

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UMA CAMADA DE MISTURA SUPERSÔNICA TRANSIENTE DE H₂ E AR: CONDIÇÕES DE IGNIÇÃO E ESTRUTURA DA COMBUSTÃO

Adriana Ferreira de Faria

Uniminas – União Educacional Minas Gerais
Pç. Doutor Duarte, 99, Uberlândia, MG
affaria@uniminas.br

Milton Biage

Universidade Federal de Uberlândia
Faculdade de Engenharia Mecânica

Paulo Lopes Silva Júnior

Uniminas – União Educacional Minas Gerais

Resumo. *O estudo da combustão em escoamentos supersônicos é motivado pela perspectiva de vôos atmosféricos, para os quais um motor aeróbio, capaz de fornecer potência suficiente para números de Mach superiores a 6, não está completamente desenvolvido. O domínio de aplicação para este tipo de motor interessa desde o transporte de passageiros à construção de mísseis. A descrição quantitativa e a compreensão dos processos de combustão esbarram em limitações de ordem prática, como o alto custo de trabalhos experimentais ou o considerável esforço computacional de trabalhos numéricos, o que impede o estudo de todos os aspectos importantes deste fenômeno em um único programa. Porém, mesmo as configurações mais simples permitem obter importantes resultados, que possibilitam uma melhor compreensão do fenômeno, como os problemas de ignição e a estrutura da chama. O processo de combustão em escoamentos supersônicos é controlado pela acoplagem da fluidodinâmica à cinética química multi-reacional e pela multiplicidade de escalas e não linearidade da turbulência. Este trabalho tem por objetivo a análise numérica das condições de ignição e estrutura da combustão para uma camada de mistura supersônica transiente de hidrogênio e ar. Para a modelagem matemática do problema são utilizadas as equações de conservação compressíveis bidimensionais e multicomponentes, acopladas à uma modelagem detalhada dos mecanismos químicos, de transporte e termodinâmicos. É dada ênfase especial aos efeitos químicos e nenhuma modelagem para a turbulência é utilizada, apesar de seus efeitos serem certamente importantes. Para a resolução do sistema de equações diferenciais parciais, formado pelas equações governantes, utiliza-se o método de elementos espectrais da colocação, com polinômios de Chebyshev. As taxas das reações químicas e as propriedades termodinâmicas são calculadas pelo Chemkin, as propriedades de transporte são calculadas pelo Pacote para Avaliação das Propriedade de Transporte, ambos desenvolvidos pela Sandia National Laboratories.*

Palavras chaves: *Combustão, Escoamento Supersônico, Camada de Mistura.*

1. Introdução

Os fenômenos de combustão aparecem em inúmeras aplicações industriais, a título de exemplo, podem ser citadas a produção de energia em fornos e caldeiras, os motores de combustão interna e os motores *scramjet* (*Supersonic Combustion Ramjet*). Para motores *scramjet* a velocidade de escoamento na câmara de combustão é supersônica, portanto, devem ser evitados expressivos aumentos de temperatura e pressão, decorrentes da diminuição da velocidade do escoamento na entrada da câmara de combustão. O aumento de pressão se torna um problema sério no que diz respeito à estrutura mecânica do propulsor. Quanto ao aumento de temperatura, se ele se torna expressivo, os processos químicos de combustão podem se tornar ligeiramente exotérmicos, ou mesmo endotérmicos, devido ao importante incremento dos processos de dissociação. (René-Corail, 1995)

Depois de significativo desenvolvimento, verificado no final de década de 60 e começo da década de 70, os estudos com relação à combustão supersônica despertaram pouco interesse do ponto de vista da propulsão até o final da década de 80. Os estudos durante este período se voltaram, essencialmente, para o problema de detonação. No que concerne à propulsão, este período foi dedicado ao desenvolvimento de turbo-reatores, estato-reatores e motores de ignição a centelha. O final dos anos 80 viu renascer o interesse pelos estudos relativos à combustão em escoamentos supersônicos. Em particular, os Estados Unidos (Nasa-Langley), a Alemanha, o Japão (NAL) e a França (PREPHA) fomentaram programas destinados ao desenvolvimento de estudos, tanto no plano teórico e numérico, quanto experimental, a fim de estabelecer condições para a realização e estabilização de reações de combustão em escoamentos supersônicos.

Atenção especial tem sido voltada, na maioria dos trabalhos de cunho experimental, à interação entre os efeitos de compressibilidade, associados aos altos números de Mach, e a cinética química das reações exotérmicas, que são fortemente influenciadas pela temperatura. A modelagem e simulação numérica deste conjunto de fenômenos são, atualmente, objetos de estudo de pesquisas fundamentais e aplicadas. Mesmo para um modelo simplificado, os efeitos de compressibilidade que aparecem nos escoamentos supersônicos, com ou sem reação química, são expressivos. Desta forma, se torna necessária a utilização de esquemas numéricos eficazes e malhas refinadas, a fim de identificar ondas de choques e descontinuidades de contato ou de zonas reacionais. Avanços expressivos tanto na modelagem numérica quanto nas técnicas experimentais têm tornado possível uma melhor compreensão dos aspectos fundamentais do fenômeno de combustão em escoamentos supersônicos, o que tem aumentado a viabilidade de projetos para aplicações práticas.

O fenômeno de combustão pode ser dividido em três categorias dependendo das características do escoamento, onde os reagentes podem estar pré-misturados ou não, o problema é complexo, mas podem-se distinguir: as chamas de pré-misturas (*premixed flame*) para as quais o combustível e o oxidante são pré-misturados, é o caso dos motores à explosão; as chamas de difusão (*diffusion flame*) onde o combustível e o oxidante se misturam por difusão antes de reagirem; e as chamas triplas.

A descrição fenomenológica da estrutura de uma camada de mistura, obtida pela junção de dois escoamentos paralelos, um de oxidante e outro de combustível foram estudados teoricamente para o caso de escoamentos subsônicos por Liñán e Crespo (1976) e supersônicos por Jackson e Hussaini (1988). Nestes trabalhos, o processo de combustão é representado por uma reação química global e por aproximação de camada limite. Se os dois escoamentos, de combustível e oxidante, são subsônicos, a zona de mistura pode suportar uma estrutura chamada chama tripla.

Esta estrutura de chama tripla se apresenta da seguinte maneira: a zona de combustão apresenta uma estrutura do tipo chama de pré-mistura, controlada por um equilíbrio entre os transportes difusivos de massa e calor e pela produção química. A chama de pré-mistura é constituída, de uma parte e outra da linha estequiométrica, de uma chama rica (do lado do escoamento do combustível) e de uma chama pobre (do lado do escoamento do ar), que são transversais ao escoamento principal. Além desta estrutura de chama de pré-mistura pobre e rica coexistem duas regiões a altas temperaturas, onde uma contém o oxidante misturado aos gases queimados e a outra o combustível misturado aos gases provenientes da combustão. Na interface destas regiões pode existir uma chama de difusão.

Contrariamente ao caso da chama tripla subsônica, para o caso supersônico a região de indução não é do tipo propagativo. Sua estabilização requer que as temperaturas de injeção dos escoamentos sejam compatíveis com a auto-ignição química para o domínio considerado, compromisso entre o tempo químico para a temperatura de injeção e a velocidade do escoamento. Foi determinado que para o caso de dois escoamentos supersônicos, a velocidades diferentes, a dissipação viscosa pode influenciar consideravelmente as condições de ignição.

