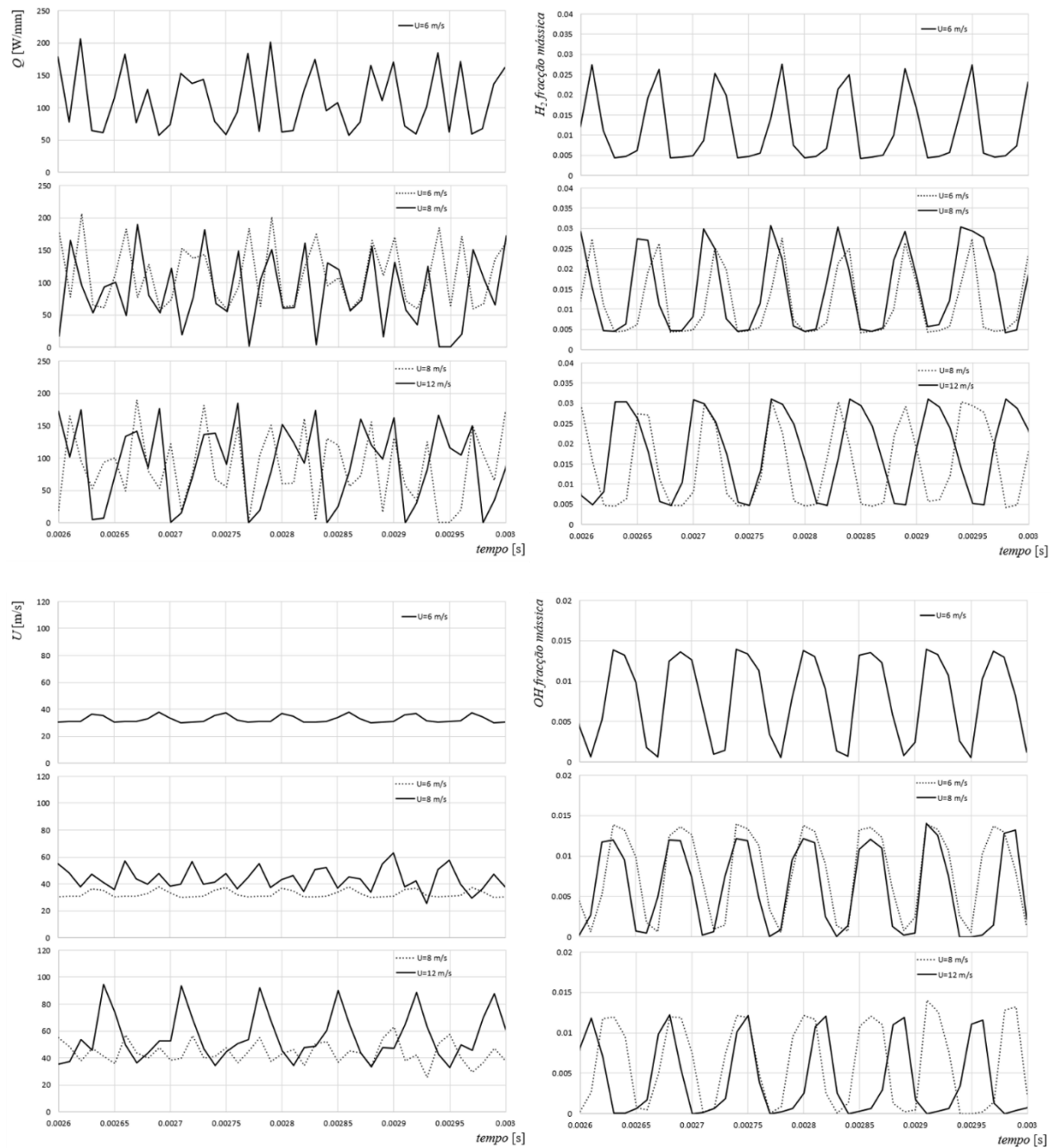


Figura B.2 - Evolução temporal de quatro parâmetros distintos (calor libertado, fração mássica de H_2 , velocidade e fração mássica de OH) num ponto localizado no eixo central do microcanal e a 4,5 mm da secção de entrada. Gráficos referentes às simulações LIN_09, LIN_10 e LIN_11.

