



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
MECÂNICA**

**CARACTERIZAÇÃO DE PARÂMETROS DE ONDA DE CHOQUE
E IGNIÇÃO TÉRMICA EM TUBO DE CHOQUE USANDO
SIMULAÇÃO NUMÉRICA**

CLAUDIO MÁRCIO SANTANA

Belo Horizonte, 14 de dezembro de 2018

CLAUDIO MÁRCIO SANTANA

**CARACTERIZAÇÃO DE PARÂMETROS E IGNIÇÃO TÉRMICA
DE ONDA DE CHOQUE EM TUBO DE CHOQUE USANDO
SIMULAÇÃO NUMÉRICA**

Trabalho de Tese de Doutorado apresentado ao Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de
Minas Gerais, como requisito para obtenção do título de Doutor em
engenharia Mecânica.

Área de concentração: Energia e Sustentabilidade.

Orientador: Prof. Dr. Jose Eduardo Mautone Barros.
Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG.

Belo Horizonte,
Escola de Engenharia da UFMG
2018

Santana, Claudio Márcio.

S232c

Caracterização de parâmetros e ignição térmica de onda de choque em tubo de choque usando simulação numérica [manuscrito] / Claudio Márcio Santana. – 2018.

xvi,127 f., enc.: il.

Orientador: José Eduardo Mautone Barros.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Minas Gerais,
Escola de Engenharia.

Apêndices: f. 109 - 127.

Bibliografia: f. 105 - 108.

1. Engenharia mecânica - Teses. 2. Combustão - Teses.
3. Choque (Mecânica) - Teses. 4. Automóveis – Ignição – Teses.

I. Barros, José Eduardo Mautone. II. Universidade Federal de Minas Gerais. Escola de Engenharia. III. Título.

CDU: 621(043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

PROGRAMA DE POS-GRADUAÇÃO EM

ENGENHARIA MECÂNICA

Av. Antônio Carlos, 6627 - Campus Universitário

31270-901 - Belo Horizonte - MG

Tel. :+55 31 3409.5145

E-mail: cpgmec@demec.ufmg.br

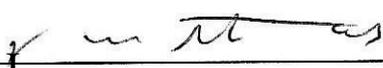
**"CARACTERIZAÇÃO DE PARÂMETROS DE ONDA DE CHOQUE E
IGNIÇÃO TÉRMICA EM TUBO DE CHOQUE USANDO
SIMULAÇÃO NUMÉRICA "**

CLAUDIO MARCIO SANTANA

Tese submetida à Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de PósGraduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Minas Gerais, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de "Doutor em Engenharia Mecânica", na área de concentração de "ENERGIA E SUSTENTABILIDADE".

Tese aprovada no dia 17 de dezembro de 2018.

Por:



Prof. José Eduardo Mautone Barros

Orientador - Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG

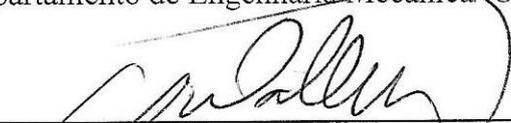


Prof. Sérgio de Moraes Harriot

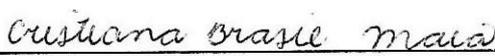
Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais



Prof. Juan Carlos Horta Gutiérrez
Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG



Prof. Juan Canellas Bosch Neto
Universidade Federal de São João Del-Rei



Prof.ª Cristiana Brasil Maia
Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais

AGRADECIMENTOS

Seguem meus sinceros agradecimentos às pessoas que se fizeram presentes na condução desse trabalho:

À minha esposa Alice e meu filho Guilherme pela paciência.

À minha mãe Maria Piedade e minhas irmãs Patrícia, Magda e Janaina pelo apoio.

Ao professor Mautone pela sabedoria nas orientações, pelo tempo dedicado no acompanhamento e análise dos testes experimentais e simulações.

À Deus pelas vitórias alcançadas durante a vida.

RESUMO

O presente trabalho consistiu em desenvolver uma rotina computacional para previsão e caracterização dos parâmetros de tempo de atraso de ignição, pressão, velocidade de reação química, velocidade de propagação, número de Mach, temperatura da chama, massa específica dos produtos gerados na combustão e energia liberada no processo de combustão da onda de choque em um tubo de choque. A modelagem matemática considerou a região de alta pressão do tubo de choque conhecida como seção conduzida. Foi utilizado o compilador de códigos *Lazarus* para geração das malhas triangulares não estruturadas e implementação das rotinas computacionais para simular a propagação de ondas de choque no interior do tubo de choque. A modelagem matemática utilizou os parâmetros geométricos do tubo de choque do laboratório de combustão da Universidade Federal de Minas Gerais e foi baseada somente no deslocamento da onda de choque após rompimento do diafragma. Resultados dos ensaios experimentais realizados por Santana (2013) com etanol, Diesel e biodiesel foram comparados e correlacionados com trabalhos realizados por outros autores para gerar dados de entrada para simulação. Esses dados foram utilizados para simular o comportamento da onda de choque no tubo de choque. O trabalho teve como objetivo principal o desenvolvimento de rotinas computacionais para caracterizar os parâmetros de onda de choque sem e com combustão, validar os ensaios experimentais realizados no tubo de choque do laboratório de combustão da Universidade Federal de Minas Gerais conduzidos por Santana (2013), Valente (2016) e Guimarães (2016). Os resultados alcançados na simulação foram confrontados com testes experimentais e foram considerados satisfatórios, uma vez que estão na mesma ordem de grandeza dos resultados encontrado nos testes experimentais realizados por Santana (2013) e outros trabalhos. Pode-se afirmar que é possível realizar medições de tempos de atraso de ignição de combustíveis utilizando o tubo de choque do laboratório de combustão da Universidade Federal de Minas Gerais.

Palavra-chave: Tubo de choque, Onda de Choque, Combustão, Tempo de atraso de ignição.

ABSTRACT

The present work consisted in developing a computational routine to predict and characterize the parameters of ignition delay time, shock wave pressure, chemical reaction velocity, shock wave propagation velocity, Mach number, flame temperature, density of the products generated in the combustion and energy released in the combustion process of the shock wave in a shock tube. Mathematical modeling considered the high-pressure region of the shock tube known as the conducted section. The *Lazarus* code compiler was used to generate unstructured triangular meshes and implementation of computational routines to simulate the propagation of shock waves inside the shock tube. The mathematical modeling used the geometric parameters of the shock tube of the combustion laboratory of the Federal University of Minas Gerais and was based only on the displacement of the shock wave after rupture of the diaphragm. Results of the experimental tests carried out by Santana (2013) on ethanol, diesel and biodiesel were compared and correlated with work done by other authors to generate input data for simulation. These data were used to simulate the behavior of the shock wave in the shock tube. The main objective of this work was the development of computational routines to characterize the shock wave parameters without and with combustion, to validate the experimental tests performed in the combustion tube of the combustion laboratory of the Federal University of Minas Gerais conducted by Santana (2013). Valente (2016) and Guimaraes (2016). The results obtained in the simulation were confronted with experimental tests and were considered satisfactory, since they are in the same order of magnitude of the results found in the experimental tests performed in the shock tube by Santana (2013) and other works. It can be stated that it is possible to carry out measurements of ignition delay times of fuels using shock tube from the combustion laboratory of the Federal University of Minas Gerais.

Keyword: Shock tube, Shockwave, Combustion, Ignition delay time.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Atraso da ignição medido no motor CFR.	8
Figura 2 - Números de cetano medido no motor CFR.....	8
Figura 3 - Atraso da ignição medido no motor Diesel.....	9
Figura 4 - Atraso da ignição medido no motor Diesel CFR cetano.....	9
Figura 5 - Atraso de ignição <i>T-Fuel</i> medido no tubo de choque.	10
Figura 6 - Localização dos sensores de pressões e sensor de detecção de chama no tubo de choque.....	11
Figura 7 - Tubo de choque do laboratório da Universidade do Texas A&M.	13
Figura 8 - Malhas estruturadas e região de localização do diafragma.....	14
Figura 9 - Configuração do tubo de choque e condições de contorno para transferência de calor.....	15
Figura 10 - Campos de fluxos simulados no tubo de choque antes do rompimento do diafragma.....	19
Figura 11 - Campos de fluxos simulados no tubo de choque após o rompimento do diafragma.	19
Figura 12 - Campos de fluxos simulados no tubo de choque reflexão da onda de choque.	19
Figura 13 - Pressão e número de Mach distribuído ao longo do eixo do tubo para: (a) T=1, (b) T=2, (c) T=3, (d) T=4, (e) T=5, (f) T=6, (g) T=7, (h) T=8, (k) T=9, (l) T=10, (i) T=11 e (j) T=12.	24
Figura 14 - Pressão e número de Mach distribuído ao longo do eixo do tubo para: (a) T=1, (b) T=2, (c) T=3, (d) T=4, (e) T=5, (f) T=6, (g) T=7, (h) T=8, (k) T=9, (l) T=10, (i) T=11 e (j) T=12.	25
Figura 15 - Exemplo de malha ortogonal.	27
Figura 16 - Exemplo de malha não ortogonal.	28
Figura 17 - Exemplo de uma malha 2D, estruturada, não ortogonal.....	29
Figura 18 - Malhas estruturadas tipo H, tipo O e tipo C.....	30
Figura 19 - Malha estruturada por blocos, com 3 blocos.....	30
Figura 20 - Malha estruturada por blocos, com 5 blocos.....	31
Figura 21 - Malhas com sobreposição de blocos.....	31
Figura 22 - tubo de choque simples.....	33
Figura 23 - Representação das seções do tubo de choque antes da ruptura do diafragma.	34
Figura 24 - Propagação da onda de choque e expansão após ruptura do diafragma do tubo de choque.....	34
Figura 25 - Formação da superfície de contato imediatamente após ruptura do diafragma.....	34
Figura 26 - Condições do tubo de choque antes da ruptura do diafragma.....	35
Figura 27 - Comportamento da pressão e da temperatura no tubo de choque após ruptura do diafragma.....	36
Figura 28 - Condições do tubo de choque após reflexão da onda de choque.....	38
Figura 29 - Vista tubo de choque.....	48
Figura 30 - Módulo do tubo de choque.....	49
Figura 31 - localizações dos sensores de pressão e diafragma de rompimento.....	49
Figura 32 - Localização dos sensores P2 e P1 em relação ao diafragma no tubo de choque.....	50
Figura 33 - Teste sem combustão destacando o movimento da onda de choque.....	50
Figura 34 - Superfícies de rompimento do diafragma, eixo, parede superior e parede lateral da seção conduzida do tubo de choque.....	55
Figura 35 - Posição das células da região de rompimento do diafragma, paredes laterais, eixo e parede superior.....	56
Figura 36 - Identificação das células fantasmas da malha.....	56
Figura 37 - Vista geral do tubo de choque.....	64
Figura 38 - Manta de aquecimento e injetor de combustível.....	65
Figura 39 - localizações dos sensores de pressão, diafragma e injetor de combustível.....	65

Figura 40 - Teste com Diesel S25 em um intervalo de 30 milissegundos.....	66
Figura 41 - Teste com Diesel S25 no intervalo de 1,5 milissegundos.....	67
Figura 42 - Teste com Diesel de referência no intervalo de 1,5 milissegundos.	67
Figura 43 - Teste com etanol aditivado no intervalo de 1,5 milissegundos.....	68
Figura 44 - Teste com biodiesel B100 no intervalo de 1,5 milissegundos.	68
Figura 45 – Massa específica adimensional do choque sem combustão 4 milissegundos após rompimento do diafragma.....	70
Figura 46 – Pressão adimensional da onda de choque sem combustão 4 milissegundos após rompimento do diafragma.....	70
Figura 47 – Componente horizontal da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 4 milissegundos após rompimento do diafragma.	71
Figura 48 – Componente vertical da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 4 milissegundos após rompimento do diafragma.	72
Figura 49 – Número de Mach adimensional do choque sem combustão 4 milissegundos após rompimento do diafragma.....	72
Figura 50 – Temperatura adimensional do choque sem combustão 4 milissegundos após rompimento do diafragma.....	73
Figura 51 – Energia adimensional do choque sem combustão 4 milissegundos após rompimento do diafragma.....	74
Figura 52 – Massa específica adimensional do choque sem combustão 6 milissegundos após rompimento do diafragma.....	74
Figura 53 – Pressão adimensional da onda de choque sem combustão 6 milissegundos após rompimento do diafragma.....	75
Figura 54 – Componente horizontal da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 6 milissegundos após rompimento do diafragma.	76
Figura 55 – Componente vertical da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 6 milissegundos após rompimento do diafragma.	76
Figura 56 – Número de Mach adimensional do choque sem combustão 6 milissegundos após rompimento do diafragma.....	77
Figura 57 – Temperatura adimensional do choque sem combustão 6 milissegundos após rompimento do diafragma.....	78
Figura 58 – Energia adimensional do choque sem combustão 6 milissegundos após rompimento do diafragma.....	79
Figura 59 – Massa específica adimensional do choque sem combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.....	79
Figura 60 – Pressão adimensional da onda de choque sem combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.....	80
Figura 61 – Componente horizontal da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.	81
Figura 62 – Componente vertical da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.	81
Figura 63 – Número de Mach adimensional do choque sem combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.....	82
Figura 64 – Temperatura adimensional do choque sem combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.....	83
Figura 65 – Energia adimensional do choque sem combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.....	84

Figura 66 – Massa específica adimensional do choque sem combustão 10 milissegundos após rompimento do diafragma.	84
Figura 67 – Pressão adimensional da onda de choque sem combustão 10 milissegundos após rompimento do diafragma.	85
Figura 68 – Componente horizontal da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 10 milissegundos após rompimento do diafragma.	86
Figura 69 – Componente vertical da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 10 milissegundos após rompimento do diafragma.	86
Figura 70 – Número de Mach adimensional do choque sem combustão 10 milissegundos após rompimento do diafragma.	87
Figura 71 – Temperatura adimensional do choque sem combustão 10 milissegundos após rompimento do diafragma.	88
Figura 72 – Energia adimensional do choque sem combustão 10 milissegundos após rompimento do diafragma.	88
Figura 73 - Localização do sensor P1 em relação à membrana no tubo de choque.	89
Figura 74 - localização do sensor P1 na malha para simular a passagem da onda de choque.	89
Figura 75 - Parâmetros adimensionais de pressão e temperatura da onda de choque do Diesel com combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.	90
Figura 76 - Interface gráfica do compilador da temperatura em um instante anterior ao processo de combustão e após queima da mistura combustível/ar.	91
Figura 77 – Comparativo dos parâmetros adimensionais pressão e temperatura das simulações do Diesel com e sem combustão nas células próximas a parede do tubo.	91
Figura 78 - Resultados de simulação do sensor de pressão do Diesel com combustão em função do tempo.	93
Figura 79 - Comparativo dos tempos de atraso de ignição simulados nesse trabalho com os ensaios experimentais realizados por Santana (2013) com Diesel no intervalo de 2 milissegundos.	93
Figura 80 - Parâmetros adimensionais de pressão e temperatura da onda de choque do biodiesel com combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.	94
Figura 81 – Comparativo dos parâmetros adimensionais pressão e temperatura das simulações do biodiesel com e sem combustão nas células próximas a parede do tubo.	95
Figura 82 - Resultados de simulação do sensor de pressão do biodiesel com combustão em função do tempo.	96
Figura 83 - Comparativo dos tempos de atraso de ignição simulados nesse trabalho com os ensaios experimentais realizados por Santana (2013) com biodiesel no intervalo de 2 milissegundos.	97
Figura 84 - Parâmetros adimensionais de pressão e temperatura da onda de choque com etanol.	98
Figura 85 – Comparativo dos parâmetros adimensionais pressão e temperatura das simulações do biodiesel com e sem combustão nas células próximas a parede do tubo.	99
Figura 86 - Resultados de simulação do sensor de pressão do etanol com combustão em função do tempo.	100
Figura 87 - Comparativo dos tempos de atraso de ignição simulados nesse trabalho com os ensaios experimentais realizados por Santana (2013) com etanol no intervalo de 2 milissegundos.	101

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Tempos de atraso de ignição medidos x número de cetano das misturas dos combustíveis.	12
Tabela 2 - Tempos de atraso de ignição medidos das misturas óleo Diesel B7 com etanol.....	12
Tabela 3 - Testes realizados nas condições de choque refletido: $698\text{ K} < T5 < 2528\text{ K}$ e $P5$ de 1 atm	20
Tabela 4 - Testes realizados nas condições de choque refletido: $683\text{ K} < T5 < 1955\text{ K}$ e $9.5\text{ atm} < P5 < 14.5$ atm	21
Tabela 5 - Testes realizados nas condições de choque refletido: $681\text{ K} < T5 < 1978\text{ K}$ e $P5$ de 1 atm	22
Tabela 6 – Tempos de atraso de ignição medidos por Santana (2013).....	69
Tabela 7 – Tempos de atraso de ignição medidos, simulados e diferença percentual.....	101

LISTA DE SÍMBOLOS

c_{min} – Menor distância entre os centroides de duas células adjacentes [m];

CO – Monóxido de carbono;

C_p – Calor específico a pressão constante [KJ/kg.K];

C_v – Calor específico a volume constante [KJ/kg.K];

$D(Q)$ – Dissipação artificial;

$d^{(2)}(Q)$ – Operador Laplaciano;

$d^{(4)}(Q)$ – Operador harmônico;

E – Energia [J];

FA_{est} – Razão combustível/ar estequiométrico;

H – Entalpia [KJ];

h – Entalpia específica [KJ/kg];

l_{min} – Menor lado do triângulo [m];

Ma – Número de Mach;

N_{faces} – Número de faces da célula;

nb – Células vizinhas;

Nox – Oxidos de nitrogenio;

P – Pressão [Pa];

$P1_{Dim}$ – Pressão dimensional das células não queimadas [N/m²];

$P1_{Adim}$ – Pressão adimensional;

$P2_{Dim}$ – Pressão dimensional das células queimadas [N/m²];

$Q[e]$ – Energia adimensional das células queimadas;

$Q[Ro]$ – Massa específica adimensional;

$Q[Rou]$ – Componente adimensional horizontal da velocidade;

$Q[Rov]$ – Componente adimensional vertical da velocidade;

R – Constante do gás [KJ/kg. K];

RO_{doo} – Massa específica infinita [kg/m³];

T – Temperatura do gás [K];

$T1_{Dim}$ – Temperatura dimensional das células não queimadas [K];

$T2_{Dim}$ – Temperatura dimensional das células queimadas [K];

T_{Adim} – Temperatura adimensional;

T_{doo} – Temperatura infinita [K];

$X_{biodiesel}$ – Fração molar do biodiesel na mistura;
 X_{Diesel} – Fração molar do Diesel na mistura;
 X_{O_2} – Concentração de oxigênio;
 x_k – Vértice de triângulos da malha;
 y_k – Vértice de triângulos da malha;
 a – Velocidade do som no meio [m/s];
 a_{oo} – Velocidade de propagação do som no meio [m/s];
 ρ – Massa específica [kg/m³];
 v – velocidade [m/s];
 τ – Tempo de atraso de ignição em [μ s];
 $\tau_{ignmistura}$ – Tempo de atraso de ignição da mistura Diesel e biodiesel [μ s];
 $\tau_{ignDiesel}$ – Tempo de atraso de ignição do Diesel [μ s];
 $\tau_{ignbiodiesel}$ – Tempo de atraso de ignição do biodiesel [μ s];
 γ – Razão de calores específicos;
 \emptyset – Razão de equivalência combustível / ar;
 Δt – Passo de tempo [s];
 Δs – Passo de espaço [m];

LISTA DE SIGLAS

- B5E0 – Óleo diesel, 5% de biodiesel e 0% de etanol;
B5E10 – Óleo diesel, 5% de biodiesel e 10% de etanol;
B5E15 – Óleo diesel, 5% de biodiesel e 15% de etanol;
B5E20 – Óleo diesel, 5% de biodiesel e 20% de etanol;
B20E0 – Óleo diesel, 20% de biodiesel e 0% de etanol;
B20E15 – Óleo diesel, 20% de biodiesel e 15% de etanol;
B5E20 – Óleo diesel, 5% de biodiesel e 20% de etanol;
B5E25 – Óleo diesel, 5% de biodiesel e 25% de etanol;
B5E30 – Óleo diesel, 5% de biodiesel e 30% de etanol;
B5E5 – Óleo diesel, 5% de biodiesel e 5% de Etanol;
B7E0 – Óleo diesel, 7% de biodiesel e 0% de etanol;
B7E10 – Óleo diesel, 7% de biodiesel e 10% de etanol;
B7E15 – Óleo diesel, 7% de biodiesel e 15% de etanol;
B7E20 – Óleo diesel, 7% de biodiesel e 20% de etanol;
B7E5 – Óleo diesel, 7% de biodiesel e 5% de etanol;
CFL – número de Courant;
PCI – Poder calorífico inferior [KJ/kg.];
PUC Minas – Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais;
T0 – zero% de *T-Fuel*, 100% *U-Fuel*;
T15 – 15% de *T-Fuel*, 85% *U-Fuel*;
T25 – 25% de *T-Fuel*, 75% *U-Fuel*;
T35 – 35% de *T-Fuel*, 65% *U-Fuel*;
T45 – 45% de *T-Fuel*, 55% *U-Fuel*;
T65 – 65% de *T-Fuel*, 35% *U-Fuel*;
T75 – 75% de *T-Fuel*, 25% *U-Fuel*;
T95 – 95% de *T-Fuel*, 5% *U-Fuel*;
T100 – 100% de *T-Fuel*, 0% *U-Fuel*;
UFMG – Universidade Federal de Minas Gerais;

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
1.1. Objetivo geral.....	1
1.2. Objetivos específicos.....	2
1.3. Relevância do trabalho.....	2
1.4. Organização do documento.....	3
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	4
2.1. Trabalhos realizados em tubo de choque.....	4
2.2. Trabalhos experimentais realizados no tubo de choque do laboratório de combustão da UFMG.....	7
2.3. Trabalhos realizados no tubo de choque com modelagem e simulação numérica.....	13
2.4. Malhas computacionais.....	26
2.4.1. Malhas ortogonais e malhas não ortogonais.....	26
2.4.2. Malhas estruturadas e malhas não estruturadas.....	28
3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	33
3.1. Teoria do Tubo de Choque.....	33
3.2. Simulação de escoamento transiente utilizando as equações de Euler.....	39
4. METODOLOGIA	48
4.1. Tubo de choque.....	48
4.2. Equações adimensionais.....	51
4.3. Construção das malhas.....	54
4.4. Condições de contorno.....	56
4.5. Cálculo das propriedades do escoamento antes e após o rompimento do diafragma.....	57
4.6. Análise de ignição térmica.....	59
4.7. Critério de ignição térmica.....	60
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES	64
5.1. Análise dos testes experimentais realizados no tubo de choque, Santana (2013).....	64
5.2. Análise dos ensaios de simulação dos parâmetros da onda de choque sem combustão.....	69
5.3. Análise dos ensaios de simulação com combustão.....	89
6. CONCLUSÕES	103
7. SUGESTÃO PARA TRABALHOS FUTUROS	104
8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	105
9. APÊNDICE A – Rotinas implementadas no ambiente integrado de programação <i>Lazarus</i>	109
9.1. Rotina computacional implementada para definição de classes e constantes do programa.....	109
9.2. Rotina computacional implementada para construção da malha retangular.....	113
9.3. Rotina computacional implementada para construção e leitura das coordenadas dos pontos da malha triangular.....	114
9.4. Rotina computacional implementada para calcular as coordenadas dos centroides das células da malha.....	116
9.5. Rotina computacional implementada para calcular a distancia dos centroides das células da malha.....	117
9.6. Rotina computacional implementada para calcular o volume das células da malha.....	117
9.7. Rotina computacional implementada para calcular o gradiente de massa específica.....	117
9.8. Rotina computacional implementada para cálculo da pressão nas células.....	119
9.9. Rotina computacional implementada para cálculo do número de Mach das células.....	119
9.10. Rotina computacional implementada para cálculo do tempo de passo.....	120
9.11. Rotina computacional implementada para cálculo das propriedades dos fluxos nas células na direção horizontal.....	121
9.12. Rotina computacional implementada para cálculo das propriedades dos fluxos nas células fantasmas na direção horizontal.....	121

9.13. Rotina computacional implementada para cálculo das propriedades dos fluxos nas células na direção vertical.	122
9.14. Rotina computacional implementada para cálculo das propriedades dos fluxos nas células fantasmas na direção vertical.	122
9.15. Rotina computacional implementada para cálculo do operador laplaciano.	123
9.16. Rotina computacional implementada para cálculo operado bi harmônico.....	123
9.17. Rotina computacional implementada para cálculo da dissipação artificial.....	124
9.18. Rotina computacional implementada para cálculo Integração numerica da equação de Euler	125
9.19. Rotina computacional implementada para criterio de ignição.	126

1. INTRODUÇÃO

Em um esforço para melhorar a eficiência energética extraída da queima de combustíveis e reduzir as emissões de CO, NO_x, aldeídos e hidrocarbonetos produzidas por essa queima, têm sido feitas pesquisas relacionadas com o desenvolvimento e implementação de novas tecnologias para estudo da combustão. Esses estudos envolvem a determinação e caracterização de parâmetros relacionados com o processo de ignição dos combustíveis. A ignição da mistura ar combustível pode ser quantificada pelos seguintes parâmetros: tempo de atraso de ignição, pressão da onda de choque, temperatura da chama, massa específica da mistura dos produtos da combustão, velocidade de reação química, velocidade de propagação da onda de choque e energia liberada no processo de combustão.

Nos últimos anos a simulação numérica se tornou uma grande aliada dos procedimentos experimentais, principalmente no que se refere aos custos dos testes experimentais. Para que simulações sejam confiáveis é necessário transformar as características físicas do objeto de estudo em um modelo matemático. Nessas simulações devem ser consideradas as complexidades dos sistemas e a combinação dos diversos fenômenos físicos envolvidos.

Em trabalhos de simulação computacional, o uso de malhas é importante no que se refere à precisão alcançada dos resultados simulados computacionalmente com os testes experimentais. Malhas são estruturas geométricas simples como triângulos ou retângulos que servem de modelo para caracterizar um determinado fenômeno físico. A escolha de uma malha depende dos fatores desempenho computacional e influenciam os resultados da simulação. Quanto maior a área coberta por cada elemento da malha, menos elementos são necessários para processar a simulação e mais rápido será o processo. Quanto menores os elementos de uma malha, mais preciso será o resultado da simulação, porém com custo computacional maior. Nesse foi desenvolvido de uma rotina computacional no ambiente integrado de programação *Lazarus* para simular parâmetros de combustão em tubo de choque.

1.1. Objetivo geral.

Este trabalho teve como objetivo geral o desenvolvimento de uma rotina computacional no ambiente integrado de programação *Lazarus* para explicar o comportamento do tempo de atraso de ignição de combustíveis medidos em um tubo de choque pelo autor Santana (2013) com base no sinal de pressão em uma seção do tubo. Para isso, se fez necessária a implementação de uma rotina computacional

para simular o comportamento de ignição do combustível provocado por uma onda de choque gerada na operação do tubo de choque em condições pré-determinadas

1.2. Objetivos específicos.

Implementar uma rotina computacional utilizando malhas triangulares não estruturada sem refinamento de malhas para caracterizar onda de choque após rompimento do diafragma em diversas regiões do tubo de choque, ao longo do tempo.

Implementar uma rotina computacional para calcular os tempos de atrasos de ignição dos combustíveis, para isso foi utilizando o mecanismo global de ignição térmica.

;

analisar especificamente a ignição da mistura ar/combustível dentro do tubo de choque após o rompimento do diafragma com a quantificação da temperatura na ignição, da temperatura adiabática de chama e da determinação do tempo de atraso de ignição na condição de cada teste.

A hipótese a ser confirmada é que a ignição ocorre em algumas regiões do tubo durante o deslocamento da onda de choque, assim o sensor de pressão localizado no final da seção de testes, seção conduzida, deve sentir o aumento de pressão causado pela ignição da mistura ar/combustível somente quando a onda chegar até a sua zona de medida. Os tempos de atraso medido apresentados na literatura são de medição em tubos de choque de menor diâmetro e baseados na emissão de luz pela zona de ignição. O tubo de choque usado tem várias finalidades que exigem um maior diâmetro que simula condições mais próximas das encontradas em motores de combustão interna. Assim, por esta hipótese, os tempos de atrasos de ignição medidos devem ter o tempo químico de ignição somado ao tempo de deslocamento da onda de pressão até o sensor.

1.3. Relevância do trabalho.

O ineditismo desse trabalho em relação aos anteriores é que este vai contemplar uma análise mais detalhada dos parâmetros relacionados a propagação de onda de choque vinculados aos aspectos de ignição térmica no processo de combustão. A grande maioria dos trabalhos realizados na área de tubos de choques apresentam simulações sem combustão e utilizam programas comerciais de simulação de escoamento. Esse trabalho foi desenvolvido em linguagem Pascal orientada a objetos

com ferramentas abertas e será útil para trabalhos futuros em combustão em alta velocidade e com a presença de ondas de choque.

1.4. Organização do documento.

Este documento foi estruturado em nove capítulos, começando no capítulo um com breve introdução sobre o vínculo que se criou nos últimos anos entre testes experimentais e simulação computacional, objetivos gerais e específicos do trabalho. O capítulo dois apresenta trabalhos experimentais realizados em tubo de choque e simulações numéricas sobre os fenômenos físicos e químicos que ocorrem nesse equipamento e por último apresenta uma revisão bibliográfica detalhada de malhas computacionais e métodos empregados para refinamento de malhas. O capítulo três faz uma abordagem teórica sobre o princípio de funcionamento do tubo de choque e apresenta um conjunto de equações analíticas utilizadas para explicar os fundamentos do tubo de choque. O capítulo quatro apresenta a metodologia desenvolvida no trabalho que consistiu em implementar uma rotina computacional no ambiente integrado de programação *Lazarus* para descrever o comportamento da onda de choque em um tubo de choque. O capítulo cinco apresenta os resultados da simulação numérica. O capítulo seis apresenta as conclusões do trabalho. O capítulo sete apresenta sugestões para trabalhos futuros. O capítulo oito apresenta a lista as referências bibliográficas. O capítulo nove apresenta os apêndices, que é composto pelas rotinas computacionais implementadas em linguagem Pascal orientada a objetos.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo são apresentados os estudos referentes a testes experimentais e ensaios de simulação de tempo de atraso de ignição em tubo de choque, estudos numéricos para simular fluxos de ondas choque não reativas e reativas e estudos numéricos para resolver as equações de Euler envolvendo ondas de choque em um tubo de choque.

2.1. Trabalhos realizados em tubo de choque.

Cancino (2009) realizou testes experimentais em tubo de choque para medição de tempo de atraso de ignição e desenvolveu modelos cinéticos para o etanol, iso-octano, n-heptano e tolueno nas condições normalmente encontradas em motores de combustão interna como altas pressões e altas temperaturas. As medições de atraso de ignição foram feitas a fim de fornecer dados para o desenvolvimento e validação de modelos cinéticos detalhados. Para ensaios do etanol com 10 bar de choque incidente e razão ar/combustível 1 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 100 a 1000 microssegundos, para ensaios do etanol com 30 bar e razão ar/combustível 1 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 30 a 1000 microssegundos e para ensaios do etanol com 50 bar e razão ar/combustível 1 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 20 a 1000 microssegundos. Conclui-se que o tempo de atraso de ignição diminui com o aumento da pressão do choque.

McMillan (2004) realizou testes em tubo de choque com objetivo verificar a eficiência de tradutores de pressão revestidos com silicone em ambiente hostil com altas temperaturas e altas pressões e comparou esses resultados com os tradutores de pressão sem qualquer tipo de revestimento nessas mesmas condições de operação. McMillan comparou os números de Mach incidentes obtidos com equações analíticas de gás ideal com a simulação no CHEMKIN e resultados experimentais. O número de Mach experimental apresentou valores 7% menor que o Mach calculado pelas equações analíticas e 9% menor que o Mach teórico simulação no CHEMKIN.

Horning (2001) mediu os tempos de atraso de ignição do propano, n-butano, n-heptano e n-decano. As medições desses tempos foram determinadas a partir do *HC Emission Diagnostics* instalado na parede lateral do tubo de choque que monitorava as emissões de HC, permitindo a determinação mais precisa o tempo de atraso de ignição. Para ensaios do n-heptano com 1 atm. de choque incidente e razão de equivalência 1 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 200 a 300

microssegundos, para ensaios do n-heptano com 2 atm. de choque incidente e razão de equivalência 1 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 100 a 300 microssegundos, para ensaios do n-heptano com 1atm. de choque incidente e razão de equivalência 2 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 100 a 300 microssegundos. Horning conclui que o tempo de atraso de ignição diminui com o aumento da razão de equivalência e pressão.

Hanson (2007) mediu o tempo de atraso de ignição dos combustíveis JET-A, JP-8, n-dodecano e Diesel em alta pressão e baixa temperatura. Os testes foram realizados nas seguintes condições iniciais: temperatura da mistura ar combustível variando de 715 a 1229 K, pressão do choque refletido variando de 17 a 51 atm. razão de equivalência de 0,5 a 1,0 e concentração de oxigênio variando de 10 a 21% em ar sintético. Para ensaios do n-dodecano com 6,7 atm. de choque incidente e razão de equivalência 0,5 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 300 a 1200 microssegundos e para ensaios do n-dodecano com 20 atm. de choque incidente e mesma razão de equivalência foram encontrados tempos de atraso que variaram de 100 a 900 microssegundos.

Campbell et al. (2012) mediram os tempos de atraso de ignição para metil oleato ($C_{19}H_{36}O_2$) e metil linoleato ($C_{19}H_{34}O_2$). Os teste foram realizados nas seguintes condições iniciais: temperatura da onda de choque refletida variando de 1100 a 1400 K, pressões do choque de 3,5 a 7,0 atm. e relação de equivalência entre 0,6 a 2,4. Para ensaios do metil oleato com 7 atm. de choque incidente e razão de equivalência 1,25 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 2000 a 10000 microssegundos e para ensaios do metil linoleato com a mesma pressão e razão de equivalência do metil oleato foram encontrados tempos de atraso que variaram de 1900 a 10000 microssegundos. Em geral observou-se que os tempos de atraso do metil oleato e Metil linoleato apresentou grande semelhança para uma ampla faixa de pressão e razão de equivalência e os valores encontrados variarm de 2000 a 10000 microssegundos.

Dubois et al. (2008) mediram o tempo de atraso de ignição do n-propilciclohexano (C_9H_{18}) em diferentes temperaturas e razões de equivalência do n-propilciclohexano diluídos em Argônio com constante concentração de Oxigênio. Para ensaios com 1% ($C_9H_{18} + O_2$) + 99% de Argônio com razão de equivalência 1,5 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 20 a 900 microssegundos, para ensaios com razão de equivalência de 1 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 20 a 900 microssegundos para ensaios com razão de equivalência de 0,5 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 10 a 900 microssegundos, para ensaios com razão de equivalência de 0,3 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 10 a 300 microssegundos e para ensaios com

razão de equivalência de 0,2 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 10 a 800 microssegundos. Em geral os tempos de atraso de ignição diminuem com a diminuição da razão de equivalência e com o aumento da pressão.

Walton et. al. (2011) mediram o tempo de atraso de ignição do metil butanoate ($C_5H_{10}O_2$) em mistura com ar. Os teste foram realizados nas seguintes condições iniciais: temperatura da onda de choque refletida variando de 935 a 1117 K, pressões do choque de 4,7 a 19,6 atm. e relação de equivalência de 0,3 e 0,4. Para ensaios do metil butanoate com 10 atm. de choque incidente e razão de equivalência 0,3 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 500 a 1100 microssegundos e para razão de equivalência 0,4 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 300 a 1200 microssegundos.

Kumar et. al. (2016) mediram o tempo de atraso de ignição do metil butanoate em mistura com Argônio/Ar. Os teste foram realizados nas seguintes condições iniciais: temperatura da onda de choque variando de 833 a 1112 K, pressões do choque de 15, 30, 45 e 75 bar e relação de equivalência de 0,25, 0,5 e 1. Para ensaios do metil butanoate com 15 bar de choque incidente e razão de equivalência 1 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 300 a 1500 microssegundos, para razão de equivalência 0,5 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 300 a 1200 microssegundos e para razão de equivalência 0,25 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 200 a 1100 microssegundos.

Brunnell J. A. (2015) mediu o tempo de atraso de ignição em uma maquina de compressão rapida do metil pentanoato em mistura com Ar. Os teste foram realizados nas seguintes condições iniciais: temperatura da onda de choque variando de 682 a 1048 K, pressões do choque de 15 e 30 bar e relação de equivalência de 0,25, 0,5 e 1. Para ensaios do metil pentanoato com 30 bar de choque incidente e razão de equivalência 0,25 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 7000 a 30000 microssegundos e para razão de equivalência 0,5 foram encontrados tempos de atraso que variaram de 8000 a 20000 microssegundos.

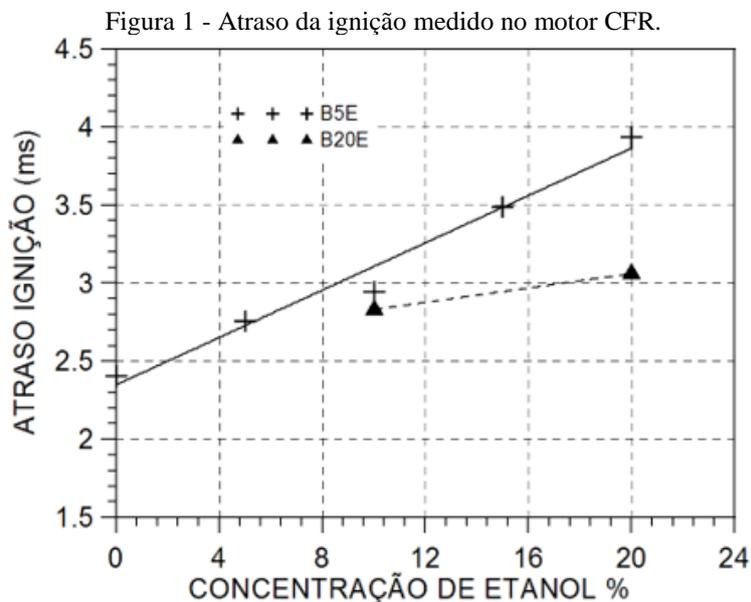
Fikri M., Kalghatgi G. T., Starke R., Roth P. (2017) utilizaram um tubo de choque de alta pressão para determinar os tempos e atraso de ignição de várias misturas estequiométricas de combustíveis afim de validar simulações de atraso de ignição baseados modelos de cinética química. Os combustíveis testados foram: n-heptano (18%), iso-octano (62%) e etanol (20%) bem como n-heptano (20%), tolueno (45%), iso-octano (25%) e di-isobutileno (10%) por volume de liquido. Os testes foram realizados nas seguintes condições: temperaturas de 690 a 1200 K e pressões a 10, 30 e 50 bar.

Os experimentos foram realizados em um tubo de choque com diâmetro interno de 90 mm. Um diafragma de alumínio divide a seção condutora com 6,1 metros da seção conduzida com 6,4 metros de comprimento. Para ensaios da mistura com n-heptano (18%), iso-octano (62%) e etanol (20%) com 10 bar de pressão foram encontrados tempos de atraso que variaram de 200 a 3000 microssegundos, com 30 bar foram encontrados tempos de atraso que variaram de 200 a 8000 microssegundos e com 50 bar foram encontrados tempos de atraso que variaram de 20 a 8000 microssegundos. Para ensaios da mistura com n-heptano (20%), tolueno (45%), iso-octano (25%) e di-isobutileno (10%) com 10 bar de pressão foram encontrados tempos de atraso que variaram de 275 a 4600 microssegundos, com 30 bar foram encontrados tempos de atraso que variaram de 200 a 8300 microssegundos e com 50 bar foram encontrados tempos de atraso que variaram de 200 a 10700 microssegundos. Os dados de tempo de ignição obtidos das misturas foram comparados com os dados resultados relatados na literatura para combustível puro. Este estudo confirma que a autoignição de combustíveis puros difere da das misturas devido acoplamento da cinética química dos vários componentes.

2.2. Trabalhos experimentais realizados no tubo de choque do laboratório de combustão da UFMG.

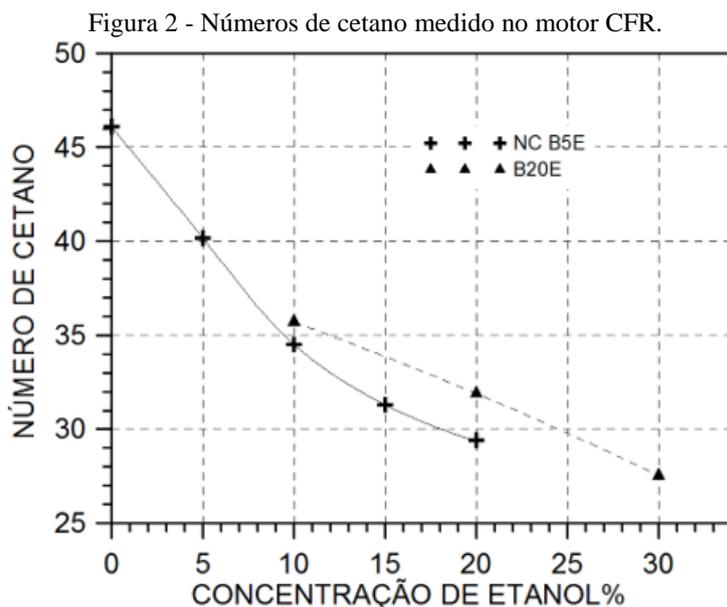
O trabalho de Valente (2016), teve como objetivo desenvolver um método para determinar o número de cetano de misturas de óleo Diesel, biodiesel, etanol e misturas dos combustíveis padrão *T-Fuel* e *U-Fuel* a partir de medições do atraso de ignição em um tubo de choque. Os testes com misturas contendo óleo Diesel, biodiesel e etanol foram realizados em três fases, cada uma em um laboratório distinto. No Núcleo de Ensaio de Combustíveis Automotivos do Laboratório de Máquinas Térmicas da Universidade Federal do Rio de Janeiro determinou-se o número de cetano e o atraso de ignição das misturas de biodiesel B5 com 0, 5, 10, 15, e 20% de etanol (B5E0, B5E5, B5E10, B5E15 e B5E20) e misturas de biodiesel B20 com 0, 10, e 20% de etanol (B20E0, B20E10 e B20E20). No Laboratório de Combustão da Universidade Federal de Minas Gerais, foram realizados testes em um tubo de choque para medição do atraso de ignição de combustíveis padrão para determinação do número de cetano das misturas de biodiesel B7 com 0, 5, 10, 15, e 20% de etanol (B7E0, B7E5, B7E10 B7E15 e B7E20). No Laboratório de Geração de Energia Elétrica da Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais foi medido o atraso de ignição das misturas B7E0, B7E5, B7E10, B7E15, B7E20, B20E0, B20E5, B20E10 B20E15 e B20E20. No Laboratório de Ensaio de Combustíveis da Universidade Federal de Minas Gerais foram caracterizadas todas as misturas, Valente (2016).

A Figura 1 mostra os atrasos de ignição de misturas B5E0, B5E5, B5E10, B5E15, B5E20, B20E10 e B20E20 medido no motor CFR cetano. O atraso de ignição aumenta com o percentual de etanol para todas as misturas e a mistura B20E20 tem atraso de ignição menor que B5E20 devido a maior quantidade de biodiesel na mistura, Valente (2016).



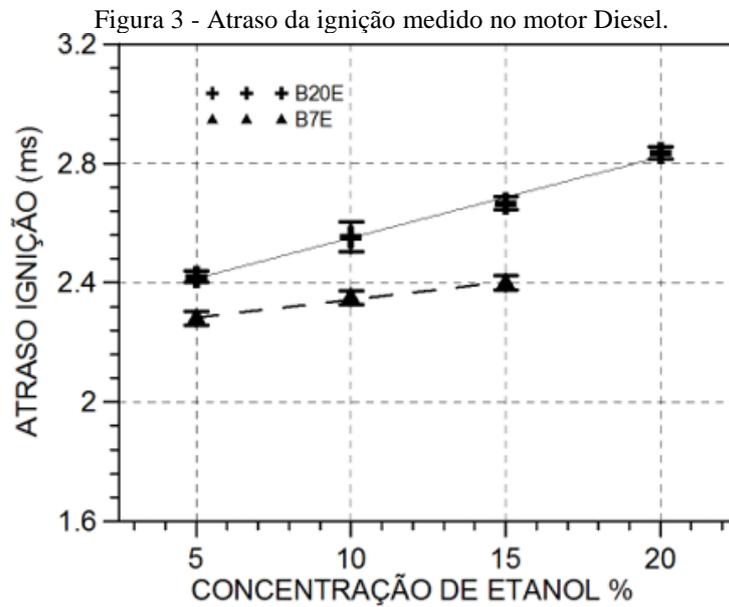
Fonte: Valente (2016).

A Figura 2 mostra os números de cetano de misturas B5E0, B5E5, B5E10, B5E15, B5E20, B20E10, B20E20 e B20E30 medido no motor CFR cetano. O número de cetano reduz com o aumento da concentração de etanol e aumenta com o percentual de biodiesel, Valente (2016).



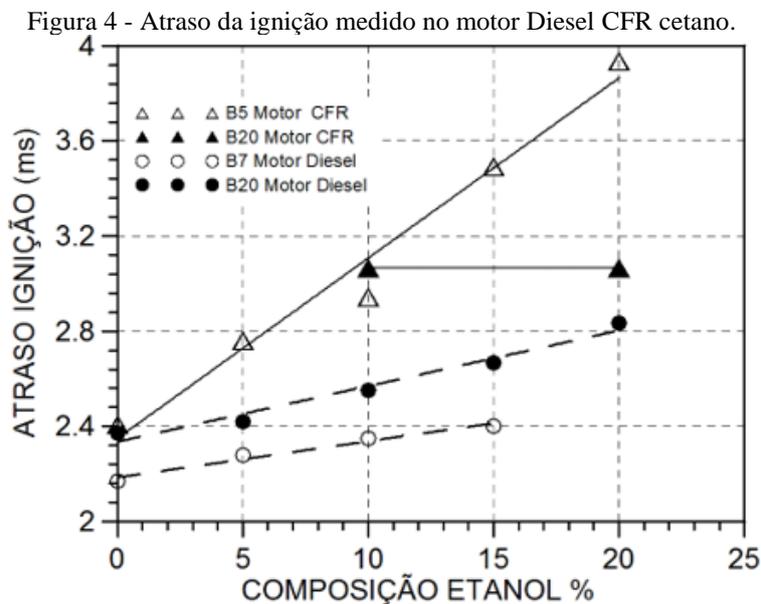
Fonte: Valente (2016).

A Figura 3 mostra os atrasos de ignição de misturas B20E5, B20E10, B20E15, B20E20, B7E5, B7E10 e B7E15 medido no motor Diesel, Valente (2016).