Jackson e Hussaini (1988) foram os primeiros a considerar o efeito da dissipação viscosa sobre a distância de ignição. Suas conclusões mostraram que para uma dada condição de cisalhamento, aumentando-se a estratificação, aumenta-se a distância de ignição, além disso, a localização do ponto de ignição tende em direção à corrente livre de maior temperatura. Foi também observado que se aumentar o cisalhamento, o qual é o responsável pelo aumento da mistura, diminui-se a distância de ignição e a localização do ponto de ignição tende a se deslocar em direção a corrente livre de menor velocidade.

Os primeiros trabalhos envolvendo a simulação numérica da combustão do H_2 -ar em camada de mistura supersônica, utilizando formulação de camada de mistura estacionária, foram realizados por Figueira da Silva et al. (1993), Nishioka et al. (1995) e Im et al. (1996). Devido ao alto coeficiente de difusão do H_2 -ar e a composição estequiométrica de misturas H_2 -ar ($2H_2 + O_2 + 3.76N_2$) a ignição sempre ocorre do lado do ar. Um aspecto específico do caso H_2 -ar é a geometria não simétrica da região de combustão pré-misturada, ao invés da estrutura de combustão tripla (duas regiões de combustão pré-misturada em volta da região de difusão da chama), somente uma região de combustão de pré-mistura é observada do lado da corrente de hidrogênio.

Assim como Jackson e Hussaini (1988), Figueira da Silva et al. (1993) propuseram, ao longo da direção transversal, a seguinte estrutura típica para a camada de mistura supersônica reativa: uma região de indução, onde a mistura entre o combustível e o oxidante ocorre, nesta região a temperatura permanece quase constante; uma região de disparada térmica, caracterizada por um grande aumento de temperatura e onde ocorre, parcialmente, uma região de combustão pré-misturada, devido à alta sensibilidade do esquema químico à temperatura, um pequeno aumento na temperatura da região de indução resulta em uma drástica variação no tempo característico do processo químico; uma região onde coexistem combustão do tipo difusão e pré-misturada, em particular, observou-se uma zona rica em H_2 -ar pré-misturados que consome o excesso de O_2 que está presente no lado do H_2 , na camada de mistura após a disparada térmica; uma região onde permanece somente o regime de difusão da chama, caracterizada pela difusão dos reagentes em direção normal à chama.

A alta velocidade associada aos escoamentos supersônicos implica em um tempo de residência extremamente curto para que a ignição ocorra. Esta é a maior dificuldade no desenvolvimento de tecnologia *scramjet*. Contudo, a partir de estudos teóricos de escoamentos reativos em alta velocidade, descobriu-se que a ignição pode ser facilitada pelo aumento da velocidade do escoamento, o que parece um contra-senso com a afirmativa anterior. Mas, isto ocorre porque se aumenta consideravelmente a quantidade de calor devido à dissipação viscosa da energia cinética do escoamento em energia térmica. Este aumento da dissipação viscosa promove um incremento da temperatura, favorecendo às reações químicas e consequentemente à ignição. (Jackson e Hussaini, 1988; Grosh e Jackson, 1991 e Figueira da Silva et al., 1993)

Im et al. (1993) estudaram o efeito da dissipação viscosa sobre a ignição supersônica. Em particular, é demonstrado que partindo de baixas velocidades, a distância de ignição, inicialmente, aumenta linearmente com o aumento da velocidade da corrente livre, uma vez que a temperatura característica da região de ignição permanece constante. Porém, um incremento adicional na velocidade da corrente livre faz com que a temperatura característica da região de ignição aumente quadraticamente com o número de Mach, devido ao aumento da dissipação viscosa, conseqüentemente, a distância de ignição diminui exponencialmente.

Im et al. (1996) estudaram a ignição de um mistura de H_2 - ar em uma camada de mistura laminar supersônica através da análise assintótica, com mecanismos de reações químicas reduzidos. Para os regimes em alta e baixa temperatura, eles analisaram duas situações distintas. Uma primeira, onde a fonte de energia dominante para a ignição é a corrente quente de ar, que está numa temperatura maior que a temperatura crítica (924,70K a 1 atm). A temperatura crítica foi definida como sendo a temperatura na qual as taxas das reações de ramificação ($H+O_2 \rightarrow OH+O$) e de propagação ($H+O_2+M \rightarrow HO_2+M$) são iguais. Na segunda, a temperatura da corrente de ar é menor que a temperatura crítica e portanto, a fonte de energia para a ignição é a dissipação viscosa gerada pela alta velocidade do escoamento.

Nishioka e Law (1995) realizaram um estudo numérico da ignição supersônica do hidrogênio e ar em uma camada de mistura laminar estacionária, usando mecanismos de reação química e de transporte detalhados. Assim como nos estudos assintóticos, os autores identificaram quatro regimes de ignição distintos, caracterizados pela alta ou baixa temperatura da corrente de ar relativa à temperatura crítica e ainda, pela fonte de energia dominante para a ignição como sendo a corrente de ar quente ou a dissipação viscosa. Estes resultados demonstram que nenhuma proposta prática para a ignição é possível quando a temperatura da corrente de ar é menor que a temperatura crítica, mesmo para o regime onde a dissipação viscosa é a fonte de energia dominante para a ignição. Quando a temperatura da corrente de ar é maior que a temperatura crítica, regime de alta temperatura, as distâncias de ignição calculadas mostram que a ignição pode ser facilmente atingida nos motores de combustão supersônica. Verificou-se ainda que no regime de alta temperatura a ignição é inicializada pela proliferação de radicais, ou espécies intermediárias, ao invés de disparada térmica. Isto implica no fato de que a ignição pode ser predita neste regime sem considerar o termo de calor liberado.

2. Formulação Matemática

Uma vez que o método numérico utilizado para a resolução do sistema de equações diferenciais, formado pelas equações de conservação, é o método de elementos espectrais da colocação, com polinômios de Chebyshev, se torna necessário normalizar o domínio de cálculo no intervalo $[-1,1]$. Sendo assim as coordenadas cartesianas do sistema devem ser adimensionalizadas em função desta característica. As outras variáveis são adimensionalizadas em função das propriedades para a corrente livre de ar. O símbolo * representa as variáveis dimensionais, enquanto que a ausência deste representa as variáveis adimensionais. As coordenadas cartesianas adimensionais são definidas como:

$$x_i = \frac{2[x^* - (a_x)_i]}{(\Delta x^*)_i} - 1, \quad i = 1, \dots, Ne_x; \quad y_j = \frac{2[y^* - (a_y)_j]}{(\Delta y^*)_j} - 1, \quad j = 1, \dots, Ne_y \quad (1, 2)$$

onde Ne_x e Ne_y são os números de elementos espectrais na direção x^* e y^* , respectivamente, $(\Delta x^*)_i$ e $(\Delta y^*)_j$ são os comprimentos de cada elemento espectral nas direções x^* e y^* , definidos por:

$$(\Delta x^*)_i = (b_x)_i - (a_x)_i \quad \text{com} \quad x_i^* \in [(a_x)_i, (b_x)_i] \rightarrow x_i \in [-1,1] \quad (3)$$

$$(\Delta y^*)_j = (b_y)_j - (a_y)_j \quad \text{com} \quad y_j^* \in [(a_y)_j, (b_y)_j] \rightarrow y_j \in [-1,1] \quad (4)$$

$(b_x)_i$ e $(a_x)_i$, com $i = 1, \dots, Ne_x$, são os pontos iniciais e finais que caracterizam um elemento na abcissa.