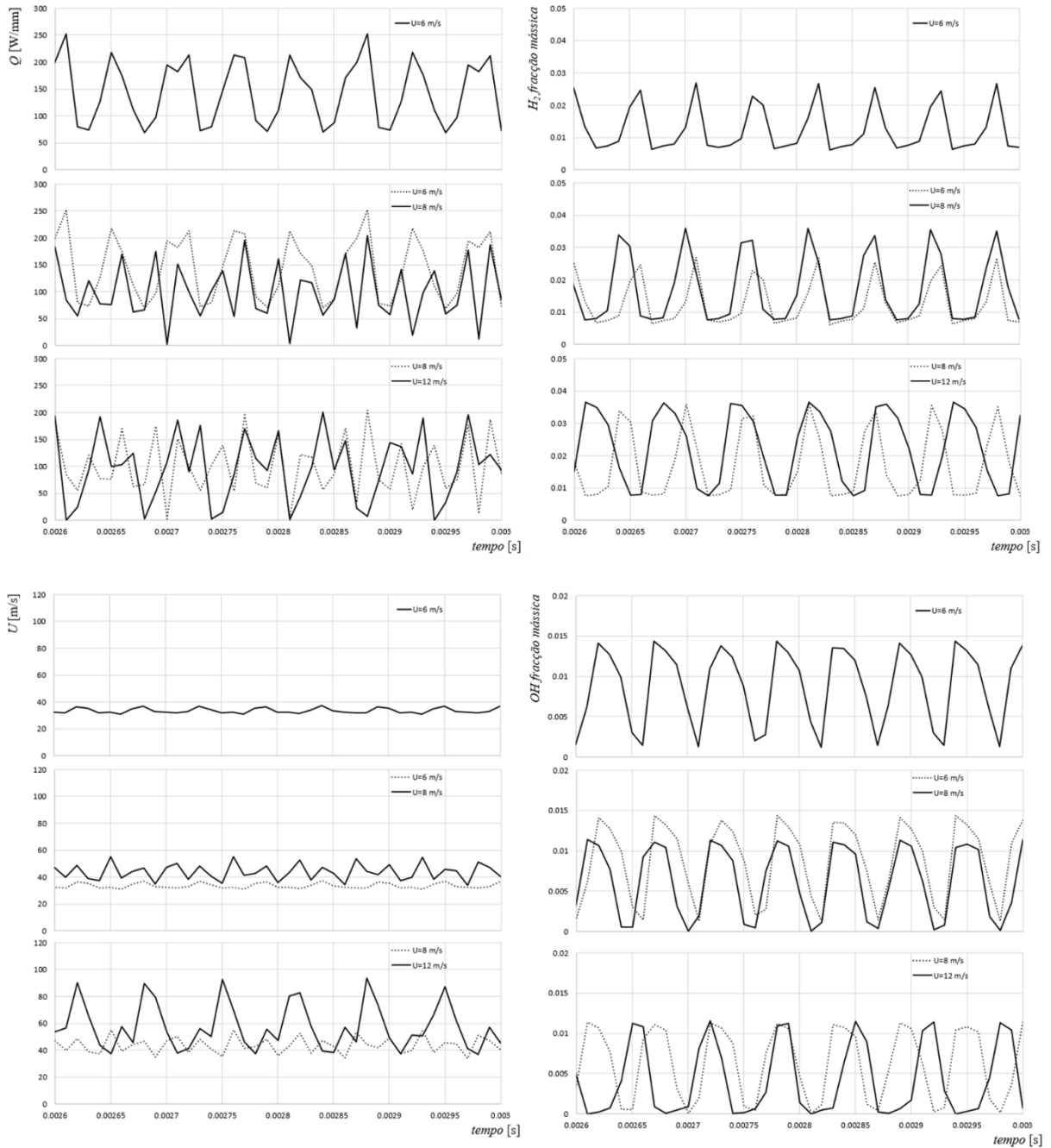


Figura B.3 - Evolução temporal de quatro parâmetros distintos (calor libertado, fração mássica de H_2 , velocidade e fração mássica de OH) num ponto localizado no eixo central do microcanal e a 4,5 mm da secção de entrada. Gráficos referentes às simulações LIN_14, LIN_15 e LIN_16.