Fonte: Valente (2016).

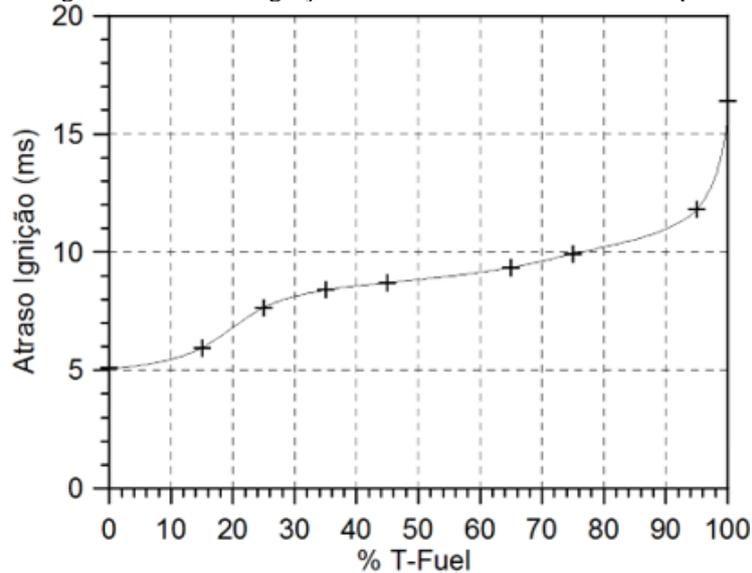
A Figura 4 mostra os atrasos de ignição de misturas de biodiesel e etanol medido no motor Diesel e CFR cetano, Valente (2016).



Fonte: Valente (2016).

A Figura 5 mostra os atrasos de ignição de misturas de combustíveis padrão, *T-Fuel* e *U-Fuel* medido em um tubo de choque, Valente (2016).

Figura 5 - Atraso de ignição *T-Fuel* medido no tubo de choque.



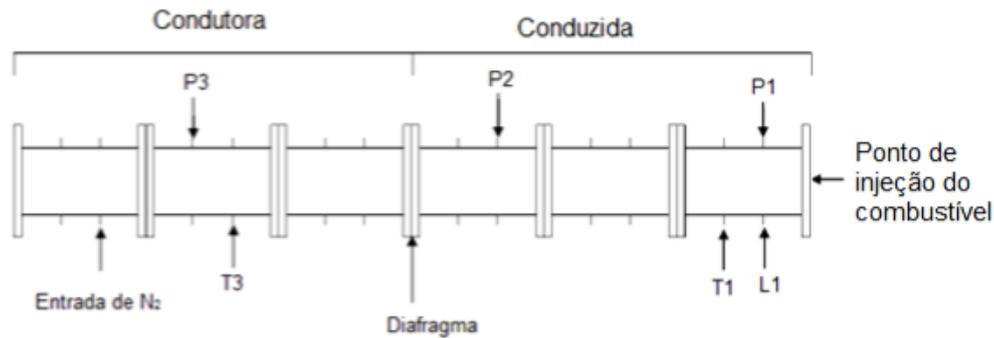
Fonte: Valente (2016).

Este trabalho demonstra que o tempo de atraso de ignição depende do equipamento usado para a combustão, ou seja, o tempo químico para a ignição só é medido em testes onde os fatores de dimensão do tubo e os métodos de detecção de ignição não interferem nos resultados.

O trabalho de Guimarães (2016) teve como objetivo medir o atraso de ignição de combustíveis oxigenados utilizando um tubo de choque, com sensor detector de chama. Os testes foram realizados no tubo de choque do Laboratório de Combustão da Universidade Federal de Minas Gerais. Nesse trabalho foram analisados os atrasos de ignição de 14 tipos de misturas de combustíveis: Diesel puro, misturas de biodiesel B7 com 5, 10, 15, e 20% de etanol, combustíveis padrão puros conhecidos com *T-Fuel* e *U-Fuel*, e misturas de combustíveis padrão *U-Fuel* com proporções de *T-Fuel* de 95, 75, 45, 35, 25 e 15%. Os combustíveis padrões *T-Fuel* e *U-Fuel* são hidrocarbonetos cujos números de cetanos, determinados por Valente (2016), são utilizados como parâmetros de calibração em motores CFR Cetano. Os combustíveis *T-Fuel* e *U-Fuel* usados nos experimentos tinham números de cetanos 75,2 e 19,4 respectivamente. A determinação do número de cetano de um determinado combustível é feita comparando o valor obtido com valores de conhecidos de combustíveis padrões. Por apresentar maior número de cetano o *T-Fuel* possui menor atraso de ignição que o *U-Fuel*, Guimarães (2016).

A figura 6 mostra esquematicamente a localização dos sensores de pressões (P1, P2 e P3), sensor de detecção de chama (L1), a seção condutora e conduzida e os pontos de entrada de nitrogênio na seção condutora e injeção de combustível na seção conduzida, Guimarães (2016).

Figura 6 - Localização dos sensores de pressões e sensor de detecção de chama no tubo de choque.



Fonte: Guimarães 2016.

Os testes foram realizados com combustíveis puros de Diesel, biodiesel, etanol e misturas de combustíveis padrão *T-Fuel* e *U-Fuel*. Todas as misturas foram feitas em proporções mássicas. Foram feitas as seguintes misturas de combustíveis:

- B7E0: 100% de óleo Diesel B7 com 0% de etanol;
- B7E5: 95% de óleo Diesel B7 com 5% de etanol;
- B7E10: 90% de óleo Diesel B7 com 10% de etanol;
- B7E15: 85% de óleo Diesel B7 com 15% de etanol;
- B7E20: 80% de óleo Diesel B7 com 20% de etanol;
- T100: 100% de *T-Fuel* e 0% de *U-Fuel*;
- T95: 95% de *T-Fuel* e 5% de *U-Fuel*;
- T75: 75% de *T-Fuel* e 25% de *U-Fuel*;
- T65: 65% de *T-Fuel* e 35% de *U-Fuel*;
- T45: 45% de *T-Fuel* e 55% de *U-Fuel*;
- T35: 35% de *T-Fuel* e 65% de *U-Fuel*;
- T25: 25% de *T-Fuel* e 75% de *U-Fuel*;
- T15: 15% de *T-Fuel* e 85% de *U-Fuel*;
- T0: 0% de *T-Fuel* e 100% de *U-Fuel*.

O atraso de ignição foi obtido a partir da determinação das pressões medidas no interior do tubo e do momento de início da chama detectado pelo sensor de luminosidade. O atraso de ignição foi medido como o tempo entre o início da onda de choque passando pelo sensor (P1) e o início do aparecimento de luz detectada pelo sensor de chama (L1), Guimarães (2016).

A tabela 1 relaciona os tempos de atraso de ignição medidos com estimativa de número de cetano das misturas dos combustíveis *T-Fuel* e *U-Fuel*, Guimarães (2016).

Tabela 1 - Tempos de atraso de ignição medidos x número de cetano das misturas dos combustíveis.

Misturas	Número de cetano	Atraso de ignição (ms)
T100	75,20	4,68
T95	72,40	5,54
T75	61,20	7,04
T65	55,70	7,41
T45	44,50	8,22
T35	38,90	10,48
T25	33,40	12,76
T15	27,80	13,05
T0	19,40	15,94

Fonte: Guimarães 2016.

Conforme se verifica na tabela 1, Guimarães concluiu que o atraso de ignição aumenta conforme a concentração de *U-Fuel* aumenta.

A tabela 2 relaciona os tempos de atraso de ignição medidos das misturas de óleo Diesel B7 com etanol, Guimarães (2016).

Tabela 2 - Tempos de atraso de ignição medidos das misturas óleo Diesel B7 com etanol.

Misturas	Atraso de ignição (ms)
B7E0	6,38
B7E5	14,80
B7E10	17,55
B7E15	17,87
B7E20	23,48

Fonte: Guimarães 2016.

Conforme resultados mostrados na tabela 2 a medida em que aumenta a concentração de etanol em relação ao óleo Diesel B7 o atraso de ignição aumenta. O combustível puro *T-Fuel* apresentou o menor atraso de ignição, 4,68 ms enquanto o *U-Fuel* apresentou o maior atraso de ignição 15,94 ms entre os padrões. Porém, o teste com maior atraso de ignição aconteceu na mistura B7E20, com um

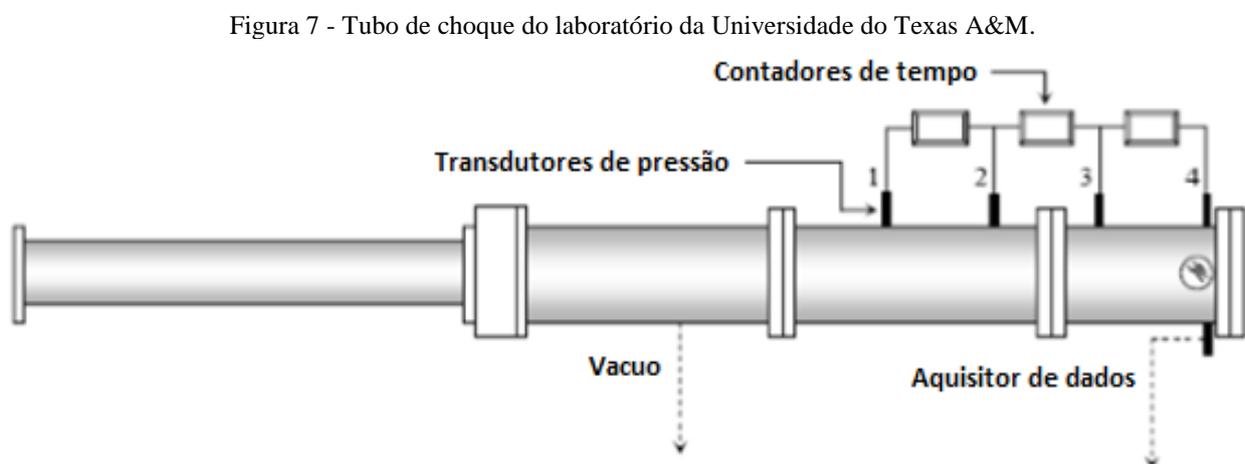
atraso de 23,48ms, enquanto o combustível B7 puro teve um atraso de ignição quase 4 vezes menor, de 6,38ms. Foi possível concluir que o acréscimo de etanol no óleo Diesel B7 aumenta consideravelmente o atraso de ignição da mistura, bem como os atrasos também aumentam na medida que a concentração de *U-Fuel* na mistura de combustíveis padrão aumenta, Guimarães (2016).

O trabalho de Guimarães (2016) usou a mesma técnica de detecção de chama que o de Valente (2016). Contudo, o método de leitura e a taxa de aquisição do sinal foram diferentes neste, apesar de usar o mesmo tubo de choque. As diferenças principais estão na taxa de amostragem e na detecção da chama via luminosidade.

2.3. Trabalhos realizados no tubo de choque com modelagem e simulação numérica.

O trabalho de Lamnaouer (2004) teve como objetivo desenvolver um modelo numérico simétrico de tubo de choque para simular fluxos de ondas de choque não reativas e reativas. As simulações foram realizadas considerando a geometria completa do tubo de choque de alta pressão localizado no laboratório da Universidade do Texas A&M. A seção condutora do tubo de choque possui 2,46 metros de comprimento e 7,62 centímetros de diâmetro interno. A seção conduzida possui 4,72 metros de comprimento e 15,24 centímetros de diâmetro interno. As espessuras das paredes das seções condutora e conduzida do tubo são respectivamente 1,27 e 2,54 centímetros. Esse equipamento pode operar com pressões de até 100 atm e temperaturas até 2500 K.

A figura 7 mostra o desenho esquemático do tubo de choque do laboratório da Universidade do Texas A&M, Lamnaouer (2004).



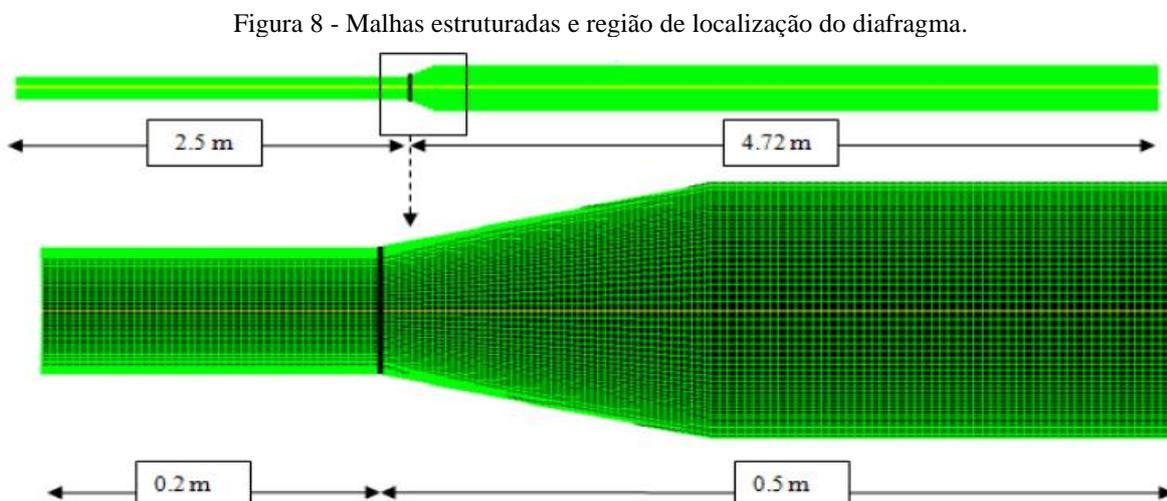
Fonte: Lamnaouer (2004).

As velocidades dos choques foram medidas em quatro locais diferentes ao longo da seção conduzida utilizando quatro transdutores de pressão de PCB 113A em conjunto com quatro contadores de intervalo de tempo. O sistema de aquisição de dados foi constituído de dois computadores de 16 bits de 10 MHz com placas de osciloscópio com um total de quatro canais. Os tempos de atraso de ignição são medidos a partir da identificação do sinal de pressão de um transdutor de pressão PCB 113A e das emissões quimioluminescente de CH* identificadas com um tubo fotomultiplicador Hamamatsu 1P21 (PMT), Lamnaouer (2004).

Basicamente o tempo de atraso de ignição é a diferença de tempo entre as emissões quimioluminescente de CH* e identificação do sinal de aumento da pressão em um transdutor de pressão, Lamnaouer (2004).

Os cálculos foram realizados no software *FLUENT CFD Solver* baseado em um modelo de volume finito com refinamento de malhas adaptável. O algoritmo foi aplicado nos campos de fluxo dependentes do tempo para capturar e resolver com precisão discontinuidades de choque associadas a emissões viscosas reativas. A robustez do modelo numérico e a precisão das simulações foram avaliadas utilizando a teoria analítica ideal de tubo de choque e com dados experimentais. Devido a geometria axial simétrica do tubo de choque o domínio estrutural das malhas de fluxo foi modelado simetricamente, Lamnaouer (2004).

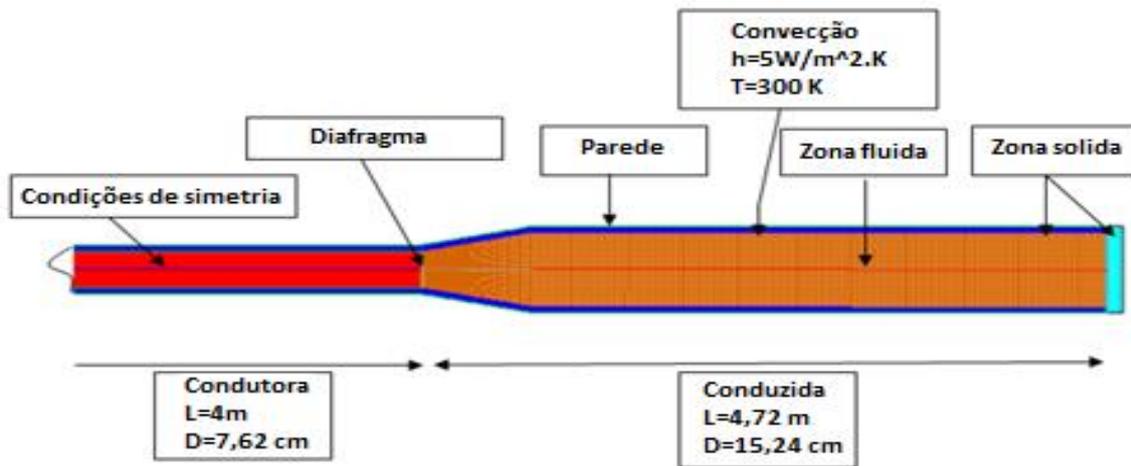
A figura 8 mostra as malhas estruturadas simétrica antes da aplicação da técnica de adaptação de malhas e a região de localização do diafragma que separa as seções condutora e conduzida, Lamnaouer (2004).



Fonte: Lamnaouer (2004).

A abordagem simétrica foi aproximada de uma geometria cilíndrica do tubo de choque e isso foi suficiente para descrever com precisão o fluxo real. As condições de contorno do tubo de choque foram modeladas conjugando o modelo de transferência de calor indicado na figura 9, Lamnaouer (2004).

Figura 9 - Configuração do tubo de choque e condições de contorno para transferência de calor.



Fonte: Lamnaouer (2004).

Lamnaouer (2004) utilizou o método de volumes finitos no qual a massa específica foi explicitamente acoplada ao algoritmo. Esse algoritmo resolveu simultaneamente as equações da continuidade, momento, energia e transporte de espécies. O método de volume finito baseado em uma abordagem de discretização foi usado para resolver numericamente as equações de Navier-Stokes. Isso foi conseguido dividindo o domínio em volumes de controles discretos, em seguida as equações governantes foram integradas em volume de controle individual para construção das equações algébricas de variáveis dependentes discretas e por último as equações governantes foram linearizadas formando um sistema de equações de variáveis dependentes. As equações governantes podem ser ilustradas considerando a equação de conservação instável para transporte de quantidade escalar ϕ . Isso foi demonstrado pela equação (1) escrita em forma de integral para um volume de controle arbitrário V:

$$\iiint \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \oint \rho \phi \vec{v} \cdot d\vec{A} = \oint \tau_\phi \vec{V} \phi \cdot d\vec{A} + \iiint S_\phi dV \quad (1)$$

Onde ρ é a massa específica, v é o vetor velocidade, A é o vetor de área superficial, τ é o coeficiente de difusão para ϕ , $V\phi$ é o gradiente de ϕ e S_ϕ é área por unidade de volume. A discretização da equação 1 pode ser expressa por:

$$\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} V + \sum_f^{N_{\text{faces}}} \rho_f v_f \varphi_f A_f = \sum_f^{N_{\text{faces}}} \tau_f V_f A_f + S_\varphi V \quad (2)$$

Onde N_{faces} são o número de faces da célula, φ_f é o valor de φ convertido através da face f , $\rho_f v_f A_f$ é o fluxo de massa através da face f , A_f é a área da face f , $V_f \varphi_f$ é o gradiente de φ na face f e V é o volume da célula. A linearização de equação 2 pode ser expressa por:

$$a_p \varphi = \sum_{nb} a_{nb} \varphi_{nb} + b \quad (3)$$

Onde o subscrito nb se refere às células vizinhas e a_p e a_{nb} são os coeficientes linearizados de φ e φ_{nb} . Lamnaouer (2004) considerou um campo de fluxo invíscido, governado pelas conhecidas equações de Euler para fluxo invíscido. Para um modelo simétrico a equação da continuidade é dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_r)}{\partial y} + \frac{\partial v_r}{r} = 0 \quad (4)$$

A forma conservativa da equação de Euler é dada por:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} \alpha H = 0 \quad (5)$$

Onde $\alpha = 0$ para bidimensional e $\alpha = 1$ para problemas axisimétricos. Os vetores U , E , G e H são dados por:

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho v_x \\ \rho v_r \\ \rho E \end{bmatrix} \quad E = \begin{bmatrix} \rho v_x \\ \rho v_x v_x + P \\ \rho v_x v_r \\ (\rho E + P) v_x \end{bmatrix} \quad G = \begin{bmatrix} \rho v_r \\ \rho v_x v_r \\ \rho v_r v_r + P \\ (\rho E + P) v_r \end{bmatrix} \quad H = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} \rho v_r \\ \rho v_x v_r \\ \rho v_r v_r \\ (\rho E + P) v_r \end{bmatrix} \quad (6)$$

Onde ρ , v , P e E são respectivamente a massa específica, velocidade, pressão e energia total por unidade de massa do fluido. A energia total E foi relacionada com a equação de estado dos gases perfeitos e pode ser expressa pela seguinte equação:

$$E = \frac{P}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho(v_x^2 + v_r^2) \quad (7)$$

Onde $\frac{1}{2}\rho(v_x^2 + v_r^2)$ é a energia cinética e γ é a razão de calores específicos. A energia total E foi relacionada com a entalpia total H por:

$$E = H - \frac{P}{\rho} \quad (8)$$

Onde,

$$H = h + \frac{|v|^2}{2} \quad (9)$$

Quando a mistura e o transporte de espécies químicas são considerados, a equação da conservação, que descreve convecção e difusão com ou sem fonte de reação para cada componente é representada pela seguinte forma:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \bar{V} \cdot (\rho \bar{v} Y_i) = -\bar{V} \cdot \vec{J}_i + R_i \quad (10)$$

Onde R_i é a taxa líquida de produção de espécies i quando ocorre reação química. A fração de massa local de cada espécie Y_i foi predita através da solução da equação de convecção difusão para cada espécie. A conservação de energia foi descrita para o modelo invíscido por:

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \bar{V} \cdot (\bar{v}(\rho E + P)) = -\bar{V} \cdot \left(\sum_j h_j J_j \right) \quad (11)$$

Onde $\bar{V} \cdot (\sum_j h_j J_j)$ representa o transporte de entalpia devido a difusão de espécies para múltiplos componentes, J_j é o fluxo de difusão das espécies j , que surgem devido ao gradiente de concentração e h_j é a entalpia da espécie j . O fluxo de difusão das espécies j é dado por:

$$\vec{J}_j = -\rho D_{j,m} \bar{V} Y_j \quad (12)$$

$D_{j,m}$ é o coeficiente de difusão das espécies j na mistura. O transporte da entalpia torna-se importante e deve ser explicado na equação da conservação da energia especialmente quando o número de Lewis é maior que 1. O número de Lewis é dado por:

$$Le_i = \frac{k}{\rho C_p D_{j,m}} \quad (13)$$

A equação de estado de gases termicamente e caloricamente perfeito para misturas de múltiplos componentes é dado por:

$$\rho = \frac{P}{RT \sum_i \frac{Y_i}{M_{w,i}}} \quad (14)$$

Onde R é a constante universal dos gases, Y_i é a fração mássica das espécies i , $M_{w,i}$ é o peso molecular das espécies i , P e T são respectivamente a pressão estática e temperatura local. Os calores específicos da mistura são calculados como fração média em massa das espécies puras tal como:

$$C_p = \sum_i Y_i C_{p,i} \quad (15)$$

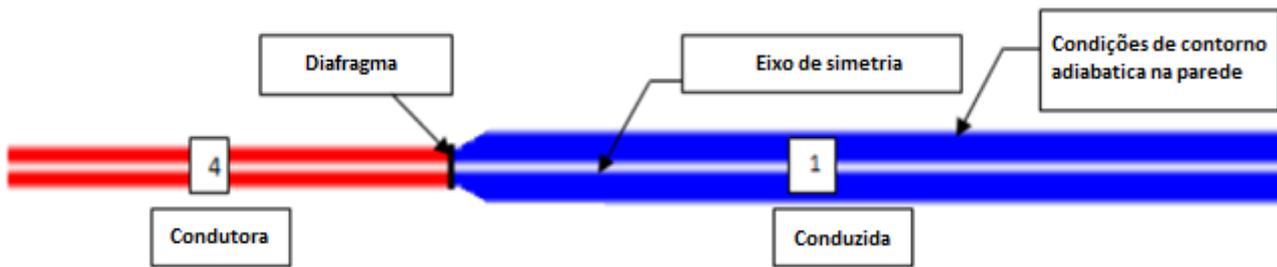
$$C_v = \sum_i Y_i C_{v,i} \quad (16)$$

$$\gamma = \frac{\sum_i Y_i C_{p,i}}{\sum_i Y_i C_{v,i}} \quad (17)$$

Onde $C_{p,i}$ é calor específico a pressão constante das espécies i e $C_{v,i}$ é calor específico a volume constante das espécies i .

A figura 10 mostra os campos de fluxos simulados no tubo de choque antes do rompimento do diafragma, a seção de alta pressão (estado 4) é separada da seção de baixa pressão (estado 1) por um diafragma localizado na interface das duas seções, Lamnaouer (2004).

Figura 10 - Campos de fluxos simulados no tubo de choque antes do rompimento do diagrama.



Lamnaouer (2004)

A figura 11 mostra os campos de fluxos simulados no tubo de choque após o rompimento do diafragma, uma onda de expansão e uma onda de choque incidente (estado 2) são produzidas, Lamnaouer (2004).

Figura 11 - Campos de fluxos simulados no tubo de choque após o rompimento do diafragma.



Lamnaouer (2004)

A figura 12 mostra que após a onda de choque incidente atingir a extremidade fechada do tubo de choque, o choque reflete e viaja na direção oposta gerando alta temperatura e pressão (estado 5), Lamnaouer (2004).

Figura 12 - Campos de fluxos simulados no tubo de choque reflexão da onda de choque.



Lamnaouer (2004)

A tabela 3 mostra um resumo dos testes realizados nas seguintes condições de choque refletido: $698 \text{ K} < T5 < 2528 \text{ K}$ e $P5$ próximo de 1 atm . O gás utilizado na seção condutora foi o Hélio e na seção conduzida foi Ar, Lamnaouer (2004).

Tabela 3 - Testes realizados nas condições de choque refletido: $698 \text{ K} < T_5 < 2528 \text{ K}$ e P_5 de 1 atm

T_5 (K)	P_5 (atm)	T_2 (K)	P_2 (atm)	P_1 (atm)	P_4 (atm)	P_4/P_1	Ms	Mr
698	0.99	481	0.416	0.141	1.5	10.64	1.6	1.45
701	1	482	0.417	0.141	1.6	11.35	1.6	1.45
706	1	484	0.42	0.141	1.7	12.06	1.61	1.46
719	1	490	0.43	0.141	1.8	12.77	1.628	1.472
800	1.31	525	0.45	0.141	2	14.18	1.73	1.526
900	0.99	568	0.346	0.086	1.9	22.09	1.85	1.583
918	1.03	577	0.35	0.086	2	23.26	1.87	1.59
980	1.91	600	0.5	0.141	2.5	17.73	1.91	1.62
1180	0.93	686	0.27	0.05	2	40.00	2.15	1.7
1187	1.62	690	0.45	0.086	2.5	29.07	2.16	1.7
1203	0.97	696	0.28	0.05	2.1	42.00	2.18	1.71
1214	0.98	701	0.284	0.05	2.15	43.00	2.19	1.71
1258	2.9	720	0.75	0.141	5	35.46	2.23	1.73
1480	1.35	810	0.35	0.05	2.5	50.00	2.44	1.79
1500	0.99	821	0.26	0.036	2.3	63.89	2.45	1.79
1568	1.06	849	0.28	0.036	2.5	69.44	2.51	1.81
1593	1.09	860	0.34	0.036	3	83.33	2.538	1.81
1596	1.51	860	0.39	0.05	3	60.00	2.54	1.817
1628	0.84	874	0.21	0.027	2	74.07	2.57	1.82
1690	2.84	900	0.6	0.086	6	69.77	2.62	1.83
1755	0.944	927	0.23	0.027	2.3	85.19	2.67	1.84
1783	0.96	939	0.239	0.027	2.4	88.89	2.697	1.854
1803	0.984	948	0.24	0.027	2.45	90.74	2.71	1.857
1953	1.1	1010	0.25	0.027	2.5	92.59	2.83	1.88
2097	1.22	1070	0.26	0.027	3	111.11	2.94	1.9
2528	1.58	1250	0.4	0.027	4	148.15	3.249	1.952

Lamnaouer (2004).

A tabela 4 mostra um resumo dos testes realizados nas seguintes condições de choque refletido: $683 \text{ K} < T_5 < 1955 \text{ K}$ e $9.5 \text{ atm} < P_5 < 14.5 \text{ atm}$. O gás utilizado na seção condutora foi o Hélio e na seção conduzida foi Ar, Lamnaouer (2004).

Tabela 4 - Testes realizados nas condições de choque refletido: $683 \text{ K} < T_5 < 1955 \text{ K}$ e $9.5 \text{ atm} < P_5 < 14.5 \text{ atm}$

T_5 (K)	P_5 (atm)	T_2 (K)	P_2 (atm)	P_1 (atm)	P_4 (atm)	P_4/P_1	M_s	M_r
683	10.59	474	4.45	1.55	17	10.97	1.58	1.445
699	10.99	481	4.57	1.55	18	11.61	1.6	1.45
707	11.2	484	4.63	1.55	18.5	11.94	1.61	1.46
743	12.4	500	5	1.55	20	12.90	1.659	1.488
899	10.42	567	3.6	0.9	20	22.22	1.848	1.582
900	10.46	568	3.6	0.9	19.9	22.11	1.85	1.58
904	10.53	569	3.64	0.9	20	22.22	1.854	1.585
923	10.93	577	3.7	0.9	21	23.33	1.875	1.594
942	11.35	585	3.8	0.9	22	24.44	1.898	1.604
997	12.58	608	4	0.9	25	27.78	1.959	1.63
1094	14.8	650	4.5	0.9	30	33.33	2.064	1.671
1200	10	694	9.73	0.52	21.5	41.35	2.173	1.71
1206	10.1	697	2.95	0.52	22	42.31	2.179	1.712
1283	11.19	729	3.17	0.52	25	48.08	2.255	1.737
1337	11.95	752	3.32	0.52	27	51.92	2.306	1.752
1500	9.7	820	2.62	0.36	22.5	62.50	2.456	1.795
1510	14.49	825	3.8	0.52	35	67.31	2.465	1.797
1515	10	827	2.65	0.36	23	63.89	2.469	1.798
1550	10.4	841	2.72	0.36	24	66.67	2.5	1.8
1640	11.38	879	2.9	0.36	27	75.00	2.578	1.826
1735	12.39	919	3	0.36	30	83.33	2.658	1.845
1765	9.33	931.7	2.36	0.27	23	85.19	2.682	1.85
1800	9.8	946	2.41	0.27	24	88.89	2.711	1.856
1841	9.89	963	2.47	0.27	25	92.59	2.744	1.864
1889	13.93	980	3.37	0.36	35	97.22	2.775	1.87
1900	10.61	988	2.56	0.27	30	111.11	2.791	1.873
1916	10.44	994	2.58	0.27	27	100.00	2.803	1.876
1955	10.7	1011	2.64	0.27	28	103.70	2.834	1.882

Lamnaouer (2004).

A tabela 5 mostra um resumo dos testes realizados nas seguintes condições de choque refletido: $681 \text{ K} < T_5 < 1978 \text{ K}$ e P_5 próximo de 1 atm. O gás utilizado na seção condutora foi o Hélio e na seção conduzida foi Nitrogênio, Lamnaouer (2004).

Tabela 5 - Testes realizados nas condições de choque refletido: $681\text{ K} < T_5 < 1978\text{ K}$ e P_5 de 1 atm

T_5 (K)	P_5 (atm)	T_2 (K)	P_2 (atm)	P_1 (atm)	P_4 (atm)	P_4/P_1	M_s	M_r
681	0.82	475	0.273	0.07	1.8	25.71	1.87	1.661
691	0.84	480	0.28	0.07	1.9	27.14	1.89	1.673
699	0.9	483	0.283	0.07	2.06	29.43	1.905	1.681
702	0.89	485	0.286	0.07	2.08	29.71	1.91	1.684
704	0.9	487	0.29	0.07	2.1	30.00	1.914	1.686
746	1	500	0.306	0.07	2.4	34.29	1.974	1.718
848	0.7	550	0.21	0.04	1.925	48.13	2.171	1.814
897	0.87	570	0.23	0.04	2.15	53.75	2.249	1.848
900	0.99	572	0.26	0.045	2.43	54.00	2.257	1.852
902	0.87	573	0.23	0.04	2.17	54.25	2.26	1.853
905	0.89	574	0.23	0.04	2.2	55.00	2.264	1.855
905	0.77	574	0.2	0.035	1.925	55.00	2.264	1.855
946	0.97	593	0.246	0.04	2.45	61.25	2.33	1.883
957	1	597	0.25	0.04	2.5	62.50	2.347	1.889
958	0.88	598	0.22	0.035	2.2	62.86	2.349	1.89
1077	0.94	650	0.218	0.03	2.4	80.00	2.529	1.959
1132	1.03	674	0.23	0.03	2.8	93.33	2.608	1.986
1136	1.04	676	0.234	0.03	3	100.00	2.614	1.988
1199	1.14	703	0.25	0.03	3.2	106.67	2.7	2.016
1214	1.17	710	0.254	0.03	3.3	110.00	2.722	2.023
1229	1.19	717	0.258	0.03	3.4	113.33	2.742	2.029
1433	0.98	807	0.2	0.02	3.2	160.00	3.006	2.105
1493	1.11	833	0.21	0.02	3.4	170.00	3.08	2.123
1500	1.11	837	0.219	0.02	3.42	171.00	3.088	2.125
1509	1.13	840	0.22	0.02	3.45	172.50	3.1	2.128
1525	1.14	847	0.223	0.02	3.5	175.00	3.118	2.133
1769	0.72	954	0.132	0.01	2.8	280.00	3.397	2.195
1800	0.74	967	0.135	0.01	2.92	292.00	3.43	2.2
1800	1.11	967	0.203	0.015	4.38	292.00	3.43	2.2
1809	0.75	971	0.136	0.01	2.95	295.00	3.44	2.2
1922	0.82	1021	0.146	0.01	3.4	340.00	3.56	2.226
1958	0.84	1036	0.149	0.01	3.55	355.00	3.598	2.233
1978	0.85	1045	0.15	0.01	3.65	365.00	3.619	2.237

Lamnaouer (2004).

As simulações numéricas foram realizadas para diferentes condições iniciais de testes afim de produzir diferentes números de Mach incidentes, que posteriormente influenciou na força do choque refletido. O número de Mach incidente foi determinado a partir da medição da velocidade do choque em dois instantes de tempo diferentes, Lamnaouer (2004).

A velocidade do choque foi calculada pela equação (18):

$$W_{is} = \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (18)$$

O número de Mach do choque incidente foi determinado a partir de:

$$M_{is} = \frac{W_{is}}{\alpha_1} \quad (19)$$

O número de Mach do choque refletido foi determinado a partir de:

$$M_{rs} = \frac{(W_{rs} + U_2)}{\alpha_2} \quad (20)$$

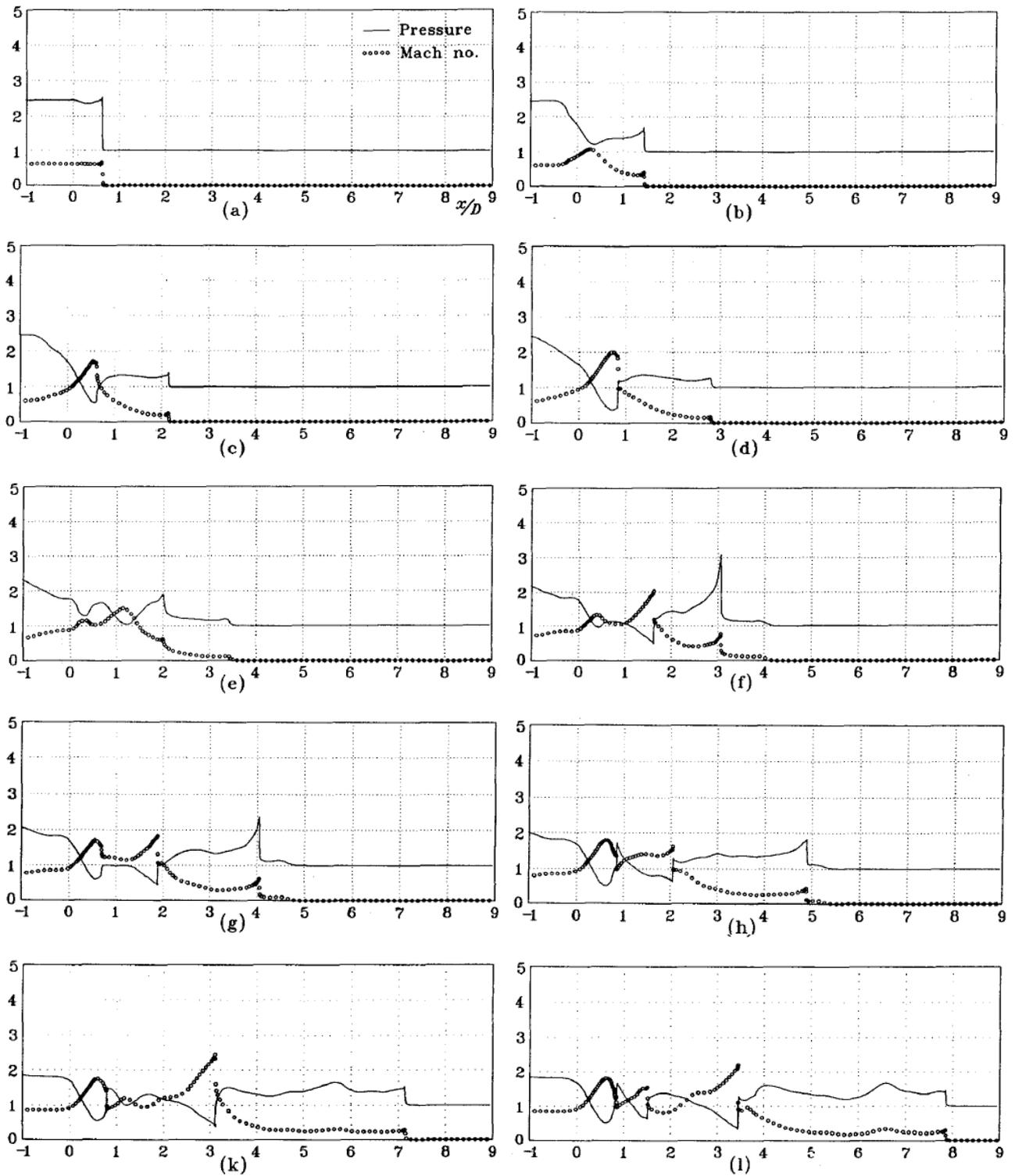
Onde U_2 é a velocidade do gás no estado 2, α_1 e α_2 são respectivamente as velocidades do som dos gases nos estados 1 e 2.

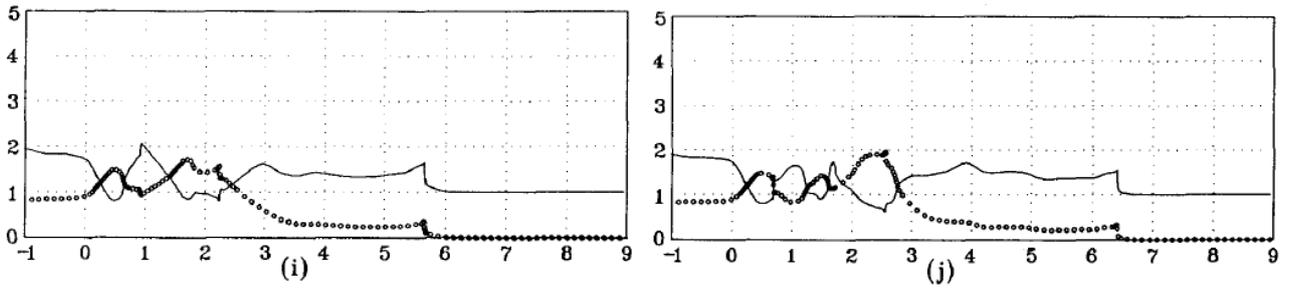
As simulações de Lamnaouer (2004), invíscida, bidimensional e sem reação química, mostram que a solução bidimensional requer uma razão de pressão da seção condutora para a pressão da seção conduzida maior que a medida para gerar a mesma diferença de temperatura medida, mas as grandezas descritoras do escoamento são previstas bem com discretizações de 2ª ordem. Características semelhantes também foram observadas nos resultados deste trabalho.

O trabalho de Chang e Kim (1994) teve como objetivo desenvolver um modelo numérico para resolver as equações de Euler envolvendo ondas de choque em um tubo de choque de seção expandida. Nesse trabalho a onda de choque foi repentinamente descarregada em uma expansão cilíndrica três vezes maior que o diâmetro original do tubo. O fluxo instável desenvolvido devido à restrição da passagem tornou o escoamento complexo. Para resolução dessa complexidade, um modelo em elementos finitos com a técnica de refinamento adaptativo de malhas triangulares não estruturadas foi implementado. O objetivo específico do estudo foi analisar o fluxo instável da onda de choque associada transformação morfológica devido à expansão da onda. A técnica empregada na solução das equações de Euler e os procedimentos numéricos foram semelhantes aos empregados no trabalho de Azevedo e Oliveira (1994). O refinamento de malhas foi feito subdividindo cada elemento triangular da malha original em quatro novos elementos, gerando uma nova malha refinada. As condições iniciais adotadas foram razão de pressão 5 e razão de massa específica 4.

As figuras 13 de (a) a (j) mostram os resultados de simulação de pressão e número de Mach ao longo do tubo após ruptura do diafragma para número de Mach incidente de 1,5, Chang e Kim (1994).

Figura 13 - Pressão e número de Mach distribuído ao longo do eixo do tubo para: (a) T=1, (b) T=2, (c) T=3, (d) T=4, (e) T=5, (f) T=6, (g) T=7, (h) T=8, (i) T=9, (l) T=10, (i) T=11 e (j) T=12.

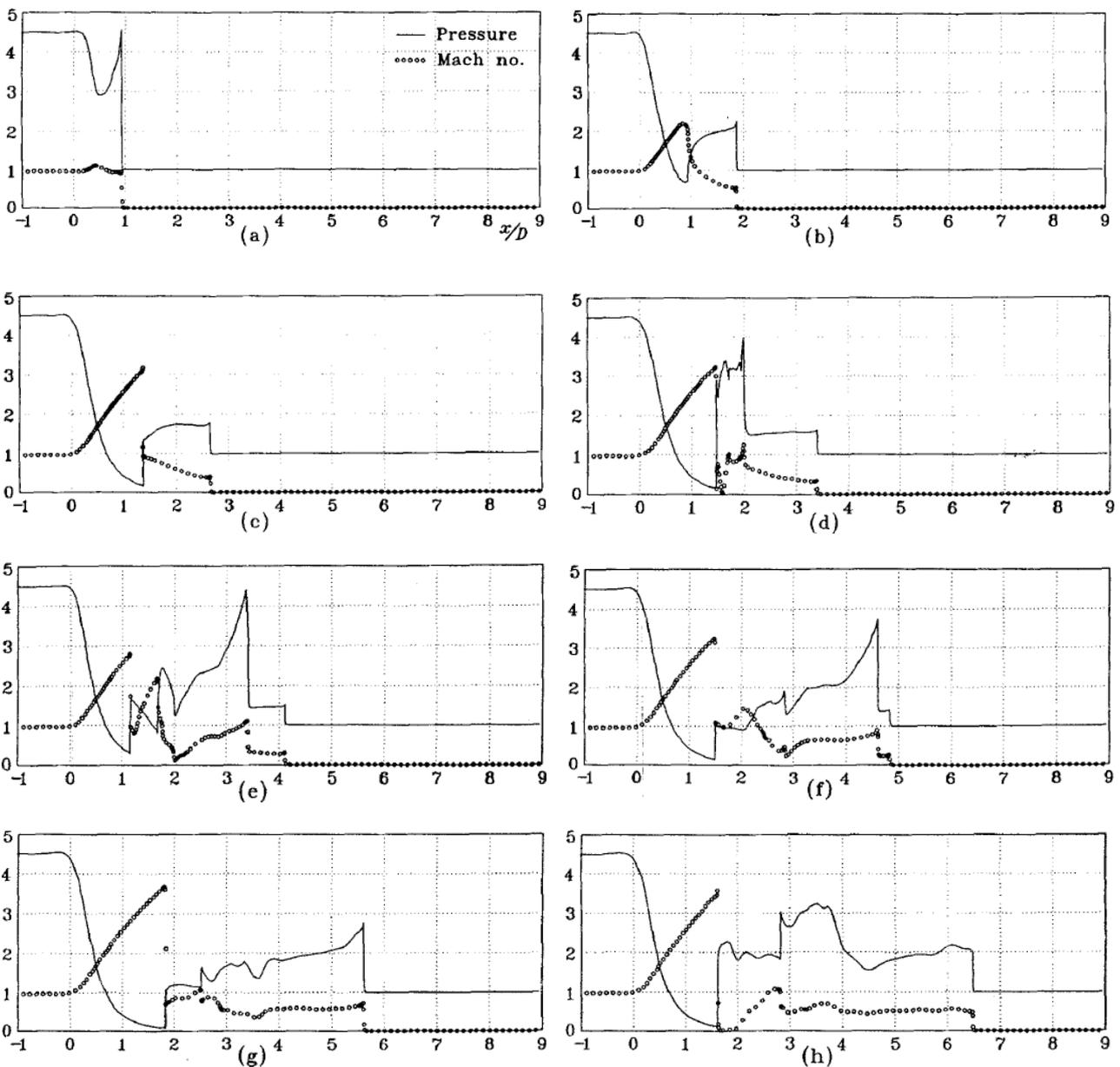


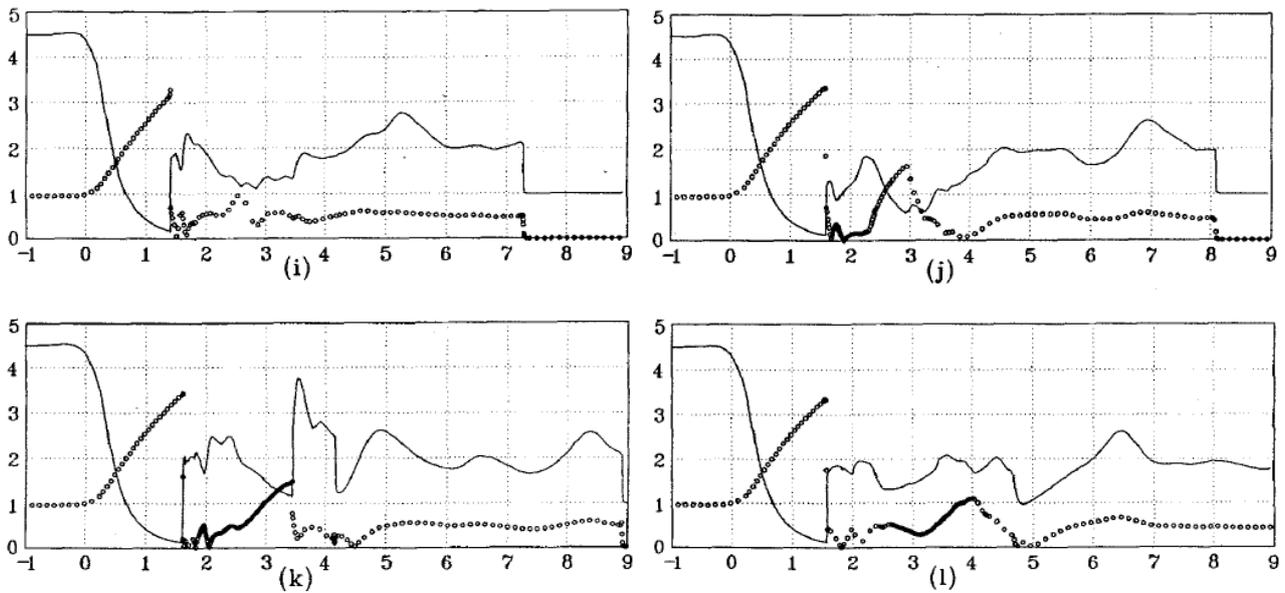


Fonte: Chang e Kim (1994).