$(b_y)_j$ e $(a_y)_j$, com $j = 1, \dots, Ne_y$, são os pontos iniciais e finais que caracterizam um elemento na ordenada.

A Figura 1 mostra a distribuição dos elementos na direção x^* , a distribuição dos elementos na direção y^* é semelhante àquela para a direção x^* . O comprimento de cada elemento nas direções x^* e y^* , assim como, os comprimentos dos elementos numa mesma direção podem ser diferentes. Tal procedimento permite refinar a malha na

posição e direção desejadas. O comprimento do domínio na direção x^* é L_x , sendo que $-L_x/2 \leq x^* \leq L_x/2$, enquanto que na direção y^* é L_y , onde $-L_y/2 \leq y^* \leq L_y/2$.



Figura 1. Distribuição dos elementos na direção x^* .

Com objetivo de facilitar o tratamento computacional das equações, pode-se escrever as equações de conservação adimensional na forma vetorial, como segue:

$$\frac{\mathcal{U}}{\mathcal{t}} + \frac{L_x}{(\Delta x^*)_i} \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{x}} + \frac{L_x}{(\Delta y^*)_j} \frac{\mathcal{F}}{\mathcal{y}} = S \quad (5)$$

$$U = \begin{pmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{ru} \\ \mathbf{rv} \\ \mathbf{rE} \\ \mathbf{rY}_k \end{pmatrix}, \quad E = \begin{pmatrix} \mathbf{ru} \\ \mathbf{ruu} + P - \frac{1}{\text{Re}} \mathbf{t}_{xx} \\ \mathbf{rvu} - \frac{1}{\text{Re}} \mathbf{t}_{xy} \\ \mathbf{ruE} + \frac{1}{\text{Pe}} q_x + Pu - \frac{1}{\text{Re}} (\mathbf{t}_{xx}u + \mathbf{t}_{xy}v) \\ \mathbf{ruY}_k + \frac{1}{\text{Re}Sc} J_{kx} \end{pmatrix} \quad (6, 7)$$

$$F = \begin{pmatrix} \mathbf{rv} \\ \mathbf{ruv} - \frac{1}{\text{Re}} \mathbf{t}_{xy} \\ \mathbf{rvv} + P - \frac{1}{\text{Re}} \mathbf{t}_{yy} \\ \mathbf{rvE} + \frac{1}{\text{Pe}} q_y + Pv - \frac{1}{\text{Re}} (\mathbf{t}_{xy}u + \mathbf{t}_{yy}v) \\ \mathbf{rvY}_k + \frac{1}{\text{Re}d_0Sc} J_{ky} \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ w_k \end{pmatrix}, \quad k = 1, \dots, N \quad (8, 9)$$

onde \mathbf{r} é a densidade da mistura, u e v são as componentes do vetor velocidade, \mathbf{t}_{ij} é o tensor fluxo de quantidade de movimento difusivo, q_x e q_y são as componentes do vetor fluxo de calor, Y_k , \bar{J}_k e w_k são a fração mássica, o vetor fluxo de massa e a taxa da reação química da k -ésima espécie química, respectivamente, N é o número de espécies químicas presentes.

As componentes do tensor fluxo difusivo de quantidade de movimento adimensionais são dadas abaixo:

$$\mathbf{t}_{xx} = (2d_0) \frac{2}{3} \mathbf{m} \left(\frac{2}{(\Delta x^*)_i} \frac{\mathcal{u}}{\mathcal{x}} - \frac{1}{(\Delta y^*)_j} \frac{\mathcal{v}}{\mathcal{y}} \right), \quad \mathbf{t}_{yy} = (2d_0) \frac{2}{3} \mathbf{m} \left(\frac{2}{(\Delta y^*)_j} \frac{\mathcal{v}}{\mathcal{y}} - \frac{1}{(\Delta x^*)_i} \frac{\mathcal{u}}{\mathcal{x}} \right), \quad (10, 11)$$

$$t_{xy} = (2d_0) \mathbf{m} \left(\frac{1}{(\Delta x^*)_i} \frac{\mathcal{J}u}{\mathcal{J}x} + \frac{1}{(\Delta y^*)_j} \frac{\mathcal{J}v}{\mathcal{J}y} \right) \quad (12)$$

As componente do vetor fluxo de calor adimensionais são:

$$(q_c)_x = 2d_0 \left[\frac{1}{Ec(\Delta x^*)_i} k \frac{\mathcal{J}T}{\mathcal{J}x} + Le \sum_{k=1}^N h_k \mathbf{r}Y_k (V_k)_x \right], \quad (q_c)_y = 2d_0 \left[\frac{1}{Ec(\Delta y^*)_j} k \frac{\mathcal{J}T}{\mathcal{J}y} + Le \sum_{k=1}^N h_k \mathbf{r}Y_k (V_k)_y \right] \quad (13, 14)$$

d_0 é a espessura inicial da camada de mistura, T representa a temperatura, k é a condutividade térmica da mistura e h_k e a entalpia da k-ésima espécie química.

O vetor fluxo de massa adimensional é dado por:

$$\vec{J}_k = 2d_0 \mathbf{r}Y_k \vec{V}_k \quad (15)$$

As componentes do vetor velocidade de difusão de massa adimensionais são:

$$(V_k)_x = -\frac{1}{X_k} D_{km} (d_k)_x - \frac{D_k^T}{\mathbf{r}Y_k T} \frac{1}{(\Delta x^*)_i} \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (V_k)_y = -\frac{1}{X_k} D_{km} (d_k)_y - \frac{D_k^T}{\mathbf{r}Y_k T} \frac{1}{(\Delta y^*)_j} \frac{\partial T}{\partial y} \quad (16, 17)$$

$$(d_k)_x = \frac{1}{(\Delta x^*)_i} \left(\frac{\mathcal{J}X_k}{\mathcal{J}x} + (X_k - Y_k) \frac{1}{P} \frac{\mathcal{J}P}{\mathcal{J}x} \right), \quad (d_k)_y = \frac{1}{(\Delta y^*)_j} \left(\frac{\mathcal{J}X_k}{\mathcal{J}y} + (X_k - Y_k) \frac{1}{P} \frac{\mathcal{J}P}{\mathcal{J}y} \right) \quad (18, 19)$$

D_{km} , D_k^T e X_k representam, respectivamente, o coeficiente de difusão de massa por gradiente de concentração, o coeficiente de difusão de massa por gradiente de temperatura e a fração molar k-ésima espécie química na mistura, P é a pressão. Os números adimensionais de Reynolds, Prandtl, Schmidt, Lewis, Peclet e Eckert são definidos, respectivamente da seguinte forma:

$$\text{Re}_{d_0} = \frac{U_\infty \mathbf{r}_\infty d_0}{\mathbf{m}_\infty}, \quad \text{Pr} = \frac{c_{p_\infty} \mathbf{m}_\infty}{k_\infty}, \quad \text{Sc} = \frac{\mathbf{m}_\infty}{D_{(O_2-N_2)_\infty} \mathbf{r}_\infty}, \quad \text{Le} = \frac{\overline{r} c_p D_{(O_2-N_2)_\infty}}{\bar{k}}, \quad \text{Pe} = \text{Pr} \cdot \text{Re}, \quad \text{Ec} = \frac{U_\infty^2}{c_{p_\infty} T_\infty} \quad (20, 21, 22, 23, 24, 25)$$

A fim de provocar instabilidades no escoamento é estabelecido como condição inicial para a velocidade um perfil básico do tipo tangente hiperbólica. Os campos de temperatura e frações mássicas são inicializados de forma similar ao perfil médio de velocidade. O campo inicial de pressão é constante e igual à pressão da corrente livre. Finalmente, os campos de densidade e energia interna são calculados através das equações termodinâmicas para gás ideal juntamente com os perfis de temperatura, frações mássicas e pressão.