B.2 Em regime adiabático

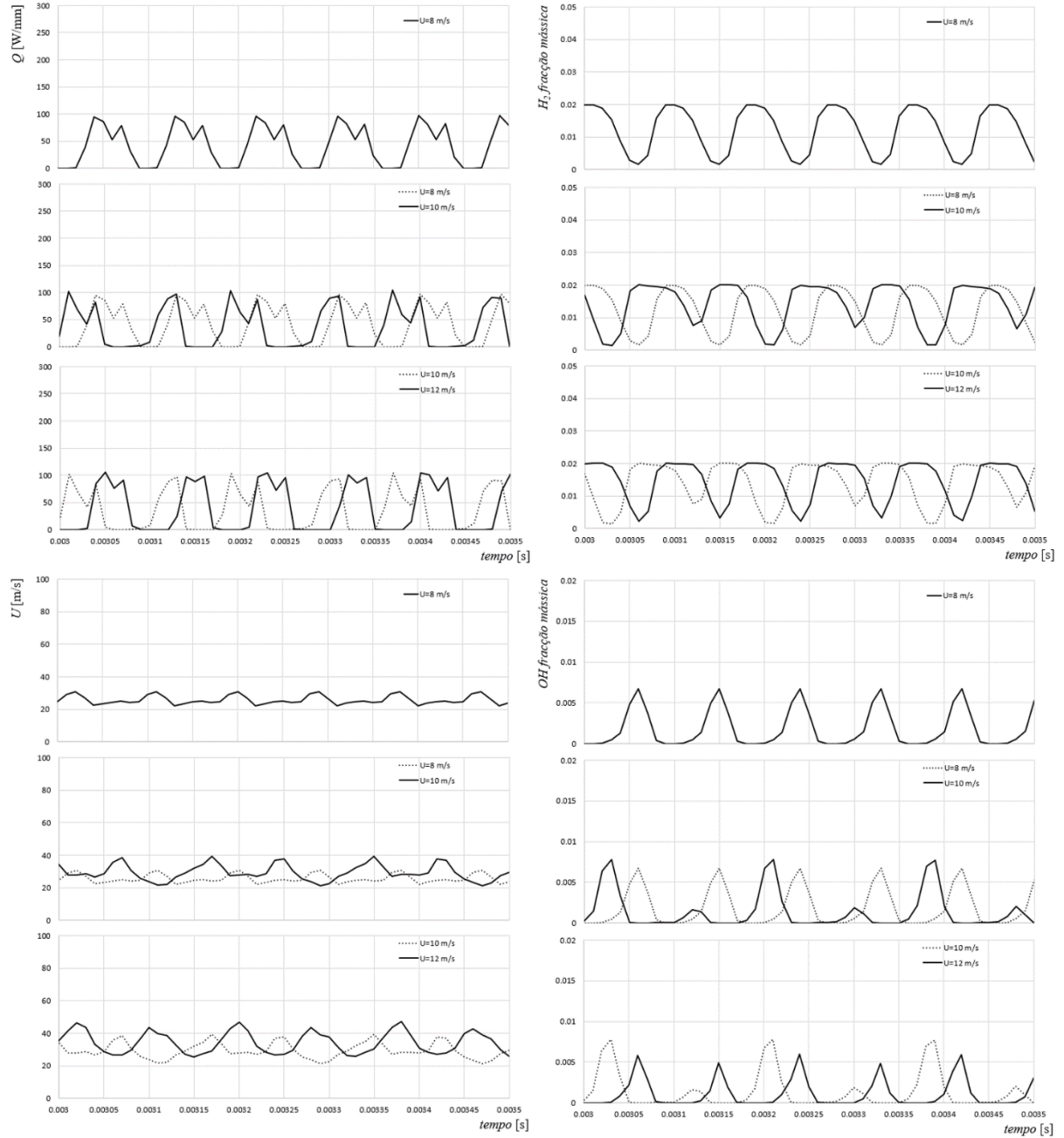


Figura B.4 - Evolução temporal de quatro parâmetros distintos (calor libertado, fração mássica de H_2 , velocidade e fração mássica de OH) num ponto localizado no eixo central do microcanal e a 4,5 mm da secção de entrada. Gráficos referentes às simulações ADI_03, ADI_04 e ADI_05.