As figuras 14 de (a) a (j) mostram os resultados de simulação de pressão e número de Mach ao longo do tubo após ruptura do diafragma para número de Mach incidente de 2, Chang e Kim (1994).

Figura 14 - Pressão e número de Mach distribuído ao longo do eixo do tubo para: (a) $T=1$, (b) $T=2$, (c) $T=3$, (d) $T=4$, (e) $T=5$, (f) $T=6$, (g) $T=7$, (h) $T=8$, (k) $T=9$, (l) $T=10$, (i) $T=11$ e (j) $T=12$.





Fonte: Chang e Kim (1994)

As simulações de Chang e Kim (1994), que usam malhas não estruturadas e discretização semelhante a proposta por Azevedo e Oliveira (1994), apresentam resultados compatíveis com os apresentados neste trabalho.

2.4. Malhas computacionais.

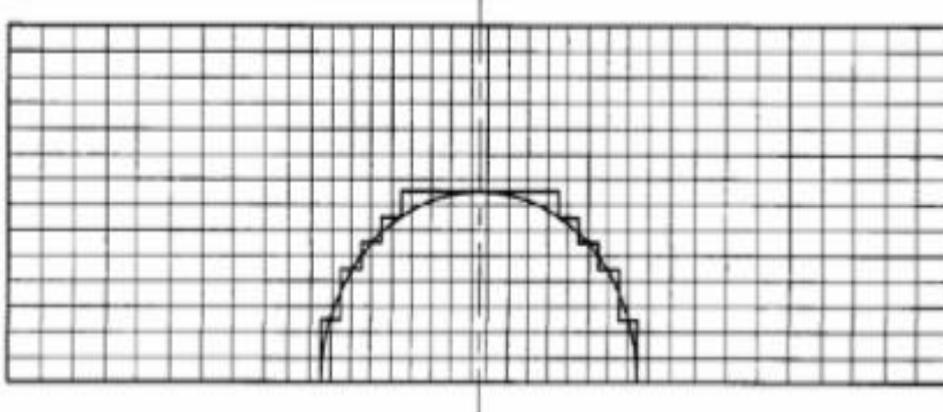
2.4.1. Malhas ortogonais e malhas não ortogonais.

Em muitos problemas de simulação de fenômenos físicos, o uso de malhas é considerado um componente muito importante. Malha é uma aproximação de uma geometria por um conjunto de elementos mais simples, tais como triângulos e quadriláteros. A escolha do tipo de malha influencia o desempenho e precisão dos resultados da simulação. O desempenho está relacionado com o número de elementos a serem processados, quanto maior for a área coberta por cada elemento da malha, menor número de elementos serão necessários para processar a simulação e mais rápida será a simulação. A precisão está vinculada tanto com o formato quanto ao tamanho dos elementos da malha, quanto menor os elementos da malha mais preciso serão os resultados e mais tempo será gasto para processar a simulação. No que se refere ao formato, quanto mais próximos eles são do quadrilátero melhor a precisão da simulação, Lacassa e Filho (2007).

As malhas podem ser agrupadas como ortogonais e não ortogonais. As malhas ortogonais são baseadas em um sistema fixo de coordenadas cartesianas ou cilíndricas que apresentam diversas limitações quando utilizadas em geometrias irregulares, Gonçalves (2007).

A figura 15 mostra um exemplo de malha ortogonal aplicado a um cilindro, Gonçalves (2007).

Figura 15 - Exemplo de malha ortogonal.

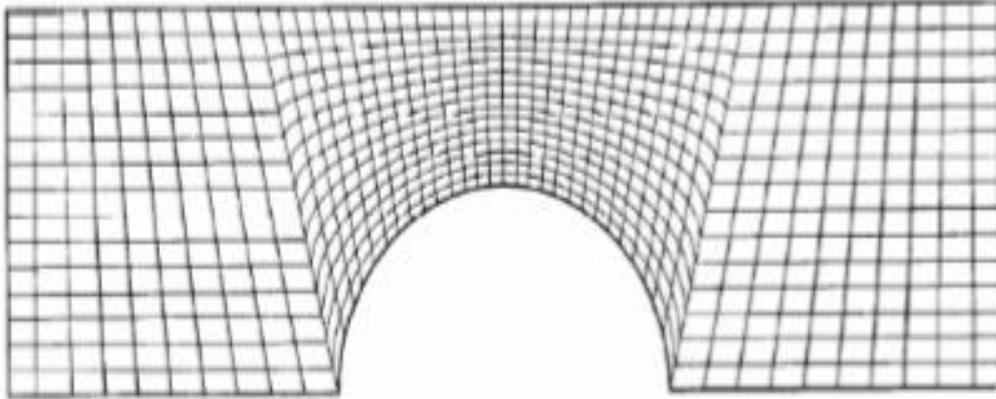


Fonte: Gonçalves (2007).

Para calcular o fluxo que passa em torno do cilindro utilizando malhas ortogonais, a fronteira poderá ser representada por uma aproximação e as células localizadas no interior da parede sólida do cilindro não são consideradas no cálculo. Esse fato apresenta desvantagens consideráveis desde as dificuldades associadas a descrição da aproximação da fronteira até a existência de erros inerentes a esta aproximação. Outra desvantagem da utilização de sistemas de coordenadas ortogonais é o desperdício de recursos de armazenamento pois a introdução de uma malha ortogonal fina numa região de interesse particular implica no desnecessário refinamento de outra região de interesse mínimo. Malhas não ortogonais ou adaptativas têm sido desenvolvidas para superar as limitações referidas anteriormente e são cada vez mais utilizadas em simulações computacionais, Gonçalves (2007).

A Figura 16 mostra uma malha não ortogonal aplicada a um cilindro, Gonçalves (2007).

Figura 16 - Exemplo de malha não ortogonal.



Fonte: Gonçalves (2007).

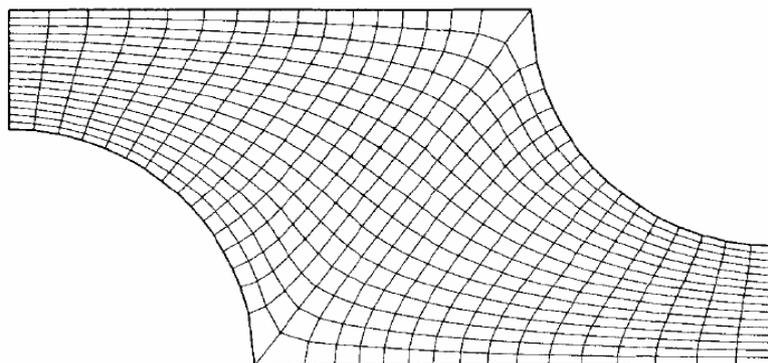
A flexibilidade geométrica é útil na modelagem de problemas práticos, envolvendo geometrias irregulares, porque todos os detalhes geométricos podem ser incorporados de uma forma precisa e as propriedades da malha podem ser controladas para captar características úteis em regiões de interesse. As equações governantes com malhas não ortogonais são, contudo, muito mais complexas do que as suas malhas ortogonais equivalentes. As malhas não ortogonais são cada vez mais preferíveis, dados os requisitos de armazenamento adicionais associados às malhas ortogonais, Gonçalves (2007).

2.4.2. Malhas estruturadas e malhas não estruturadas.

As malhas não ortogonais podem ser divididas em dois grupos: malhas estruturadas e não estruturadas. Esta classificação está relacionada com a disposição relativa dos diferentes elementos. Nas malhas estruturadas ou regulares os elementos são dispostos em famílias de linhas, em que membros de uma determinada família não se cruzam uns com os outros e atravessam cada membro de outras famílias apenas uma vez. Isto permite que as linhas de um determinado conjunto sejam numeradas consecutivamente. A posição de qualquer ponto (ou volume de controle) da malha é numerado dentro do domínio sendo identificado de maneira única por um conjunto de dois (em 2D) ou três (em 3D) índices. Esta é a estrutura de malha mais simples, uma vez que é logicamente equivalente a uma malha ortogonal ou cartesiana, Gonçalves (2007).

A figura 17 apresenta um exemplo de malha estruturada, Gonçalves (2007).

Figura 17 - Exemplo de uma malha 2D, estruturada, não ortogonal

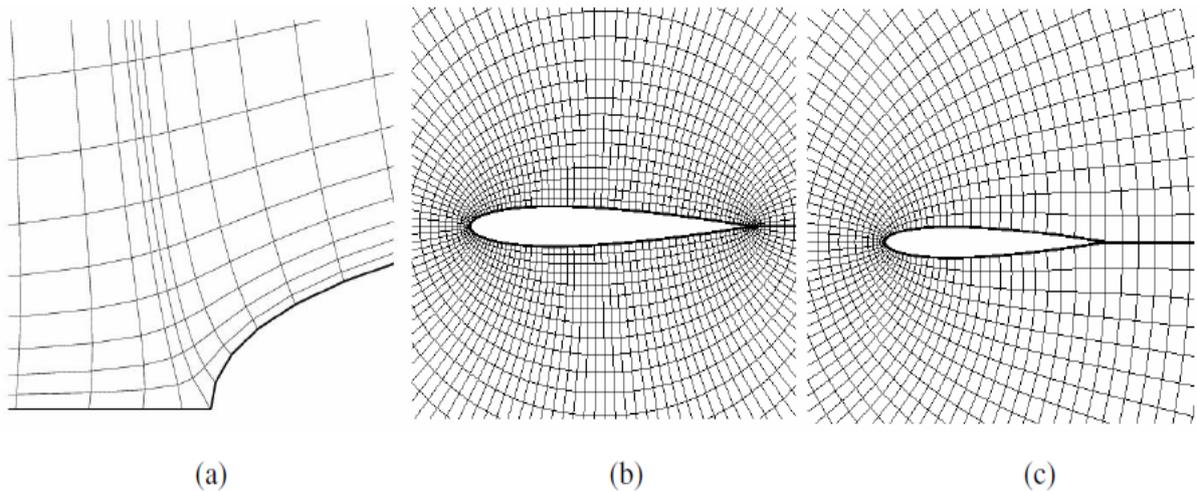


Fonte: Gonçalves (2007).

Esta conectividade entre células vizinhas simplifica a programação e a matriz do sistema de equações algébricas apresenta uma estrutura regular, que pode ser explorada desenvolvendo técnicas de resolução adequadas. A limitação das malhas estruturadas é que estas somente podem ser aplicadas em domínios com geometrias de complexidade média e que pode ser difícil a distribuição dos pontos da malha. As malhas estruturadas podem ser do tipo H, tipo O ou tipo C. Estas designações derivam da geometria das linhas da malha. Uma malha tipo H quando projetada num retângulo tem diferentes fronteiras lógicas: leste, oeste, norte e sul. Na malha com estrutura tipo O, um conjunto de linhas da malha é ilimitado, se as linhas da malha forem tratadas como linhas de coordenadas em torno do cilindro, estas irão crescer indefinidamente. Que pode ser contornado com um corte artificial no qual as coordenadas do ponto saltam de um valor finito para zero. Neste corte, a malha pode ser de fronteira, mas os pontos da vizinhança têm de ser tratados como sendo pontos do interior da malha, em contraste com o tratamento aplicado às fronteiras de uma malha do tipo H. Em malhas do tipo C pontos em porções de uma das linhas da malha coincidem, requerendo a introdução de um corte similar ao encontrado nas malhas do tipo O. Este tipo de malhas é muitas vezes encontrado em sólidos com arestas pontiagudas nos quais este tipo de malhas é capaz de promover uma adequada precisão de cálculo, Gonçalves (2007).

A figura 18 apresenta um exemplo de malhas estruturadas tipo H, tipo O e tipo C, Gonçalves (2007).

Figura 18 - Malhas estruturadas tipo H, tipo O e tipo C.

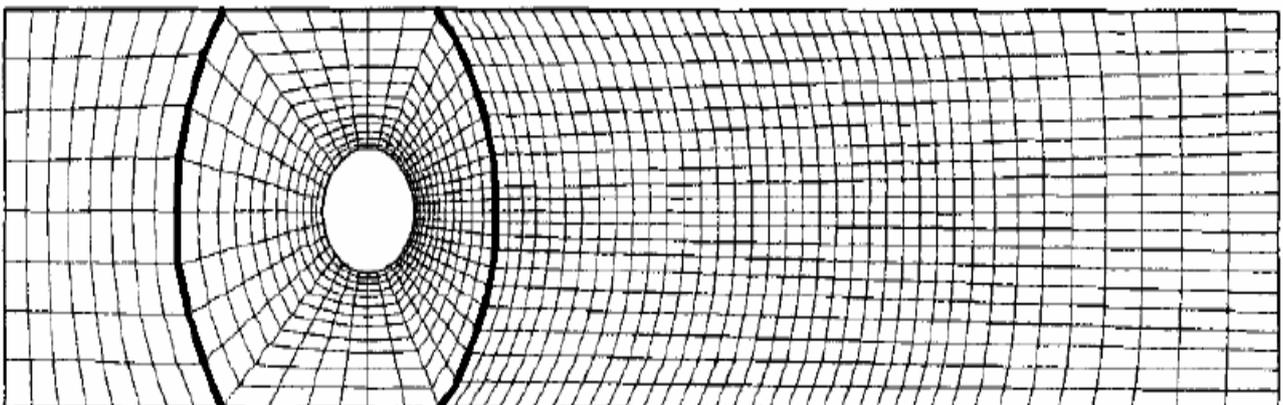


Fonte: Gonçalves (2007).

Com o objetivo de contornar algumas limitações associadas à utilização de malhas estruturadas convencionais, foi desenvolvido o conceito de malhas estruturadas por blocos. Neste tipo de malhas existem dois ou mais níveis de subdivisão do domínio de solução. Num nível mais grosseiro existem blocos lógicos com regiões relativamente largas do domínio. Em níveis mais finos, dentro de cada bloco, é criada uma malha estruturada. Neste tipo de malha é necessário um tratamento especial nas interfaces dos blocos, Gonçalves (2007).

A Figura 19 apresenta uma malha estruturada por blocos com continuidade nas interfaces que mapeia uma geometria 2D em torno de um cilindro e cuja geometria contém três blocos, Gonçalves (2007).

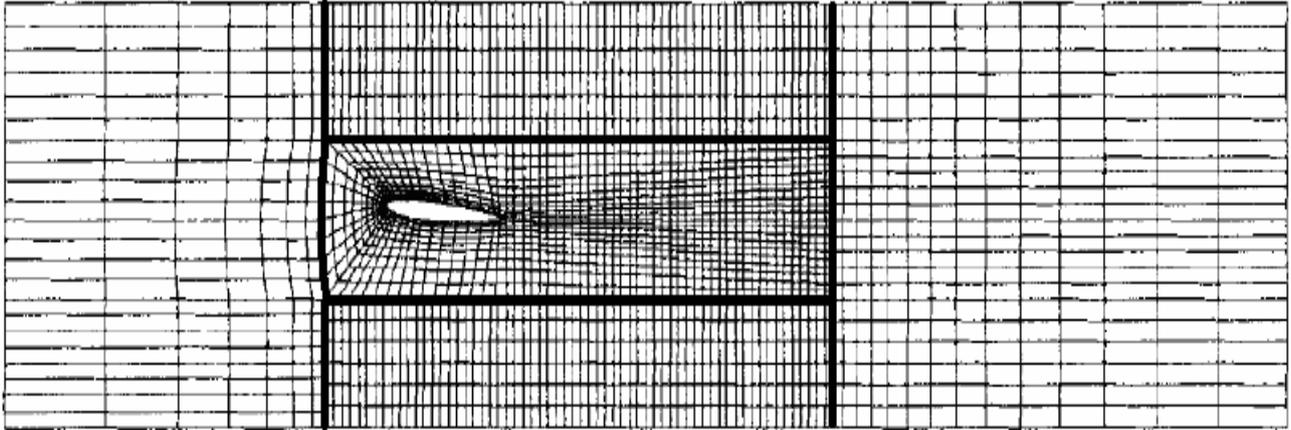
Figura 19 - Malha estruturada por blocos, com 3 blocos



Fonte: Gonçalves (2007).

A figura 20 ilustra malha estruturada por blocos sem continuidade nas interfaces, Gonçalves (2007).

Figura 20 – Malha estruturada por blocos, com 5 blocos.



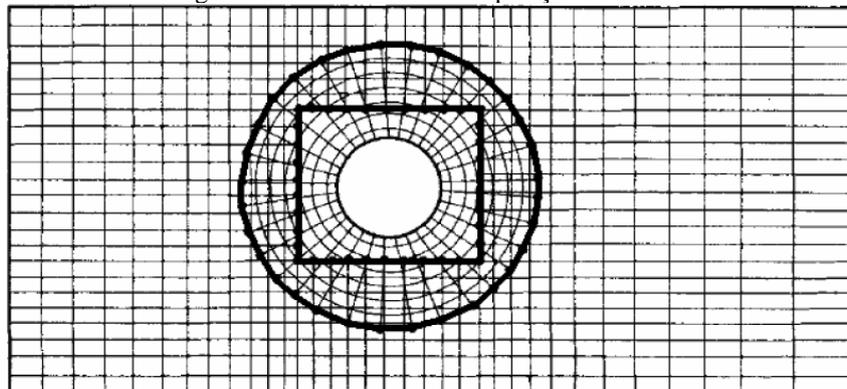
Fonte: Gonçalves (2007).

Neste caso foram utilizados cinco blocos. Este exemplo ilustra a flexibilidade destas malhas quando comparado com as malhas estruturadas simples, pois permite o uso de malhas mais finas em regiões limites onde é necessária maior precisão de cálculo. A interface sem continuidade pode ser tratada de modo totalmente conservativa. A programação deste tipo de malhas é mais complexa do que a dos casos anteriores, Gonçalves (2007).

Existem ainda malhas estruturadas por blocos com sobreposição. Na região de sobreposição, as condições na fronteira para um bloco são obtidas fazendo a interpolação com o outro bloco. A desvantagem destas malhas é que a conservação na fronteira da malha não é garantida. As vantagens desta aproximação são a forma mais simples com que os domínios mais complexos são tratados, Gonçalves (2007).

A figura 21 mostra malhas com sobreposição de blocos, Gonçalves (2007).

Figura 21 - Malhas com sobreposição de blocos.



Fonte: Gonçalves (2007).

Para geometrias muito complexas, o tipo mais flexível de malhas é o que consegue se adaptar sem quaisquer limitações à fronteira do domínio de solução, essas malhas são chamadas de malhas não estruturadas, Gonçalves (2007).

Estas malhas podem ser usadas com qualquer método de discretização, mas adaptam se melhor com aproximações por volumes finitos ou por elementos finitos. Os elementos ou volumes de controle podem ter qualquer forma e não há qualquer restrição ao número de elementos vizinhos ou vértices. Na prática, malhas feitas de triângulos ou quadriláteros em 2D e tetraedros ou hexaedros em 3D são as mais frequentemente usadas. A flexibilidade é compensada pela irregularidade na estrutura dos dados e aumento de complexidade e formulação. Os códigos computacionais para malhas não estruturadas são mais flexíveis, não necessitam ser alterados quando a malha é localmente refinada, ou quando elementos ou volumes de controle de diferentes formas são usados, contudo, a geração de malhas e o processamento são habitualmente mais complexos, Gonçalves (2007).

Neste trabalho se optou por usar uma malha não estruturada de células triangulares gerada a partir de uma malha estruturada construída inicialmente.

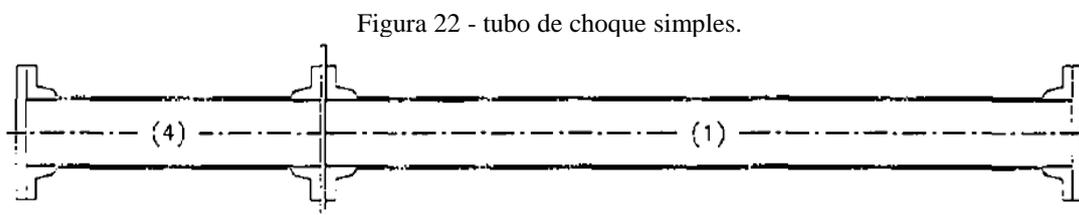
3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo são apresentados os fundamentos relativos ao princípio funcionamento do tubo de choque, equações que governam escoamento compressivo em tubo de choque e fundamentos relativo a discretização das equações de Euler para volume de controle finito.

3.1. Teoria do Tubo de Choque.

Um tubo de choque é um dispositivo utilizado para criar escoamentos de gases a fim de simular condições e conhecer os efeitos fluidodinâmicos e térmicos desse escoamento, como por exemplo, efeitos iniciais de uma explosão. Também é utilizado para estudar fluxos aerodinâmicos em diversas condições de temperatura e pressão, efeitos de compressibilidade e condições de combustão de gases. Na configuração mais simples um tubo de choque é um tubo de grande comprimento com área de seção transversal constante, formado por duas seções fechadas e separadas por um diafragma, Santana (2013).

A Figura 22 mostra o desenho de um tubo de choque simples, Santana (2013).

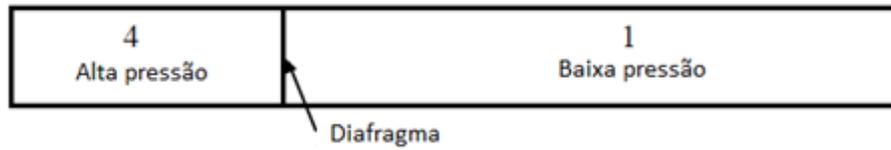


Fonte: Antônio (1997).

Inicialmente uma dessas seções, chamada de seção condutora (4), é preenchida com um gás ou mistura de gases até uma determinada pressão, enquanto a outra seção, chamada de conduzida (1), permanece em uma pressão menor em relação à seção condutora. Quando a diferença de pressão entre as duas seções vence a resistência estrutural do diafragma, ocorre o rompimento do mesmo e uma onda de choque é gerada em razão das diferenças de pressão entre as duas seções. Essa onda de choque desloca-se em direção a seção de baixa pressão. Uma onda de expansão propaga-se em direção à seção de alta pressão. Os gases nas seções podem ou não ser da mesma espécie, assim como podem ou não estar a diferentes temperaturas antes da ruptura do diafragma. Após a ruptura do diafragma a onda de choque de compressão causa o movimento da massa do gás aumentando a temperatura e pressão na seção conduzida. A onda de expansão diminui a temperatura e pressão do gás à medida que se desloca para a seção condutora, Santana (2013).

A Figura 23 mostra as seções de alta e baixa pressão do tubo de choque antes do rompimento do diafragma, Santana (2013).

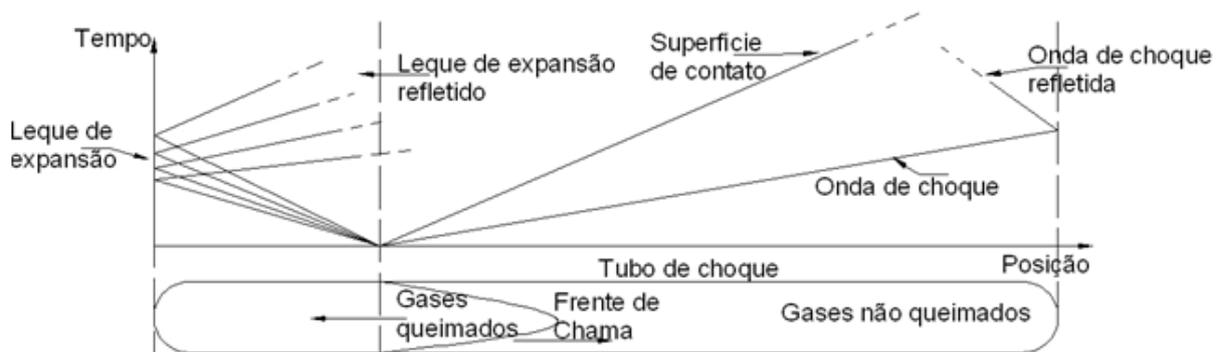
Figura 23 - Representação das seções do tubo de choque antes da ruptura do diafragma.



Fonte: Mcmillan (2004).

A Figura 24 mostra a propagação da onda de choque, da onda de choque refletida, da onda de expansão, da onda de expansão refletida e superfície de contato em função do tempo após a ruptura do diafragma do tubo de choque, Santana (2013).

Figura 24 - Propagação da onda de choque e expansão após ruptura do diafragma do tubo de choque.

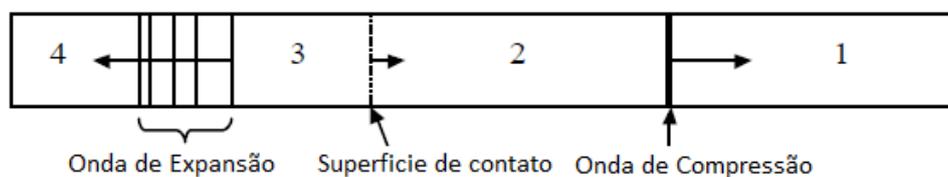


Fonte: Santana (2013).

Imediatamente após a ruptura do diafragma forma-se uma região chamada de superfície de contato em que os gases das seções condutora e conduzida se encontram e começam a se misturar, com o movimento da massa gás no interior do tubo essa região desaparece, Santana (2013).

A Figura 25 mostra as regiões formadas entre superfície de contato, Santana (2013).

Figura 25 - Formação da superfície de contato imediatamente após ruptura do diafragma.

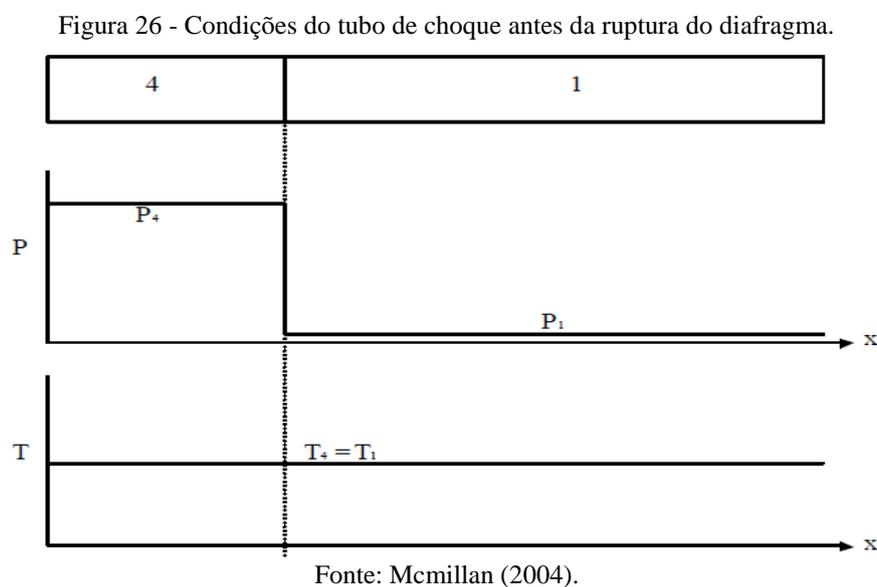


Fonte: Mcmillan (2004).

A onda de compressão propaga-se em direção à extremidade direita do tubo sendo que, esse movimento provoca aumento de temperatura e pressão do gás na seção conduzida. Ao atingir a extremidade fechada do tubo a onda de choque reflete e propaga-se em direção à outra extremidade do tubo. No movimento de volta a onda refletida encontra-se com a onda incidente. Essa sobreposição de ondas de choque aumenta ainda mais a temperatura e pressão do gás na seção conduzida. Por esse motivo a onda refletida é a responsável por causar, frequentemente, a dissociação e ionização do ar na seção conduzida do tubo de choque. Analogamente, a onda de expansão movimenta-se em direção a outra extremidade do tubo. Ao alcançar a extremidade, também fechada, a onda se reflete e se propaga de volta ao centro do tubo, Santana (2013).

Há dois parâmetros que determinam a força do choque: a razão de pressão entre as seções condutora e conduzida (P_4/P_1) e a razão de velocidade de propagação do som nas respectivas seções (a_4/a_1). A razão de velocidade do som é determinada em função da razão dos calores específicos e pesos moleculares dos gases usados nas seções condutora e conduzida, Santana (2013).

A Figura 26 representa as condições do tubo de choque antes da ruptura do diafragma, assumindo que as duas seções estão à mesma temperatura, Santana (2013).

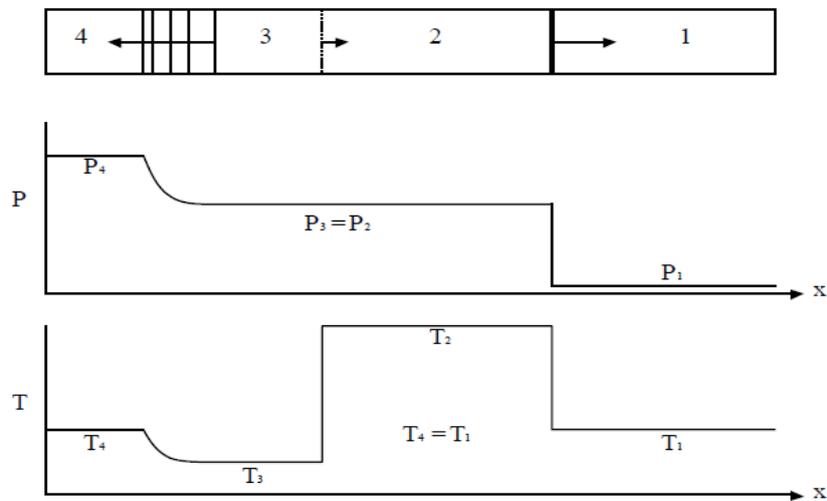


Os princípios de movimento normal do choque são usados para desenvolver as relações entre as regiões 1 e 2 de cada lado da onda de compressão e entre as regiões 3 e 4 de cada lado da onda de expansão. Embora inicialmente existam apenas dois gases no tubo, após a ruptura do diafragma, existem quatro estados de gás com temperatura, pressão, massa específica e calores específicos bem definidos para cada região. A frente da onda de choque normal e onda de expansão à pressão, massa

específica e temperatura são as mesmas das condições iniciais das seções de baixa e alta pressão respectivamente, ou seja, essas regiões ainda não são afetadas pelas ondas de choque e expansão. Atrás da onda de choque normal há aumento de pressão, massa específica e temperatura, enquanto atrás da onda de expansão essas variáveis diminuem. Essa região delimitada pela onda de choque e onda de expansão é conhecida como superfície de contato, Santana (2013).

A Figura 27 mostra o comportamento da pressão e da temperatura no tubo de choque após a ruptura do diafragma, Santana (2013).

Figura 27 - Comportamento da pressão e da temperatura no tubo de choque após ruptura do diafragma.



Fonte: Mcmillan (2004).

A velocidade do som para cada estado de gás pode ser calculada usando a equação:

$$a = \sqrt{\gamma RT} \quad (21)$$

Onde γ representa a razão de calores específicos do gás, R a constante do gás e T a temperatura dos gases nas respectivas regiões do tubo, Santana (2013).

O número de Mach pode ser determinado utilizando a equação (22):

$$\frac{P_4}{P_1} = \frac{\gamma_{1-1}}{\gamma_{1+1}} \left[\frac{2\gamma_1}{\gamma_{1-1}} M_s^2 - 1 \right] \left[1 - \frac{\frac{\gamma_{4-1}}{\gamma_{4+1}} \left(\frac{a_1}{a_4} \right) (M_s^2 - 1)}{M_s} \right]^{-\frac{2\gamma_4}{\gamma_{4-1}}} \quad (22)$$

Onde M_s representa o número de Mach da onda de choque, o subscrito 1 denota seção conduzida e o subscrito 4 denota seção condutora. Com o número de Mach conhecido, a razão de pressão em ambos os lados da onda de choque (P_2/P_1) pode ser calculada utilizando a relação de choque normal, Santana (2013).

$$\frac{P_2}{P_1} = 1 + \frac{2\gamma_1}{\gamma_1 + 1} (M_s^2 - 1) \quad (23)$$

A razão de pressão (P_2/P_1) pode ser utilizada para determinar a razão de temperatura (T_2/T_1) em ambos os lados da onda de choque, Santana (2013).

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{P_2}{P_1} \left(\frac{\frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} + \frac{P_2}{P_1}}{1 + \frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} \frac{P_2}{P_1}} \right) \quad (24)$$

A temperatura do gás atrás da onda de choque pode ser utilizada para prever a dissociação e ionização do ar. Para cada par de gases há um número de Mach teórico que pode ser alcançado. Este número teórico máximo, indicado por um asterisco sobrescrito, pode ser calculado pela seguinte equação, Santana (2013):

$$M_s^* = \frac{\gamma_1 + 1}{2(\gamma_4 - 1)} \frac{a_1}{a_4} + \sqrt{\left[\frac{\gamma_1 + 1}{2(\gamma_4 - 1)} \frac{a_1}{a_4} \right]^2 + 1} \quad (25)$$

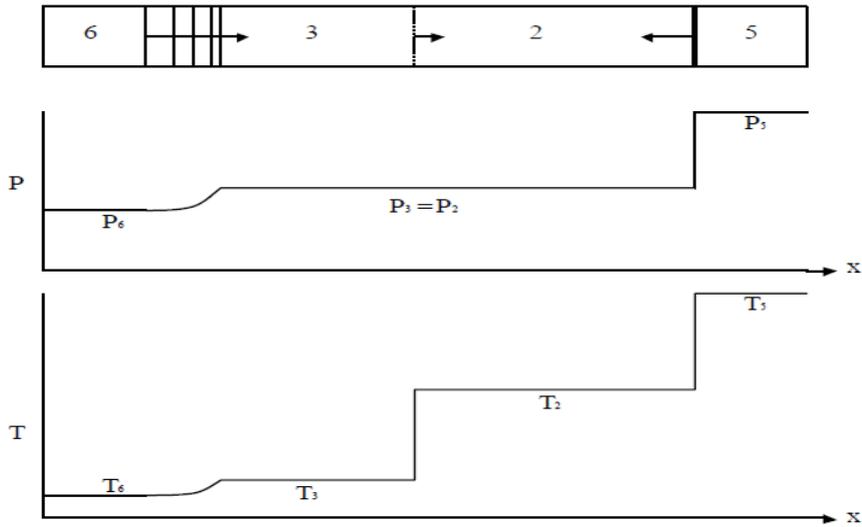
A velocidade da onda de choque refletida depende da velocidade da onda de choque incidente e pode ser determinada pela seguinte equação, Santana (2013):

$$\frac{M_R}{M_R^2 - 1} = \frac{M_s}{M_s^2 - 1} \sqrt{1 + \frac{2(\gamma_1 - 1)}{(\gamma_1 + 1)^2} (M_s^2 - 1) \left(\gamma_1 + \frac{1}{M_s^2} \right)} \quad (26)$$

A onda de choque refletida viaja com velocidade e pressão mais elevada do que a onda incidente, Santana (2013).

A Figura 28 mostra as condições do tubo de choque após reflexão da onda de choque, Santana (2013).

Figura 28 - Condições do tubo de choque após reflexão da onda de choque.



Fonte: Mcmillan (2004).

O aumento de pressão da onda de choque refletida depende da velocidade da onda de choque incidente, essa relação pode ser calculada pela seguinte equação, Santana (2013):

$$\frac{P_5}{P_2} = 1 + \frac{2\gamma_1}{\gamma_1 + 1} (M_R^2 - 1) \quad (27)$$

A onda de choque refletida interrompe o movimento da massa dos gases, de modo que as velocidades de propagação dos gases atrás da onda de choque refletida e a frente onda de choque incidente tendem a zero. A equação (28) mostra a relação de movimento desses gases, Santana (2013):

$$\frac{2a_1}{\gamma_1 + 1} \left(M_s - \frac{1}{M_s} \right) = \frac{2a_2}{\gamma_1 + 1} \left(M_R - \frac{1}{M_R} \right) \quad (28)$$

Os cálculos envolvendo velocidade das moléculas dos gases podem ser determinadas pela equação (29):

$$Mach M = \frac{V}{a} \quad (29)$$

O cálculo da velocidade real da onda deve levar em consideração o movimento de massa dos gases atrás da onda de choque incidente. Essa velocidade pode ser calculada pela seguinte equação, Santana (2013):

$$V_R = M_R a_2 - V_2 \quad (30)$$

Para determinar a relação de pressão das ondas de choque incidente e reflectida, utilizando apenas os dados da onda incidente, a seguinte equação pode ser utilizada, Santana (2013):

$$\frac{P_5}{P_2} = \left(\frac{\frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} + 2 - \frac{P_1}{P_2}}{1 + \frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} \frac{P_1}{P_2}} \right) \quad (31)$$

Com a taxa de compressão conhecida, pode-se determinar a razão das temperaturas, Santana (2013):

$$\frac{T_5}{T_2} = \frac{P_5}{P_2} \left(\frac{\frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} + \frac{P_5}{P_2}}{1 + \frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} \frac{P_5}{P_2}} \right) \quad (32)$$

Neste trabalho todos os cálculos prévios aos ensaios foram feitos usando estas relações unidimensionais para a onda de choque.

3.2. Simulação de escoamento transiente utilizando as equações de Euler.

O processo de discretização das equações de Euler, integração numerica e introdução da técnica de dissipação artificial desenvolvida nesse trabalho teve como referência o trabalho desenvolvido por Azevedo e Oliveira (1994), que é adequado para escoamento compressível e será descrito na sequência.

O trabalho de Azevedo e Oliveira (1994) se concentrou no desenvolvimento de algoritmo em volumes finitos em duas dimensões e não estruturado para solucionar as equações de Euler em fluxos aerodinâmicos instáveis. A ênfase do trabalho é na simulação de fluxos instáveis em aerofólio. Em geral os movimentos instáveis foram considerados com o objetivo de demonstrar a capacidade de implementação e utilização do método para solução de problemas de escoamentos em geral. Soluções estáveis também foram apresentadas e discutidas.

A equação de Euler pode ser escrita na forma integral em duas dimensões cartesianas como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_{\forall} Q dx dy + \int_S (E dy + F dx) = 0 \quad (33)$$

Onde \forall representa a área do volume de controle e S é a fronteira do volume de controle. O vetor de conservação de quantidade Q pode ser escrito como:

$$Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ e \end{bmatrix} \quad (34)$$

Para malhas não estacionárias invíscida, os vetores de fluxos E e F podem ser escritos como:

$$E = \begin{bmatrix} \rho U \\ \rho u U + P \\ \rho v U \\ (e + P)U + x_t p \end{bmatrix} \quad F = \begin{bmatrix} \rho V \\ \rho u V \\ \rho v V + P \\ (e + P)V + y_t p \end{bmatrix} \quad (35)$$

Onde ρ é a massa específica, u e v são as componentes de velocidades cartesianas, e é a energia total por unidade de volume. A pressão P é calculada a partir da equação de estado dos gases perfeitos:

$$P = (\gamma - 1) \left[e - \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) \right] \quad (36)$$

Onde γ é a razão dos calores específicos. As componentes das velocidades podem ser definidas como:

$$U = u - x_t \quad V = v - y_t \quad (37)$$

Onde x_t e y_t representam as componentes de velocidades cartesianas da malha.

As equações bidimensionais de Euler na forma integral foram discretizadas por meio de um procedimento de volumes finitos em malhas triangulares não estruturadas. O algoritmo do presente trabalho representa um esquema de células centradas em que as variáveis atuais representam a média da conservação de quantidades do volume de controle. A média de quantidade das células é definida como:

$$Q_i = \frac{1}{V_{\bar{t}}} \iint_{V_i} Q dx dy = \frac{\partial}{\partial t} (V_{\bar{t}} Q_i) \quad (38)$$

A equação de Euler pode ser reescrita para cada célula (i) do volume de controle como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (V_{\bar{t}} Q_i) + \int_{S_i} (E dy + F dx) = 0 \quad (39)$$

Para cada célula, o volume de controle usado para integração das equações foi formado por cada célula triangular. Os fluxos passando pelas interfaces do volume foram obtidos por média aritmética simples calculada usando as propriedades do volume de controle que compartilham a mesma interface. A integral de superfície da equação (39) pode ser aproximada por um operador convectivo $C(Q_i)$ como:

$$\begin{aligned} \int_{S_i} (E dy + F dx) &= C(Q_i) \\ &= \sum_{k=1}^3 \left[\left(\frac{E_i + E_k}{2} \right) (y_{k_2} - y_{k_1}) - \left(\frac{F_i + F_k}{2} \right) (x_{k_2} - x_{k_1}) \right] \end{aligned} \quad (40)$$

Onde (x_{k_1}, y_{k_1}) e (x_{k_2}, y_{k_2}) são os vértices dos triângulos que definem a interface entre as células (i) e (k). Esses pontos foram sempre ordenados no sentido anti-horário de cada célula do volume de controle, Azevedo e Oliveira (1994).

Os fluxos foram computados calculando as médias das propriedades em cada uma das duas interfaces de células adjacentes.

As equações de Euler são definidas como formas hiperbólicas, não dissipativas da lei de conservação. A solução numérica dessas equações requer a introdução do termo da dissipação artificial afim de evitar oscilações perto da onda de choque e os erros incorporados com as altas frequências. Os termos de dissipação numéricas são formados pelos operadores Laplaciano e harmônico. O termo de dissipação artificial $D(Q_i)$ pode ser escrito como:

$$D(Q_i) = d^{(2)}(Q_i) - d^{(4)}(Q_i) \quad (41)$$

Onde $d^{(2)}(Q_i)$ representa a contribuição do operador Laplaciano e $d^{(4)}(Q_i)$ representa a contribuição do operador harmônico. O operador harmônico é o responsável por corrigir os erros relacionados com as altas frequências de oscilação. O operador harmônico é formado por:

$$d^{(4)}(Q_i) = \sum_{k+1}^3 \frac{\epsilon_{ik}^{(4)}}{2} \left(\frac{V_l}{\Delta t_i} + \frac{V_k}{\Delta t_k} \right) (V^2 Q_k - V^2 Q_i) \quad (42)$$

Onde o somatório de k representa o volume de controle comum nas interfaces com as células i. O operador Laplaciano previne oscilações perto da onda de choque e é construído como:

$$d^{(2)}(Q_i) = \sum_{k+1}^3 \frac{\epsilon_{ik}^{(2)}}{2} \left(\frac{V_l}{\Delta t_i} + \frac{V_k}{\Delta t_k} \right) (Q_k - Q_i) \quad (43)$$

Onde o coeficiente $\epsilon_{ik}^{(2)}$ é definido como:

$$\epsilon_{ik}^{(2)} = k^{(2)} \max(V_l, V_k) \quad (44)$$

Onde v_i é calculado pela normalização do operador Laplaciano como:

$$v_i = \frac{\sum_{k=1}^3 |p_k - p_i|}{\sum_{k=1}^3 (p_k + p_i)} \quad (45)$$

O coeficiente $\epsilon_{ik}^{(4)}$ é definido como:

$$\epsilon_{ik}^{(4)} = \max \left[0, k^{(4)} - \epsilon_{ik}^{(2)} \right] \quad (46)$$

Com base em informações disponíveis nos trabalhos realizados por Jameson (1981) e Mavriplis (1988) as constantes sugeridas para $K^{(2)}$ e $K^{(4)}$ são: $1/4 \leq K^{(2)} \leq 1/2$ e $1/256 \leq K^{(4)} \leq 3/256$. Nesse trabalho os valores das constantes utilizadas foram $K^{(2)} = 1/4$ e $K^{(4)} = 3/256$. Dessa forma a equação de Euler totalmente discretizada e após adição do termo da dissipação artificial pode ser escrita como:

$$\frac{d}{dt} (V_k Q_i) + C(Q_i) - D(Q_i) = 0 \quad (47)$$

A equação 47 é integrada no tempo, utiliza cinco estágios e um esquema híbrido que envolve considerações de passo tempo de explícito de Jameson. Para solucionar essa equação Azevedo e Oliveira (1994) utilizaram o procedimento sugerido por Jameson et al (1987). Esse esquema pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
Q_i^{(0)} &= Q_i^n \\
Q_i^{(1)} &= \frac{V_{\tau}^n}{V_{\tau}^{n+1}} Q_i^{(0)} - \alpha_1 \frac{\Delta t_i}{V_{\tau}^{n+1}} [C(Q_i^{(0)}) - D(Q_i^{(0)})] \\
Q_i^{(2)} &= \frac{V_{\tau}^n}{V_{\tau}^{n+1}} Q_i^{(0)} - \alpha_2 \frac{\Delta t_i}{V_{\tau}^{n+1}} [C(Q_i^{(1)}) - D(Q_i^{(1)})] \\
Q_i^{(3)} &= \frac{V_{\tau}^n}{V_{\tau}^{n+1}} Q_i^{(0)} - \alpha_3 \frac{\Delta t_i}{V_{\tau}^{n+1}} [C(Q_i^{(2)}) - D(Q_i^{(1)})] \\
Q_i^{(4)} &= \frac{V_{\tau}^n}{V_{\tau}^{n+1}} Q_i^{(0)} - \alpha_4 \frac{\Delta t_i}{V_{\tau}^{n+1}} [C(Q_i^{(3)}) - D(Q_i^{(1)})] \\
Q_i^{(5)} &= \frac{V_{\tau}^n}{V_{\tau}^{n+1}} Q_i^{(0)} - \alpha_5 \frac{\Delta t_i}{V_{\tau}^{n+1}} [C(Q_i^{(4)}) - D(Q_i^{(1)})] \\
Q_i^{n+1} &= Q_i^{(5)}
\end{aligned} \tag{48}$$

Onde os subscritos n e $n + 1$ indicam os valores das propriedades no início e final de cada passo de tempo. Os valores usados para os coeficientes α , com base no trabalho de Mavriplis (1988) são:

$$\alpha_1 = \frac{1}{4}, \alpha_2 = \frac{1}{6}, \alpha_3 = \frac{3}{8}, \alpha_4 = \frac{1}{2}, \alpha_5 = 1 \tag{49}$$

Pode-se observar que o operador convectivo $C(Q)$ é avaliado em todos os estágios do processo de integração, enquanto a dissipação artificial é avaliada somente nos dois estágios iniciais. Esse procedimento foi adotado com o objetivo de reduzir os custos e tempo de simulação computacional, Azevedo e Oliveira (1994).