Condições Iniciais:

$$u(x, y, t = 0) = [U_o + U_1 \tanh(y^* / d_0)] / U_\infty, \quad v(x, y, t = 0) = 0 \quad (26, 27)$$

$$T(x, y, t = 0) = [T_o + T_1 \tanh(y^* / d_0)] / T_\infty \quad (28)$$

$$\mathbf{r}(x, y, t = 0) = [f(T(x^*, y^*, t^* = 0), Y_k(x^*, y^*, t^* = 0), P_\infty)] / \mathbf{r}_\infty \quad (29)$$

$$Y_k(x, y, t = 0) = Y_{k_o} + Y_{k1} \tanh(y^* / d_0), \quad k = 1, \dots, N \quad (30)$$

onde:

$$U_o = \frac{U_\infty + U_{-\infty}}{2}, \quad U_1 = \frac{U_\infty - U_{-\infty}}{2}, \quad T_o = \frac{T_\infty + T_{-\infty}}{2}, \quad T_1 = \frac{T_\infty - T_{-\infty}}{2}, \quad Y_{k_o} = \frac{Y_{k_\infty} + Y_{k_{-\infty}}}{2}, \quad Y_{k1} = \frac{Y_{k_\infty} - Y_{k_{-\infty}}}{2} \quad (31, 32, 33, 34, 35, 36)$$

Condições de Contorno para a Direção Axial:

As condições de contorno na entrada do domínio são do tipo Dirichlet, isto é, as próprias variáveis são impostas. Para gerar turbulência residual é superposto ao perfil básico do campo de velocidade uma perturbação aleatória, do tipo ruído branco, em cada passo de tempo:

$$u(x = -1, y, t) = [U_o + U_1 \tanh(y^* / \mathbf{d}_0) + f(y^*) \mathbf{e} \hat{V}(y^*, t^*)] / U_\infty, \quad v(x = -1, y, t) = [f(y^*) \mathbf{e} \hat{V}(y^*, t^*)] / U_\infty \quad (37, 38)$$

$$T(x = -1, y, t) = [T_o + T_1 \tanh(y^* / \mathbf{d}_0)] / T \quad (39)$$

$$\mathbf{r}(x = -1, y, t) = \left[f\left(T\left(x^* = -\frac{L_x}{2}, y^*, t^*\right), Y_k\left(x^* = -\frac{L_x}{2}, y^*, t^*\right), P_\infty\right) \right] / \mathbf{r}_\infty \quad (40)$$

$$Y_k(x = -1, y, t) = Y_{k_o} + Y_{k_1} \tanh(y^* / \mathbf{d}_0), \quad k = 1, \dots, N \quad (41)$$

$\hat{V}(y^*, t^*)$ é um número aleatório, do tipo ruído branco que insere a mesma quantidade de energia em todos os modos longitudinais do escoamento básico. A energia inserida nos modos estáveis será amortecida, enquanto que, os modos instáveis vão crescer e sua taxa de amplificação é dada pela teoria da instabilidade linear. O maior modo amplificado aparece primeiro e obscurece os outros modos instáveis. Ele surge das pequenas perturbações caóticas devido às instabilidades do perfil de velocidade básico. O ruído branco representa, com boa aproximação, a turbulência residual que é experimentalmente, responsável pelo crescimento das instabilidades.

ϵ é amplitude da perturbação aleatória, na prática se encontra no intervalo de $[10^{-6}, 10^{-1}]$, definida da seguinte forma:

$$\mathbf{e} = 10^{-4} \text{Max} \left| \frac{\partial(U_o + U_1 \tanh(y^* / \mathbf{d}_0))}{\partial y^*} \right| \quad (42)$$

A função $f(y^*)$ é um filtro gaussiano que modula as perturbações e as confina na zona rotacional do escoamento, dado por:

$$f(y^*) = \exp\left(-0.5(y^* / \mathbf{d}_0)^2\right) \quad (43)$$

Na saída do domínio assume-se que os turbilhões formados ao longo da camada de mistura são evacuados permanentemente. Para tal, usam-se condições de contorno do tipo Neuman, válidas para ondas lineares e perturbações não lineares, tais como: estruturas coerentes e turbilhões de pequenas escalas.

$$\frac{\partial \mathbf{j}(x = 1, y, t)}{\partial x} = 0, \quad \mathbf{j} = \{u, v, E, \mathbf{r}, Y_k\} \quad (44)$$

Condições de Contorno para a Direção Transversal:

Para as condições de contorno na direção y são assumidos os valores das variáveis na corrente livre do escoamento:

$$u(x, y = 1, t) = 1, \quad u(x, y = -1, t) = U_{-\infty} / U_\infty \quad (45, 46)$$

$$v(x, y = 1, t) = 0, \quad v(x, y = -1, t) = 0 \quad (47, 48)$$

$$T(x, y = 1, t) = 1, \quad T(x, y = -1, t) = T_{-\infty} / T_\infty \quad (49, 50)$$

$$\mathbf{r}(x, y = 1, t) = 1, \quad \mathbf{r}(x, y = -1, t) = \mathbf{r}_{-\infty} / \mathbf{r}_\infty \quad (51, 52)$$

$$Y_k(x, y = 1, t) = Y_{k_\infty}, \quad Y_k(x, y = -1, t) = Y_{k_{-\infty}} \quad (53, 54)$$

O modelo químico reacional utilizado está apresentado na Tabela 1. Ele é constituído de 19 reações químicas elementares e 9 espécies químicas, onde o nitrogênio é tratado como inerte e as espécies químicas consideradas são: H_2 , O_2 , N_2 , H_2O , OH , H , O , HO_2 e H_2O_2 .

Tabela 1. Mecanismo reacional para a combustão do H_2 - ar de acordo com Kee et al. (1989).