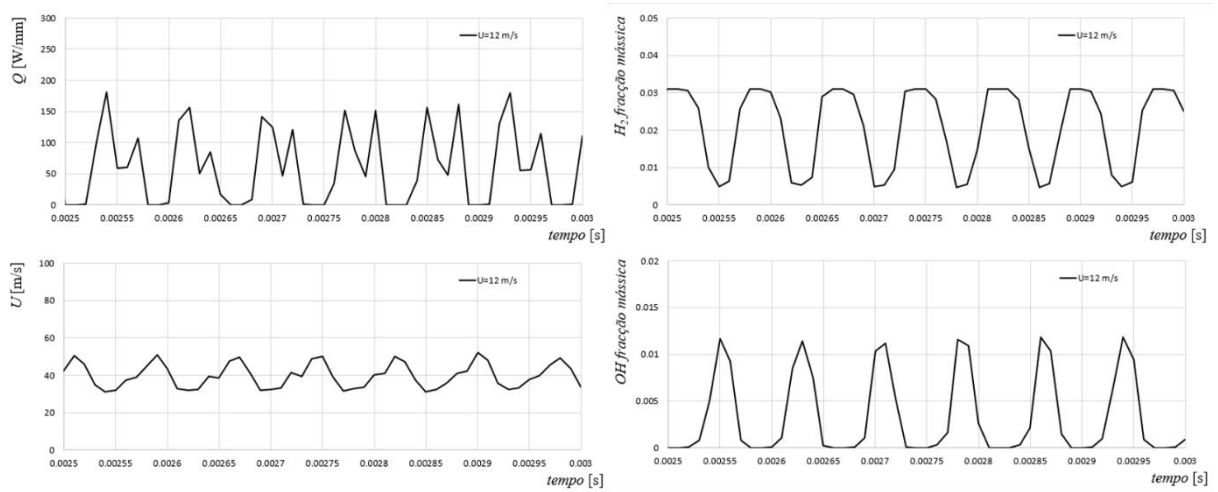


Figura B.5 - Evolução temporal de quatro parâmetros distintos (calor libertado, fração mássica de H_2 , velocidade e fração mássica de OH) num ponto localizado no eixo central do microcanal e a 4,5 mm da secção de entrada. Gráficos referentes à simulação ADI_10.

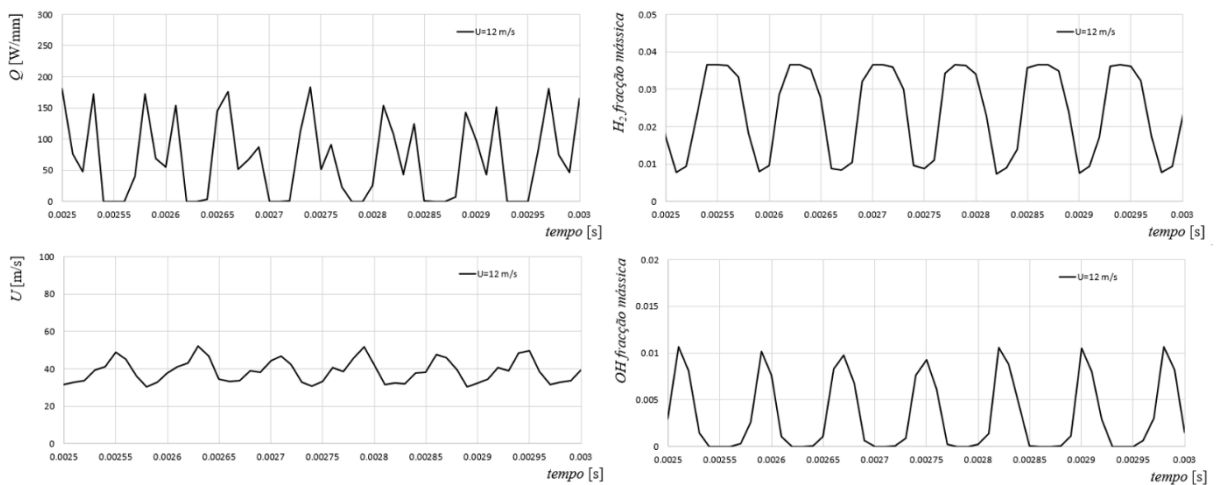


Figura B.6 - Evolução temporal de quatro parâmetros distintos (calor libertado, fração mássica de H_2 , velocidade e fração mássica de OH) num ponto localizado no eixo central do microcanal e a 4,5 mm da secção de entrada. Gráficos referentes à simulação ADI_15.