No presente trabalho o passo de tempo local e a suavização do residual foram empregados para acelerar a convergência do processo de simulação em regime estável. O objetivo de implementação do tempo de passo local é de manter aproximadamente constante o número CFL ao longo de todo o campo. O tempo de passo usado para atualizar as variáveis de conservação nas células no regime estável, pode ser calculado por:

$$\Delta t_i = \frac{(CFL)(\Delta s_i)}{(|q| + \alpha i)} \quad (50)$$

Onde (Δs_i) é associado ao comprimento característico da célula i e α é a velocidade do som. A magnitude do vetor de velocidade local é dada por:

$$|q| = \sqrt{u^2 + v^2} \quad (51)$$

(Δs_i) pode ser calculado da seguinte forma:

$$(\Delta s_i) = \min(l_{min}, c_{min}) \quad (52)$$

Onde l_{min} representa o menor lado do triângulo e c_{min} a menor distância entre os centroides de duas células adjacentes, Azevedo e Oliveira (1994).

Para acelerar a convergência da condição estável, a suavização do residual foi empregada. Pode se definir o residual na célula i como:

$$R_i(Q_i) = \frac{1}{Q_i} [C(Q_i) - D(Q_i)] \quad (53)$$

A suavização R_i é implementada substituindo o residual R_i pela média dos residuais da seguinte forma:

$$\bar{R}_i - \bar{V}^2 \bar{R}_i = R_i \quad (54)$$

Onde $\bar{V}^2 \bar{R}_i$ representa o operador laplaciano. Para o esquema de célula centrada aplicada a uma malha triangular tem-se:

$$\bar{V}^2 \bar{R}_i = \sum_{k=1}^3 (\bar{R}_k - \bar{R}_i) \quad (55)$$

Onde o índice k representa o *loop* sobre todas as células vizinhas em torno da célula i .

As condições de contorno foram implementadas com o uso de células fantasmas. Essas células são volumes de controles fictícios definidos na saída do domínio computacional de interesse e que servem somente para implementação das condições de contorno, Azevedo e Oliveira (1994).

Para condição de parede sólida o fluxo deve ser tangente a parede e impõe que a componente de velocidade normal a parede na célula fantasma possui a mesma magnitude de velocidade, mas com sinal oposto da componente normal da célula adjacente. Já a componente tangencial da velocidade na célula fantasma é exatamente igual à da célula adjacente. Outras duas condições são obtidas assumindo gradientes de pressão e temperatura zero na parede. As componentes normais dos vetores de fluxos E e F também são definidos com zero através da interface das paredes de células adjacentes exceto para termos de pressão nas equações de momento e energia, Azevedo e Oliveira (1994).

Duas formas de tratamento para campo distante de paredes sólidas foram implementadas. A primeira assume que o fluxo é livre na condição de campo distante. Porém essa condição introduz erros na solução. O correto tratamento dessa condição de contorno é a implementação da onda não refletida, condição de contorno que permite que a perturbação se distancie da onda. Isso é realizado nesse trabalho com o uso do Riemann invariante. Os Riemann invariantes são avaliados da seguinte forma, Azevedo e Oliveira (1994):

$$R_{\infty}^{-} = q_{n\infty} - \frac{2\alpha_{\infty}}{\gamma - 1}$$

$$R_e^{+} = q_{ne} + \frac{2\alpha_e}{\gamma - 1} \quad (56)$$

Onde o subscrito ∞ denota quantidade de fluxo livre e o subscrito e denota quantidade extrapolada no interior da célula adjacente. A variável q_n é a componente de velocidade normal da superfície de contorno. As seguintes expressões podem ser utilizadas para a componente normal da velocidade e velocidade do som da superfície de contorno, Azevedo e Oliveira (1994):

$$q_{nb} = \frac{1}{2}(R_e^{+} + R_{\infty}^{-}) \quad (57)$$

$$\alpha_b = \frac{\gamma - 1}{4}(R_e^{+} + R_{\infty}^{-}) \quad (58)$$

Outras duas condições de contorno dependem se há fluxo de saída ou entrada na superfície de controle. As seguintes equações foram utilizadas para calcular a massa específica e a componente de velocidade cartesiana na interface da superfície de controle quando o fluxo é de saída ($q_{nb} > 0$), Azevedo e Oliveira (1994):

$$\rho_b = \left(\frac{\rho_e^\gamma a_b^2}{\gamma P_e} \right)^{\frac{1}{1-\gamma}} \quad (59)$$

$$u_b = u_e + (q_{nb} - q_{ne})s_x \quad (60)$$

$$v_b = v_e - (q_{nb} - q_{ne})s_y \quad (61)$$

Onde s_x e s_y são as componentes x e y do fluxo na saída da superfície de controle. Na condição de fluxo de entrada ($q_{nb} < 0$) as equações podem ser expressas como, Azevedo e Oliveira (1994):

$$\rho_b = \left(\frac{\rho_\infty^\gamma a_b^2}{\gamma P_\infty} \right)^{\frac{1}{1-\gamma}} \quad (62)$$

$$u_b = u_\infty + (q_{nb} - q_{n\infty})s_x \quad (63)$$

$$v_b = v_\infty - (q_{nb} - q_{n\infty})s_y \quad (64)$$

Foi implementado um algoritmo para geração automática das malhas triangulares não estruturadas. Esse procedimento foi dividido em quatro etapas: construção dos nós, geração das células triangulares, suavização das malhas e refinamento adaptativo das malhas, Azevedo e Oliveira (1994).

Os cálculos numéricos e simulações realizados com fluxos instáveis não apresentaram resultados satisfatórios. Os autores atribuíram a discrepância dos resultados, quando comparados com os testes realizados por Batina, ao fato que Batina utilizou em seus experimentos 4 estágios de dissipação artificial e no presente trabalho foram utilizados 5 estágios. Os autores também apontaram que o esquema híbrido de Runge - Kutta implementado no trabalho pode ter sido a causa da discrepância observada. Outros testes foram realizados com um esquema de Runge - Kutta tradicional afim de

validar os resultados do presente trabalho, porém os resultados encontrados foram considerados semelhantes com o do presente trabalho, Azevedo e Oliveira (1994).

4. METODOLOGIA

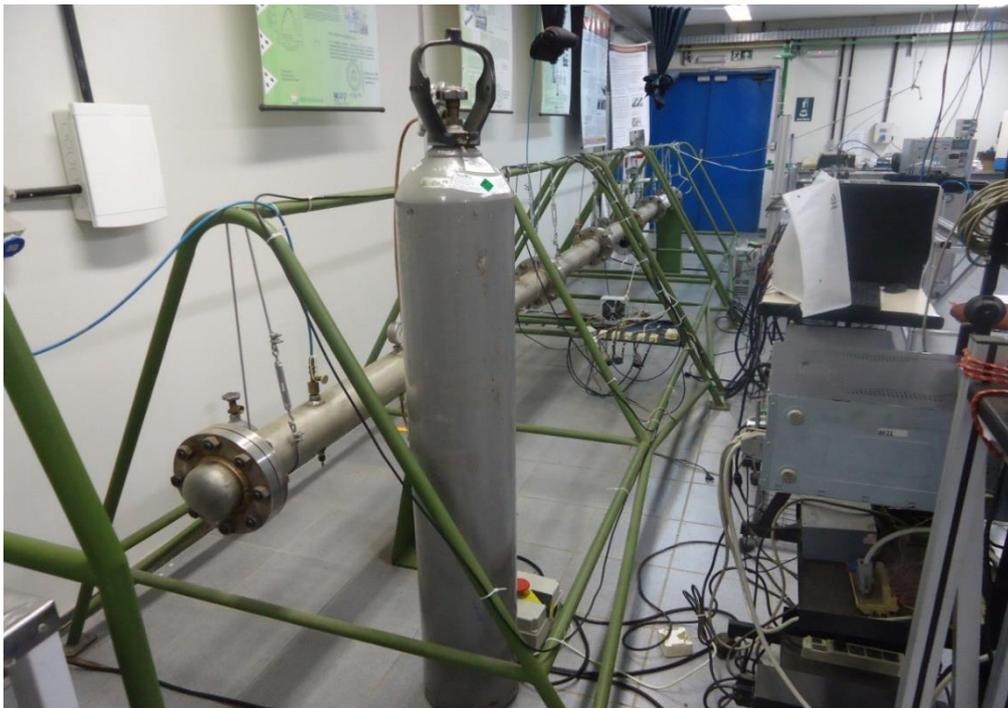
A metodologia consistiu em desenvolver, através de simulação numérica, um método de estudo e análise do processo de combustão na seção conduzida do tubo de choque. Rotinas computacionais foram implementadas para cálculo das propriedades do escoamento e tempo de retardo da ignição após rompimento do diafragma do tubo de choque. Os resultados dessas simulações foram comparados com os testes experimentais realizados por Santana (2013) e outros autores.

4.1. Tubo de choque.

Os testes experimentais conduzidos por Santana (2013) foram realizados no tubo de choque do laboratório de combustão de Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG). O tubo é composto por 6 módulos, com cada módulos medindo 1,00 metro, totalizando 6,00 metros de comprimento total e diâmetro interno de 97,18 milímetros. O tubo é dividido em duas seções: seção condutora e seção conduzida e um diafragma delimita essas seções na metade do tubo. Na seção condutora um gás é mantido até há uma determinada pressão, quando essa pressão atinge um determinado valor preestabelecido, o diafragma se rompe e uma onda de choque é gerada em direção a seção conduzida.

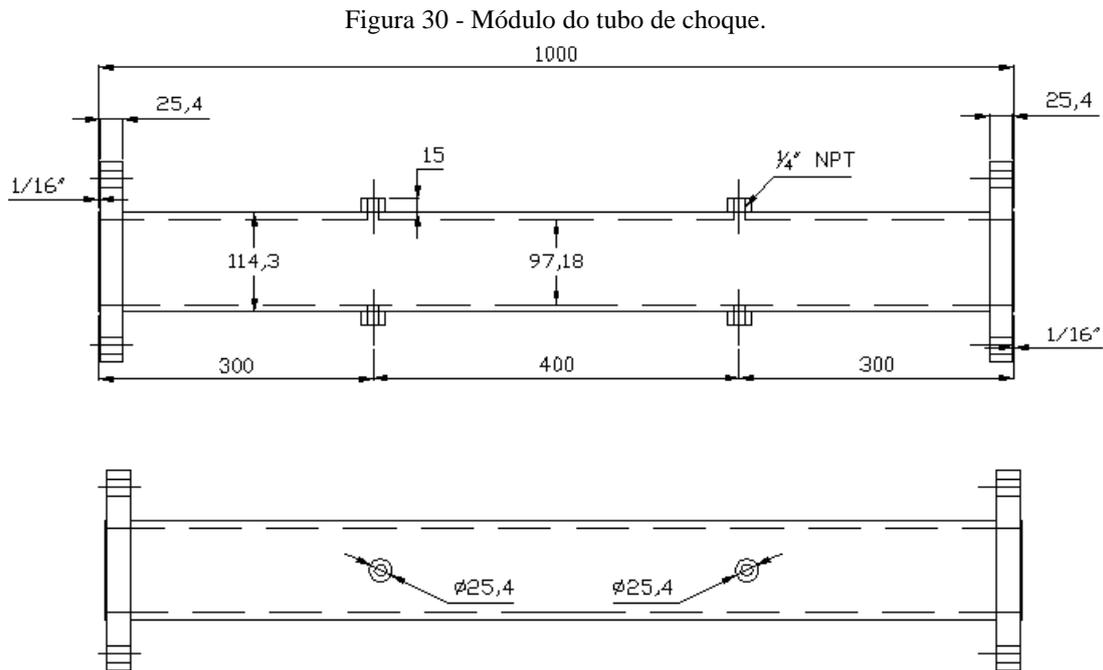
A figura 29 mostra a vista geral do tubo de choque do laboratório de combustão da UFMG.

Figura 29 – Vista tubo de choque.



Fonte: Autor.

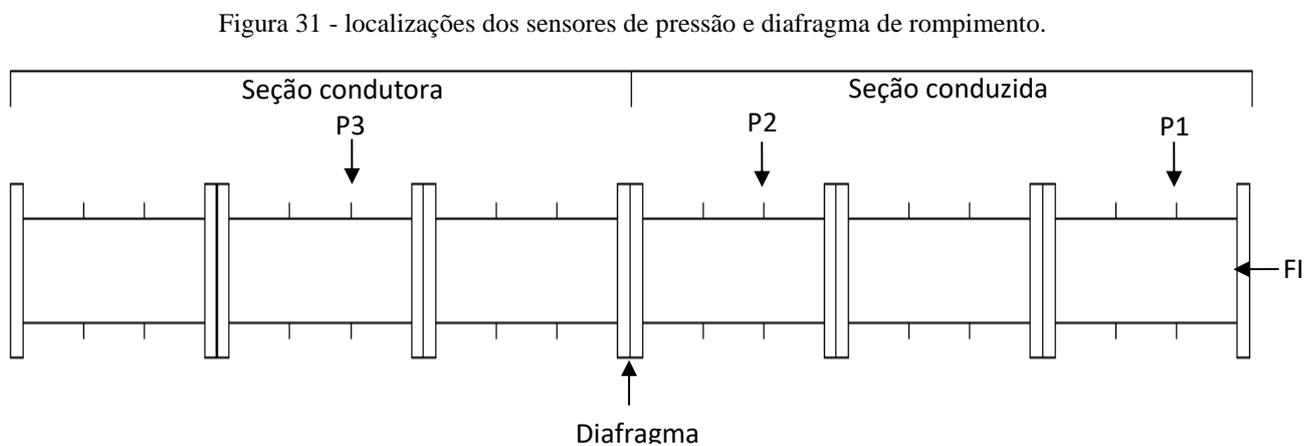
A figura 30 mostra o desenho esquemático e as dimensões de cada módulo do tubo de choque.



Fonte: Autor

Foi utilizado um sensor de pressão na seção condutora e dois sensores de pressão na seção conduzida. O sensor P3 localizado na seção condutora foi utilizado para monitorar a pressão de rompimento do diafragma. O sensor P2 localizado na seção conduzida foi utilizado para controlar a injeção do combustível pelo injetor FI e o sensor P1 também localizado na seção conduzida foi utilizado para calcular o tempo de atraso de ignição, Santana (2013).

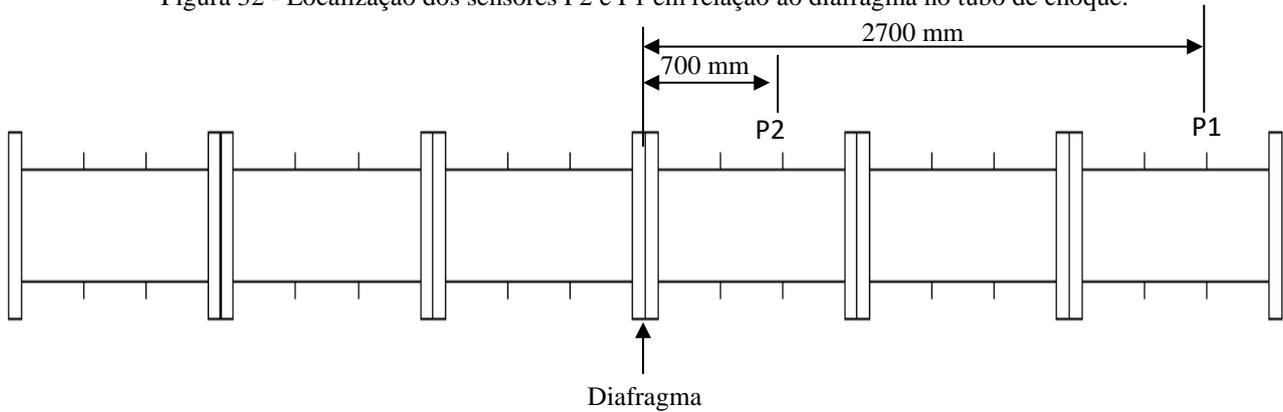
A Figura 31 mostra um desenho esquemático identificando as localizações dos sensores de pressão, injetor de combustível, diafragma, seções condutora e conduzida.



Fonte: Autor

A Figura 32 mostra a localização dos sensores P2 e P1 em relação ao diafragma na seção conduzida.

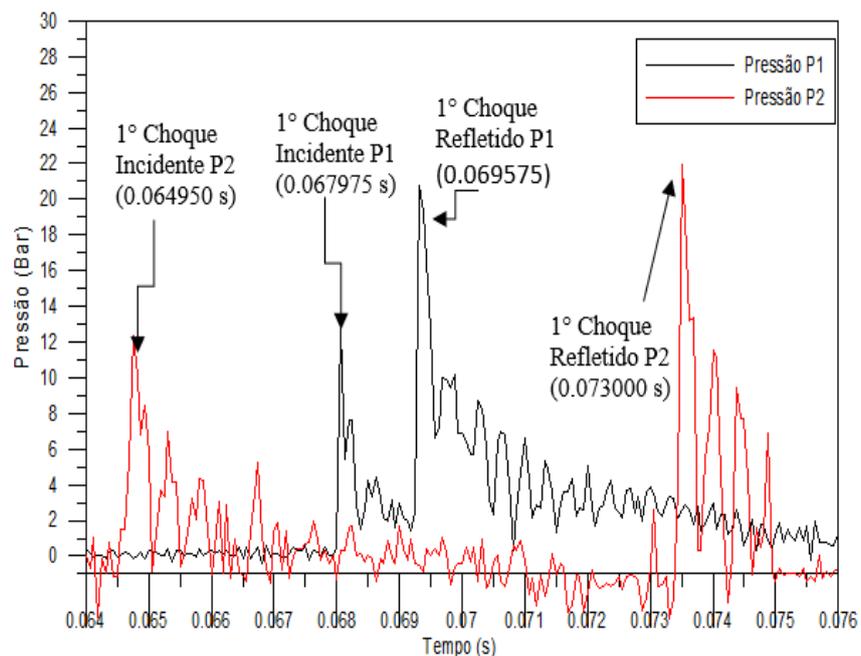
Figura 32 - Localização dos sensores P2 e P1 em relação ao diafragma no tubo de choque.



Fonte: Autor.

A Figura 33 mostra um ensaio realizado no tubo de choque que mostra a passagem da onda de choque pelos sensores após rompimento do diafragma. O sensor P2 localizado a 700 milímetros do diafragma capta a passagem do 1º choque incidente no instante de tempo 0,064950 s. O sensor P1 localizado a 2700 milímetros do diafragma capta a passagem do 1º choque incidente no instante de tempo 0,067975 s. A onda alcança a extremidade do tubo e no movimento de retorno, o sensor P1 capta a passagem do 1º choque refletido no instante de tempo 0,069575 s e na sequência o sensor P2 capta a passagem do 1º choque refletido no instante de tempo 0,073000 s, Santana (2013).

Figura 33 - Teste sem combustão destacando o movimento da onda de choque.



Fonte: Autor.

4.2. Equações adimensionais.

Para melhor convergência e visualização gráfica dos resultados da simulação, as equações dimensionais que envolvem o processo simulação foram substituídas por parâmetros adimensionais, conforme mostrado a seguir. A Equação do gás ideal dimensional pode ser expressa como:

$$\tilde{P} = \tilde{\rho} \cdot \tilde{R} \cdot \tilde{T} \quad (65)$$

Onde:

\tilde{P} é a pressão absoluta em [N/m²];

$\tilde{\rho}$ é massa específica do gás em [kg/m³];

\tilde{R} é a constante do gás em [J/kg K];

\tilde{T} é a temperatura do gás em [K].

A Equação de propagação da velocidade do som dimensional pode ser expressa como:

$$\tilde{a}^2 = \gamma \cdot \tilde{R} \cdot \tilde{T} \quad (66)$$

Onde:

\tilde{a} é a velocidade de propagação do som em [m/s];

γ representa a razão entre calores específicos.

As equações 65 e 66 podem ser manipuladas da seguinte forma:

$$\tilde{R} \cdot \tilde{T} = \frac{\tilde{a}^2}{\gamma} = \frac{\tilde{P}}{\tilde{\rho}} \quad (67)$$

$$\tilde{P} = \tilde{\rho} \cdot \frac{\tilde{a}^2}{\gamma} \quad (68)$$

$$\tilde{T} = \frac{\tilde{P}}{\tilde{\rho} \cdot \tilde{R}} = \frac{\tilde{a}^2}{\gamma \cdot \tilde{R}} \quad (69)$$

As relações de calores específicos podem ser expressas como:

$$\tilde{c}_p - \tilde{c}_v = \tilde{R} \quad (70)$$

$$\tilde{c}_p / \tilde{c}_v = \gamma \quad (71)$$

Onde:

\tilde{c}_p é o calor específico a pressão constante em [J/kg K];

\tilde{c}_v é o calor específico a volume constante em [J/kg K].

As equações 70 e 71 podem ser manipuladas da seguinte forma:

$$\frac{\tilde{c}_p}{\tilde{c}_v} - 1 = \gamma - 1 = \frac{\tilde{R}}{\tilde{c}_v} \quad (72)$$

$$\frac{\tilde{c}_v}{\tilde{R}} = \frac{1}{\gamma - 1} \quad (73)$$

A equação da energia pode ser expressa como:

$$\tilde{e} = \tilde{\rho} \left(\tilde{e}_i + \frac{1}{2} \tilde{q}^2 \right) \quad (74)$$

Onde:

\tilde{e} é a energia em [J];

$\tilde{\rho}$ é massa específica do gás em [Kg/m³];

\tilde{e}_i é o produto do calor específico a volume constante e temperatura absoluta em [[J/kg];

\tilde{q} é a velocidade em [m/s].

A equação 74 pode ser manipulada para seguinte forma:

$$\tilde{e} = \frac{\tilde{P}}{\tilde{T} \cdot \tilde{R}} \left(c_v \cdot \tilde{T} + \frac{1}{2} \tilde{q}^2 \right) \quad (75)$$

$$\tilde{e} = \tilde{P} \cdot \frac{\tilde{c}_v}{\tilde{R}} + \frac{1}{2} \tilde{\rho} \cdot \tilde{q}^2 \quad (76)$$

$$\frac{\tilde{P}}{\gamma - 1} = \tilde{e} - \frac{1}{2}\tilde{\rho}\cdot\tilde{q}^2 \quad (77)$$

$$\tilde{P} = (\gamma - 1) \cdot \left(\tilde{e} - \frac{1}{2}\tilde{\rho}\cdot\tilde{q}^2 \right) = (\gamma - 1) \left[\tilde{e} - \frac{1}{2}\tilde{\rho}(\tilde{u}^2 - \tilde{v}^2) \right] \quad (78)$$

Onde:

\tilde{P} é a pressão absoluta em [N/m²];

\tilde{u} é a velocidade na direção x em [m/s];

\tilde{v} é a velocidade na direção y em [m/s].

As equações adimensionais podem ser expressas da seguinte forma:

$$P = \frac{\tilde{P}}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty^2} \quad (79)$$

$$\rho = \frac{\tilde{\rho}}{\tilde{\rho}_\infty} \quad (80)$$

$$T = \frac{\tilde{T}}{\tilde{T}_\infty} = \frac{\tilde{a}^2}{\tilde{a}_\infty^2} = a^2 = \gamma \frac{P}{\rho} \quad (81)$$

$$e = \frac{\tilde{e}}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty^2} \quad (82)$$

$$u = \frac{\tilde{u}}{\tilde{a}_\infty} \quad v = \frac{\tilde{v}}{\tilde{a}_\infty} \quad a = \frac{\tilde{a}}{\tilde{a}_\infty} \quad \sqrt{\gamma \frac{P}{\rho}} \quad (83)$$

$$\tilde{q}^2 = \tilde{u}^2 - \tilde{v}^2 = \tilde{a}_\infty^2 (u^2 + v^2) \rightarrow q^2 = u^2 + v^2 \quad (84)$$

$$M = \frac{\tilde{q}}{\tilde{a}_\infty} = \sqrt{(u^2 + v^2)} = q \quad (85)$$

$$\frac{\tilde{P}}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty^2} = \frac{(\gamma - 1)}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty^2} \left[\tilde{e} - \frac{1}{2}\tilde{\rho}(\tilde{u}^2 - \tilde{v}^2) \right] \quad (86)$$

$$P = (\gamma - 1) \left[e - \frac{1}{2} \rho (u^2 - v^2) \right] \quad (87)$$

$$e = \frac{P}{(\gamma - 1)} + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) \quad (88)$$

O número de Courant utilizando variáveis dimensionais pode ser expresso por:

$$CFL_i = \frac{(|\tilde{q}| + \tilde{a}_i) \Delta \tilde{t}}{\Delta \tilde{s}_i} \quad (89)$$

Onde:

CFL_i é o número de Courant;

$|\tilde{q}|$ é a velocidade na direção em [m/s];

\tilde{a}_i é a velocidade de propagação do som em [m/s];

$\Delta \tilde{t}$ é o passo de tempo em [s];

$\Delta \tilde{s}_i$ é o passo de espaço em [m]

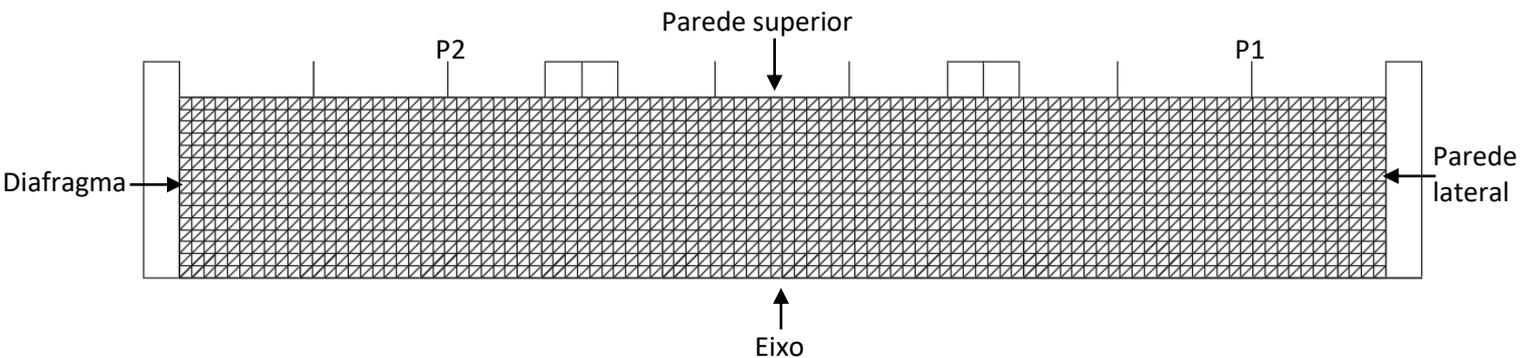
4.3. Construção das malhas.

Uma rotina computacional foi implementada em linguagem Pascal orientado a objetos, usando o ambiente integrado *Lazarus* para construção das malhas. Foram gerados 100 pontos horizontais, que correspondem ao comprimento da seção conduzida (3000 mm) e 50 pontos na vertical, que correspondem ao raio da seção transversal do tubo de choque (48,60 mm) gerando um total de 5000 células retangulares. A distância entre os pontos adotada foi de 1 mm. A rotina de programação implementada para construção da malha retangular da seção conduzida do tubo de choque encontra-se na seção de apêndice.

A leitura da malha iniciou-se no ponto (0, 0) correspondente a extremidade inferior esquerda do tubo de choque e seguiu verticalmente pela parede lateral do tubo até o ponto (0, 50) que corresponde à extremidade superior esquerda. Na sequência o ponto (0, 1) e assim por diante até o último ponto da malha (50, 100) que corresponde à extremidade superior direita do tubo de choque. Cada célula retangular da malha foi dividida em duas triangulares totalizando uma malha com 10000 células triangulares. A rotina de programação implementada para leitura dos pontos da malha, geração e leitura das coordenadas da malha triangular encontra-se na seção de apêndice.

A figura 34 mostra a malha triangular não estruturada gerada ambiente integrado *Larazus*, as superfícies do diafragma, eixo, parede superior e parede lateral da seção conduzida do tubo de choque.

Figura 34 - Superfícies de rompimento do diafragma, eixo, parede superior e parede lateral da seção conduzida do tubo de choque.



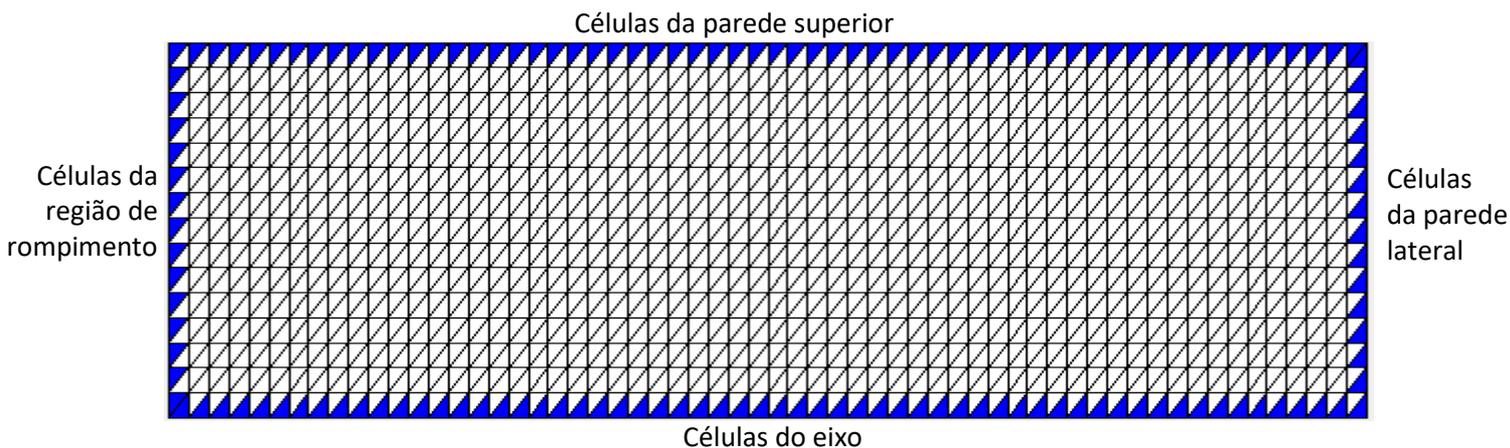
Fonte: Autor.

Cada célula foi identificada conforme a posição ocupada na malha. As células que ocupam a primeira coluna da malha, onde ocorre o rompimento do diafragma foram chamadas de célula diafragma. Células que se encontram em contato com a parede superior do tubo foram chamadas células da parede superior, células que se encontram na última coluna da malha e em contato com a extremidade final do tubo foram chamadas de células da parede lateral, células que se encontram em contato com a linha de simetria foram chamadas de células do eixo e as intermediárias foram chamadas de células vizinhas.

O comprimento total da seção conduzida é de 3000 mm (três módulos de 1000 mm) e o diâmetro interno é de 97,18 mm. Para modelagem e simulação foi utilizado a metade superior da seção conduzida dividida em quatro superfícies. Superfície do diafragma, que corresponde ao local em que há o fluxo de massa proveniente da seção condutora, região essa que corresponde ao intervalo que se origina na linha de simetria horizontal da seção conduzida e vai até 48,60 mm, que corresponde à metade do diâmetro interno do tubo. A superfície do eixo que corresponde a linha de simetria do tubo de choque, superfície da parede superior e superfície lateral.

A figura 35 destaca em sombreado a posição das células da região de rompimento do diafragma, paredes laterais, eixo de simetria e parede superior na malha.

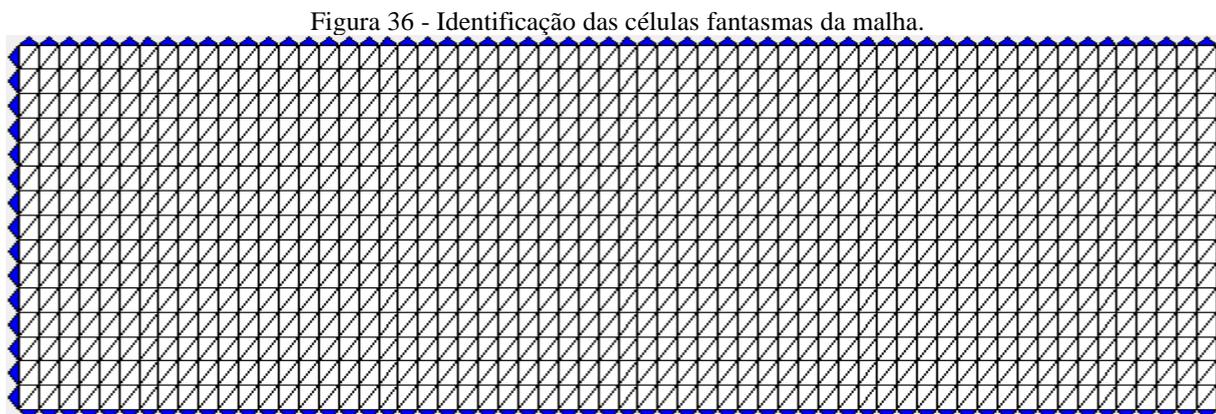
Figura 35 – Posição das células da região de rompimento do diafragma, paredes laterais, eixo e parede superior.



Fonte: Autor.

Foram criadas células denominadas de fantasma para estabelecer as condições de contorno necessárias para simulação. A rotina de programação implementada para geração das células fantasmas encontra-se na seção de anexos.

A figura 36 destaca em sombreado a posição das células dos fantasmas na malha.



Fonte: Autor.

4.4. Condições de contorno.

As condições de contorno estabelecidas no momento de rompimento do diafragma foram as seguintes: Nas células do diafragma foi estabelecido um valor inicial para massa específica, pressão e componentes das velocidades horizontal e vertical para a massa de ar. Essas condições de contorno correspondem às condições iniciais da seção condutora no momento de rompimento do diafragma. Nas células da parede superior as velocidades tanto verticais quanto horizontais foram iguais em

módulo das células vizinhas, mas com sinal contrário. Essas condições foram estabelecidas para garantir que não houvesse fluxo na parede superior do tubo. Nas células do eixo foi estabelecido velocidade vertical zero e velocidade horizontal igual em módulo e mesmo sinal em relação as células vizinhas. Essas condições garantiram que a onda deslocasse somente na direção horizontal. Na parede lateral as velocidades tanto verticais quanto horizontais foram iguais em módulo, mas com sinal contrário, essas condições garantiu o retorno da onda após alcançar extremidade do tubo de choque.

4.5. Cálculo das propriedades do escoamento antes e após o rompimento do diafragma.

As propriedades das células e células fantasmas foram calculadas aplicando-se as condições de contorno descritas na seção anterior e a metodologia de discretização das equações bidimensionais de Euler desenvolvida por Azevedo e Oliveira (1994) e apresentadas na seção 3.2. A rotina de programação implementada para discretização das equações de Euler encontra-se na seção de apêndice e o cálculo dos fluxos adimensionais serão mostrados a seguir.

Equação de conservação de quantidade de movimento adimensionalizada.

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} (\tilde{Q}\tilde{V}) = - \oint \vec{P} \cdot d\vec{s} \quad (90)$$

$$\tilde{V} \frac{\partial \tilde{Q}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{Q} \frac{\partial \tilde{V}}{\partial \tilde{t}} = - \oint \vec{P} \cdot d\vec{s} \quad (91)$$

Para volume (\tilde{V}) constante no tempo tem-se:

$$\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial \tilde{t}} = - \frac{1}{\tilde{V}} \oint \vec{P} \cdot d\vec{s} \quad (92)$$

Utilizando variáveis adimensionais tem-se:

$$\frac{\tilde{V}}{(L_\infty/100)^3} \frac{\partial \tilde{Q}}{\partial \tilde{t}} \left(\frac{100a_\infty}{L_\infty} \right) = - \oint \vec{P} \cdot \frac{d\vec{s}}{(L_\infty/100)^2} \frac{1}{\left(\frac{L_\infty}{100} \right) \left(\frac{100a_\infty}{L_\infty} \right)} \quad (93)$$

$$\Psi \frac{\partial \tilde{Q}}{\partial t} = -\frac{1}{\tilde{a}_\infty} \oint \vec{\tilde{P}} \cdot d\vec{s} \quad (94)$$

$$\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial t} = -\frac{1}{\Psi} \oint \left[\left(\frac{1}{\tilde{a}_\infty} \right) \vec{\tilde{P}} \right] \cdot d\vec{s} \quad (95)$$

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty^2} \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \tilde{\rho} \\ \tilde{\rho} \tilde{u} \\ \tilde{\rho} \tilde{v} \\ \tilde{e} \end{bmatrix} = \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ e \end{bmatrix} \quad (96)$$

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty^2} \end{bmatrix} \left(\frac{1}{\tilde{a}_\infty} \right) \begin{bmatrix} \tilde{\rho} \tilde{u} \\ \tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{u} + \tilde{P} \\ \tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{v} \\ (\tilde{e} + \tilde{P}) \tilde{u} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\rho} u \\ \tilde{\rho} \tilde{u} u + \tilde{P} / \tilde{a}_\infty \\ \tilde{\rho} \tilde{u} v \\ (\tilde{e} + \tilde{P}) u \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u u + P \\ \rho u v \\ (e + P) u \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty^2} \end{bmatrix} \left(\frac{1}{\tilde{a}_\infty} \right) \begin{bmatrix} \tilde{\rho} v \\ \rho u v \\ \rho v^2 + P \\ (e + P) v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\tilde{\rho}_\infty \tilde{a}_\infty^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\rho} v \\ \tilde{\rho} \tilde{u} v \\ \tilde{\rho} \tilde{v} v + \tilde{P} / \tilde{a}_\infty \\ (\tilde{e} + \tilde{P}) v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho u v \\ \rho v v + P \\ (e + P) v \end{bmatrix}$$

Portanto, as equações de conservação adimensionalizadas são idênticas às dimensionais.

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = -\frac{1}{\Psi} \oint \vec{P} \cdot d\vec{s}$$

4.6. Análise de ignição térmica.

A análise de ignição térmica foi feita comparando os resultados experimentais conduzidos por outros autores cujos testes mais se aproximaram dos ensaios realizados por Santana (2013). Para ensaios com etanol foi utilizada a correlação utilizada por Cancino (2009), para testes com Diesel foi utilizada a correlação de Honing (2001) e para biodiesel foi utilizada a correlação de Walton et. al (2011).

Os dados experimentais de tempos de atraso de ignição realizados por Cancino (2009) com etanol para razão combustível/ar igual a 1 foram correlacionados pela seguinte regressão linear:

$$\tau = 10^{-1,79} \exp\left(\frac{12400}{T}\right) \cdot P^{-0,83} \quad (97)$$

Onde:

τ é o tempo de atraso de ignição em [μ s];

T é a temperatura em [K];

P é a pressão em [bar].

Os dados experimentais de tempos de atraso de ignição realizados por Honing (2001) com Diesel para diferentes concentrações de oxigênio e razão combustível/ar igual a 1 foram correlacionados pela seguinte regressão linear:

$$\tau = 1,86 \cdot 10^{-6} \cdot X_{O_2}^{-0,67} \exp\left(\frac{48100}{R \cdot T}\right) \cdot P^{-0,54} \quad (98)$$

Onde:

τ é o tempo de atraso de ignição em [μ s];

T é a temperatura em [K];

P é a pressão em [atm];

X_{O_2} é a concentração de oxigênio;

R é a constante do gás em [J/kg. K].

Os dados experimentais de tempos de atraso de ignição realizados por Walton et. al (2011) com methyl butanoate para diferentes razões combustível/ar e pressão de 10 atm. foram correlacionados pela seguinte regressão linear:

$$\tau = 0,0032 \cdot X_{O_2}^{-1,62} \phi^{-0,77} \exp\left(\frac{30300}{R \cdot T}\right) \cdot P^{-1,21} \quad (99)$$

Onde:

τ é o tempo de atraso de ignição em [ms];

T é a temperatura em [K];

P é a pressão em [atm.];

X_{O_2} é a concentração de oxigênio;

ϕ é razão combustível / ar;

R é a constante do gás em [J/kg. K].

4.7. Critério de ignição térmica.

Implementou-se uma rotina computacional para calcular os tempos de atrasos de ignição dos combustíveis utilizando um mecanismo global de ignição térmica. O mecanismo global é um modelo em que os elementos químicos gerados no processo de combustão são dados diretamente pela relação de conservação de massa entre produtos e reagentes. Nesse cálculo considerou-se que a mistura já estava formada devido a temperatura e pressão dentro da seção conduzida e que a queima foi instantânea. Um procedimento semelhante foi usado na equação de cinética global para o combustível. Os parâmetros adimensionais de pressão e temperatura de cada célula foram transformados em parâmetros dimensionais, conforme seguintes relações:

$$T1_{Dim} = T_{Adim} \cdot T_{doo} \quad (100)$$

Onde:

$T1_{Dim}$ é a temperatura dimensional em [K];

T_{Adim} é a temperatura adimensional;

T_{doo} é a temperatura infinita em [K];

$$P1_{Dim} = \frac{(P1_{adim} \cdot RO_{doo} \cdot a_{oo}^2)}{100000} \quad (101)$$

Onde:

$P1_{Dim}$ é a pressão dimensional em [bar];

$P1_{Adim}$ é a pressão adimensional;

RO_{doo} é a massa específica infinita em $[kg/m^3]$;

a_{oo} é a velocidade de propagação do som no meio em $[m/s]$.

O tempo de atraso de ignição foi calculado conforme o combustível testado (etanol, Diesel ou biodiesel) e utilizando correlações obtidas pelas equações 97, 98 ou 99, respectivamente. As células que apresentaram tempo maior que o tempo de ignição, queimavam instantaneamente. Nessas células a temperatura dimensional foi calculada considerando o balanço de energia em uma célula adiabática e combustão completa:

$$T2_{Dim} = \frac{FA_{Est} \cdot PCI}{cpAr} + T1_{Dim} \quad (102)$$

Onde:

$T2_{Dim}$ é a temperatura dimensional das células queimadas em $[K]$;

$T1_{Dim}$ é a temperatura dimensional não queimadas em $[K]$;

FA_{Est} é a razão combustível/ar estequiométrica;

PCI é o poder calorífico inferior do combustível em $[J/kg.K]$;

$cpAr$ é o calor específico do ar em $[J/kg.K]$.

A pressão dimensional das células queimadas foi calculada da seguinte forma:

$$P2_{Dim} = Q[Ro] \cdot RO_{doo} \cdot R_{ar} \cdot T2_{Dim} \quad (103)$$

Onde:

$P2_{Dim}$ é a pressão dimensional das células queimadas em $[N/m^2]$;

$Q[Ro]$ é a massa específica adimensional;

RO_{doo} é a massa específica infinita em $[kg/m^3]$;

R_{ar} é a constante do gás em $[J/kg.K]$;

$T2_{Dim}$ é a temperatura dimensional das células queimadas em $[K]$.

A pressão adimensional das células queimadas foi calculada da seguinte forma:

$$P2_{adim} = \frac{P2_{Dim}}{RO_{doo} \cdot a_{oo}^2} \quad (104)$$

Onde:

$P2_{Adim}$ é a pressão adimensional;

$P2_{Dim}$ é a pressão dimensional das células queimadas em [N/m²];

RO_{doo} é a massa específica infinita em [kg/m³];

a_{oo} é a velocidade de propagação do som no meio em [m/s].

A energia das células queimadas foi calculada da seguinte forma:

$$Q[e] = \frac{P2_{Adim}}{(\gamma - 1)} + 0,5 \cdot Q[Ro] \cdot (Q[Rou]^2 + Q[Rov]^2) \quad (105)$$

Onde:

$Q[e]$ é a energia das células queimadas;

$P2_{Adim}$ é a pressão adimensional;

γ é a razão de calores específicos;

$Q[Ro]$ é a massa específica adimensional;

$Q[Rou]$ é a componente horizontal da velocidade;

$Q[Rov]$ é a componente vertical da velocidade.

A rotina de programação implementada para análise e critério de ignição térmica encontram-se na seção de apêndice.

A previsão para tempo de atraso de ignição da mistura Diesel e biodiesel foi feita considerando a seguinte relação:

$$\tau_{ignmistura} = X_{Diesel} \cdot \tau_{ignDiesel} + X_{biodiesel} \cdot \tau_{ignbiodiesel} \quad (106)$$

Onde:

$\tau_{ignmistura}$ é o tempo de atraso de ignição da mistura Diesel e biodiesel;

X_{Diesel} é a fração molar do Diesel na mistura;

$\tau_{ignDiesel}$ é o tempo de atraso de ignição do Diesel;

$X_{biodiesel}$ é a fração molar do biodiesel na mistura;

$\tau_{ignbiodiesel}$ é o tempo de atraso de ignição do biodiesel.

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados dos tempos de atraso de ignição medidos por Santana (2013) no tubo de choque, análise dos parâmetros da onda de choque sem combustão e tempo de atraso de ignição simulados. Em seguida é estabelecida uma correlação dos testes experimentais e ensaios de simulação.

5.1. Análise dos testes experimentais realizados no tubo de choque, Santana (2013).

Os testes experimentais foram realizados com os seguintes combustíveis: Diesel S25 (25 p.p.m. de enxofre), etanol aditivado com 5% de aditivo para aumentar o número de cetano, biodiesel B100 e Diesel de referência com número de cetano conhecido. Esses testes foram realizados nas seguintes condições iniciais: temperatura do ar na seção condutora de 25 °C, temperatura da mistura ar combustível na seção conduzida de 110 a 130 °C, pressão de rompimento do diafragma de 32 bar e pressão de injeção do combustível de 300 bar, Santana (2013).

A Figura 37 mostra a vista geral do tubo de choque destacando seção conduzida.

Figura 37 - Vista geral do tubo de choque.



Fonte: Santana (2013).

A Figura 38 mostra a seção conduzida destacando as mantas elétricas utilizadas para aquecimento e o injetor de combustível.

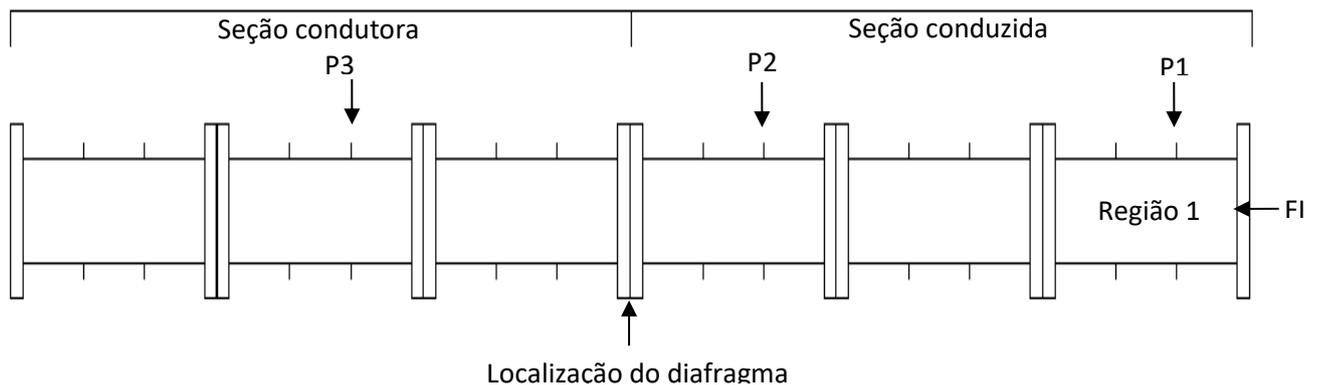
Figura 38 - Manta de aquecimento e injetor de combustível.