Reação	A (mol, cm, s)	b	E_i^* (kcal/mol)
1. $O_2+H\tilde{U}O+OH$	1.92e14	0.0	16.44
2. $H_2+O\tilde{U}H+OH$	5.08e4	2.67	6.29
3. $H_2+OH\tilde{U}H_2O+H$	2.16e8	1.51	3.43
4. $OH+OH\tilde{U}H_2O+O$	1.23e4	2.62	-1.88
5. ^a $H_2+M\tilde{U}H+H+M$	4.57e19	-1.4	104.4
6. ^a $O+O+M\tilde{U}O_2+M$	6.17e15	-0.50	0.0
7. ^a $O+H+M\tilde{U}OH+M$	4.72e18	-1.0	0.0
8. ^a $H+OH+M\tilde{U}H_2O+M$	2.25e22	-2.0	0.0
9. ^a $H+O_2+M\tilde{U}HO_2+M$	6.17e19	-1.42	0.0
10. $HO_2+H\tilde{U}H_2+O_2$	6.63e13	0.0	2.13
11. $HO_2+H\tilde{U}OH+OH$	1.69e14	0.0	0.87
12. $HO_2+O\tilde{U}OH+O_2$	1.81e13	0.0	-0.4
13. $HO_2+OH\tilde{U}H_2O+O_2$	1.45e16	-1.0	0.0
14. $HO_2+HO_2\tilde{U}H_2O_2+O_2$	3.02e12	0.0	1.39
15. ^a $H_2O_2+M\tilde{U}OH+OH+M$	1.20e17	0.0	45.5
16. $H_2O_2+H\tilde{U}H_2O+OH$	1.00e13	0.0	3.59
17. $H_2O_2+H\tilde{U}H_2+HO_2$	4.82e13	0.0	7.95
18. $H_2O_2+O\tilde{U}OH+HO_2$	9.55e6	2.0	3.97
19. $H_2O_2+OH\tilde{U}H_2O+HO_2$	7.00e12	0.0	1.43

a - Fator de eficiência do terceiro corpo: $a_{H_2O} = 12$; $a_{H_2} = 25$.

3. Método Numérico

Neste trabalho o Método de Elementos Espectrais da Colocação com polinômios de Chebyshev foi utilizado para discretização espacial do sistema de equações diferenciais formado pelas equações de conservação. Na maior parte das aplicações de métodos espectrais somente a discretização espacial é espectral. Neste caso, para obter uma solução estacionária estável, a discretização espacial é completamente separada da discretização temporal. Primeiro, a discretização espacial é feita e então uma equação diferencial ordinária é obtida, onde a única variável dependente é o tempo. (Canuto et al., 1988)

Considerando as equações de conservação na forma vetorial, dadas pela Eq. (5), é possível definir uma função que caracteriza a projeção espectral no espaço, obtida pela derivada espacial:

$$P(U_e) = -\frac{L_x}{(\Delta x^*)_i} \frac{\mathcal{I}E}{\mathcal{I}x} - \frac{L_x}{(\Delta y^*)_j} \frac{\mathcal{I}F}{\mathcal{I}y} + S \quad (55)$$

Desta forma é possível escrever a seguinte equação diferencial ordinária:

$$\frac{d(U_e)}{dt} = P(U_e) \quad (56)$$

Para a solução da equação diferencial ordinária, Eq. (56), cuja variável independente é o tempo foi utilizado o Método de Runge-Kutta de ordem s. Todos os cálculos foram feitos com pontos de colocação Gauss-Lobatto, com uma malha de 199x166 pontos.

4. Resultados

Foram estudadas condições de ignição de acordo com o trabalho de Figueira da Silva et al. (1993), onde preocupou-se em evidenciar o efeito da dissipação viscosa, assim como a influência dos gradientes transversais de temperatura e velocidade. As situações analisadas estão listadas na Tabela 2.

Tabela 2. Casos estudados na camada de mistura para a seguinte configuração: $L_x = 30$ cm, $L_y = 20$ cm, $d_0 = 1$ cm, $N_x = 18$ elementos, $N_y = 15$ elementos, $n_p = 12$ pontos, resolução = 199x166.

Caso	T_∞ (K)	$T_{-\infty}$ (K)	V_∞ (m/s)	$V_{-\infty}$ (m/s)	Ma_∞	$Ma_{-\infty}$	Re_∞	$Re_{-\infty}$
1	1.200	1.200	3.000	3.000	4,43	1,15	182.021	27.757
2	1.200	1.200	777	3.000	1,15	1,15	47.144	27.757
3	1.200	1.200	4.060	3.000	6,0	1,15	246.335	27.757
4	1.200	1.200	5.400	3.000	8,0	1,15	327.637	27.757
5	1.200	1.200	3.000	5.400	4,43	2,07	182.021	49.963
6	1.400	1.200	3.000	3.000	4,12	1,15	141.159	27.757
7	1.200	1.400	3.000	3.000	4,43	1,07	182.021	21.542

A Figura (2) representa o caso 1, para um tempo adimensional $t = 1,200$. Nesta situação, a camada de mistura em desenvolvimento espacial se encontra completamente desenvolvida. Para o caso 1, as velocidades de entrada, assim como as velocidades, das correntes de ar e hidrogênio são iguais, este caso será usado como referência. A Figura (3) representa os perfis de temperatura adimensional e frações mássicas para um tempo adimensional $t = 1,200$, em função da coordenada axial para uma posição $y = 2,0$ cm. A Figura (4) representa os perfis de temperatura adimensional e frações mássicas para um tempo adimensional $t = 1,200$, em função da coordenada transversal para uma posição $x = 5,0$ cm.

Para compreender mais precisamente a ignição e o desenvolvimento da combustão na camada de mistura, pode-se observar nas Fig. (2), (3) e (4), seguindo a direção axial, várias regiões no escoamento, de acordo com as estruturas descritas por Figueira da Silva et al. (1993). Estas regiões seriam:

- ✓ Uma região de indução, $-15 < x^* < -2$ cm, onde a temperatura permanece quase constante. Pode-se melhor evidenciar este comportamento nos perfis de temperatura adimensional e frações mássicas da H_2O e das espécies químicas intermediárias, H , OH e O ;
- ✓ Uma região de disparada térmica, devido a alta sensibilidade das espécies químicas à temperatura, um pequeno aumento de temperatura envolvido na região na região de indução resulta em drástica mudança no tempo característico do processo químico. Esta região, de acordo com a Fig. (3), compreende o intervalo $-2 < x^* < 2,5$ cm;
- ✓ Uma região onde chamas de difusão e chamas de pré-mistura coexistem, $-2 < x^* < 15$ cm. A chama de difusão é a principal responsável pelo pico no perfil de temperatura, enquanto que a zona rica de pré-mistura H_2 - ar consome o excesso de oxigênio presente no lado do hidrogênio após a disparada térmica, Fig. (4). É importante observar que estrutura semelhante não é encontrada do lado de baixo da camada de mistura devido ao valor elevado da velocidade de difusão do H_2 .

O desenvolvimento da chama de difusão é melhor evidenciado na Fig. (5), caso 2, onde a velocidade do ar é muito menor que aquela usada no caso 1. De acordo com Jackson e Hussaini (1988), o aumento do cisalhamento faz com que o processo de mistura melhore, promovendo assim a ignição. Para esta situação pode-se observar uma estrutura de chama de difusão completamente desenvolvida para o intervalo $-10 < x^* < 15$ cm.

Partindo do caso 1 como referência, aumentou-se progressivamente a velocidade de entrada da corrente de ar, casos 3 e 4. Quando aumenta-se a velocidade da corrente de ar, mantendo as mesmas temperaturas e velocidade do escoamento do hidrogênio, a zona de combustão afasta-se da entrada do domínio de cálculo, movendo-se para fora deste, como era esperado, desde que o tempo de indução dos processos químicos permanece constante. Porém, continuando a aumentar a velocidade da corrente de ar, caso 4, a zona de combustão move-se em direção à origem, este deslocamento é conseqüência da diminuição do tempo de indução do processo químico. Esta diminuição se deve ao aumento de temperatura devido aos efeitos da dissipação viscosa na região de elevado gradiente de velocidade, como mostrado na Fig. (6).

Desde que para as condições de contorno escolhidas, a região de combustão é encontrada do lado da corrente de ar da camada de mistura, espera-se que a diminuição do comprimento de indução possa ser obtida de duas maneiras. Primeira, pela diminuição da velocidade da corrente de ar, mantendo a velocidade da corrente de hidrogênio constante, para uma dada temperatura de entrada do ar e hidrogênio. Segunda, pelo aumento da temperatura da corrente de ar, fixadas as velocidades iniciais do escoamento, caso 6, conforme observado pela Fig. (7).

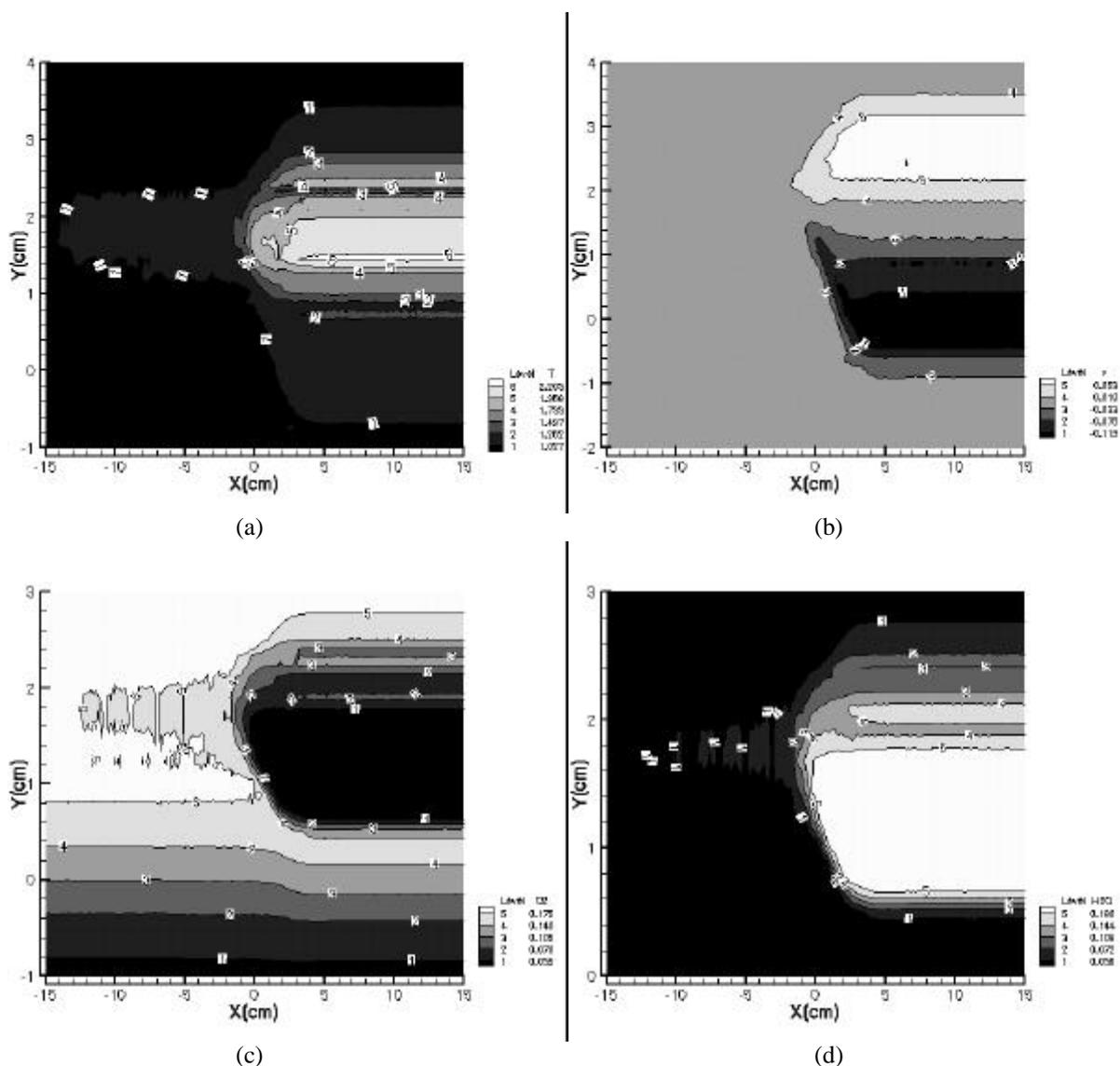


Figura 2. Perfis adimensionais de (a) Temperatura; (b) Velocidade Transversal; (c) O_2 , (d) H_2O . Para o caso 1, $t = 1,200$.

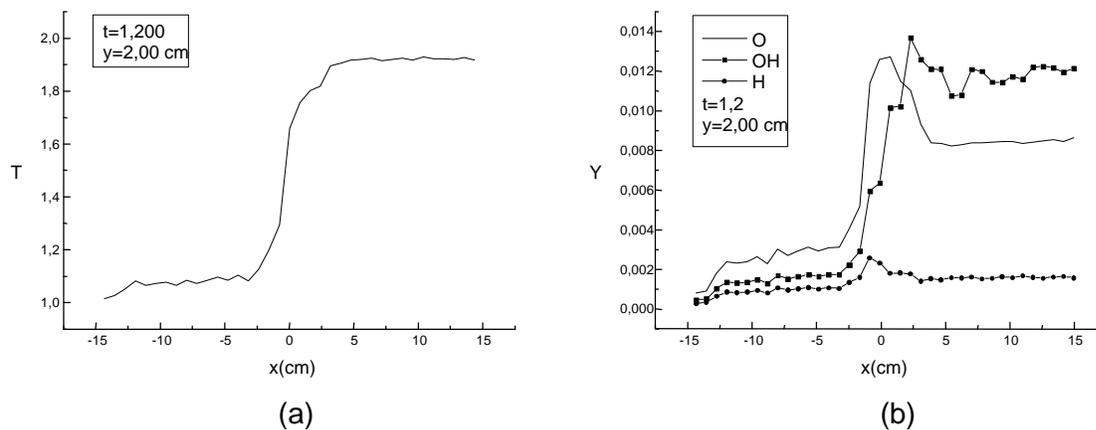


Figura 3. (a) Perfil de temperatura adimensional; (b) Perfis de frações mássicas. Ambos para o caso 1.