Fonte: Santana (2013).

A Figura 39 mostra o desenho esquemático identificando as localizações dos sensores de pressão na seções condutora e conduzida, diafragma e injetor de combustível.

Figura 39 - localizações dos sensores de pressão, diafragma e injetor de combustível.

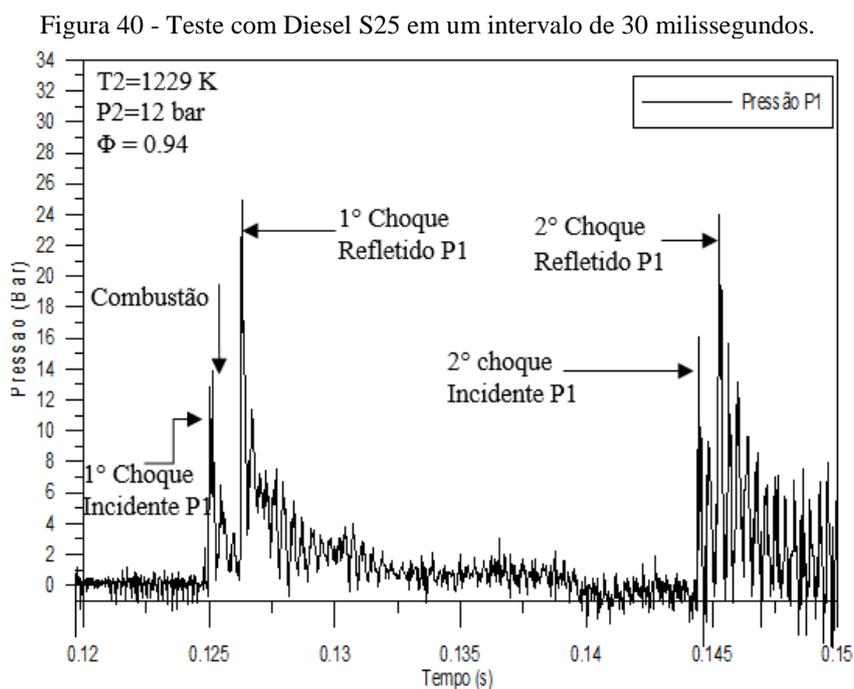


Fonte: Autor

O sensor de pressão P3 monitora a pressão na seção condutora e a pressão de ruptura do diafragma, o sensor de pressão P2 indica o momento de passagem da onda após a ruptura do diafragma. Esta informação é usada para controlar e definir o momento de injeção de combustível. O sensor de pressão P1 indica a passagem da onda de choque na região 1 onde ocorre a combustão. O injetor de combustível FI injeta combustível no tubo de choque no momento em que o sensor P2 detecta a

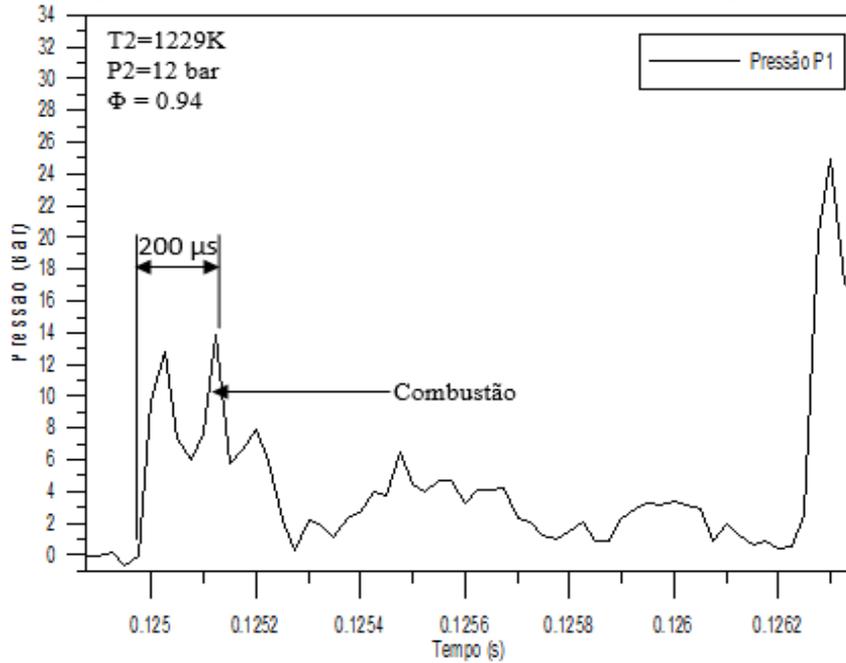
passagem da onda de choque. O tempo de atraso da ignição foi calculado pela diferença de tempo entre a passagem da onda de choque e o pico de combustão registrados pelo sensor P1, Santana (2013).

A Figura 40 apresenta o resultado do teste com Diesel S25 em um intervalo de 30 milissegundos. O sensor P1 detecta a passagem da onda de choque incidente no instante de tempo (0,125025 s) e depois de aproximadamente 1,2 milissegundos (0,12630 s) o sensor detecta a passagem da onda de choque refletida. Após aproximadamente 18,5 milissegundos, em relação ao primeiro choque incidente, o sensor detecta o segundo choque incidente (0,143752 s) e após 1,2 milissegundos detecta o segundo choque refletido (0,14587 s). Entre o primeiro choque incidente e o primeiro refletido é gerado um pico de pressão que corresponde a ignição da mistura ar combustível dentro do tubo de choque, Santana (2013).



A Figura 41 apresenta o teste com Diesel S25 em um intervalo de 1,5 milissegundos. O primeiro pico de pressão refere-se a passagem da onda de choque incidente pelo sensor P1, conforme comentado anteriormente, e o segundo refere-se à ignição da massa de ar e combustível. O tempo de atraso de ignição, tempo decorrido entre o início da injeção e início da combustão, foi de 200 μ s. O cálculo desse tempo levou em consideração o momento em que o sensor P1 detectou a passagem da onda de choque (0,124950 s) e o pico final de combustão (0,125150 s), Santana (2013).

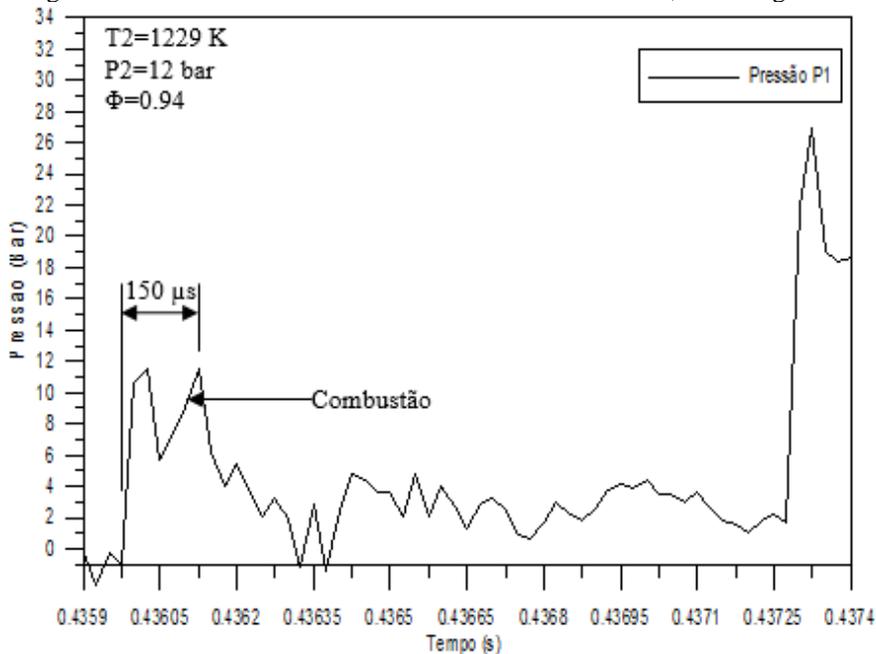
Figura 41 - Teste com Diesel S25 no intervalo de 1,5 milissegundos.



Fonte: Santana (2013).

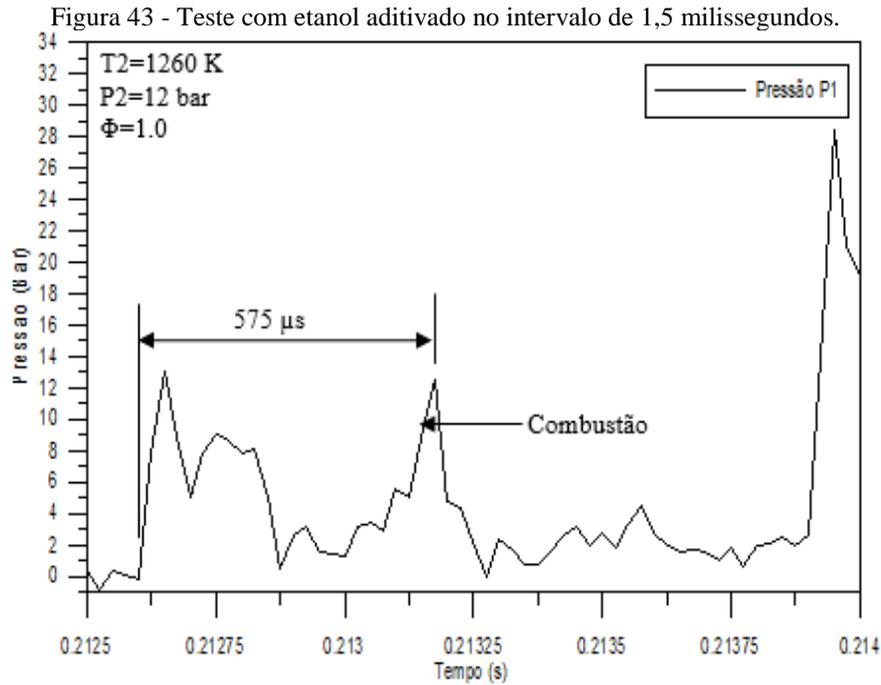
A Figura 42 apresenta o teste com Diesel de referência em um intervalo de 1,5 milissegundos. O tempo de atraso de ignição foi de 150 μs .

Figura 42 - Teste com Diesel de referência no intervalo de 1,5 milissegundos.

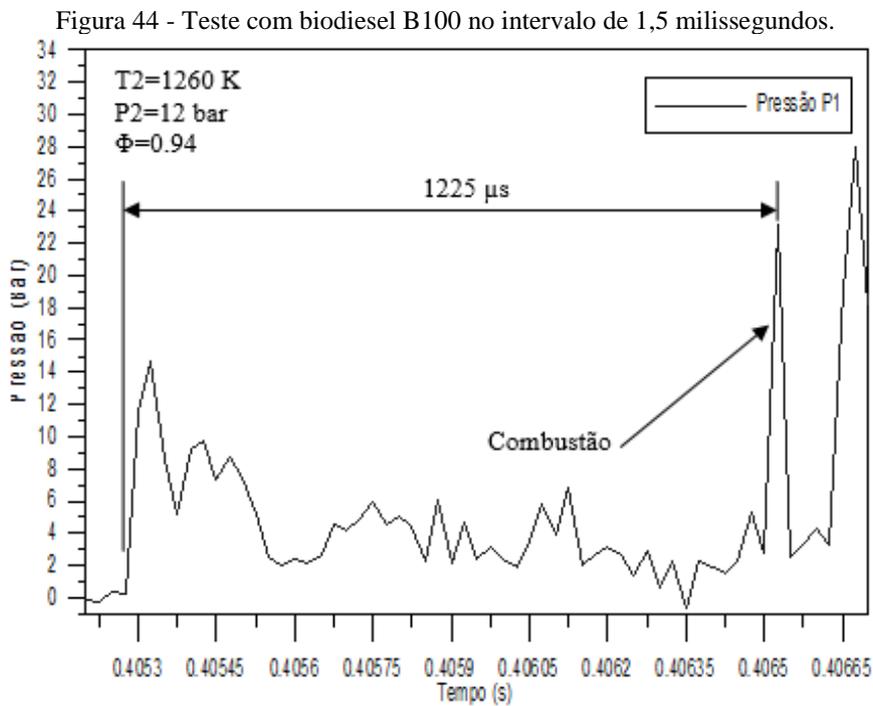


Fonte: Santana (2013).

A Figura 43 apresenta o teste com etanol aditivado em um intervalo de 1,5 milissegundos. O tempo de atraso de ignição foi de 575 μs .



A Figura 44 apresenta o teste com biodiesel B100 em um intervalo de 1,5 milissegundos. O tempo de atraso de ignição foi de 1225 μ s.



A Tabela 6 mostra a relação ar/combustível, pressão e temperatura do choque, número de cetano e tempos de atraso de ignição medidos no tubo de choque por Santana (2013). Destaca-se que em todos os ensaios a ignição ocorreu entre o primeiro choque incidente e o primeiro choque refletido

detectados pelo sensor P1. Esse fato evidencia que somente o choque incidente foi suficiente para ocorrência da combustão dentro do tubo de choque.

Tabela 6 – Tempos de atraso de ignição medidos por Santana (2013).

Testes com injeção de combustível					
Combustível	Φ	P ₂ (bar)	T ₂ (K)	$\tau_{\text{ing.}}$ (μs)	Número cetano
Diesel S25	0,94	12	1229	200	43
Diesel S25	0,94	12	1229	200	43
Diesel S25	0,94	12	1260	225	43
Diesel S25	0,94	12	1250	225	43
Diesel S25	0,94	12	1260	225	43
Diesel S25	0,94	12	1290	175	43
Diesel S25	0,94	12	1292	175	43
Diesel S25	0,94	12	1280	225	43
Etanol aditivado	1,00	12	1230	500	-
Etanol aditivado	1,00	12	1240	500	-
Etanol aditivado	1,00	12	1260	575	-
Etanol aditivado	1,00	12	1290	525	-
Etanol aditivado	1,00	12	1292	525	-
Etanol aditivado	1,00	12	1229	575	-
Biodiesel B100	0,92	12	1230	1125	38
Biodiesel B100	0,92	12	1255	900	38
Biodiesel B100	0,92	12	1260	975	38
Biodiesel B100	0,92	12	1240	975	38
Biodiesel B100	0,92	12	1234	1000	38
Biodiesel B100	0,92	12	1245	1075	38
Biodiesel B100	0,92	12	1252	1025	38
Diesel Referencia	0,94	12	1230	150	52
Diesel Referencia	0,94	12	1240	175	52
Diesel Referencia	0,94	12	1280	175	52
Diesel Referencia	0,94	12	1265	150	52
Diesel Referencia	0,94	12	1240	200	52
Diesel Referencia	0,94	12	1255	150	52
Diesel Referencia	0,94	12	1280	150	52
Diesel Referencia	0,94	12	1235	125	52

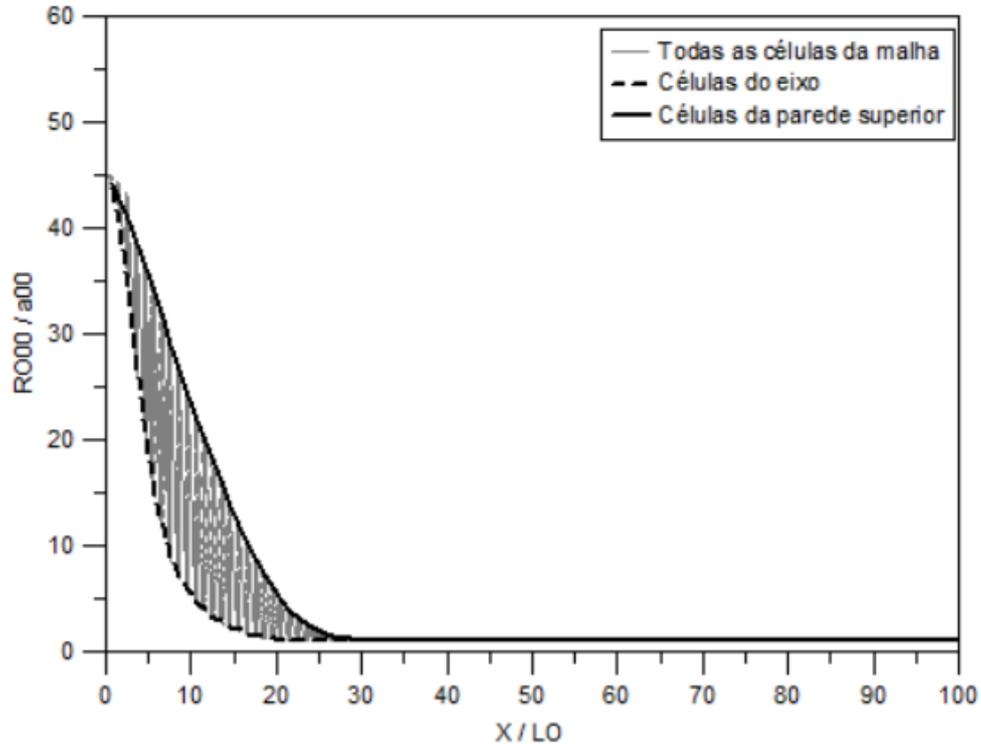
Fonte: Autor.

5.2. Análise dos ensaios de simulação dos parâmetros da onda de choque sem combustível.

Nos gráficos mostrados nessa seção, as linhas contínuas clareadas representam os parâmetros intermediários de todas as células da malha, as linhas contínuas escuras mostram os parâmetros das células mais próximas da parede superior e as linhas pontilhadas mostram os parâmetros das células mais próximas do eixo de simetria do tubo de choque.

A figura 45 mostra o resultado de simulação da massa específica adimensional sem combustível 4 milissegundos após o rompimento do diafragma para uma razão de massa específica de 45.

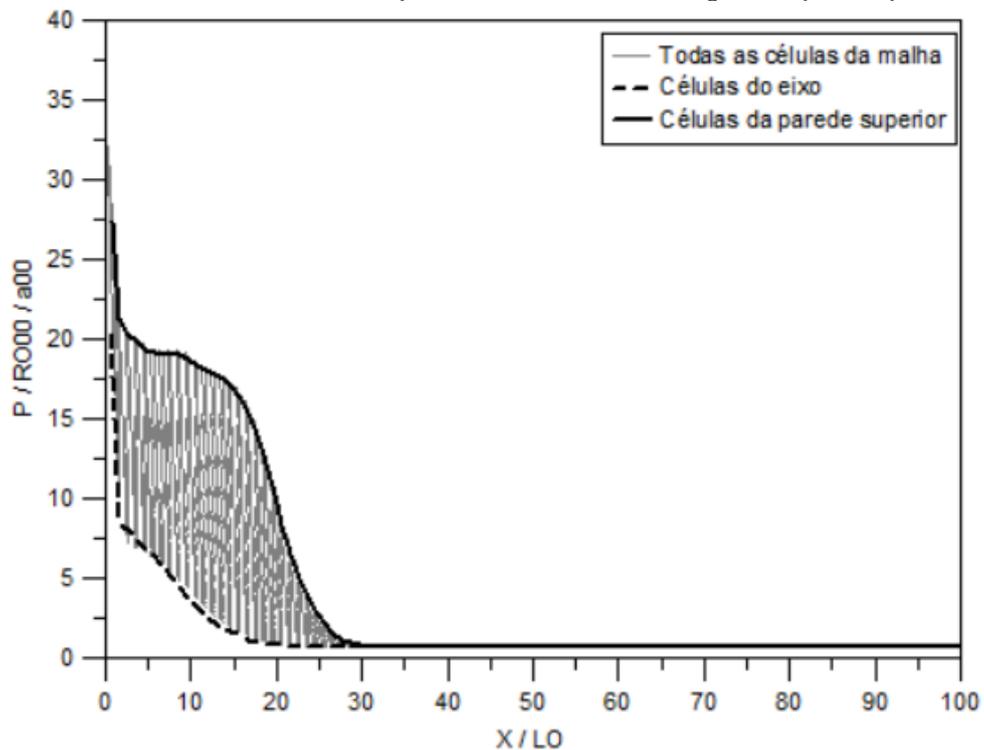
Figura 45 – Massa específica adimensional do choque sem combustão 4 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor.

A figura 46 mostra o resultado de simulação da pressão adimensional da onda de choque 4 milissegundos após o rompimento do diafragma para uma razão de pressão de 40.

Figura 46 – Pressão adimensional da onda de choque sem combustão 4 milissegundos após rompimento do diafragma.

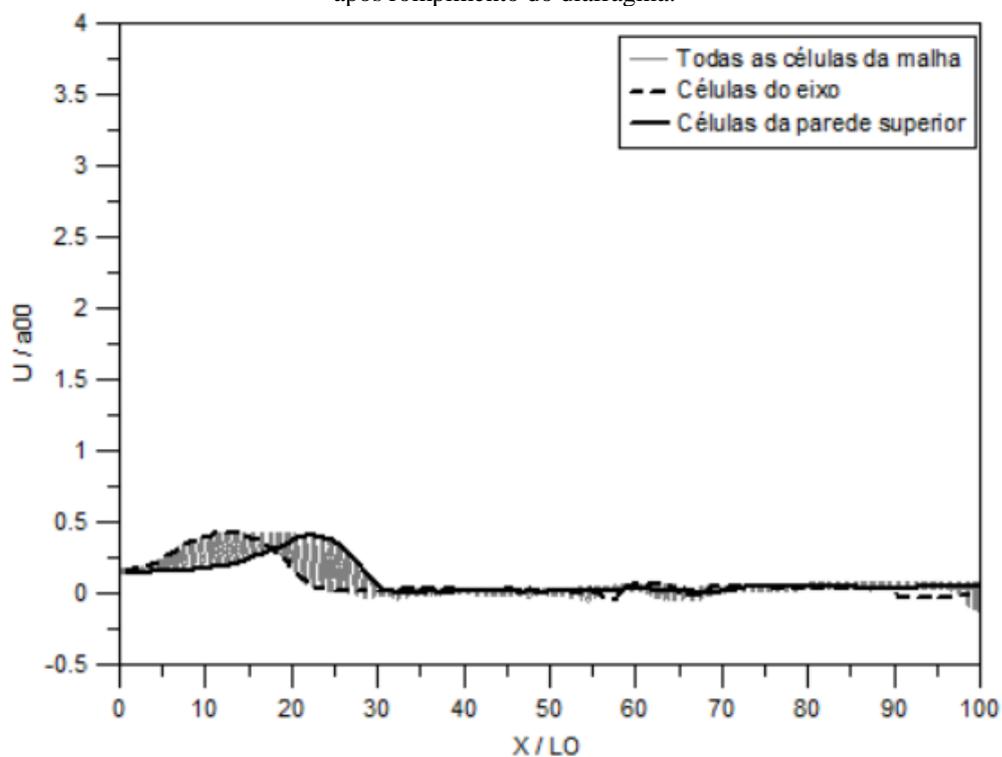


Fonte: Autor.

A pressão mais alta nas células próximas a parede superior é devida às condições de contorno, que estabelece velocidades tanto verticais quanto horizontais das células fantasmas da parede superior do tubo iguais em módulo às das células vizinhas, mas com sinal contrário. Conforme explicado anteriormente, essas condições foram estabelecidas para garantir que não há fluxo na parede superior do tubo. Em função disso o escoamento fica mais restringido, aumentando a pressão nessa região.

A figura 47 mostra o resultado de simulação da componente horizontal da velocidade adimensional da onda de choque 4 milissegundos após o rompimento do diafragma.

Figura 47 – Componente horizontal da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 4 milissegundos após rompimento do diafragma.

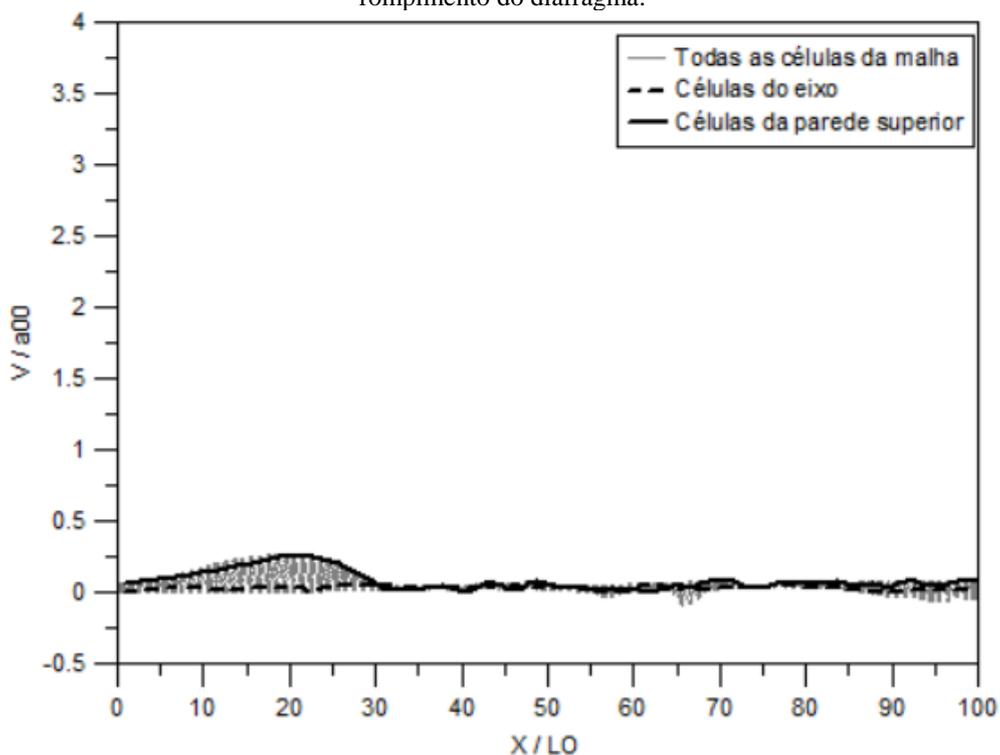


Fonte: Autor.

A onda deslocou-se até a posição 30, que corresponde a 900 a milímetros de seção conduzida do tubo de choque. A velocidade iniciou-se maior nas células do eixo, mas após a cota de x igual a 20 a velocidade na parede se tornou maior, esse fato se justifica pelas condições de contorno estabelecidas.

A figura 48 mostra o resultado de simulação da componente vertical da velocidade adimensional da onda de choque 4 milissegundos após o rompimento do diafragma.

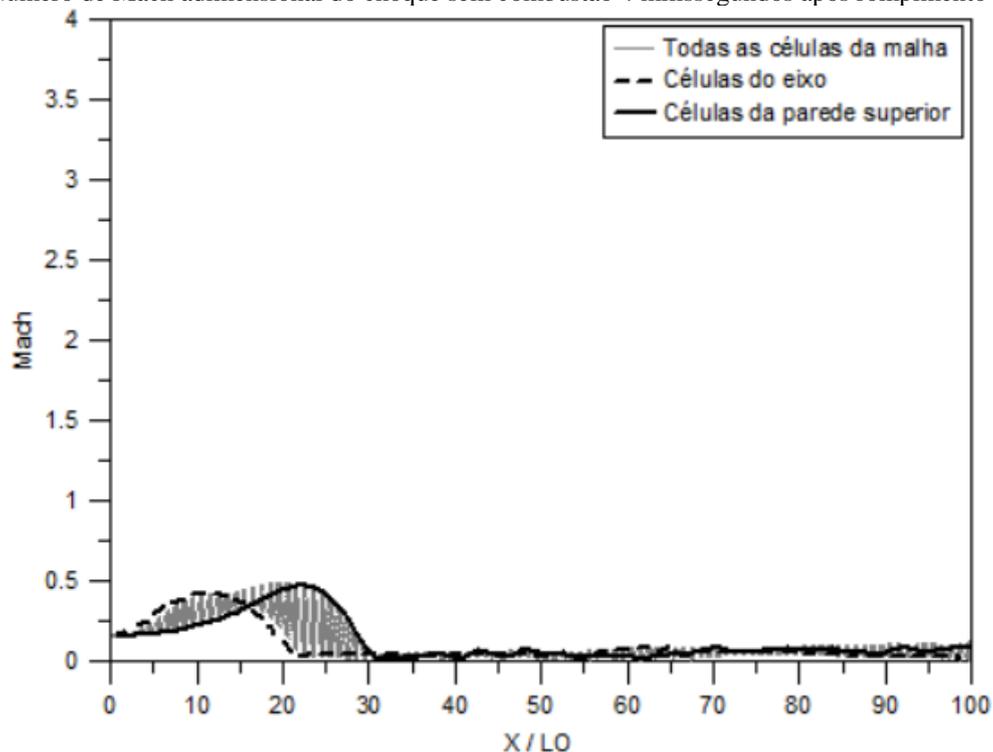
Figura 48 – Componente vertical da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 4 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor.

A figura 49 mostra o resultado de simulação do número de Mach adimensional da onda de choque 4 milissegundos após o rompimento do diafragma.

Figura 49 – Número de Mach adimensional do choque sem combustão 4 milissegundos após rompimento do diafragma.

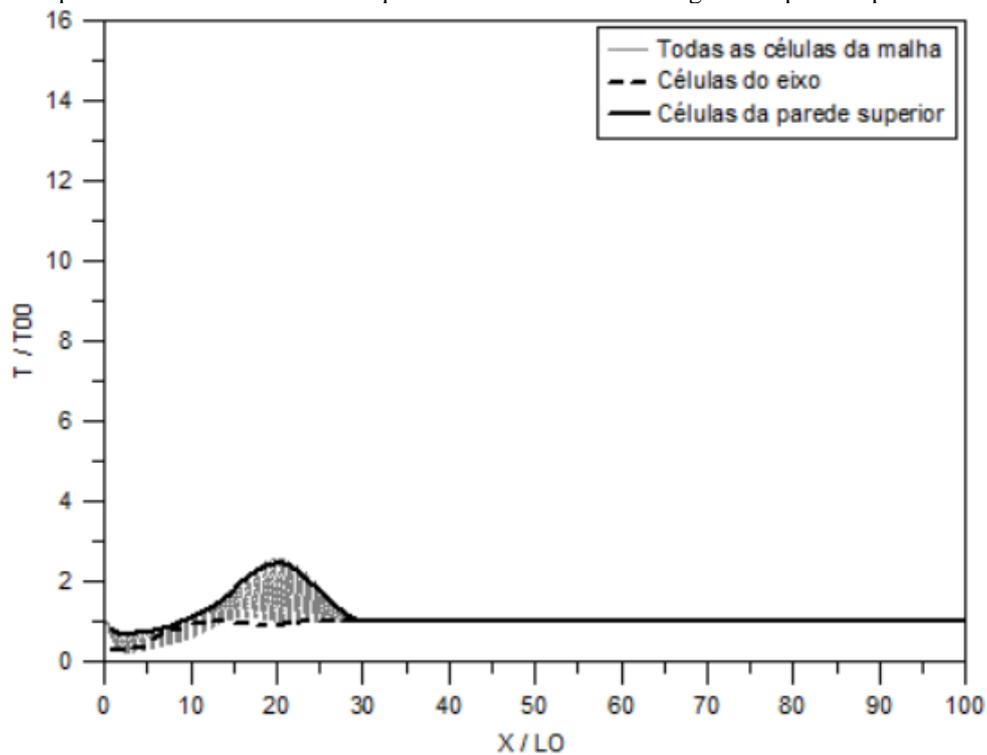


Fonte: Autor.

O número de Mach atinge um máximo de 0,5 nas células proxima a parede superior e 0,4 nas células proximas do eixo, esse resultado é consequencia direta da maior velocidade nas células da parede em relação as células do eixo e que indica também uma frente de onda em formação, ja que o número de Mach maximo foi menor que 1.

A figura 50 mostra o resultado de simulação da temperatura adimensional da onda de choque 4 milissegundos após o rompimento do diafragma.

Figura 50 – Temperatura adimensional do choque sem combustão 4 milissegundos após rompimento do diafragma.

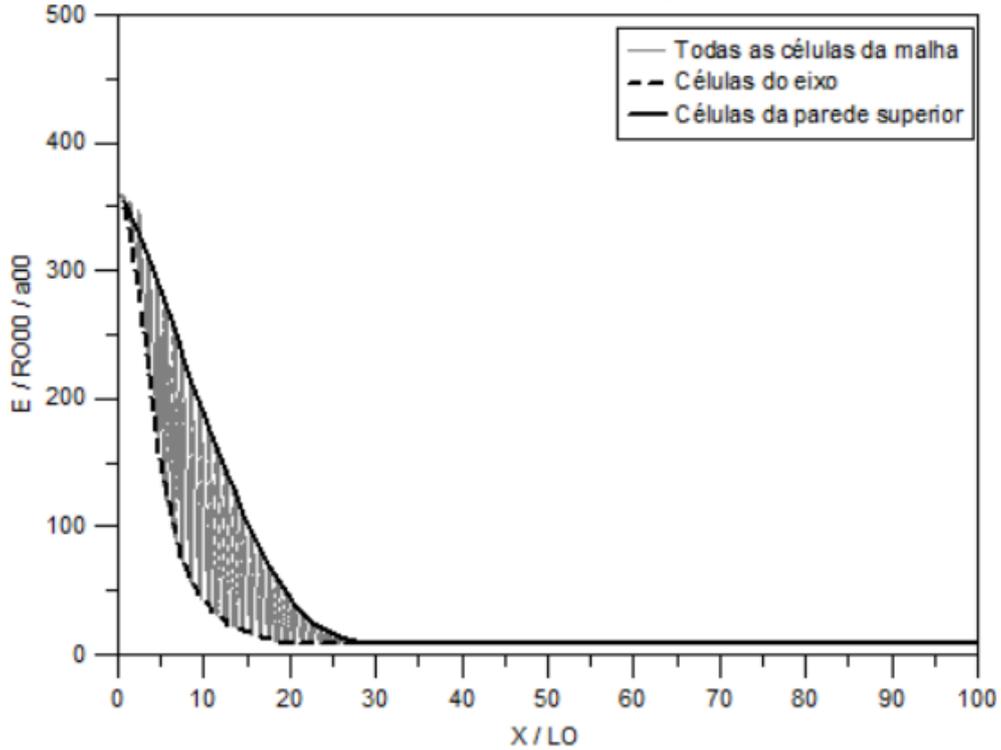


Fonte: Autor.

A temperatura da onda de choque aumenta 2,5 vezes na células proxima a parede superior, esse aumento é devido a interação entre as moléculas durante o deslocamento da massa de ar. Como nessa região a velocidade é maior, a temperatura também ser maior em relação as demais células.

A figura 51 mostra o resultado de simulação da energia adimensional da onda de choque 4 milissegundos após o rompimento do diafragma.

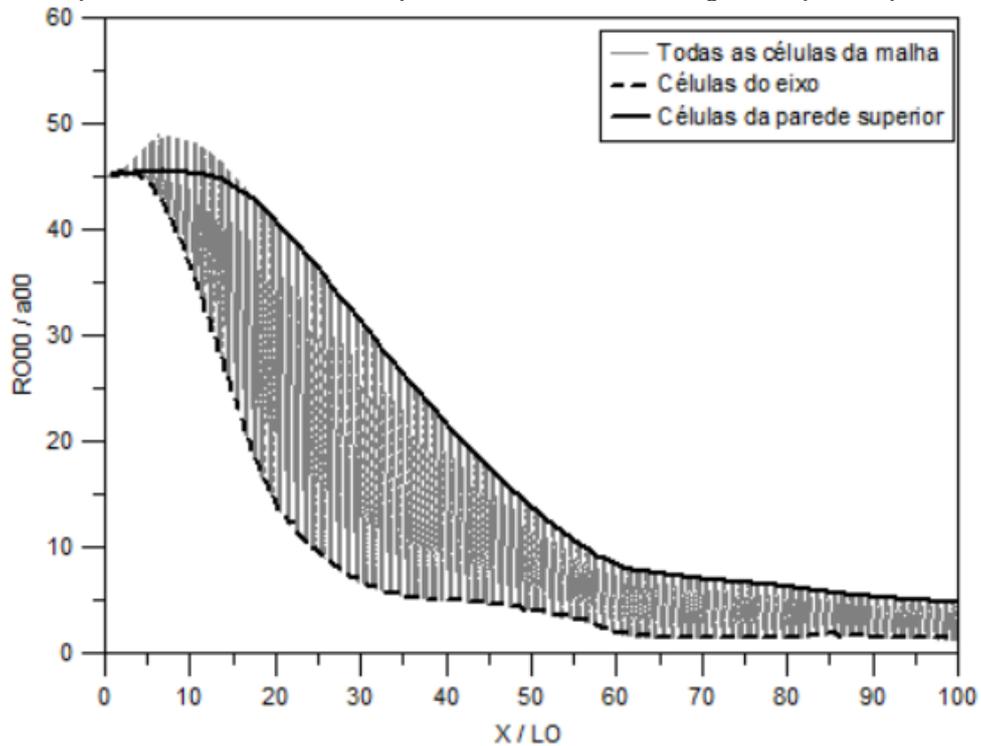
Figura 51 – Energia adimensional do choque sem combustão 4 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor.

A figura 52 mostra o resultado de simulação da massa específica adimensional sem combustão 6 milissegundos após o rompimento do diafragma para uma razão de pressão de 45.

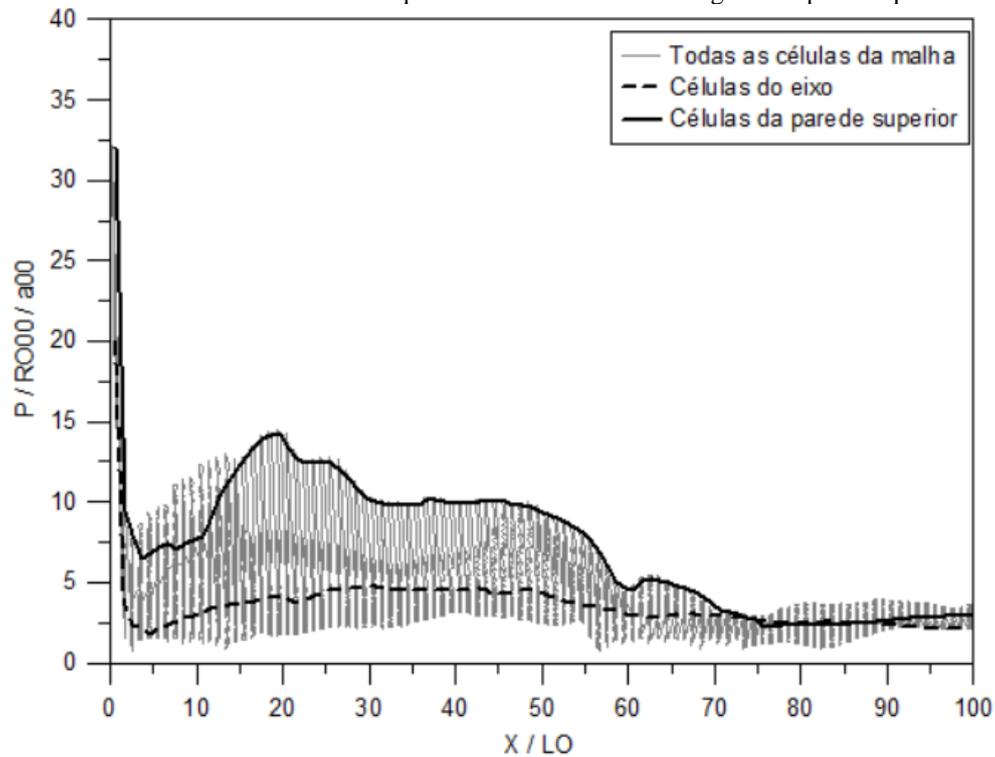
Figura 52 – Massa específica adimensional do choque sem combustão 6 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor.

A figura 53 mostra o resultado de simulação da pressão adimensional da onda de choque 6 milissegundos após o rompimento do diafragma para uma razão de pressão de 40.

Figura 53 – Pressão adimensional da onda de choque sem combustão 6 milissegundos após rompimento do diafragma.

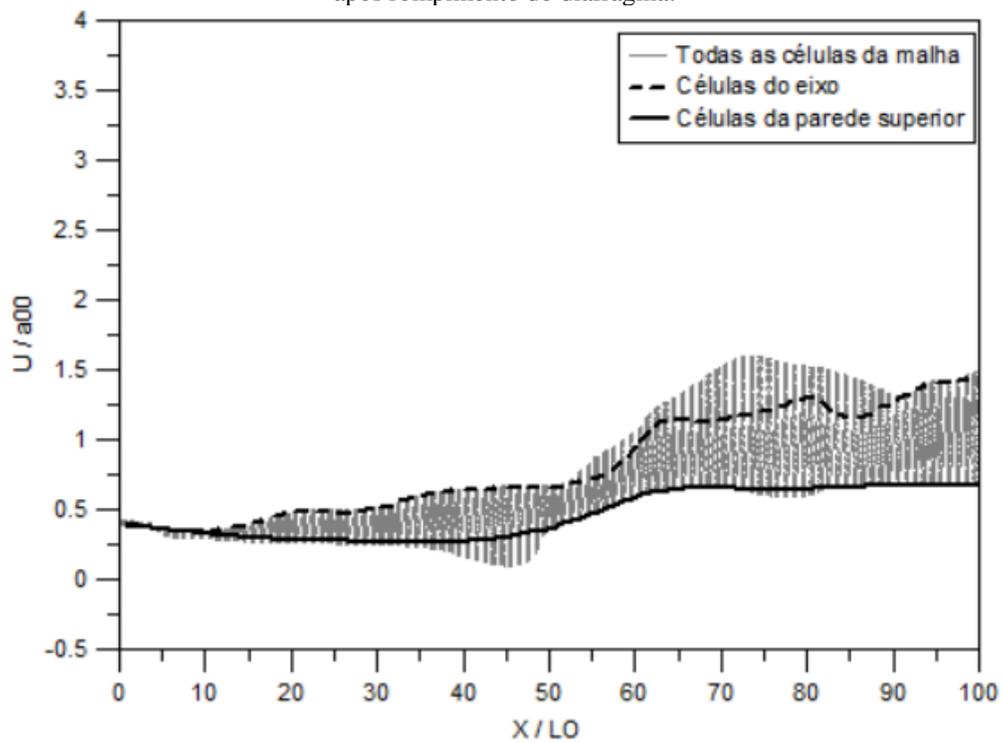


Fonte: Autor.

A pressão continua maior na parede superior devido as condições de contornos impostas e verifica-se uma redução da pressão atrás da onda de choque, essa redução é devida a onda de expansão que se desloca em sentido contrário ao da onda de choque reduzindo a pressão nessa região. Os resultados dos parâmetros de pressão alcançados nessas simulações estão bem próximos dos encontrados por Chang e Kim (1994).

A figura 54 mostra o resultado de simulação da componente horizontal da velocidade adimensional da onda de choque 6 milissegundos após o rompimento do diafragma. A onda deslocou-se até a posição 70, que corresponde a 2100 milímetros de seção conduzida do tubo de choque. A velocidade é maior nas células próxima ao eixo devido a condição de contorno, que estabeleceu velocidade vertical zero e velocidade horizontal igual em módulo e mesmo sinal em relação as células fantasmas do eixo. Conforme explicado anteriormente, essas condições foram estabelecidas para garantir que a onda deslocasse somente na direção horizontal.

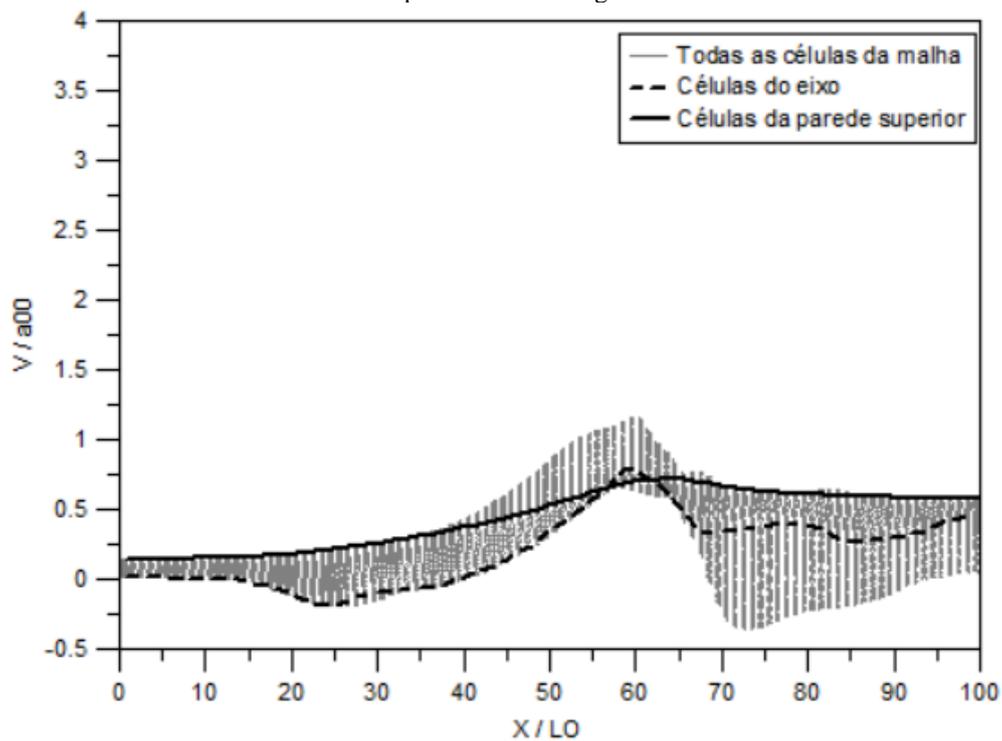
Figura 54 – Componente horizontal da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 6 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor.

A figura 55 mostra o resultado de simulação da componente vertical da velocidade adimensional da onda de choque 6 milissegundos após o rompimento do diafragma.