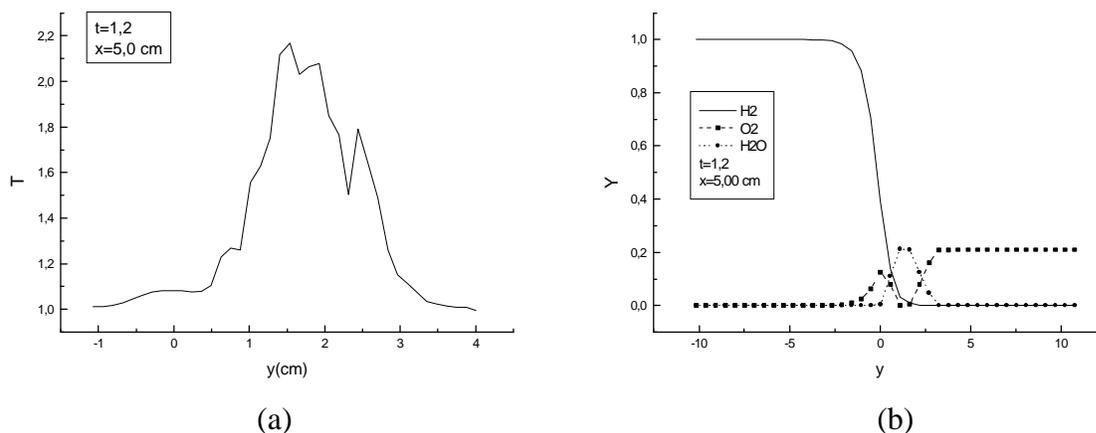


Figura 4. (a) Perfil de temperatura adimensional; (b) Perfis de frações mássicas. Ambos para o caso 1.

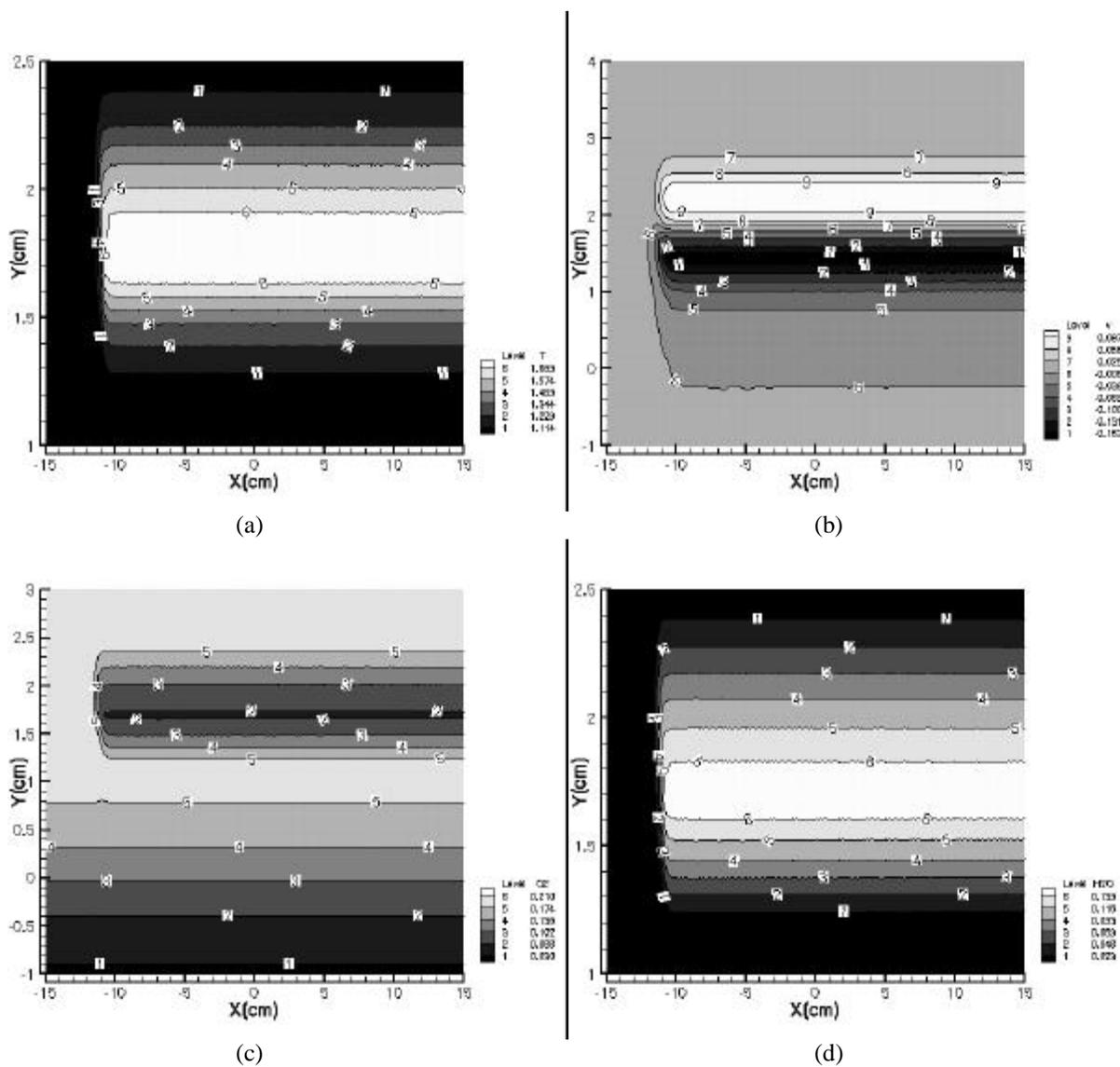


Figura 5. Perfis adimensionais de (a) Temperatura; (b) Velocidade Transversal; (c) O_2 , (d) H_2O . Para o caso 2, $t = 1,200$.

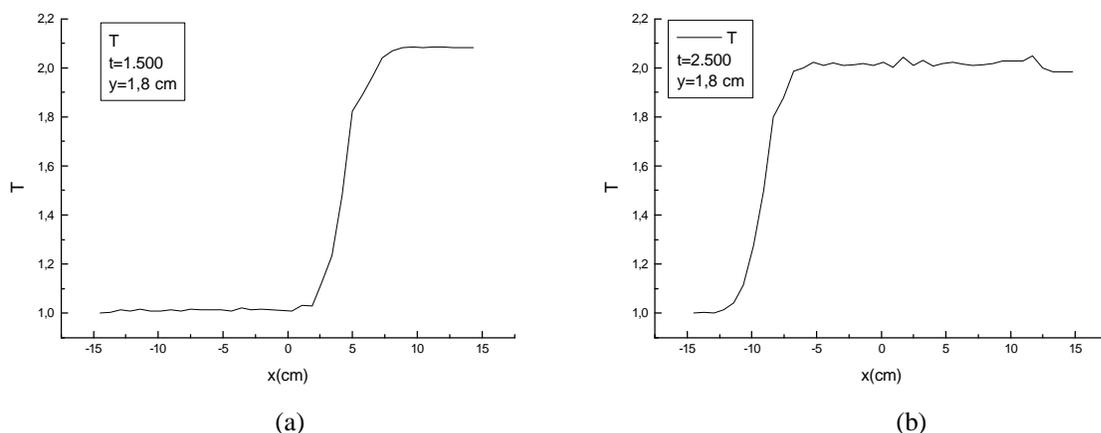


Figura 6. Perfis de temperatura adimensionais para os casos 3 e 4.