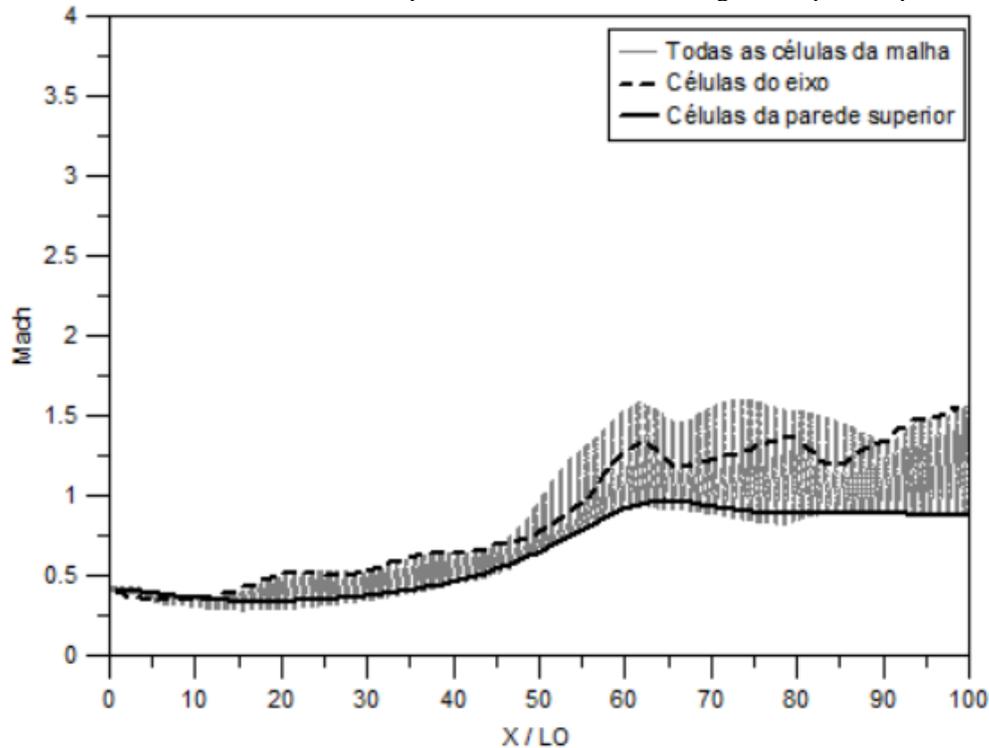
Figura 55 – Componente vertical da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 6 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor.

A figura 56 mostra o resultado de simulação do número de Mach adimensional da onda de choque 6 milissegundos após o rompimento do diafragma.

Figura 56 – Número de Mach adimensional do choque sem combustão 6 milissegundos após rompimento do diafragma.

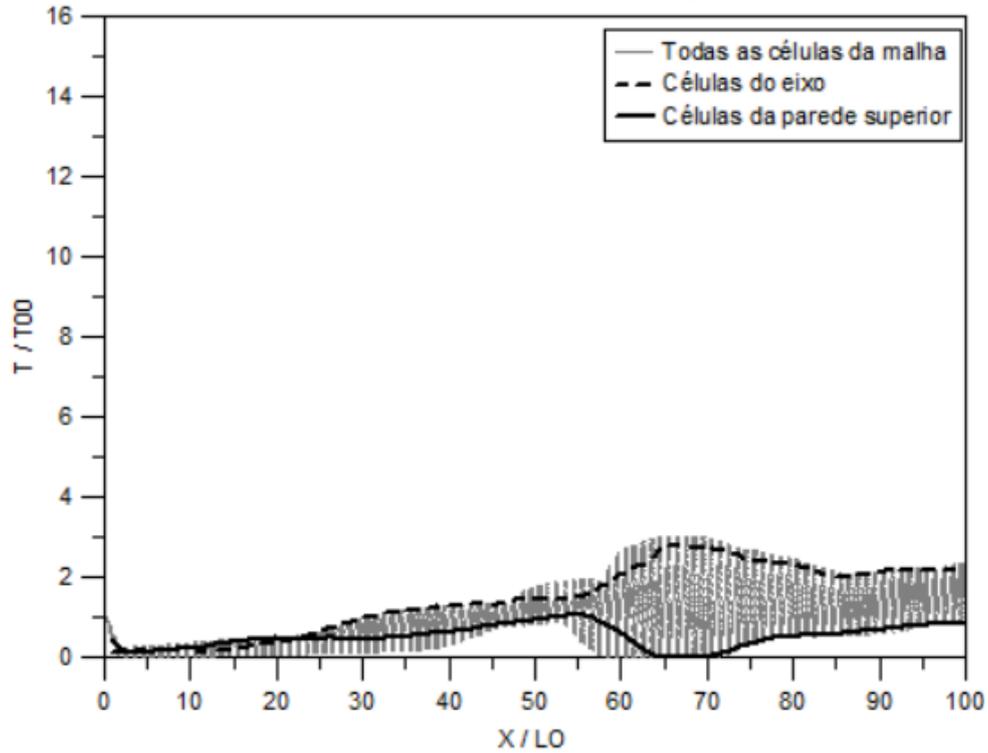


Fonte: Autor.

O número de Mach atinge um máximo de 1,5 nas células intermediárias e nas células proxima ao eixo e em torno de 1 nas células proximas parede superior, esse resultado é consequencia direta da maior velocidade nas células do eixo em relação as células da parede e indicam a formação de uma onda de choque com velocidade supersônica, já que o número de Mach alcançado foi de aproximadamente 1,5.

A figura 57 mostra o resultado de simulação da temperatura adimensional da onda de choque 6 milissegundos após o rompimento do diafragma.

Figura 57 – Temperatura adimensional do choque sem combustão 6 milissegundos após rompimento do diafragma.

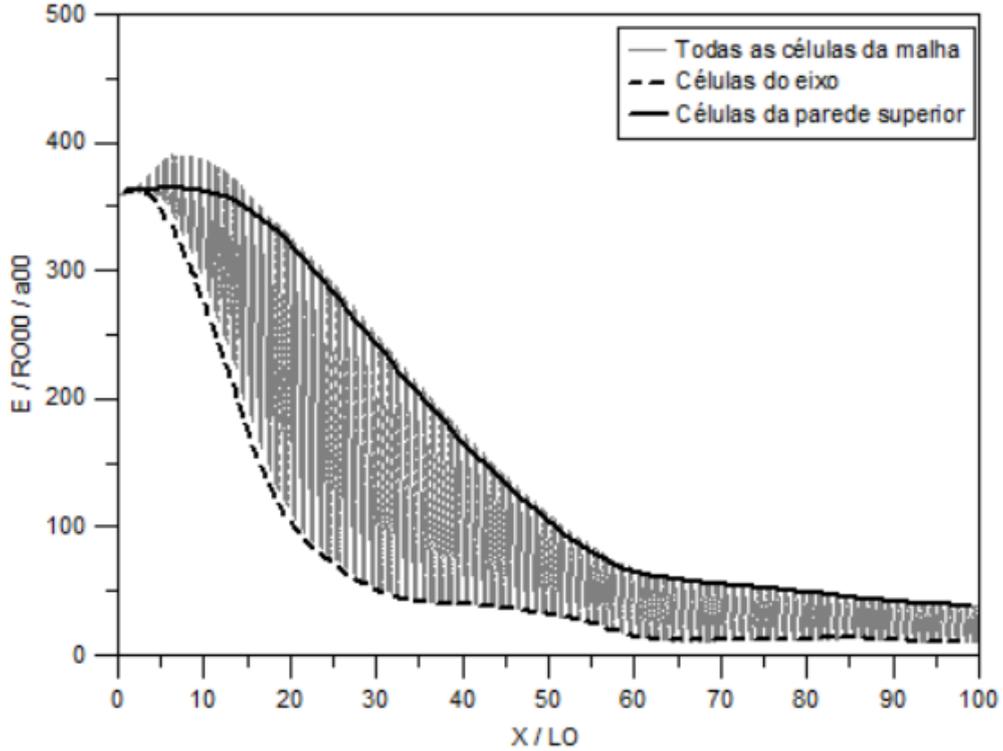


Fonte: Autor.

A temperatura da onda de choque aumenta 3 vezes nas células próximas ao eixo, esse aumento é devido à interação entre as moléculas durante o deslocamento da massa de ar. Como nessa região a velocidade é maior, a temperatura também será maior em relação às demais células. Verifica-se uma redução da temperatura atrás da onda de choque, essa redução é devida à onda de expansão que se desloca em sentido contrário ao da onda de choque, reduzindo a temperatura nessa região.

A figura 58 mostra o resultado de simulação da energia adimensional da onda de choque 6 milissegundos após o rompimento do diafragma.

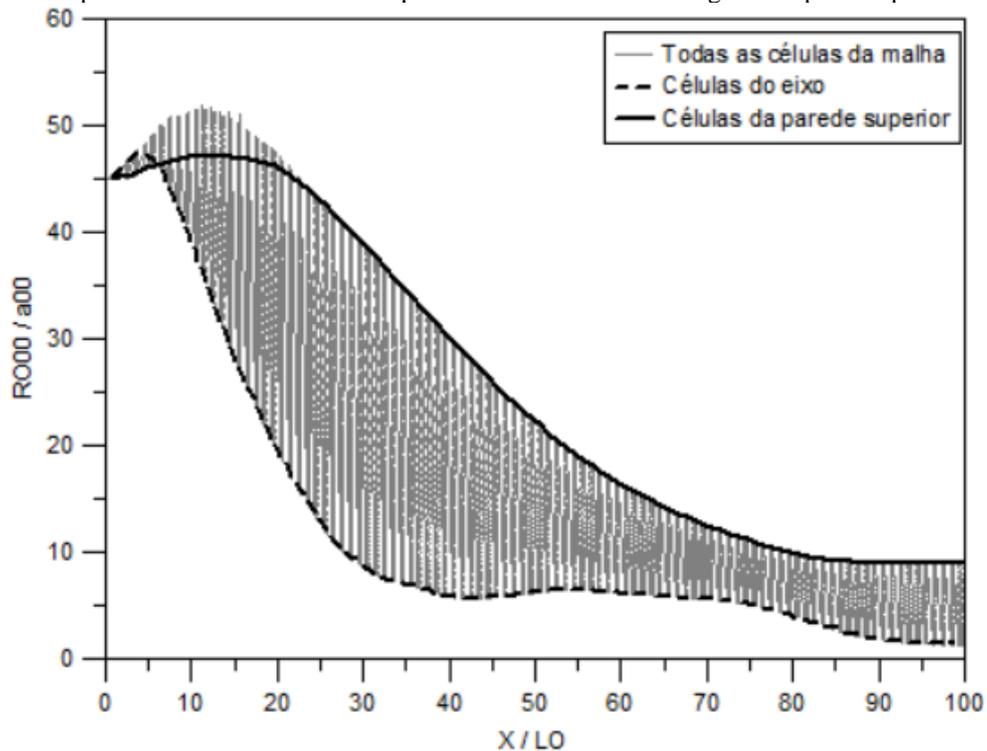
Figura 58 – Energia adimensional do choque sem combustão 6 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor.

A figura 59 mostra o resultado de simulação da massa específica adimensional sem combustão 8 milissegundos após o rompimento do diafragma para uma razão de pressão de 45.

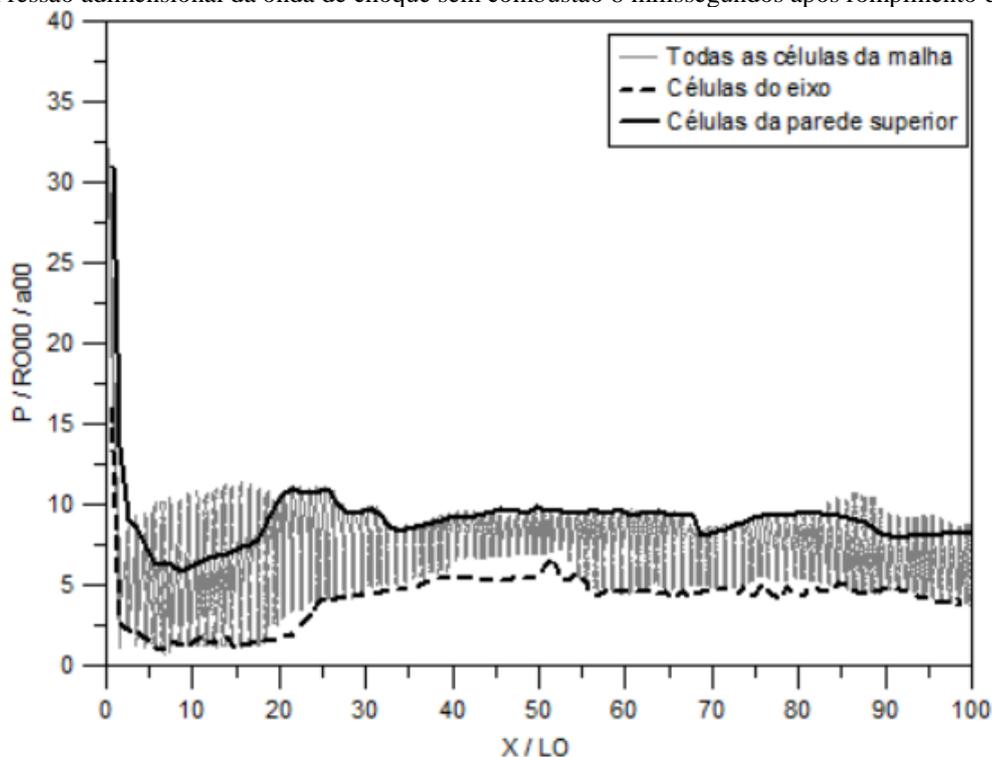
Figura 59 – Massa específica adimensional do choque sem combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor.

A figura 60 mostra o resultado de simulação da pressão adimensional da onda de choque 8 milissegundos após o rompimento do diafragma para uma razão de pressão de 40.

Figura 60 – Pressão adimensional da onda de choque sem combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.

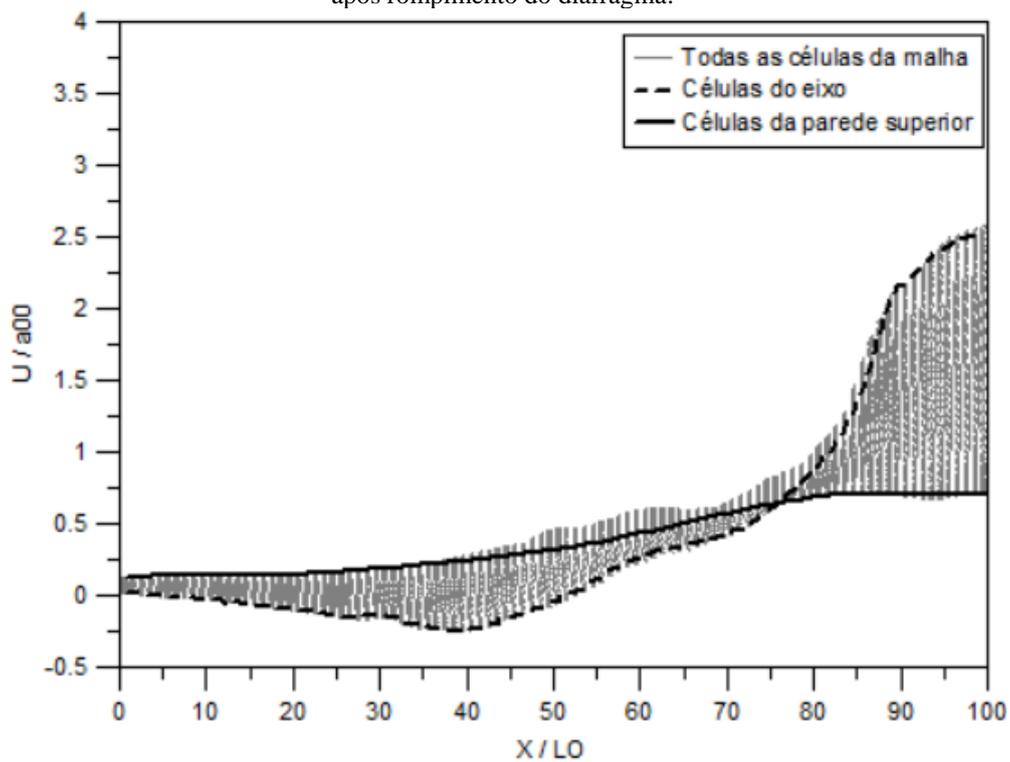


Fonte: Autor.

A pressão continua maior na parede superior devido as condições de contornos impostas e verifica-se uma redução da pressão atrás da onda de choque, essa redução é devida a onda de expansão que se desloca em sentido contrário ao da onda de choque reduzindo pressão nessa região. Verifica-se uma estabilização da pressão em torno de 10, esse valor está próximo dos encontrados nos ensaios experimentais realizados por Santana (2013) e de acordo com a literatura, que indica que a pressão da onda de choque estabiliza em torno de 1/3 da pressão de rompimento do diafragma, que nesses testes foram de 33 bar.

A figura 61 mostra o resultado de simulação da componente horizontal da velocidade adimensional da onda de choque 8 milissegundos após o rompimento do diafragma. A velocidade é maior nas células próxima ao eixo devido as condições de contorno. A onda alcança a extremidade oposta do tubo e esse aumento na velocidade, aproximadamente 2,5 vezes, nas células próximas ao eixo já é reflexo do processo de reflexão da onda.

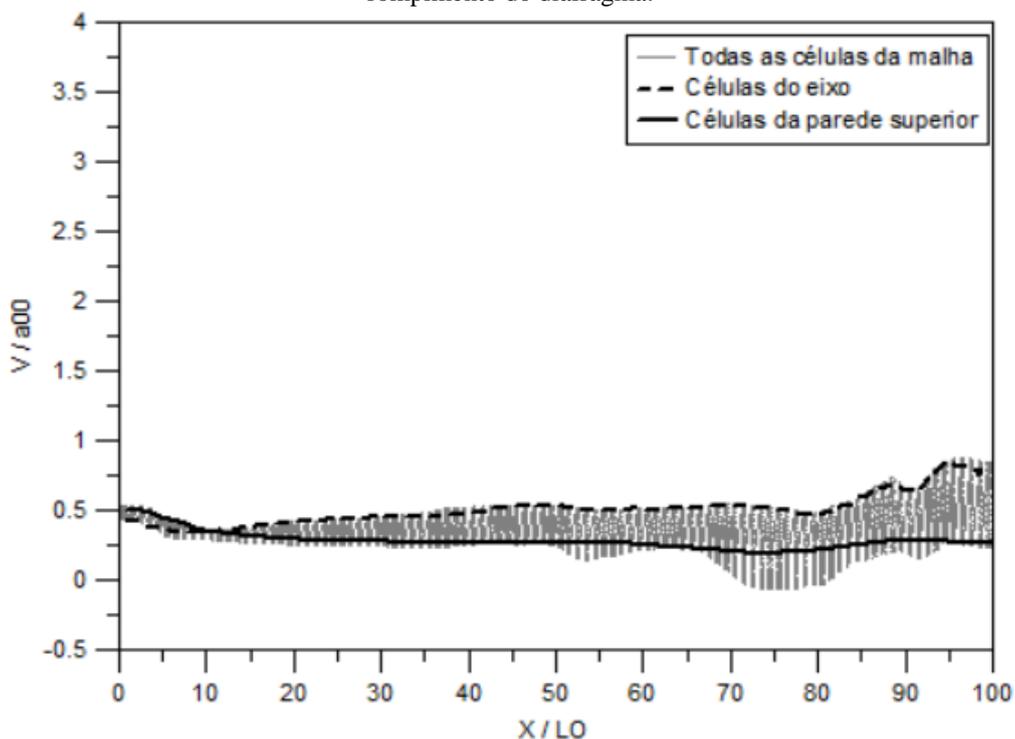
Figura 61 – Componente horizontal da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor.

A figura 62 mostra o resultado de simulação da componente vertical da velocidade adimensional da onda de choque 6 milissegundos após o rompimento do diafragma.

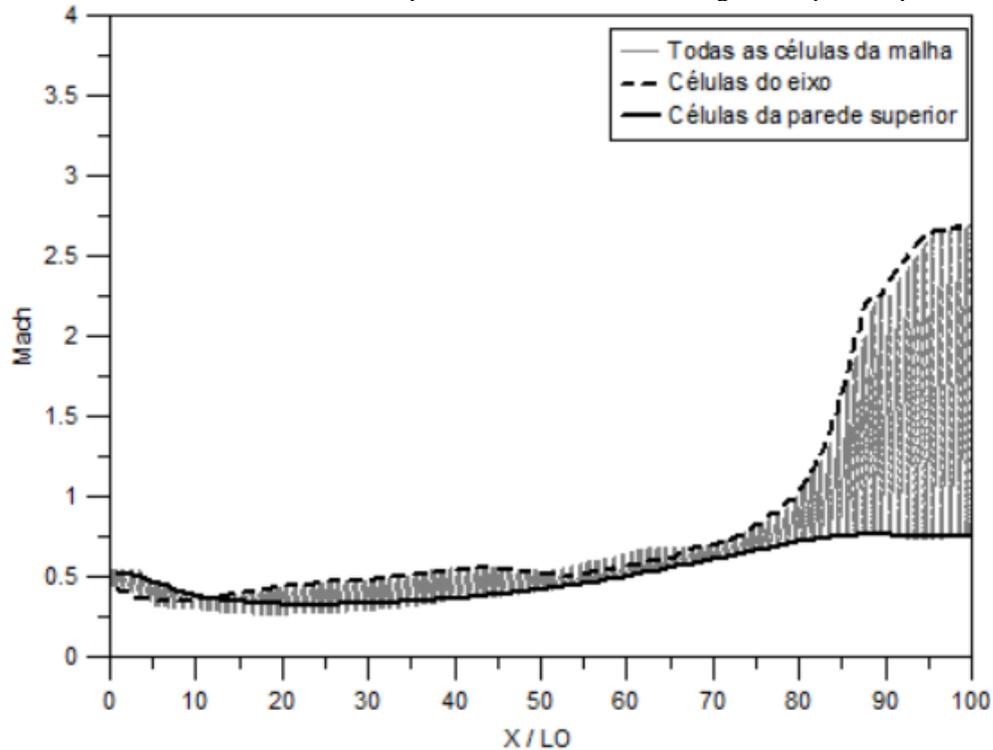
Figura 62 – Componente vertical da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor.

A figura 63 mostra o resultado de simulação do número de Mach adimensional da onda de choque 8 milissegundos após o rompimento do diafragma.

Figura 63 – Número de Mach adimensional do choque sem combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.

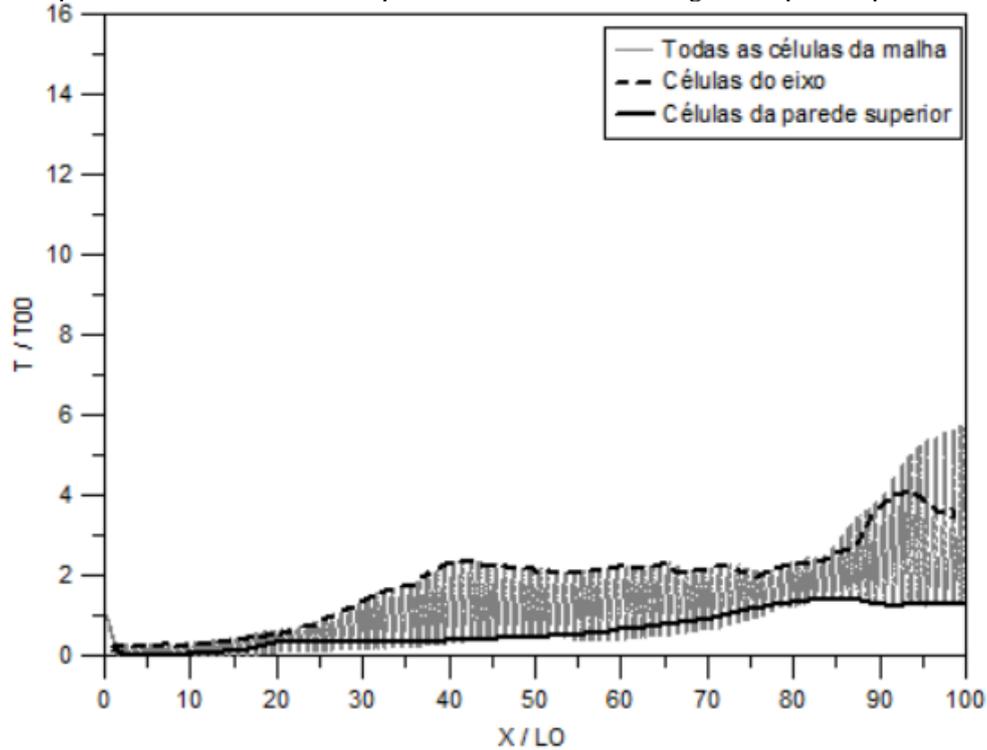


Fonte: Autor.

O número de Mach atinge um máximo de 2,5 nas células próxima ao eixo. Esse resultado é consequência direta da maior velocidade nas células do eixo em relação as células da parede e indicam a formação de uma onda de choque com velocidade supersônica com número de Mach próximo a 2,5, esse valor pode estar sendo influenciado pela compressão da onda na extremidade fechada do tubo.

A figura 64 mostra o resultado de simulação da temperatura adimensional da onda de choque 8 milissegundos após o rompimento do diafragma.

Figura 64 – Temperatura adimensional do choque sem combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.

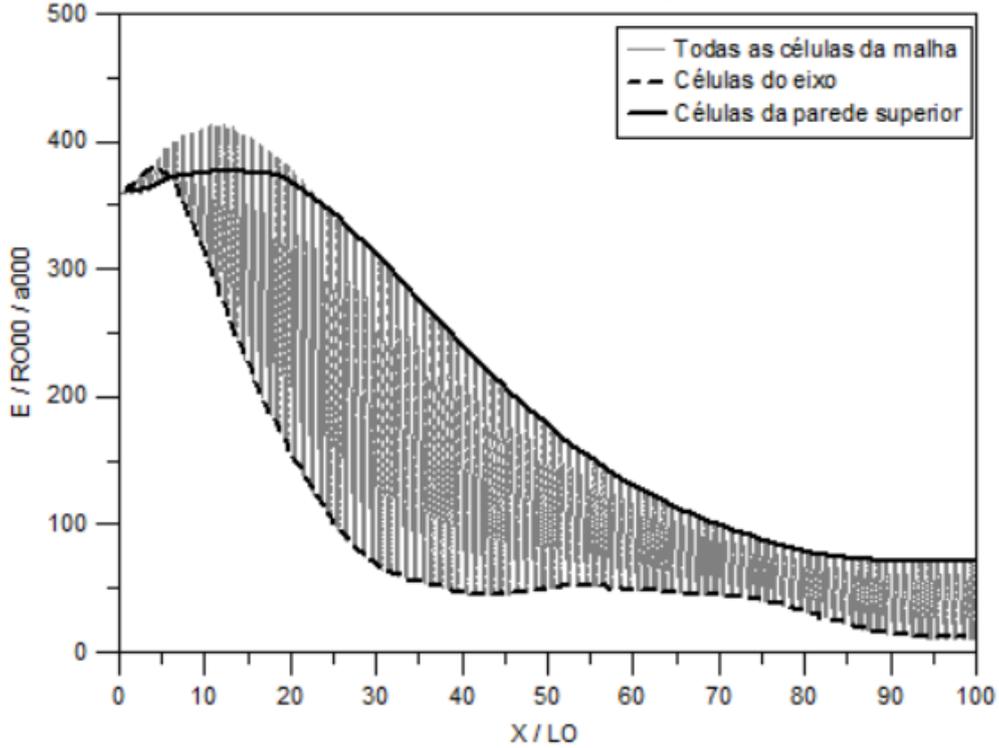


Fonte: Autor.

A temperatura da onda de choque aumenta 4 vezes nas células próximas ao eixo, esse aumento é devido à interação entre as moléculas durante o deslocamento da massa de ar. Verifica-se uma redução da temperatura atrás da onda de choque, essa redução é devida à onda de expansão que se desloca em sentido contrário ao da onda de choque reduzindo a temperatura nessa região. Observa-se um aumento de temperatura em torno de 5 nas células intermediárias no final do tubo, esse aumento de temperatura e essa flutuação na temperatura está relacionada ao início do processo de reflexão da onda, onde a onda de choque refletida sobrepõe a onda incidente, aumentando a temperatura e ocasionando flutuações, conforme observado.

A figura 65 mostra o resultado de simulação da energia adimensional da onda de choque 8 milissegundos após o rompimento do diafragma.

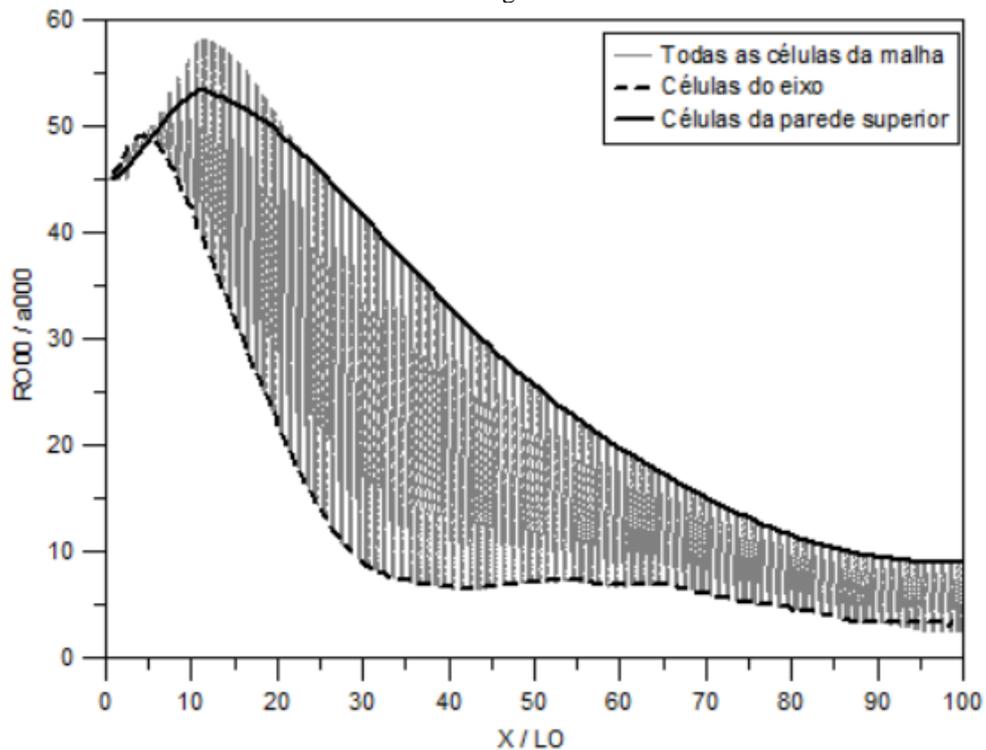
Figura 65 – Energia adimensional do choque sem combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor

A figura 66 mostra o resultado de simulação da massa específica adimensional sem combustão 10 milissegundos após o rompimento do diafragma para uma razão de pressão de 45.

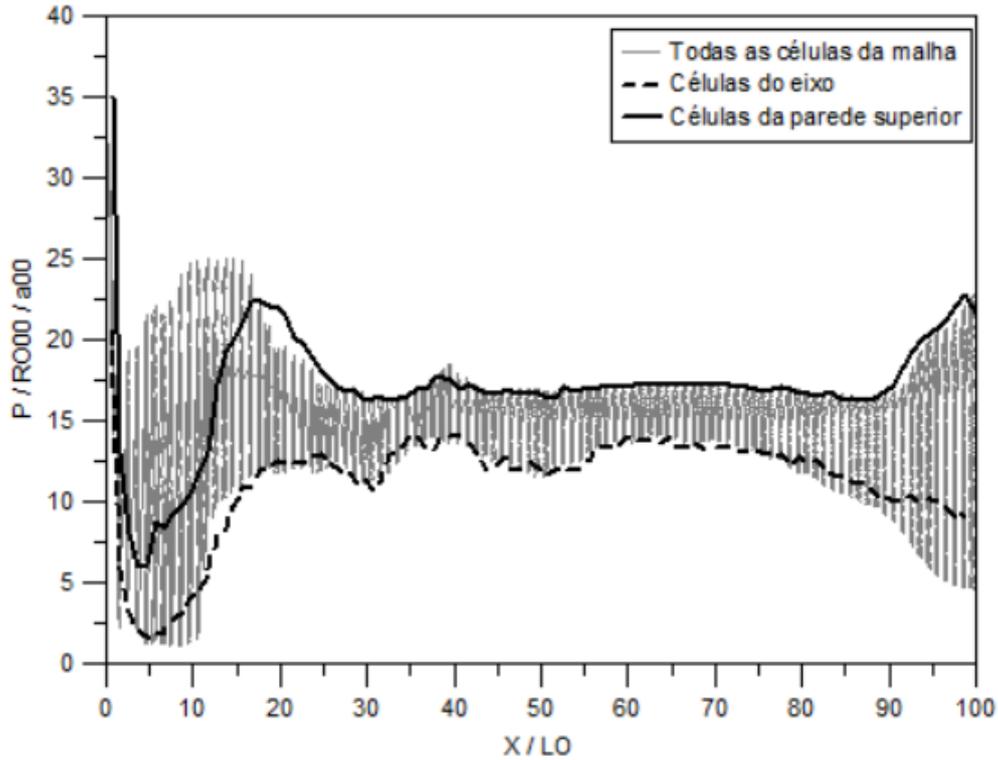
Figura 66 – Massa específica adimensional do choque sem combustão 10 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor.

A figura 67 mostra o resultado de simulação da pressão adimensional da onda de choque 10 milissegundos após o rompimento do diafragma para uma razão de pressão de 40.

Figura 67 – Pressão adimensional da onda de choque sem combustão 10 milissegundos após rompimento do diafragma.

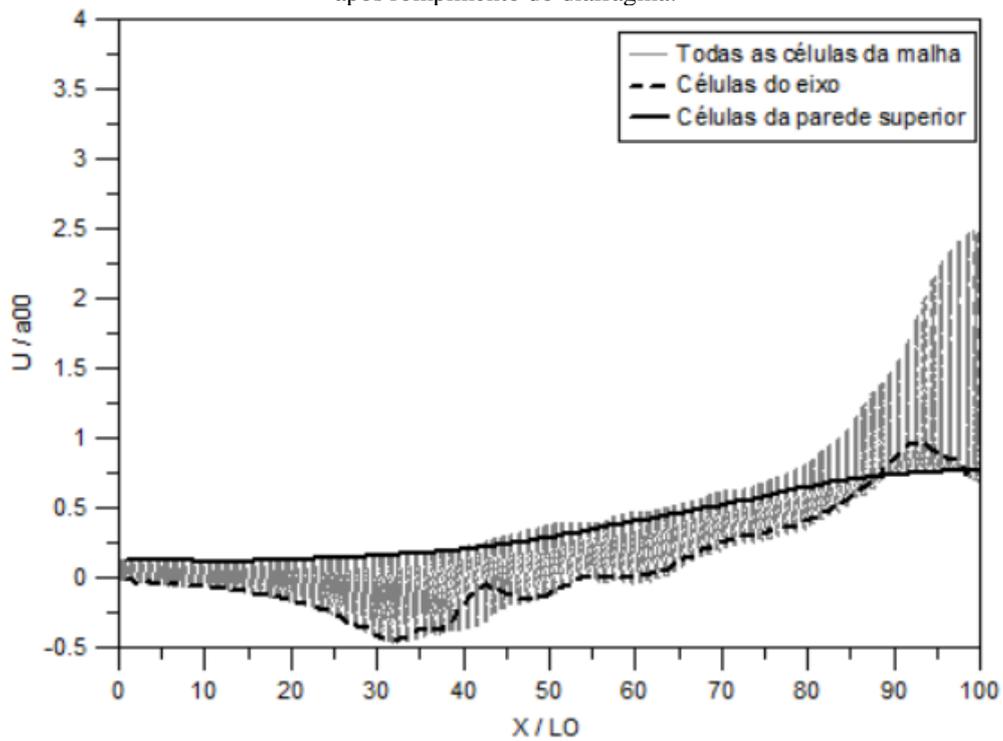


Fonte: Autor.

A pressão continua maior na parede superior devido as condições de contornos impostas e a onda de choque refletida alcança um pico de pressão próximo a 20. Esse efeito é previsto na literatura e é justificado pela sobreposição de movimento das ondas incidentes e refletidas.

A figura 68 mostra o resultado de simulação da componente horizontal da velocidade adimensional da onda de choque 10 milissegundos após o rompimento do diafragma. A velocidade é maior nas células intermediárias. Esse aumento de velocidade é reflexo do processo de reflexão da onda.

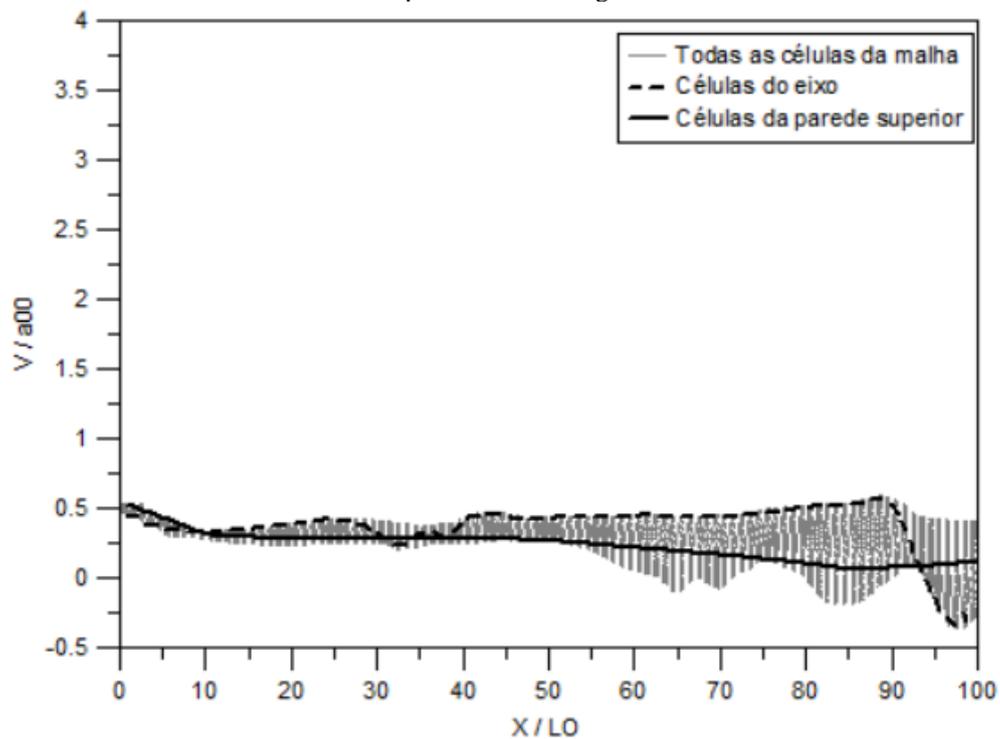
Figura 68 – Componente horizontal da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 10 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor.

A figura 69 mostra o resultado de simulação da componente vertical da velocidade adimensional da onda de choque 10 milissegundos após o rompimento do diafragma.

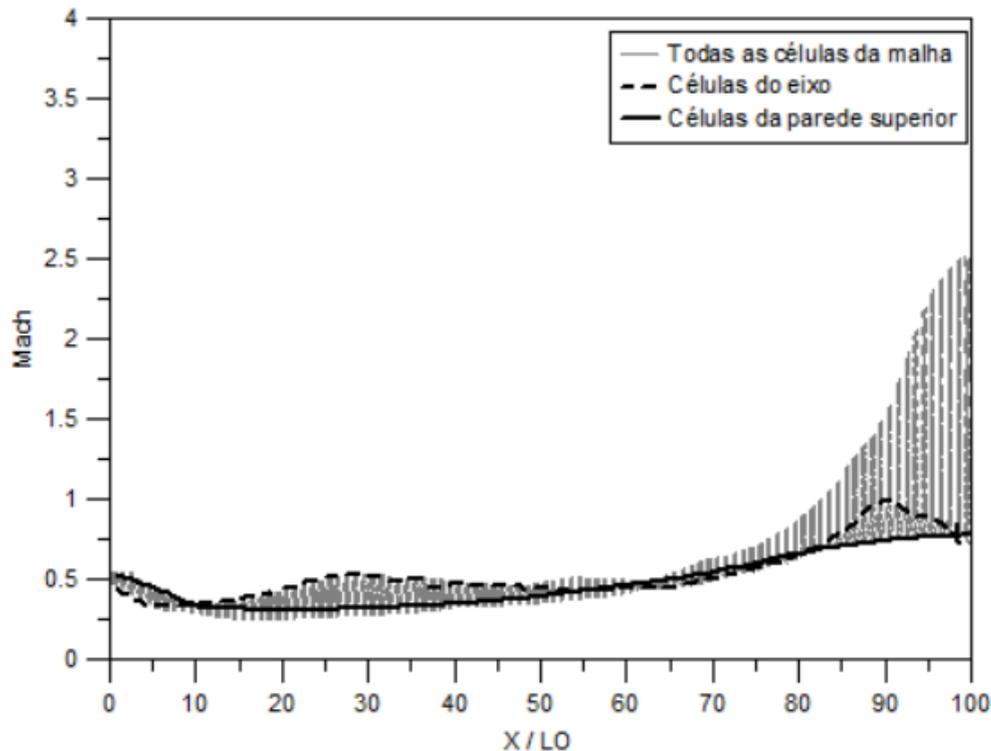
Figura 69 – Componente vertical da velocidade adimensional da onda de choque sem combustão 10 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor.

A figura 70 mostra o resultado de simulação do número de Mach adimensional da onda de choque 10 milissegundos após o rompimento do diafragma.

Figura 70 – Número de Mach adimensional do choque sem combustão 10 milissegundos após rompimento do diafragma.

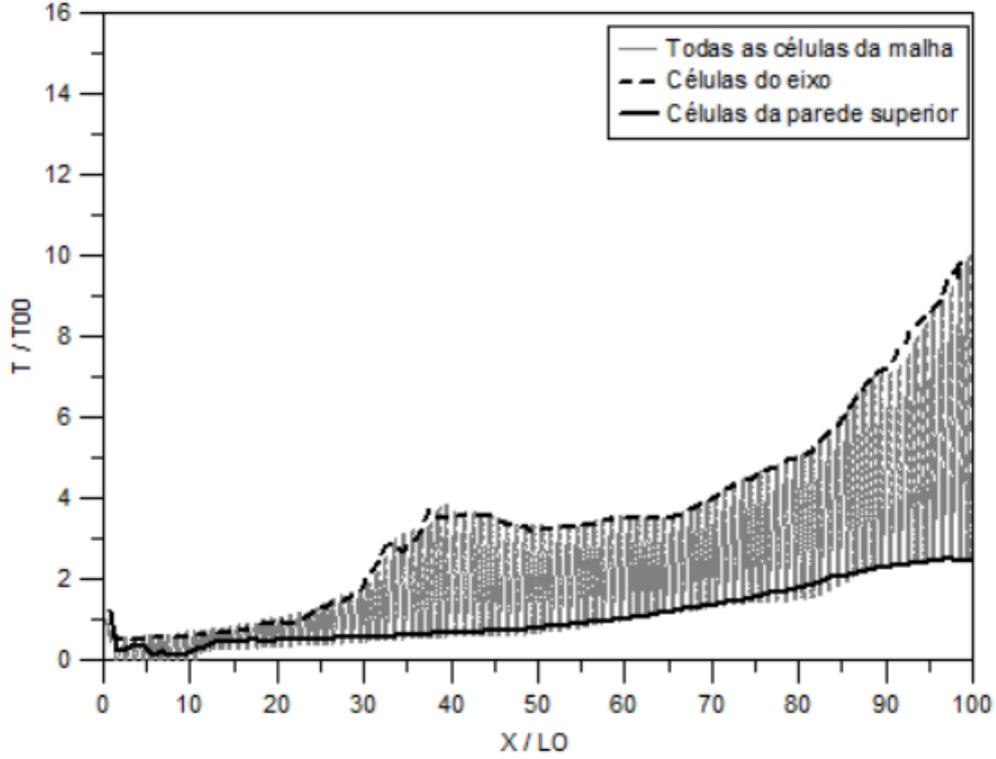


Fonte: Autor.

A redução do número de Mach refletido em relação ao Mach incidente se justifica pelo fato de que, ao alcançar a extremidade do tubo a velocidade da onda vai a zero por causa da reversão do movimento. Com isso a pressão aumenta, conforme observado, ocorrendo redução do número de Mach. Um aumento da pressão da onda de choque refletida também foi observado nas simulações realizadas por Lamnaouer (2004).

A figura 71 mostra o resultado de simulação da temperatura adimensional da onda de choque 10 milissegundos após o rompimento do diafragma. A figura destaca uma onda de choque refletida que aumenta a temperatura 8 vezes em relação a temperatura da onda incidente. Esse aumento de temperatura está relacionada ao processo de reflexão da onda, onde a onda de choque refletida sobrepõe a onda incidente, aumentando a temperatura, conforme observado.

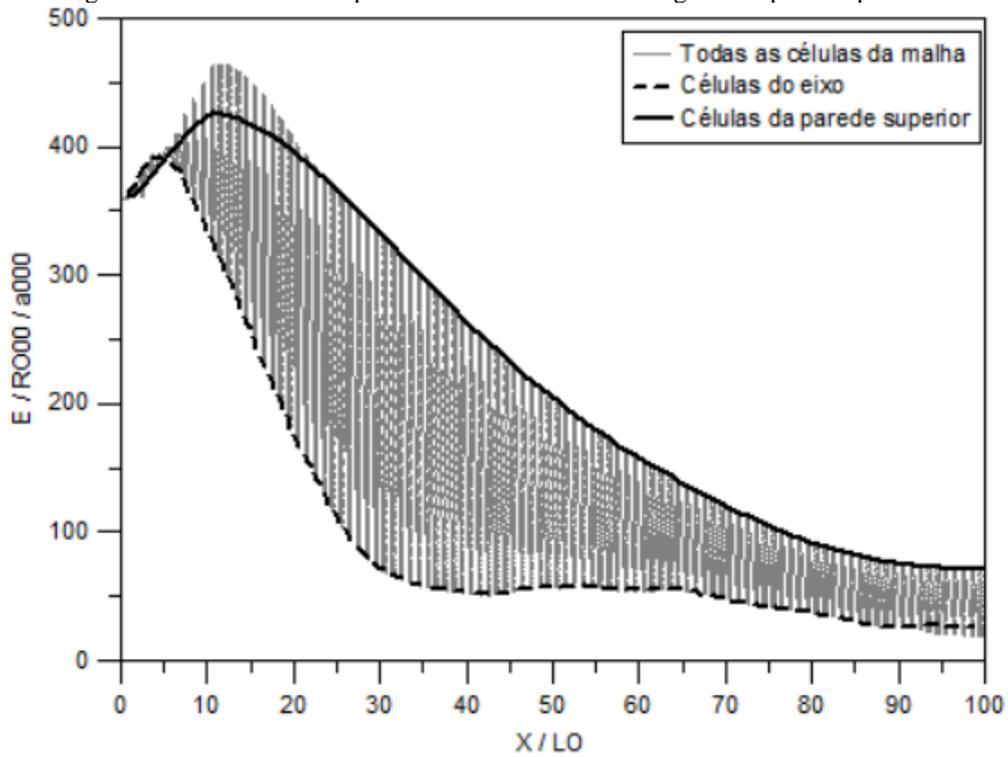
Figura 71 – Temperatura adimensional do choque sem combustão 10 milissegundos após rompimento do diafragma.



Fonte: Autor.

A figura 72 mostra o resultado de simulação da energia adimensional da onda de choque 10 milissegundos após o rompimento do diafragma.

Figura 72 – Energia adimensional do choque sem combustão 10 milissegundos após rompimento do diafragma.



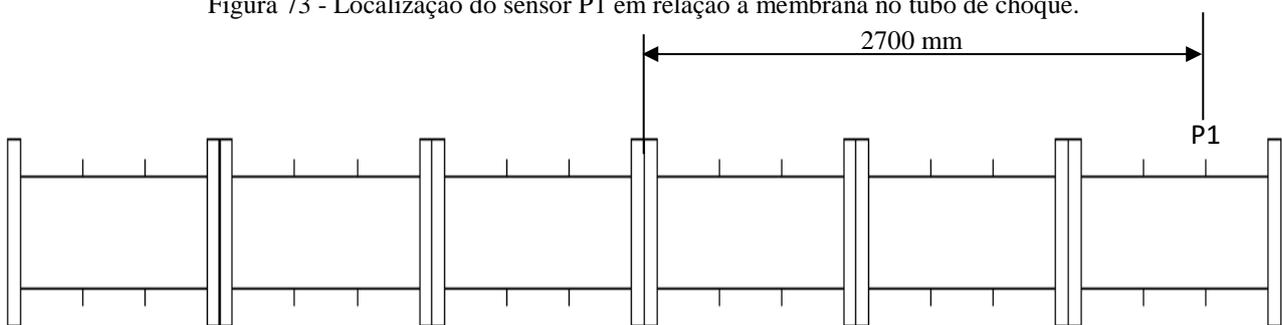
Fonte: Autor.

5.3. Análise dos ensaios de simulação com combustão.

Nessa seção são apresentados e discutidos os resultados de simulação com combustão. Para simulação com combustão foi introduzida uma rotina no programa para simular a passagem da onda de choque pelo sensor P1 do tubo de choque.

A Figura 73 mostra a localização do sensor P1 no tubo de choque em relação à membrana de rompimento.

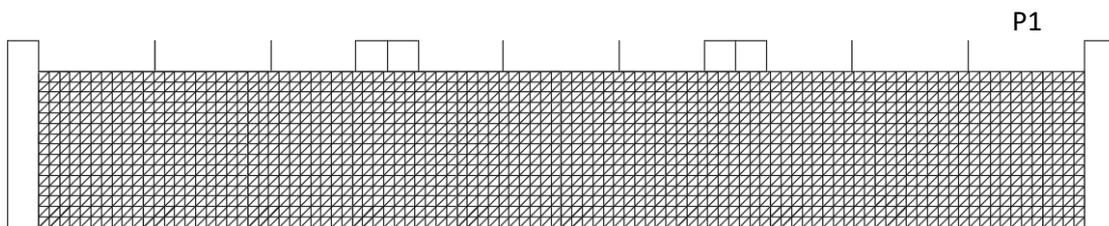
Figura 73 - Localização do sensor P1 em relação à membrana no tubo de choque.



Fonte: Autor.

A Figura 74 mostra a localização do sensor P1 na malha para simular a passagem da onda de choque.

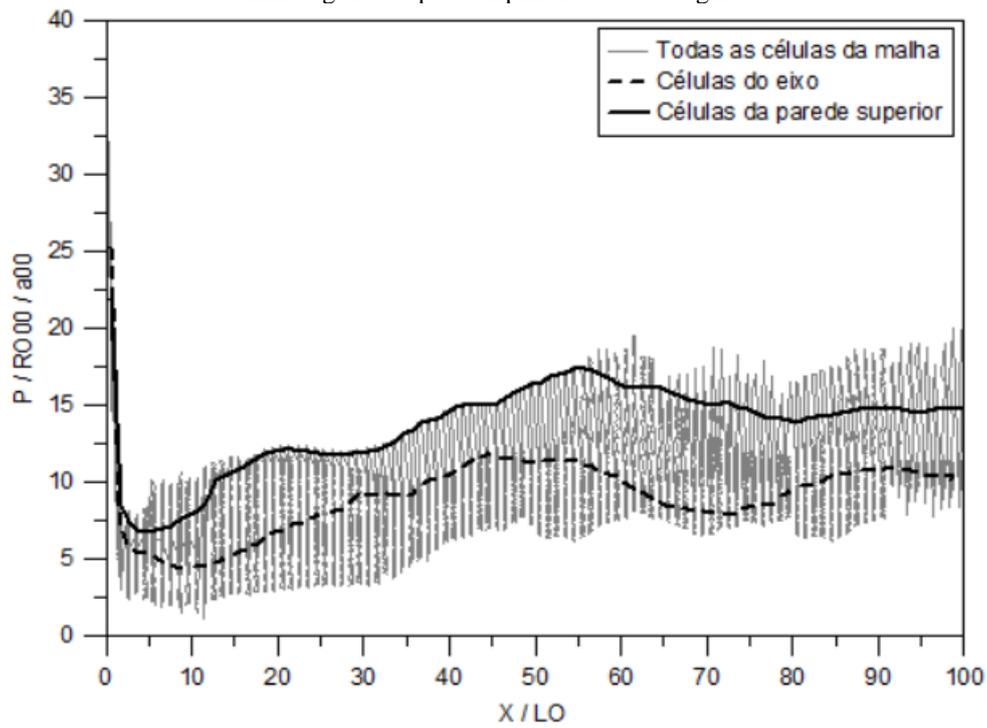
Figura 74 - localização do sensor P1 na malha para simular a passagem da onda de choque.



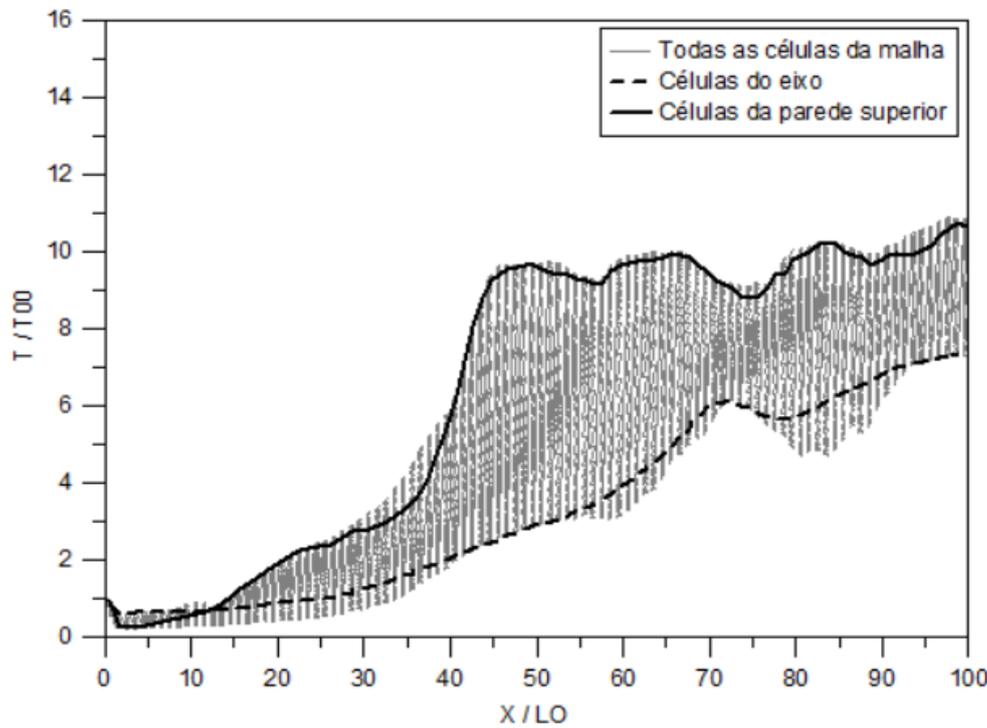
Fonte: Autor.

A figura 75 (a) e (b) mostra os resultados de simulação dos parâmetros adimensionais de pressão e temperatura da onda de choque do Diesel com combustão 8 milissegundos após o rompimento do diafragma. As figuras mostram aumentos significativos de pressão e temperatura após a queima da mistura combustível/ar. A pressão alcança picos próximo a 20 e a temperatura aumenta 10 vezes em relação a temperatura da onda incidente. Esses efeitos foram previstos pelo critério de ignição adotado, equações 100 a 105. Observa-se que tanto a pressão quanto a temperatura foram maiores nas células próximas a parede superior.

Figura 75 - Parâmetros adimensionais de pressão e temperatura da onda de choque do Diesel com combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.



(a)



(b)

Fonte: Autor.

A figura 76 mostra a interface gráfica do compilador da temperatura em um instante anterior ao processo de combustão previsto pelo critério de ignição. A temperatura se manteve maior nas células próximas a parede superior, o que indica que a ignição ocorre primeiro nessas células, conforme mostrado também na figura 87.

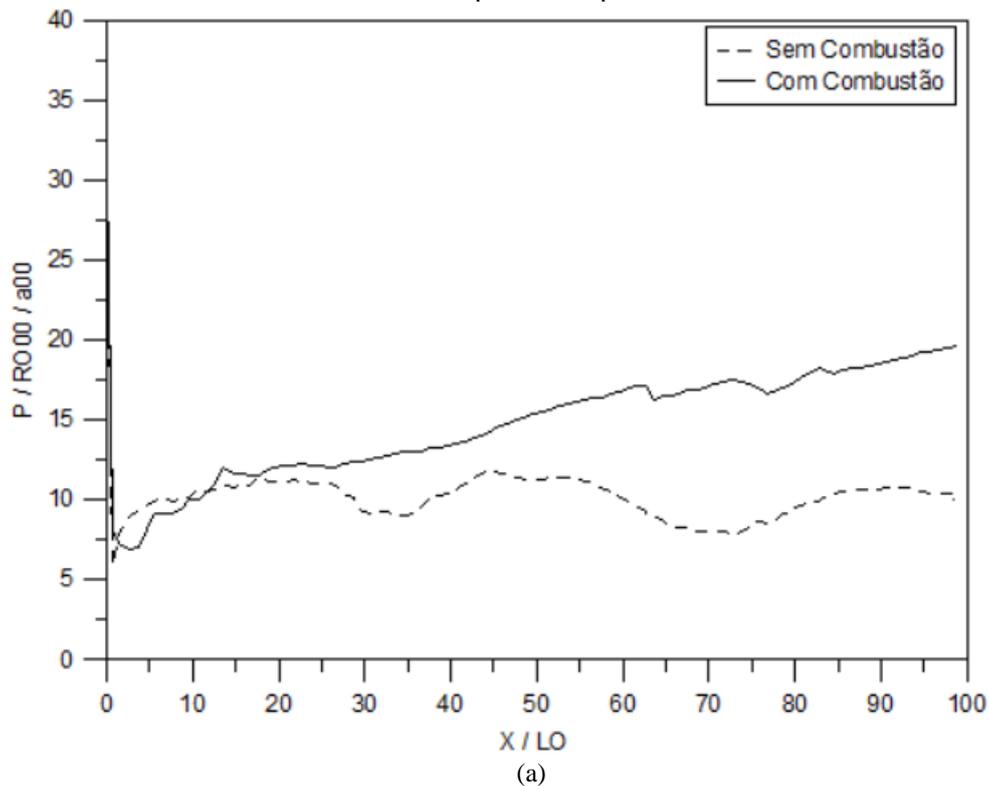
Figura 76 - Interface gráfica do compilador da temperatura em um instante anterior ao processo de combustão e após queima da mistura combustível/ar.

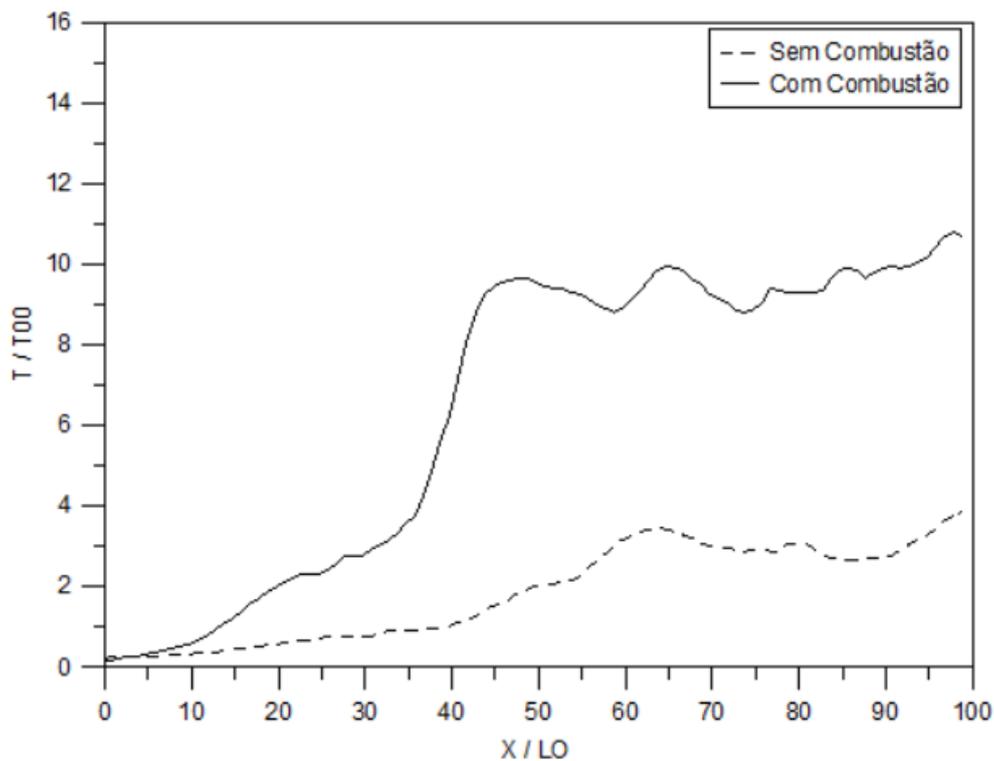


Fonte: Autor.

A figura 77 (a) e (b) mostra o comparativo dos parâmetros adimensionais pressão e temperatura das simulações com e sem combustão para o Diesel nas células próximas à parede do tubo.

Figura 77 – Comparativo dos parâmetros adimensionais pressão e temperatura das simulações do Diesel com e sem combustão nas células próximas a parede do tubo.

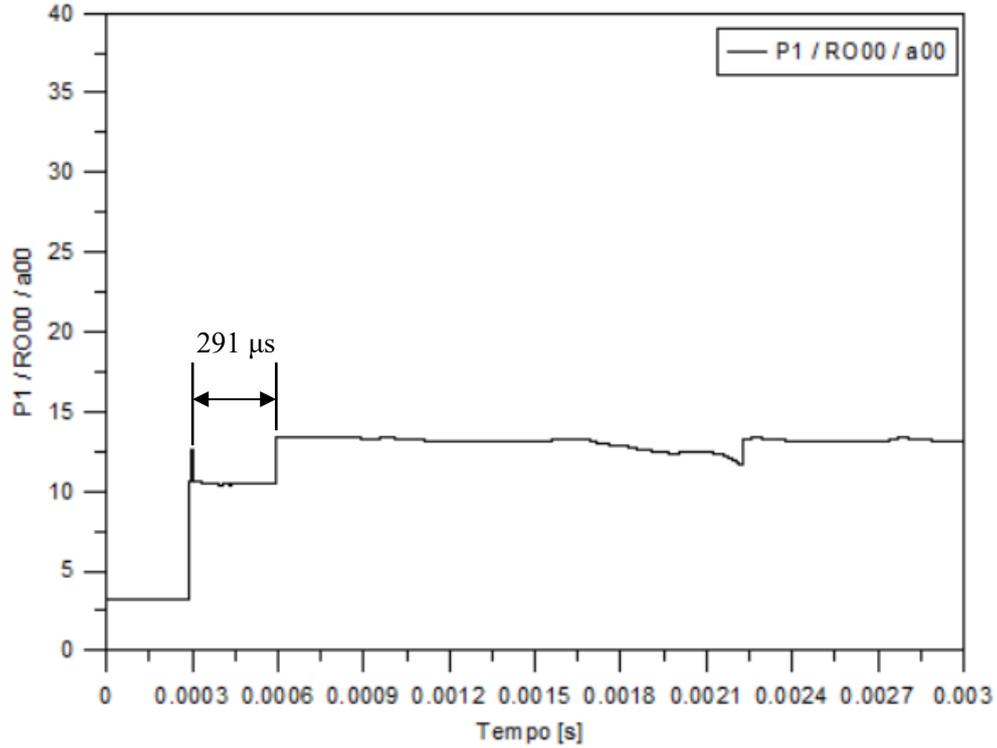




(b)
Fonte: Autor.

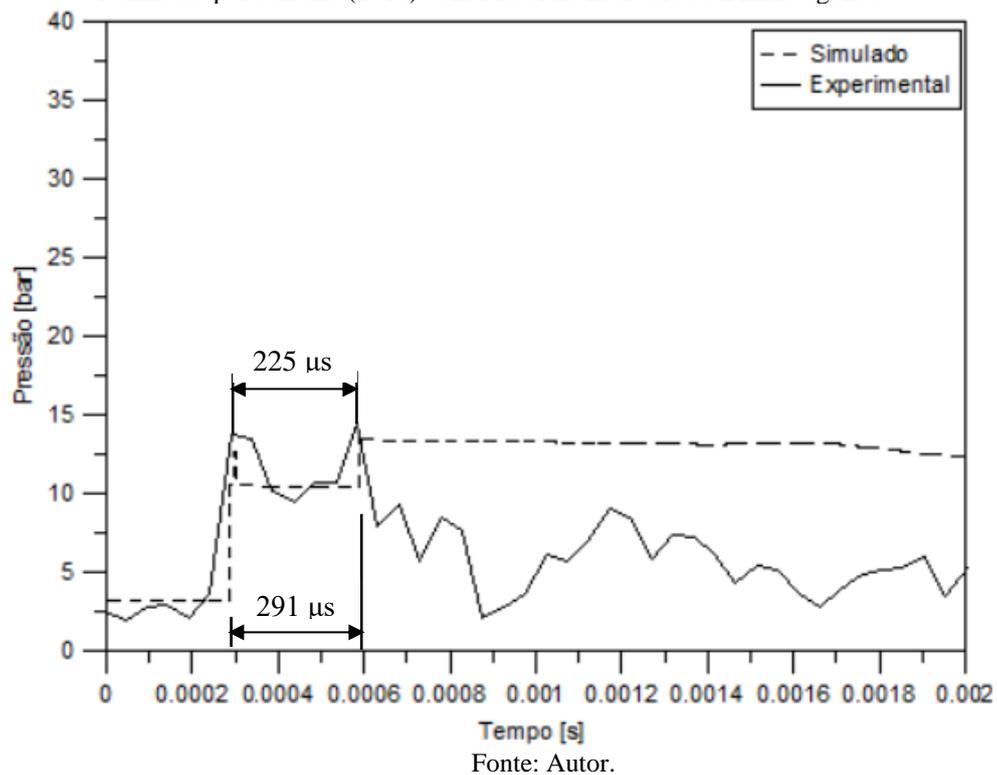
A figura 78 mostra o resultado da simulação do Diesel com combustão em função da variação de pressão com o tempo. O sensor de pressão P1 localizado no final da seção conduzida do tubo registrou um pico de pressão no instante de tempo (0,000290 s) e um segundo pico foi registrado no instante de tempo (0,000581 s). O primeiro pico refere-se a passagem da onda de choque incidente pelo sensor P1 e o segundo refere-se à autoignição da massa de ar/combustível dentro do tubo de choque. O tempo de atraso de ignição foi estimado em (0,000291 s). O cálculo desse tempo levou em consideração o momento em que o sensor P1 captou a passagem da onda de choque no instante (0,000290 s) e o pico final da combustão (0,000581 s).

Figura 78 - Resultados de simulação do sensor de pressão do Diesel com combustão em função do tempo.



A figura 79 mostra o comparativo dos tempo de atraso de ignição simulados nesse trabalho com os ensaios experimentais realizados por Santana (2013) com Diesel no intervalo de 2 milissegundos.

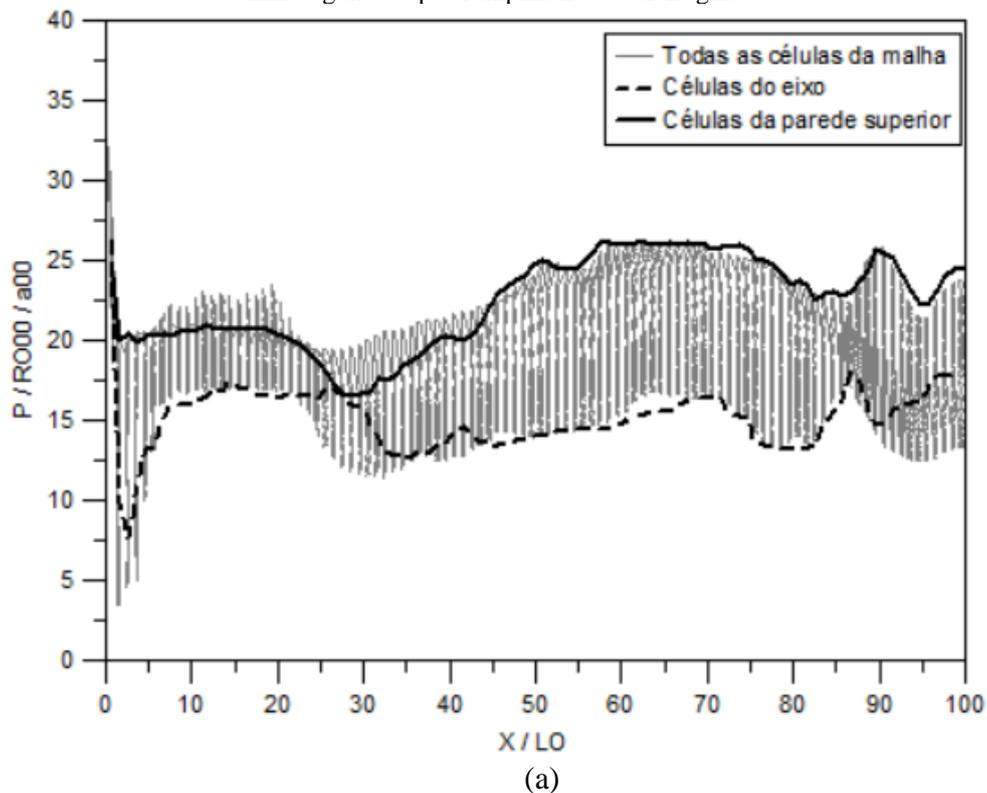
Figura 79 - Comparativo dos tempos de atraso de ignição simulados nesse trabalho com os ensaios experimentais realizados por Santana (2013) com Diesel no intervalo de 2 milissegundos.

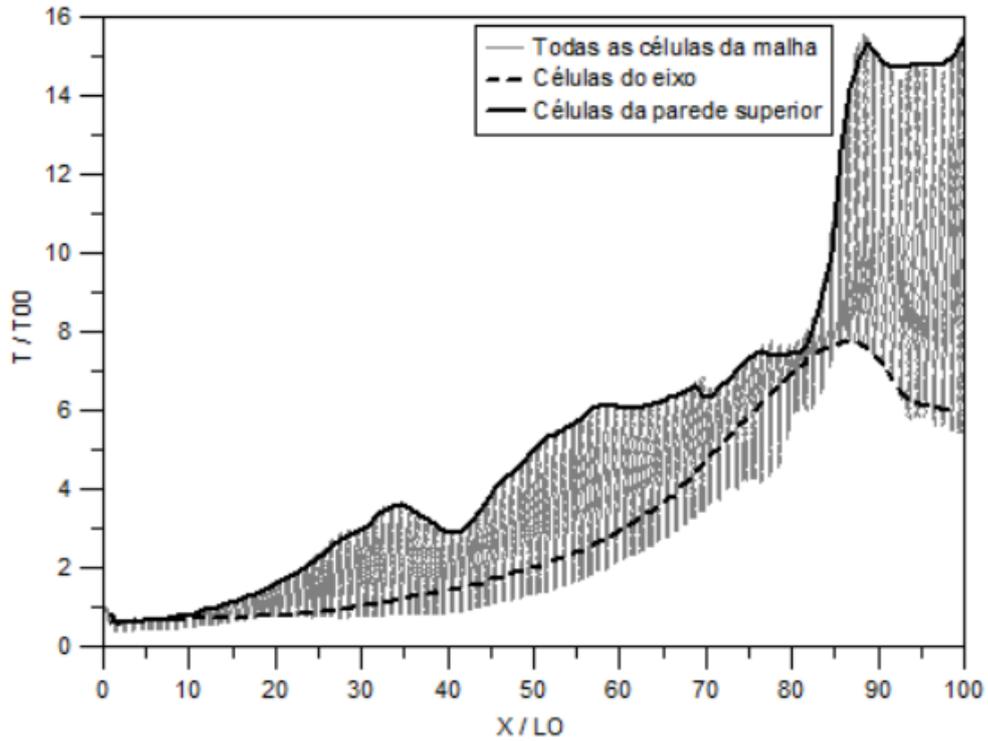


O tempo de atraso medido experimentalmente foi de 225 μ s enquanto o simulado foi de 291 μ s. A diferença percentual entre os resultados foi de 29%. Essa diferença pode ser justificada pela medição no tubo de choque, já que o cálculo do tempo de ignição experimental foi estimado somente pela diferença entre o pico de combustão e o momento em que o sensor sentiu a passagem da onda de choque. O resultado foi considerado satisfatório, uma vez que os tempos de ignição simulados e medidos estão com a mesma ordem de grandeza.

A figura 80 (a) e (b) mostra os resultados de simulação dos parâmetros adimensionais de pressão e temperatura da onda de choque do biodiesel com combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.

Figura 80 - Parâmetros adimensionais de pressão e temperatura da onda de choque do biodiesel com combustão 8 milissegundos após rompimento do diafragma.



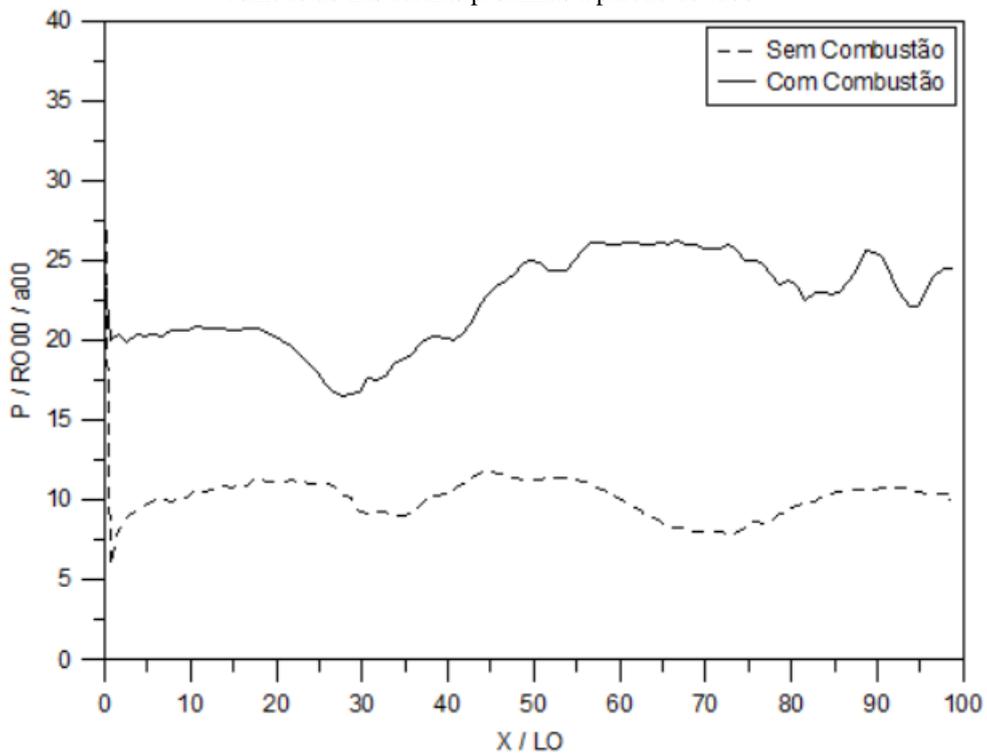


(b)

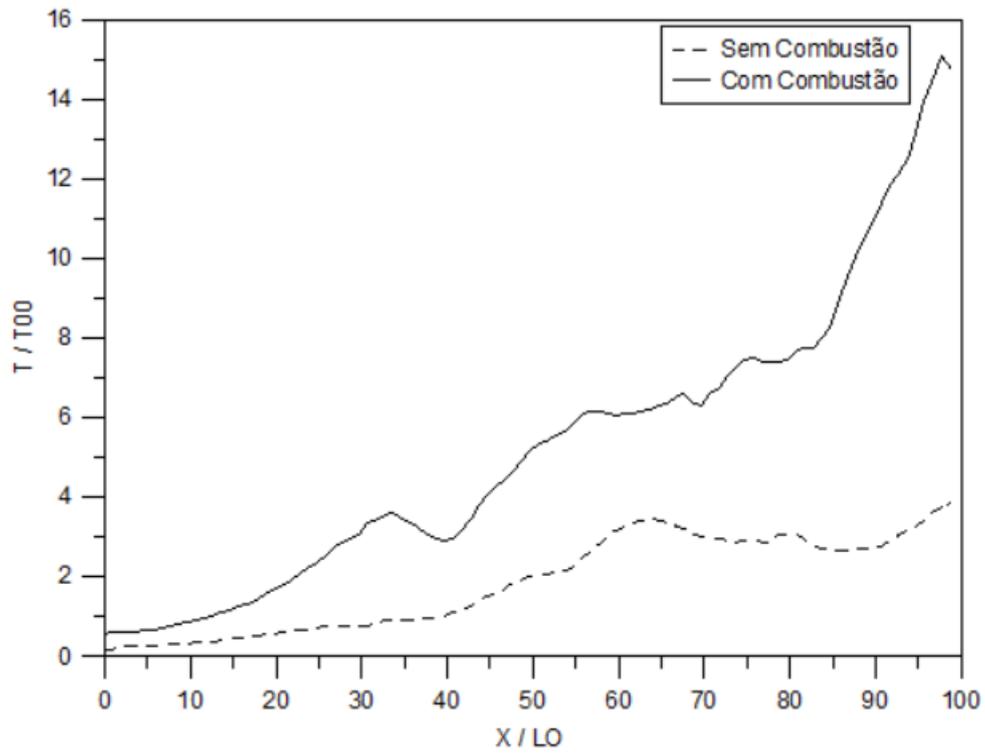
Fonte: Autor.

A figura 81 (a) e (b) mostra o comparativo dos parâmetros adimensionais de pressão e temperatura das simulações com e sem combustão para o biodiesel nas células próximas à parede do tubo.

Figura 81 – Comparativo dos parâmetros adimensionais pressão e temperatura das simulações do biodiesel com e sem combustão nas células próximas a parede do tubo.



(a)

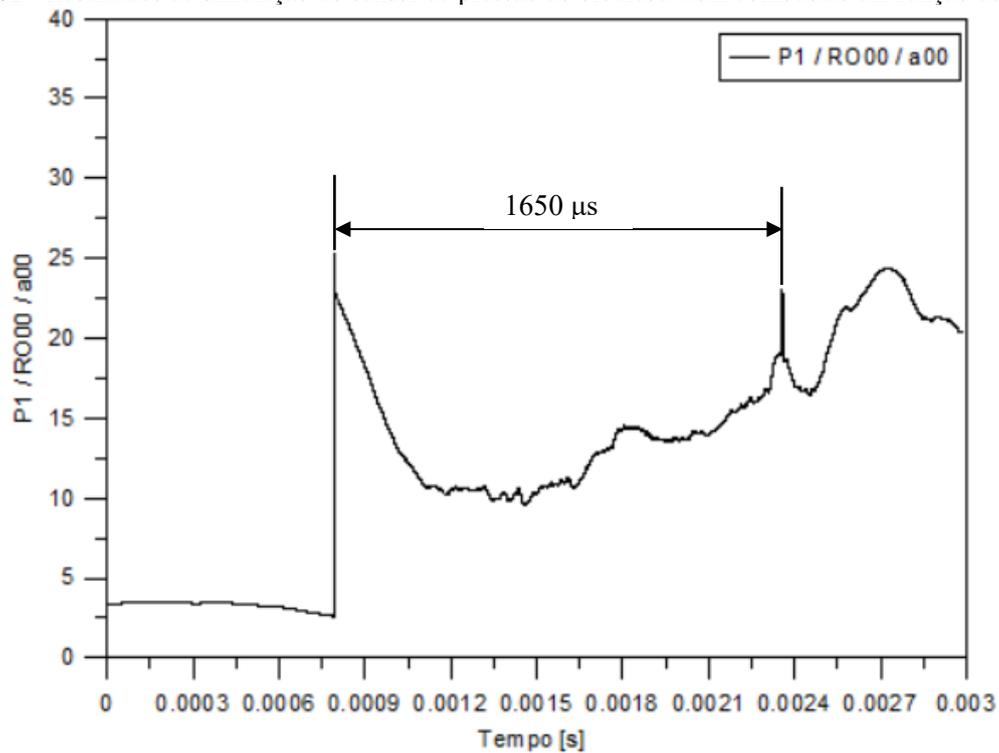


(b)

Fonte: Autor.

A figura 82 mostra o resultado de simulação do sensor de pressão do biodiesel com combustão em função do tempo.

Figura 82 - Resultados de simulação do sensor de pressão do biodiesel com combustão em função do tempo.

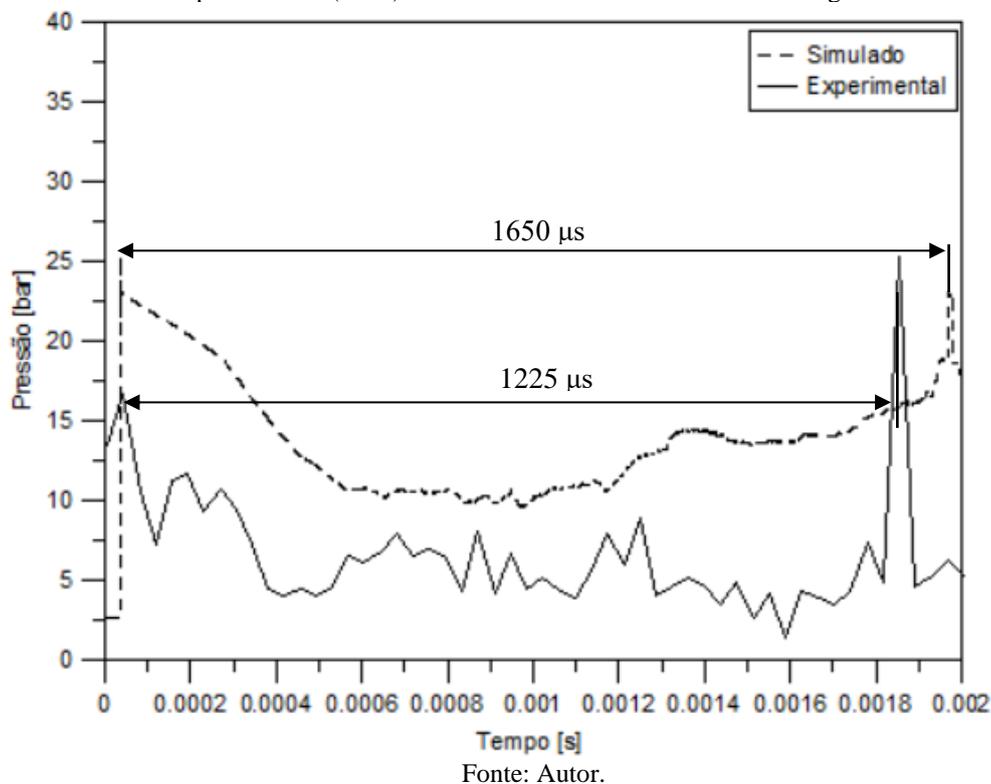


Fonte: Autor.

A figura 82 mostra o resultado de simulação do sensor de pressão P1 do biodiesel com combustão em função do tempo. O sensor de pressão registrou um pico de pressão no instante de tempo (0,000800 s) e um segundo pico foi registrado no instante de tempo (0,002450 s). O tempo de atraso de ignição foi estimado em (0,001650 s).

A figura 83 mostra o comparativo dos tempos de atraso de ignição simulados nesse trabalho com os ensaios experimentais realizados por Santana (2013) com biodiesel em um intervalo de 2 milissegundos.

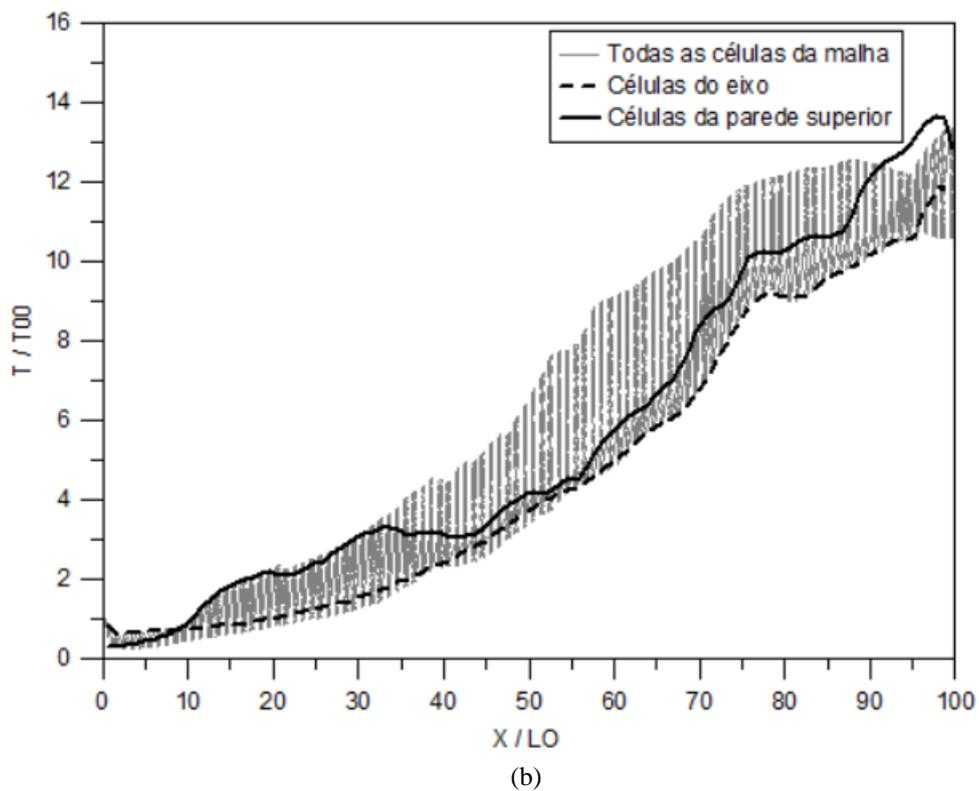
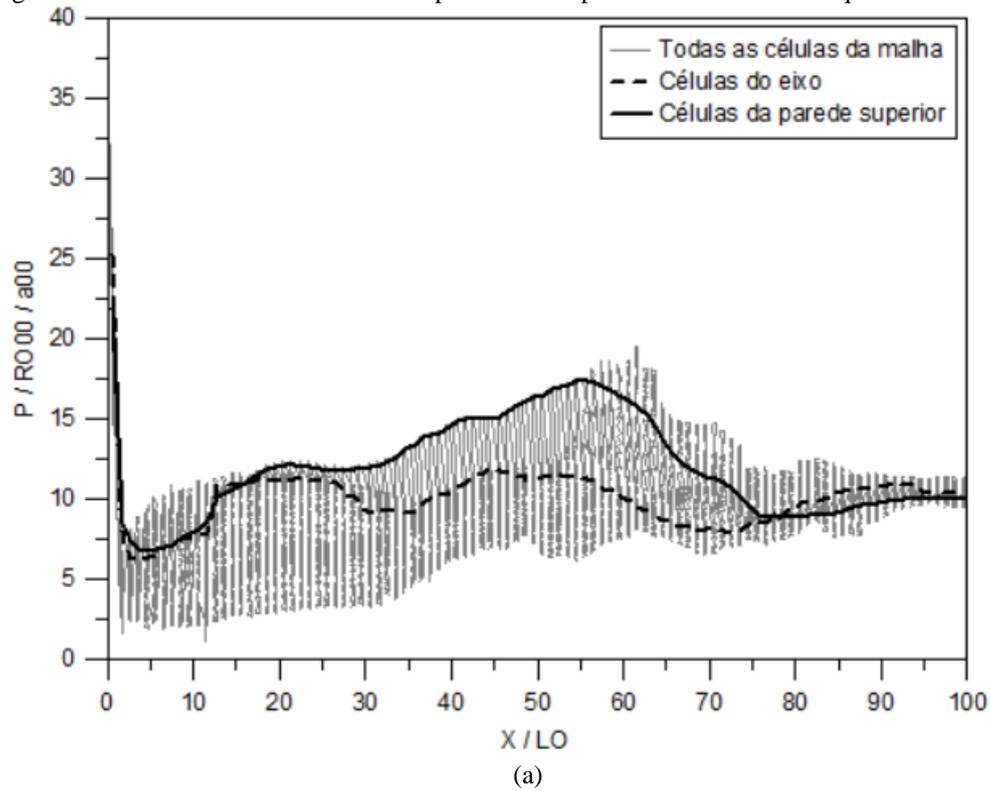
Figura 83 - Comparativo dos tempos de atraso de ignição simulados nesse trabalho com os ensaios experimentais realizados por Santana (2013) com biodiesel no intervalo de 2 milissegundos.



O tempo de atraso medido experimentalmente foi de 1225 µs enquanto o simulado foi de 1650 µs. A diferença percentual entre os resultados foi de 34%. Essa diferença pode ser justificada pela medição no tubo de choque, já que o cálculo do tempo de ignição experimental foi estimado somente pela diferença entre o pico de combustão e o momento em que o sensor sentiu a passagem da onda de choque. O resultado foi considerado satisfatório, uma vez que os tempos de ignição simulados e medidos estão com a mesma ordem de grandeza.

A figura 84 (a) e (b) mostra os resultados de simulação dos parâmetros adimensionais de pressão e temperatura da onda de choque com etanol.

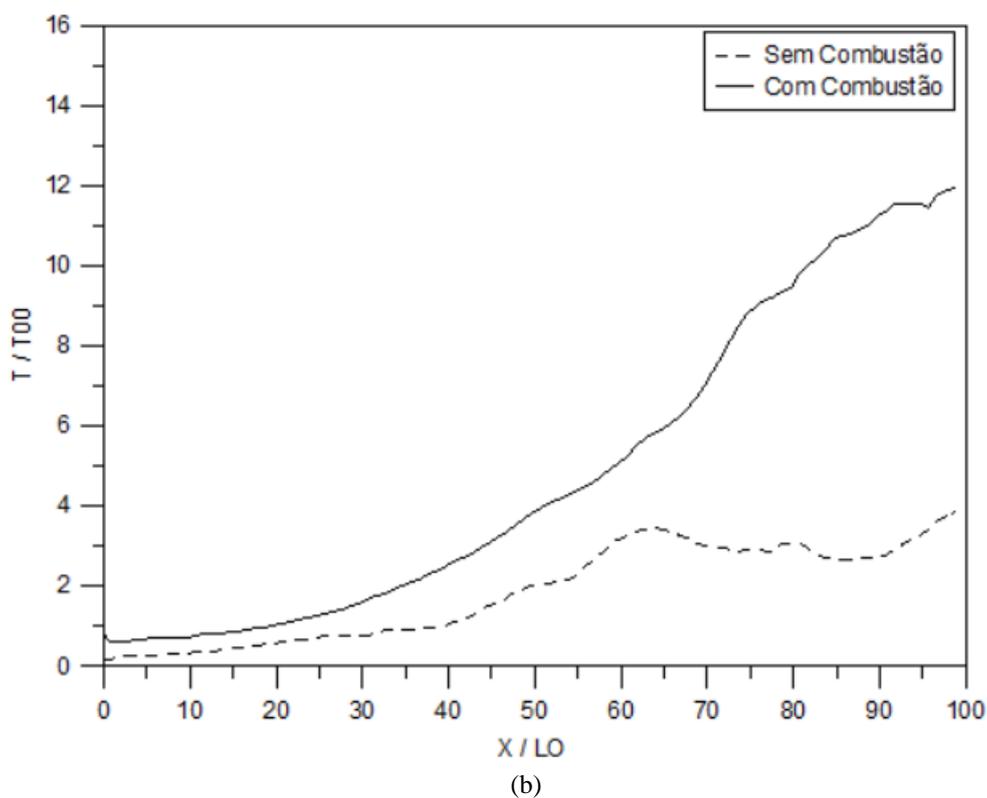
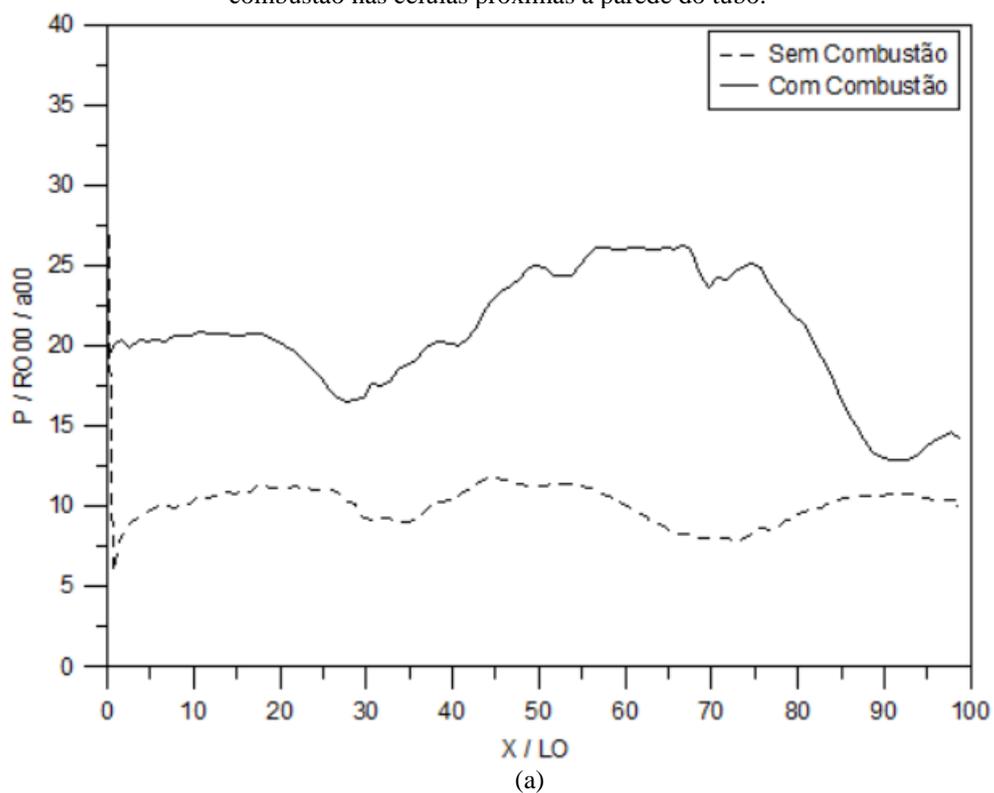
Figura 84 - Parâmetros adimensionais de pressão e temperatura da onda de choque com etanol.