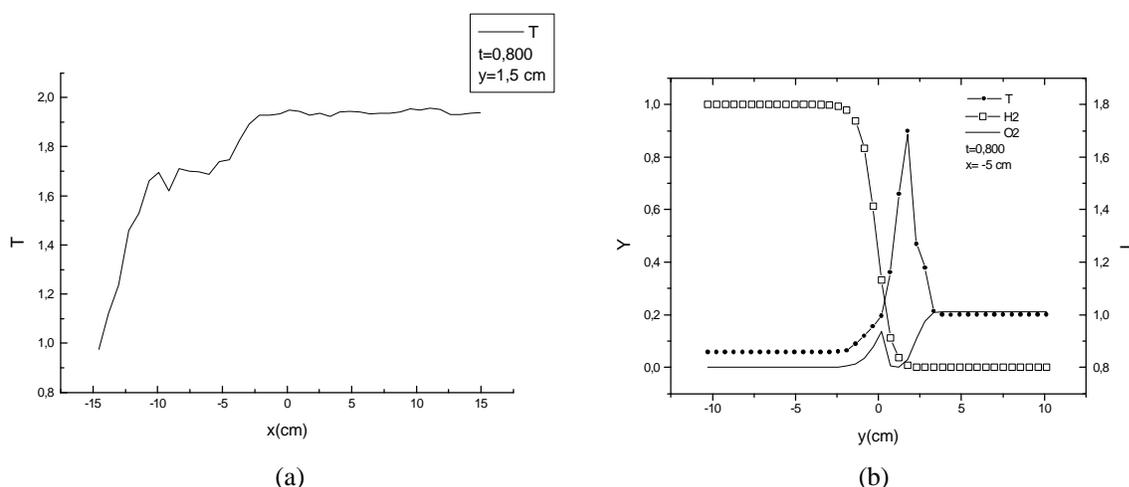


Figura 7. (a) Perfil de temperatura adimensional; (b) Frações mássicas de H_2 e O_2 . Ambos para o caso 6.

É de importância prática a construção das curvas de comprimento de ignição da camada de mistura em função da velocidade do ar e das temperaturas dos escoamentos de ar e hidrogênio, fixada a velocidade da corrente de hidrogênio. Para esta proposta, considera-se que a ignição ocorre no ponto onde a variação da fração mássica de OH ao longo da direção axial é máxima. Seguindo este critério estimaram-se os comprimentos de ignição fornecidos na Tabela 3, onde são comparados com aqueles obtidos por Figueira da Silva et al. (1993). Com exceção para o caso onde o efeito da dissipação viscosa se torna importante, todas as outras situações concordam bem. Deve-se salientar que o trabalho destes autores foi realizado utilizando aproximação de camada limite estacionária.

Tabela 3. Valores estimados da distância de ignição.

Caso	T_∞ (K)	$T_{-\infty}$ (K)	M_∞	$M_{-\infty}$	x^*_{ig}	x^*_{ig}
					Figueira da Silva et al. (1993)	
1	1200	1200	4,43	1,15	15	13
2	1200	1200	1,15	1,15	3	5
3	1200	1200	6,0	1,15	20	22
4	1200	1200	8,0	1,15	15	7
5	1200	1200	4,43	2,07		15
6	1400	1200	4,12	1,15	8	5
7	1200	1400	4,43	1,07	12	12

5. Conclusão

O estudo de escoamentos reativos a altas velocidades é um problema bastante complexo, envolvendo conhecimentos na área de cinética química, termodinâmica e dinâmica dos fluidos, além de exigir técnicas de simulação precisas. Os resultados obtidos concordaram bem qualitativamente e quantitativamente com aqueles obtidos por Figueira da Silva et al. (1993) e Nishioka et al. (1995). Deve-se, porém, considerar que estes autores utilizaram formulação do tipo camada limite em estado estacionário, enquanto que neste trabalho o problema foi simulado utilizando as equações de conservação transientes bidimensionais em suas formas conservativas.

A implementação do método numérico foi um trabalho bastante árduo, exigindo boa parte do tempo dedicado à execução deste trabalho, porém, o código numérico obtido mostrou-se robusto e genérico, possibilitando a simulação de camadas de misturas reativas transientes, em desenvolvimento espacial, com qualquer mecanismo reacional, para quaisquer condições de entrada desejadas. Deve-se salientar que método espectral é uma técnica relativamente nova na simulação de escoamentos reativos, dentro de nossos conhecimentos o trabalho aqui proposto é inédito. Com relação às sugestões para trabalhos futuros, é interessante introduzir na modelagem do problema a terceira dimensão, o que permitirá simular os efeitos da turbulência tridimensional sobre a estrutura do escoamento. Pode-se ainda experimentar a introdução de modelos de turbulência ou modelagem sub-malha.

6. Referências Bibliográficas

- Canuto, C., Hussaini, M. Y., Quarteroni, A. and Zang, T. A.. Spectral Methods in Fluid Dynamics. Springer-Verlag, 1988.
- Figueira da Silva, L. F., Deshaies, B., Champion, M and Rene-Corail, M.. Some specific aspects of combustion in supersonic H₂-air laminar mixing layers. *Combustion Science and Technology*, 89, 317-333, 1993.
- Grosch, C. E. and Jackson, T. L.. Ignition and structure of a laminar diffusion flame in a compressible mixing layer with finite rate chemistry. *Phys. Fluids*, 3(12), 3087-3097, 1991.
- Im, H. G. and Bechold, J. K.. Analysis of thermal ignition in supersonic flat plate boundary layers. *Journal Fluid Mech.*, 249, 99-120, 1993.
- Im, H. G., Helenbrook, B. T., Lee, S. R. and Law, C. K.. Ignition in the supersonic hydrogen/air mixing layer with reduced reaction mechanisms. *Journal Fluid Mech.*, 322, 275-296, 1996.
- Jackson, T. L. and Hussaini, M. Y.. An asymptotic analysis of supersonic reacting mixing layers. *Combustion Science and Technology*, 57, 129-141, 1988.
- Kee, R. J., Rupley, F. M. and Miller, J. A.. Chemkin-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics. *SANDIA REPORT*, SAND89-8009B UC706. 1989.
- Liñán, A. and Crespo, A.. An asymptotic analysis of unsteady diffusion flames for large activation energies. *Combustion Science and Technology*, 14, 95-110, 1976.
- Nishioka, M. and Law, C. K.. A numerical study of ignition in the supersonic hydrogen/air laminar mixing layer. *AIAA Paper* 95-0377, 1995.
- René-Corail, M.. *Etude Numérique d'une Couche de Mélange Supersonique d'hydrogène et Air: Conditions d'Allumage et Structure de la Combustion*. E.N.S.M.A. et Faculté des Sciences Fondamentales et Appliquées. Thèse de Docteur, 1995.

NUMERICAL SIMULATION OF SUPERSONIC H₂-AIR UNSTEADY MIXING LAYER: IGNITION CONDITIONS AND FLAME STRUCTURE

Adriana Ferreira de Faria

Uniminas – União Educacional Minas Gerais

Uberlândia, M.G., Brazil

affaria@uniminas.br

Milton Biage

Federal University of Uberlândia

Department of Mechanical Engineering

Paulo L. S. Júnior

Uniminas – União Educacional Minas Gerais

Abstract. Fundamental research on supersonic combustion has been conducted in response to the interest in the development of scramjet engine and the scram accelerator. The high speed associated with the supersonic flow implies short residence times for ignition to be effected. This is the major perceived difficulty in the development of scramjet technology. The other hand, an interesting recent theoretical result in the study of high speed chemically reacting mixing layers is that the significant amount of viscous heating can greatly facilitate the reaction rate and thereby the ignition event. The objective of this investigation is the numerical simulation of ignition in supersonic nonpremixed H₂-Air unsteady mixing layer with detailed transport and chemical reaction mechanisms, using the conservative form of the complete conservation equations. To solve the problem it was used the spectral collocation technique.

Key Words: Combustion, Supersonic Flow, Mixing Layer.