Fonte: Autor.

A figura 85 (a) e (b) mostra o comparativo dos parâmetros adimensionais pressão e temperatura das simulações com e sem combustão para o etanol nas células próximas à parede do tubo.

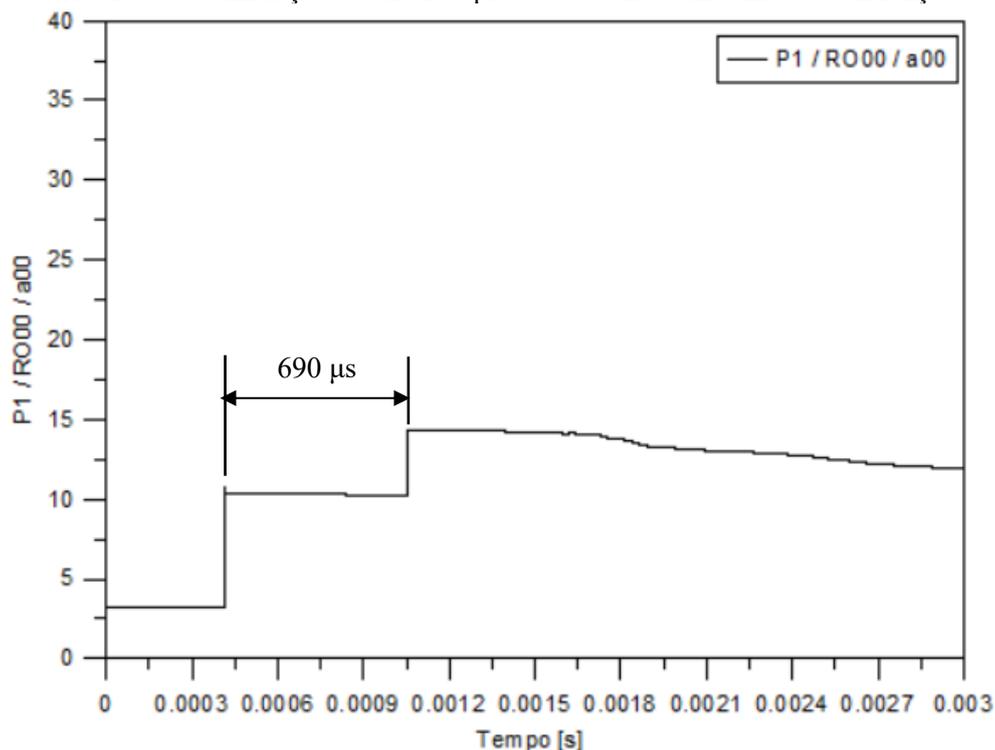
Figura 85 – Comparativo dos parâmetros adimensionais pressão e temperatura das simulações do biodiesel com e sem combustão nas células próximas a parede do tubo.



Fonte: Autor.

A figura 86 mostra o resultado de simulação do sensor de pressão do etanol com combustão em função do tempo.

Figura 86 - Resultados de simulação do sensor de pressão do etanol com combustão em função do tempo.



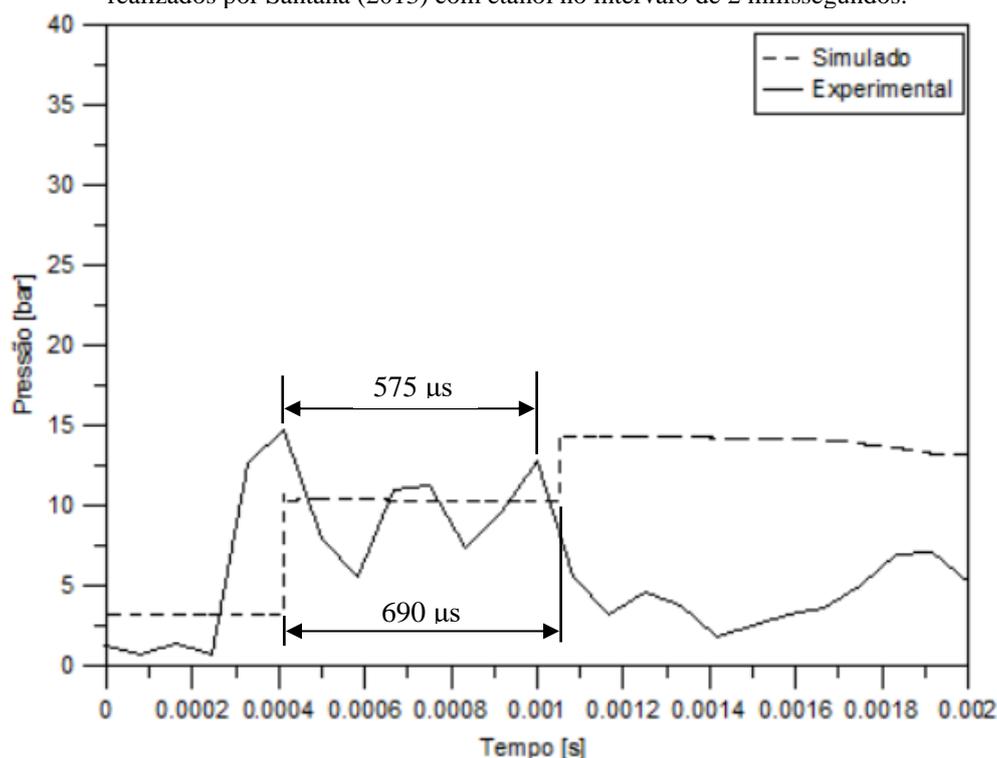
Fonte: Autor.

A figura 86 mostra o resultado de simulação do sensor de pressão P1 do etanol com combustão em função do tempo. O sensor de pressão registrou um pico de pressão no instante de tempo (0,000340 s) e um segundo pico foi registrado no instante de tempo (0,001030 s). O tempo de atraso de ignição foi estimado em (0,000690 s).

O tempo de atraso medido experimentalmente foi de 575 μs enquanto o simulado foi de 690 μs. A diferença percentual entre os resultados foi de 20%. Essa diferença pode ser justificada pela medição no tubo de choque, já que o cálculo do tempo de ignição experimental foi estimado somente pela diferença entre o pico de combustão e o momento em que o sensor sentiu a passagem da onda de choque. O resultado também foi considerado satisfatório, uma vez que os tempos de ignição simulados e medidos estão com a mesma ordem de grandeza.

A figura 87 mostra o comparativo dos tempo de atraso de ignição simulados nesse trabalho com os ensaios experimentais realizados por Santana (2013) com etanol em um intervalo de 2 milissegundos.

Figura 87 - Comparativo dos tempos de atraso de ignição simulados nesse trabalho com os ensaios experimentais realizados por Santana (2013) com etanol no intervalo de 2 milissegundos.



(d)

Fonte: Autor.

A Tabela 7 mostra os tempos de atraso de ignição medidos no tubo de choque por Santana (2013), os tempos simulados e a diferença percentual entre experimental e simulação.

Tabela 7 – Tempos de atraso de ignição medidos, simulados e diferença percentual.

Combustível	Tempo de ignição medido (μ)	Tempo de ignição simulado (μ)	Diferença percentual (%)
Diesel	225	291	29
Biodiesel B100	1225	1650	34
Etanol	575	690	20

Fonte: Autor.

Os tempos de atraso medidos para o Diesel variaram de 175 a 250 μ s e o valor encontrado na simulação foi de 290 μ s. Para o etanol os valores de tempo de atraso medidos variaram de 525 a 600 μ s e na simulação foi encontrado 690 μ s. Para o biodiesel os valores de tempo de atraso medidos variaram de 900 a 1300 μ s e na simulação foi encontrado 1690 μ s. Os valores de atraso de ignição estão coerentes com o tipo de combustível, já que quanto maior o número de cetano menor o tempo de atraso de ignição. O Diesel que possui número de cetano próximo de 50 apresentou menor tempo de atraso de ignição em relação ao biodiesel possui número de cetano próximo de 40.

Os valores de tempo de atraso de ignição simulados foram maiores que os medidos. Essa diferença pode estar relacionada com a leitura do sensor no teste experimental, uma vez que esse tempo foi estimado como a diferença entre o momento em que o sensor começa a sentir a passagem da onda e o pico de combustão.

Esse trabalho apresentou tempos de atraso de ignição maiores que os trabalhos de Cancino (2009), Honning (2001) e Walton et. al (2012), isso se justifica pelo fato de que o tubo de choque usado nesse trabalho ter várias finalidades que exigem um maior diâmetro para simular condições mais próximas das encontradas em motores de combustão interna. Assim os tempos de atrasos de ignição medidos devem ter o tempo químico de ignição somado ao tempo de deslocamento da onda de pressão até o sensor, ocasionando um tempo de atraso de ignição maior em relação aos outros trabalhos apresentados na literatura, que são medidos em tubos de choque de menor diâmetro.

Foi feita uma previsão do tempo de retardo de ignição de uma mistura com 70% de Diesel e 30% de biodiesel, de acordo com a equação 106, e o valor do atraso de ignição simulação foi de 590 μ s.

6. CONCLUSÕES

Pode-se afirmar que é possível realizar medições de tempos de atraso de ignição de combustíveis utilizando o tubo de choque do laboratório de combustão da Universidade Federal de Minas Gerais. Os combustíveis testados tiveram comportamento de tempo de atraso de ignição conforme esperado tanto nos ensaios experimentais quanto na simulação. Os maiores tempos de atraso de ignição foram encontrados no biodiesel, aproximadamente 1600 μ s, na sequência o etanol, aproximadamente 600 μ s, e o combustível que apresentou menor tempo de atraso de ignição foi o Diesel, aproximadamente 300 μ s. A diferença entre os resultados obtidos nas simulações e nos testes experimentais pode ser justificada pela medição no tubo de choque, já que o tempo de ignição foi medido através do sinal do sensor de pressão.

Os valores dos tempos de atraso de ignição medidos e simulados estão coerentes, uma vez que o número de cetano é inversamente proporcional ao tempo de retardo de ignição, ou seja, quanto maior o número de cetano menor o tempo de atraso de ignição. O Diesel que possui número de cetano maior que o biodiesel apresentou nesse trabalho menor tempo de atraso de ignição. O etanol que apresentou tempo de atraso de ignição intermediário, deve possuir número de cetano intermediário.

Os tempos de atraso de ignição medidos nesse trabalho foram estimados como a diferença entre o momento que o sensor começa a sentir a passagem da onda e o pico de combustão. Os tempos de atraso medidos apresentados na literatura são de medições em tubos de choque de menor diâmetro e baseados na emissão de luz pela zona de ignição. O tubo de choque usado nesse trabalho tem várias finalidades que exigem um maior diâmetro que simula condições mais próximas das encontradas em motores de combustão interna. Assim, por esta hipótese, os tempos de atrasos de ignição medidos devem ter o tempo químico de ignição somado ao tempo de deslocamento da onda de pressão até o sensor, ocasionando um tempo de atraso de ignição maior em relação aos outros trabalhos.

O aditivo detonante adicionado ao etanol para uso em motores ignição por compressão não altera a cinética química da combustão do etanol e sim facilita a ignição do combustível quando submetido a altas pressões e temperatura. Esse fato é justificado porque os testes experimentais foram realizados com o etanol aditivado enquanto que a simulação numérica foi feita considerando etanol comum e ambos apresentaram tempos de retardo de ignição equivalentes.

7. SUGESTÃO PARA TRABALHOS FUTUROS

Analisar os aspectos da cinética química e equilíbrio químico dos ensaios experimentais realizados no tubo de choque do laboratório de combustão da Universidade Federal de Minas Gerais por Santana (2013), Valente (2016) e Guimarães (2016). Deverão ser analisados o estado de equilíbrio dos reagentes combustível/ar e produtos da combustão dentro do tubo de choque após o rompimento do diafragma e quantificação das composições das frações molares das diferentes espécies químicas envolvidas no processo de combustão. Essas análises poderão ser confrontadas com o trabalho realizado por Bosch (2012) que utilizou o compilador Matlab para modelar as emissões gasosas em um motor de combustão interna a partir do acoplamento das metodologias de equilíbrio químico e cinética química e como o trabalho realizado por Cancino (2009) que utilizou os compiladores Cantena e Chemkin para analisar a cinética e equilíbrio químico da combustão dos hidrocarbonetos metano, acetileno, propano e butano.

Implementar um mecanismo detalhado de ignição térmica baseado no trabalho realizado por Cancino (2009) para previsão de ignição térmica. O mecanismo detalhado mostra a rota de degradação do combustível e todas as espécies geradas no processo de combustão, diferentemente do mecanismo global empregado nesse trabalho, que é um modelo em que as espécies químicas geradas no processo de combustão são dadas diretamente pela relação de conservação de massa entre produtos e reagentes.

Implementar a técnica de refinamento de malhas para reduzir o tempo de ensaio de simulação. Nessa técnica cada célula da malha dá origem a nove novas células triangulares. A técnica consiste em varrer toda malha e aplicar automaticamente o refinamento de malha somente nas células que apresentam gradiente de pressão. As outras regiões manterão a malha original. A grande vantagem de aplicação dessa técnica é a obtenção de informações mais detalhadas e precisas da simulação numérica com menor custo computacional.

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABNT - NBR 10522: **Abreviação na descrição bibliográfica** – Procedimento 1988.

ABNT - NBR 6023: **Informação e documentação – Referências** – Elaboração. 1989.

ABNT - NBR 10520: **Informação e documentação – Citações em documentos** – Apresentação. 1992.

ABNT - NBR 14724: **Informação e documentação - Trabalhos acadêmicos** – Apresentação. Abril de 2011.

Antônio, M. C. N. **Efeito do Pistão Gasoso em Tubo / Túnel de Choque Quando Operado na Condição de Equilíbrio de Interface**. Tese apresentada a Divisão de Pós-Graduação do Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São Jose dos Campos, Brasil, 1997.

Azevedo J. L. F and Oliveira L. C. **Unsteady Airfoil Flow Simulations Using the Euler Equations**. Instituto de Aeronáutica e Espaço. São Jose dos Campos, julho 1994.

Brandão D. N. **Refinamento h-Adaptativo de Malhas para o Método dos Elementos Finitos utilizando uma Estrutura de Grafo**. Dissertação submetida ao Programa de Pós-graduação em Computação da Universidade Federal Fluminense. julho 2008.

Brunnell J. A. **Autoignition of Methyl Pentanoate at Low to Intermediate Temperatures and Elevated Pressures in a Rapid Compression Machine**. Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Master of Science at the University of Connecticut, 2015.

Bosch N. J. C. **Simulações de Emissões de Misturas gasolina / Etanol em Motores de Combustão Interna**. Tese submetida ao programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade federal de Minas Gerais, agosto de 2012.

Campbell et al. **Ignition delay times of methyl oleate and methyl linoleate behind reflected shock waves**, Stanford, California, USA, 2012.

Cancino, L. R. **Auto ignition of gasoline surrogate mixtures at intermediate temperatures and high pressures: Experimental and numerical approaches**. Proceeding of the Combustion institute, Duisburg, Germany, 2009.

Cancino, L. R. **Desenvolvimento e Aplicação de Modelos Cinéticos detalhados para Etanol e Combustíveis Hidrocarbonetos Contendo Etanol**. Tese submetida à Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do grau de Doutor em Engenharia Mecânica, Santa Catarina, 2009.

Cancino, L.R.; Fikri M.; Oliveira, A.A.M.; Schulz, C. **Auto ignition of gasoline surrogate mixtures at intermediate temperatures and high pressures: Experimental and numerical approaches**, Duisburg, Germany, 2009.

Chang K. S. e Kim J. K. **Numerical Investigation of Inviscid Shock Wave Dynamics in an Expansion Tube**. Department of Aerospace Engineering, Korea Advanced Institute of Science and Technology, Taejon 305-701, Republic of Korea, 1994.

Davidson, D. F.; Oehlschlaeger, M. A.; Herbon, J. T. and Hanson, R. K. **Shock Tube measurements of Iso-Octane ignition times and oh concentration time histories. High Temperature Gas Dynamics.** Laboratory Mechanical Engineering Department Stanford University, Stanford, California, USA, 2004.

Davidson, D. F. and Hanson, R. K. **Fundamental Kinetics Database Utilizing Shock Tube Measurements, Vol. 1: Ignition Delay Time Measurements.** Mech. Eng. Dept. Report, Stanford University, California, USA, November 2005.

Davidson, D. F. and Hanson, R. K. **Fundamental Kinetics Database Utilizing Shock Tube Measurements, Vol. 2: Concentration Time-History Measurements.** Mech. Eng. Dept. Report, Stanford University, California, USA, December 2006.

Dubois et al. **Experimental and Modeling Study of n-Propyl cyclohexane Oxidation under Engine-relevant Conditions.** Total Raffinate Marketing, Direction des Recherche's and CNRS Orleans-ICARE, Aérothermique, Reactivate et Environment. Received December 5, 2008. Revised Manuscript Received March 4, 2008.

Eswar Josyula. **Hypersonic Non-equilibrium Flows: Fundamentals and Recent Advances.** U.S. Air Force Research Laboratory Wright-Patterson Air Force Base, Ohio, 2015.

Fikri M.; Kalghatgi G. T.; Starke R.; Roth P. **Shock-Tube Measurements of the Ignition Delay Times of Reference Fuels at Intermediate Temperatures and High Pressures.** European Combustion Meeting, At Chania, Greece, 2017.

Gonçalves N. D. F. **Método dos Volumes Finitos em Malhas Não Estruturadas.** Tese submetida à Faculdade de Ciências da Universidade do Porto. Departamento de Matemática Aplicada / Departamento de Matemática Pura Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, 2007.

Gonzales, C. A. Q. **Propagação de ondas de combustão em gases de nobres Abel e de Van der Waals.** Dissertação de Mestrado do curso de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia Espaciais / Combustão e Propulsão, São Jose dos Campos, 2009.

Guimarães D. C. **Estudo Dos Atrasos De Ignição De Combustíveis Oxigenados Utilizando Tubo de choque Com Detecção De Chama.** Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Belo Horizonte 2016.

Hanson, R. **Shock tube measurements of ignition processes and spray-shock wave interactions.** Work submitted by: Professor R. K. Hanson, PI Department of Mechanical Engineering Stanford University, Stanford, California, 2001.

Horning, D. C. **A study of the high-temperature auto ignition and thermal decomposition of hydrocarbons.** Work supported by TDA Research, Inc., Air Force Office of Scientific Research, Office of Naval Research, and Army Research Office, Stanford, California, 2001.

Kumar et. al. **Autoignition of methyl butanoate under engine relevant conditions.** Combustion and Flame, Volume 171, September 2016, Pages 1-14 2016.

Lacassa A. e Filho A. C. **Refinamento e Simplificação de Malhas Isotrópicas e Anisotrópicas.** Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, ICMC, USP. 13560-970, São Carlos, SP.

MacMillan A. C. N. **Efeito do Pistão Gasoso em Tubo / Túnel de Choque Quando Operado na Condição de Equilíbrio de Interface**. Tese apresentada a Divisão de Pós-Graduação do Instituto Tecnológico de Aeronáutica no Curso de Engenharia Aeronáutica na área de Aeronáutica, propulsão e Energia, São Jose dos Campos, Brasil, 2004.

Marcus J. Grote, Michaela Mehlin, Teodora Mitkova. **Runge-Kutta Based Explicit Local Time-Stepping Methods for Wave Propagation**. Institute of Mathematics University of Basel, Rheinsprung 21 CH - 4051 Basel Switzerland. February, 2014.

Marcos, M. B.; Minucci, M. A. S.; Burger, D.; Ferraz, E. O.; Toro, P. G. P. e Santos, A. M. **Compressor a Pistão Livre para Tubos e Túneis de Choque**. Instituto Técnico Aeroespacial, São José. dos Campos, Brasil, 2001.

Maurice, J. Z. and Joe, D. H. **Gas Dynamics volume 1**. School of Mechanical Engineering Purdue University, Canada, 1976.

Maurice, J. Z. and Joe, D. H. **Gas Dynamics volume 2 Multidimensional Flow**. School of Mechanical Engineering Purdue University, Canada, 1977.

McMillan, R.J. **Shock tube investigation of pressure and ion sensors used in pulse detonation engine research**. Thesis of Degree of Master of Science in Aeronautical Engineering, Ensign, USNR 2004.

Lamnaouer M. **Numerical Modeling of The Shock Tube Flow Fields Before and During Ignition Delay Time Experiments at Practical Conditions**. A dissertation submitted in Mechanical Engineering in the Department of Mechanical, Materials, and Aerospace Engineering in the College of Engineering and Computer Sciences at the University of Central Florida Orlando, Florida. B.S. of Aerospace Engineering, University of Central Florida, 2004.

Nagamatsu, H. T. **Shock Tube Technology and Design. Fundamental data obtained from shock-tube experiments**. p. 86. (Edited by Ferri) Pergamon Press, New York, 1961.

Nicholas N. K. **A Shock Tube Technique for Blast Wave Simulation and Studies of Flow Structure Interactions in Shock Tube Blast Experiments**. Thesis presented to the Faculty of The Graduaté College at the University of Nebraska. Under the Supervision of Professor Ruqiang Feng. Lincoln, Nebraska August 2011.

Santana, C. M. **Caracterização e Testes de Tubo de choque para Análise de Combustão com Injeção de Combustível**. Dissertação apresentada ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Minas Gerais, 2013.

Yokomae, T. **Planar Laser-Induced Fluorescence (plif) of H₂ – O₂ Combustion**. Presented to the faculty of the graduate school of the University of Texas at Arlington in partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science in aerospace engineering the University of Texas at Arlington, August, 2003.

Valente O. S. **Desenvolvimento de Método para Determinação do Número de Cetano de Combustíveis Oxigenados Utilizando Tubo de Choque**. Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, 2016.

Walton et. al. **Speciation Studies of Methyl Butanoate Ignition**. Fuel. Volume 90, Issue 5, May 2011, Pages 1796-1804 2011.

9. APÊNDICE A – Rotinas implementadas no ambiente integrado de programação *Lazarus*.

9.1. Rotina computacional implementada para definição de classes e constantes do programa.

```
unit gridunit;

{$mode objfpc}{$H+}

interface

uses
  Classes, SysUtils, Graphics, StdCtrls, ExtCtrls, Math;

const
  Ro          = 1;           {Ro/Rooo}
  Rou         = 2;           {Rou/ (Rooo.aoo) }
  Rov         = 3;           {Rov/ (Rooo.aoo) }
  e           = 4;           {Rou/eoo}

  NVariables  = 4;
  NVertex     = 3;
  NMaxPoints  = 350000;
  NMaxCells   = 500000;
  NMaxSubCells = 100000;
  NMaxGhostCells = 500000;
  NMaxSignalPoints = 10000000;

  TopWall     = -1;         { Fronteira com Escoam. Nao-Pertubado }
  LateralWall = -2;         { Fronteira com a Superficie do Corpo }
  Axis        = -3;         { Fronteira com o Eixo de Simetria }
  Diaphragm   = -4;         { Fronteira de Saída do Escoamento }

  { Atmosfera ISA Sea level }
  gamma = 1.40;             { Razao de Calores Especificos p/ Ar }
  RAir  = 287.0530; {J/kg/K} {Constante do gás p/ Ar}
  Pdo0  = 101325; {Pa}      {Pressão atmosferica - Infinito}

  Pdo0  = 101325; {Pa}      {Pressão atmosferica - Infinito}
  Tdo0  = 298.15; {K}       {Temperatura ambiente - Infinito}
  Rodoo = Pdo0/RAir/Tdo0;   {Constante universal dos gases - inf.}
  adoo  = sqrt(gamma*RAir*Tdo0); {Velocidade do som - infinita}

  Runiversal = 8314.0; {J/kg/K}
  cpAir=1004; {J/kg/K}

  XSensor = 90;             { Corrdenadas do sensor de pressão}
  YSensor = 40;             { em m }

  NOut : integer = 1;
```

type

```
PointType = object
    X,Y : single;
end;
```

```
VertexType = array[1..NMaxPoints] of PointType;
```

```
PropertiesType = array[1..NVariables] of extended;
```

```
SignalType = array[1..NMaxSignalPoints,1..NVariables+3] of extended;
{ rho rhou rhov e time P dpdt}
```

```
CellType = record
    Ignited      : boolean;      { Balisa indicadora de ignição      }
    cellcolor    : TColor;      { Cor interna das celulas          }

    Neighbor,    { Celulas Vizinhas - Sentido      }
    IVertex,     { Vertices da Celula - Anti-Horario }
    IGhost
                : array[1..NVertex] of integer;
    Q,           { Propriedades Escoamento na Celula }
    Q0,         { Vetor Auxiliar de Propriedades     }
    CQ,         { Fluxo Liquido na Celula            }
    Dissipation, { Dissipacao Artificial              }
    Grad
                : PropertiesType;

    Volume,
    deltat
                : extended;

end;
```

```
CellPtr = ^CellType;
```

```
SignalPtr = ^SignalType;
```

```
FuelType = class
    Name:String;
    Afactor,
    ActivationEnergy,
    nfactor,
    HeatValue,
    FAstq:
                extended;

    constructor Create; overload;
    Function GetIgnitionTime(P,T:extended): extended; virtual;

end;
```

```

BodyType = class
    RootName                { Parte Fixa dos Nomes Arquivos      }
                           : string;

    NCells,                 { No. de Celulas da Malha      }
    NSubCells,              { No. de Celulas da Malha      }
    NGhostCells,           { No. de Celulas Fantasmas     }
    NPoints,                { No. de Pontos da Malha      }
    NPointsX,               { No. de Pontos da Malha Direcao X }
    NPointsY                { No. de Pontos da Malha Direcao Y }
                           : integer;

    Time0,                  { Tempo inicial de simulação    }
    Time,                   { Tempo atual de simulação      }
    FreeStreamMach,         { No. de Mach do Escoa. NaoPertubado }
    FreeStreamVelocity,     { Velocidade do Escoa. NaoPertubado }
    MaxResidue0,           { Residuo maximo Inicial      }
    MaxResidue              { Residuo Maximo no Campo de Escoam. }
                           : extended;

    GhostVertex,
    Centroidpoint, GhostCentroidpoint,
    Vertex                  { Vertices das Celulas Triangulares }
                           : VertexType;

    Cell                    { Celula da Malha Naoestruturada }
                           : array[1..NMaxCells] of CellPtr;
    SubCell                  { Celula da SubMalha Naoestruturada }
                           : array[1..NMaxCells*3] of CellPtr;
    GhostCell
                           : array[1..NMaxGhostCells] of CellPtr;

    constructor Create(MainName : string); overload;

    procedure GetCentroid(i : integer; var XC, YC : extended);
    procedure GetGhostCentroid(i : integer; var XC, YC : extended);
    function GetDistanceCentroid(i, k : integer) : extended; virtual;
    function GetVolume (i : integer) : extended; virtual;
    function GetGradient (i, j : integer) : extended; virtual;

    function GetPressure (i : integer) : extended; virtual;
    function GetMach (i : integer) : extended; virtual;
    function GetDeltat (i : integer; CFL : extended)
                           : extended; virtual;

    function EQ (i, j : integer) : extended; virtual;
    function EQGhost (i, j : integer) : extended; virtual;
    function FQ (i, j : integer) : extended; virtual;
    function FQGhost (i, j : integer) : extended; virtual;
    function Nabla2Q(i, j : integer) : extended; virtual;
    function Ni (i : integer) : extended; virtual;

```

```

function GetNearestCell( pLocal : PointType) : integer; virtual;

procedure BuildUnstructuredGrid( GridFileName : string); virtual;
procedure Drawgrid( canvas: TPaintBox);
procedure BuildSubGrid( GridFileName : string); virtual;
procedure Drawsubgrid( canvas: TPaintBox);
procedure DrawGhostCell( canvas: TPaintBox); virtual;
procedure InitiateSensorSignal; virtual;
procedure InitialConditions; virtual;
procedure WallBoundaryConditions; virtual;
procedure AxisBoundaryConditions; virtual;
procedure DiaphragmBoundaryConditions; virtual;
procedure UpdateBoundaryConditions; virtual;|
procedure GetFluxModel; virtual;
procedure GetArtificialDissipation; virtual;
procedure ExplicitJameson(CFL : extended); virtual;
procedure CheckIgnition (Fuel : Fueltype); virtual;
procedure FlowSolver( CFL,ErrorMax : extended;
                    NIterMax : integer); virtual;

procedure Output(Memo : TMemo); virtual;
procedure FinalOutput; virtual;
procedure FinalOutputaxis; virtual;
procedure FinalOutputafteraxis; virtual;
procedure FinalOutputtopwall; virtual;
procedure OutputSensorSignal; virtual;
procedure FinalOutputSensorSignal; virtual;

destructor Destroy; override;
end;

```

implementation

```
uses Forms;
```

```
var
```

```

NIter,                { Numero de Iteracoes          }
NSignalPoints,       { Número de pontos do sinal de pressão}
NearestCell          { índice da célula mais perto do
                    { sensor de pressão          }
                    : integer;

Qoo                  { Propriedades do Escoamento Nao   }
                    : PropertiesType;   { Pertubado - Adimensionalizadas     }

SignalSensor         { Sinal do sensor de pressão         }
                    : SignalPtr;

nHeptane             :FuelType;

```

```

(*-----*)
(*      Inicializacao do Calculo do Escoamento e do Programa      *)
(*-----*)

```

```

constructor BodyType.Create( MainName : string);

var
  i
      : integer;

  Qoo
      : PropertiesType;           { Propriedades do Escoamento Nao }
                                   { Pertubado - Adimensionalizadas }

begin
  inherited Create;

  for i:=1 to NMaxCells do New(Cell[i]);
  for i:=1 to NMaxCells do New(SubCell[i]);
  for i:=1 to NMaxCells do New(GhostCell[i]);

end;

```

9.2. Rotina computacional implementada para construção da malha retangular.

```

procedure TForm1.Button1Click(Sender: TObject);
var
  input           :text;
  x,y,deltax,deltay:extended;
  i,k             :integer;

begin

  savedialog1.Execute;
  Assignfile(input,savedialog1.FileName);
  rewrite(input);

  x:=0;y:=0;
  deltax:=1;
  deltay:=1;

```

```

for k:= 1 to 3001 do
  begin
    for i:= 1 to 55 do
      if i<49 then
        begin
          writeln(input,x:10:2,y:10:2);
          y:=y+deltay;
        end

        else begin
          writeln(input,x:10:2,y:10:2);
          y:=y+0.1;
          end;
          x:=x+deltax;
          y:=0;
        end;

      closefile(input);
    end;
  end;
end;

```

9.3. Rotina computacional implementada para construção e leitura das coordenadas dos pontos da malha triangular.

```

procedure BodyType.BuildUnstructuredGrid( GridFileName : string);

var
  i,j,k,l
      : integer;
  fil
      : text;
begin
  assign(fil,GridFileName);
  reset(fil);

  readln(fil,NPointsX,NPointsY);
  k:=0;
  for i:=1 to NPointsX do

    for j:=1 to NPointsY do
      begin
        Inc(k);
        readln(fil,Vertex[k].X,Vertex[k].Y);
      end;
    end;
  end;
end;

```

```

close(fil);

NGhostCells:=0;
i:=0;
for l:=1 to NPointsX-1 do
  for j:=1 to NPointsY-1 do
    begin
      k:=(l-1)*NPointsY+j;

      Inc(i);
      with Cell[i]^ do
        begin
          IVertex[1]:=k+1;
          IVertex[2]:=k;
          Ivertex[3]:=k+NPointsY+1;

          IGhost[1]:=0;
          IGhost[2]:=0;
          IGhost[3]:=0;

          if l<>1 then Neighbor[1]:=i-(NPointsY-1)
            else begin
              if j<= 18 then Neighbor[1]:=Diaphragm
                else

                  Neighbor[1]:=LateralWall;
                  Inc(NGhostCells);
                  IGhost[1]:=NGhostCells;
                end;

          Neighbor[2]:=i+1;

          if j<>(NPointsY-1) then Neighbor[3]:=i+2
            else begin
              Neighbor[3]:=TopWall;
              Inc(NGhostCells);
              IGhost[3]:=NGhostCells;
            end;

          end;

        with Cell[i+1]^ do
          begin
            IVertex[1]:=k+1;
            IVertex[2]:=k+NPointsY;
            Ivertex[3]:=k+NPointsY+1;

```

```

    IGhost[1]:=0;
    IGhost[2]:=0;
    IGhost[3]:=0;

    if j>1 then Neighbor[1]:=i-1
    else begin
        Neighbor[1]:=Axis;
        Inc(NGhostCells);
        IGhost[2]:=NGhostCells;
    end;

    if l<>(NPointsX-1) then Neighbor[2]:=i+2*(NPointsY-1)
    else begin
        Neighbor[2]:=LateralWall;
        Inc(NGhostCells);
        IGhost[2]:=NGhostCells;
    end;

    Neighbor[3]:=i;

    end;
    Inc(i);
end;

NCells:=i;
end;

```

9.4. Rotina computacional implementada para calcular as coordenadas dos centroides das células da malha.

```

procedure BodyType.GetCentroid(i : integer; var XC, YC : extended);

var
    X1, Y1,
    X2, Y2,
    X3, Y3
        : extended;

begin
    with Cell[i]^ do
        begin
            X1:=Vertex[IVertex[1]].X; Y1:=Vertex[IVertex[1]].Y;
            X2:=Vertex[IVertex[2]].X; Y2:=Vertex[IVertex[2]].Y;
            X3:=Vertex[IVertex[3]].X; Y3:=Vertex[IVertex[3]].Y;

            XC:=(X1+X2+X3)/3;
            YC:=(Y1+Y2+Y3)/3;
        end;
    end;
end;

```

9.5. Rotina computacional implementada para calcular a distancia dos centroides das células da malha.

```
function BodyType.GetDistanceCentroid(i,k : integer) : extended;  
  
var  
    XC1,YC1,  
    XC2,YC2  
        : extended;  
  
begin  
    XC1:=0; XC2:= 0;  
    YC1:=0; YC2:= 0;  
    GetCentroid(i,XC1,YC1);  
    GetCentroid(k,XC2,YC2);  
  
    GetDistanceCentroid:=Sqrt (Sqr (XC2-XC1)+Sqr (YC2-YC1));  
end;
```

9.6. Rotina computacional implementada para calcular o volume das células da malha.

```
function BodyType.GetVolume(i : integer) : extended;  
  
begin  
    with Cell[i]^ do  
        GetVolume:=0.5*Abs ( ( Vertex[IVertex[1]].X  
            -Vertex[IVertex[3]].X)*Vertex[IVertex[2]].Y+  
            ( Vertex[IVertex[3]].X  
            -Vertex[IVertex[2]].X)*Vertex[IVertex[1]].Y+  
            ( Vertex[IVertex[2]].X  
            -Vertex[IVertex[1]].X)*Vertex[IVertex[3]].Y);  
    end;
```

9.7. Rotina computacional implementada para calcular o gradiente de massa específica .

```
function BodyType.GetGradient(i,j : integer) : extended;  
var  
    dQdx, dQdy,  
    Q1, X1, Y1,  
    Q2, X2, Y2,  
    Q3, X3, Y3:  
        extended;
```

```

begin
  with Cell[i]^ do
    begin
      if Neighbor[1]>1e-3 then
        begin
          Q1:=Cell[Neighbor[1]]^.Q[j];
          X1:=Centroidpoint[Neighbor[1]].X;
          Y1:=Centroidpoint[Neighbor[1]].Y;

          end
        else begin
          Q1:=GhostCell[Cell[i]^,IGhost[1]]^.Q[j];
          if ((Neighbor[1]=TopWall) and ((j=2) or (j=3))) then Q1:=0;
          X1:=GhostCentroidpoint[Cell[i]^,IGhost[1]].X;
          Y1:=GhostCentroidpoint[Cell[i]^,IGhost[1]].Y;

          end;

        if Neighbor[2]>1e-3 then
          begin
            Q2:=Cell[Neighbor[2]]^.Q[j];
            X2:=Centroidpoint[Neighbor[2]].X;
            Y2:=Centroidpoint[Neighbor[2]].Y;

            end
          else begin
            Q2:=GhostCell[Cell[i]^,IGhost[2]]^.Q[j];
            if ((Neighbor[2]=TopWall) and ((j=2) or (j=3))) then Q2:=0;
            X2:=GhostCentroidpoint[Cell[i]^,IGhost[2]].X;
            Y2:=GhostCentroidpoint[Cell[i]^,IGhost[2]].Y;

            end;

          if Neighbor[3]>1e-3 then
            begin
              Q3:=Cell[Neighbor[3]]^.Q[j];
              X3:=Centroidpoint[Neighbor[3]].X;
              Y3:=Centroidpoint[Neighbor[3]].Y;

              end
            else begin
              Q3:=GhostCell[Cell[i]^,IGhost[3]]^.Q[j];
              if ((Neighbor[3]=TopWall) and ((j=2) or (j=3))) then Q3:=0;
              X3:=GhostCentroidpoint[Cell[i]^,IGhost[3]].X;
              Y3:=GhostCentroidpoint[Cell[i]^,IGhost[3]].Y;

              end;

            end;
          end;
        end;
      end;
    end;
  end;
end;

```

```

if abs(X1-Centroidpoint[i].X)>1e-4 then
  dQdx:=(Q1-Q[j])/(X1-Centroidpoint[i].X)

  else dQdx:=0;

if abs(X2-Centroidpoint[i].X)>1e-4 then
  dQdx:= (dQdx+(Q2-Q[j])/(X2-Centroidpoint[i].X))/2;
if abs(X3-Centroidpoint[i].X)>1e-4 then
  dQdx:= (dQdx+(Q3-Q[j])/(X3-Centroidpoint[i].X))/2;

if abs(Y1-Centroidpoint[i].Y)>1e-4 then
  dQdy:=(Q1-Q[j])/(Y1-Centroidpoint[i].Y)

  else dQdy:=0;

  if abs(Y2-Centroidpoint[i].Y)>1e-4 then
  dQdy:= (dQdy+ (Q2-Q[j])/(Y2-Centroidpoint[i].Y))/2;
  if abs(X3-Centroidpoint[i].X)>1e-4 then
    dQdy:= (dQdy+(Q3-Q[j])/(Y3-Centroidpoint[i].Y))/2;

GetGradient:=sqrt(dQdx*dQdx+dQdy*dQdy);
end;
end;

```

9.8. Rotina computacional implementada para cálculo da pressão nas células.

```

function BodyType.GetPressure(i : integer) : extended;

begin
  with Cell[i]^ do

    GetPressure:=((gamma-1)*(Q[e]-0.5*Q[Ro]*(Q[Rou]*Q[Rou]+Q[Rov]*Q[Rov])));

end;

```

9.9. Rotina computacional implementada para cálculo do número de Mach das células.

```

function BodyType.GetMach(i : integer) : extended;

begin
  with Cell[i]^ do

    GetMach:=Sqrt((Q[Rou]*Q[Rou]+Q[Rov]*Q[Rov])/(Q[Ro]*Q[Ro]));

end;

```

9.10. Rotina computacional implementada para cálculo do tempo de passo.

```
function BodyType.GetDeltat(i : integer; CFL : extended) : extended;

var
  j
      : integer;

  qi,
  ai,
  P,
  X1, Y1, X2, Y2,
  L, Lmin,
  C, Cmin,
  deltaS
      : extended;

begin
  with Cell[i]^ do
    begin
      qi:=Sqrt(Q[Rou]*Q[Rou]+Q[Rov]*Q[Rov])/Q[Ro];

      P:=GetPressure(i);
      ai:=Sqrt(gamma*P/Q[Ro]);
      Lmin:=100;
      Cmin:=100;
      for j:=1 to NVertex do
        begin
          X1:=Vertex[IVertex[j]].X; Y1:=Vertex[IVertex[j]].Y;
          if j<>NVertex then
            begin
              X2:=Vertex[IVertex[j+1]].X; Y2:=Vertex[IVertex[j+1]].Y;
            end
          else begin
              X2:=Vertex[IVertex[1]].X; Y2:=Vertex[IVertex[1]].Y;
            end;

          L:=Sqrt(Sqr(X2-X1)+Sqr(Y2-Y1));
          if L<Lmin then Lmin:=L;

          if Neighbor[j]>0 then
            begin
              C:=GetDistanceCentroid(i,Neighbor[j]);
              if C<Cmin then Cmin:=C;
            end;
          end;
          deltaS:=Min(Lmin,Cmin);

          GetDeltat:=CFL*deltaS/(qi+ai);
        end;
      end;
    end;
end;
```

9.11. Rotina computacional implementada para cálculo das propriedades dos fluxos nas células na direção horizontal .

```
function BodyType.EQ(i,j : integer) : extended;  
  
var  
  P  
      : extended;  
  
begin  
  with Cell[i]^ do  
    begin  
      P:=GetPressure(i);  
      case j of  
        Ro  : EQ:=Q[Rou];  
        Rou : EQ:=Q[Rou]*Q[Rou]/Q[Ro]+P;  
        Rov : EQ:=Q[Rov]*Q[Rou]/Q[Ro];  
        e   : EQ:=(Q[e]+P)*Q[Rou]/Q[Ro];  
      end;  
    end;  
  end;  
end;
```

9.12. Rotina computacional implementada para cálculo das propriedades dos fluxos nas células fantasmas na direção horizontal.

```
function BodyType.EQGhost(i,j : integer) : extended;  
  
var  
  P  
      : extended;  
  
begin  
  with GhostCell[i] do  
    begin  
      P:=(gamma-1)*(Q[e]-0.5*(Q[Rou]*Q[Rou]+Q[Rov]*Q[Rov])/Q[Ro]);  
      case j of  
  
        case j of  
          Ro  : EQGhost:= Q[Rou];  
          Rou : EQGhost:= Q[Rou]*Q[Rou]/Q[Ro]+P;  
          Rov : EQGhost:= Q[Rov]*Q[Rou]/Q[Ro];  
          e   : EQGhost:=(Q[e]+P)*Q[Rou]/Q[Ro];  
        end;  
      end;  
    end;  
  end;  
end;
```

9.13. Rotina computacional implementada para cálculo das propriedades dos fluxos nas células na direção vertical.

```
function BodyType.FQ(i,j : integer) : extended;

var
  P
      : extended;

begin
  with Cell[i]^ do
    begin
      P:=GetPressure(i);
      case j of
        Ro  : FQ:=Q[Rov];
        Rou : FQ:=Q[Rou]*Q[Rov]/Q[Ro];
        Rov : FQ:=Q[Rov]*Q[Rov]/Q[Ro]+P;
        e   : FQ:=(Q[e]+P)*Q[Rov]/Q[Ro];
      end;
    end;
  end;
end;
```

9.14. Rotina computacional implementada para cálculo das propriedades dos fluxos nas células fantasmas na direção vertical.

```
function BodyType.FQGhost(i,j : integer) : extended;

var
  P
      : extended;

begin
  with GhostCell[i] do
    begin
      P:=(gamma-1)*(Q[e]-0.5*(Q[Rou]*Q[Rou]+Q[Rov]*Q[Rov])/Q[Ro]);
      case j of

        Ro  : FQGhost:=Q[Rov];
        Rou : FQGhost:=Q[Rou]*Q[Rov]/Q[Ro];
        Rov : FQGhost:=Q[Rov]*Q[Rov]/Q[Ro]+P;
        e   : FQGhost:=(Q[e]+P)*Q[Rov]/Q[Ro];
      end;
    end;
  end;
end;
```

9.15. Rotina computacional implementada para cálculo do operador laplaciano.

```
function BodyType.Nabla2Q(i,j : integer) : extended;

var
  k
  NablaAux
      : integer;
      : extended;

begin
  with Cell[i]^ do
    begin
      NablaAux:=0;
      for k:=1 to NVertex do
        if Neighbor[k]>0 then
          NablaAux:=NablaAux+Cell[Neighbor[k]]^.Q[j]-Q[j];
        end;
      Nabla2Q:=NablaAux;
    end;
end;
```

9.16. Rotina computacional implementada para cálculo operado bi harmônico.

```
function BodyType.Ni( i : integer) : extended;

var
  k
  SumDeltaP,
  SumP,
  Pi,
  Pk
      : integer;
      : extended;

begin
  with Cell[i]^ do
    begin
      Pi:=GetPressure(i);
      SumDeltaP:=0;
      SumP:=0;
      for k:=1 to NVertex do
        begin
          if Neighbor[k]=TopWall then
            begin
              with GhostCell[IGhost[k]]^ do
                Pk:=(gamma-1) * (Q[e]-0.5*(Q[Rou]*Q[Rou]+Q[Rov]*Q[Rov])/Q[Ro]);
            end;
          end;
        end;
      end;
    end;
end;
```

```

        end
        else if Neighbor[k]<0 then Pk:=Pi
            else Pk:=GetPressure(Neighbor[k]);

            SumDeltaP:=SumDeltaP+Abs(Pk-Pi);
            SumP:=SumP+(Pk+Pi);
        end;
    end;

    Ni:=SumDeltaP/SumP;
end;
```

9.17. Rotina computacional implementada para cálculo da dissipação artificial.

```

procedure BodyType.GetArtificialDissipation;

var
    i, j, k, l
        : integer;

    D2Qi,
    D4Qi,
    Epsilon4ik
        : extended;

function Epsilon2(i, k : integer) : extended;

const
    Kd2 = 1/2;
    Kd4 = 1/256;

var
    Epsilon2Aux
        : extended;

begin
    if k<>TopWall then
        Epsilon2Aux:=Kd2*Max(Ni(i), Ni(k))
    else Epsilon2Aux:=Kd2*Ni(i);
    Epsilon2:=Epsilon2Aux;

    Epsilon4ik:=Max(0, (Kd4-Epsilon2Aux));
end;
```

```

begin
  for i:=1 to NCells do
    with Cell[i]^ do
      for j:=1 to NVariables do
        begin
          d2Qi:=0;
          d4Qi:=0;
          for l:=1 to NVertex do
            begin
              k:=Neighbor[l];

              if (k>0) then
                begin
                  d2Qi:=d2Qi+Epson2(i,k)/2
                    *(Volume/deltat+Cell[k]^Volume/Cell[k]^deltat
                    *(Cell[k]^Q[j]-Q[j]));

                  d4Qi:=d4Qi+Epson4ik/2
                    *(Volume/deltat+Cell[k]^Volume/Cell[k]^deltat
                    *(Nabla2Q(k,j)-Nabla2Q(i,j)));

                end;
            end;

            Dissipation[j]:=d2Qi-d4Qi;
          end;
        end;
      end;
    end;
  end;
end;

```

9.18. Rotina computacional implementada para cálculo Integração numerica da equação de Euler

```

procedure BodyType.ExplicitJameson (CFL : extended);

type
  AlphaArray = array[1..5] of single;

const
  alpha : AlphaArray = (1/4,1/6,3/8,1/2,1);

var
  i,j,k
      : integer;

  deltatMin,
  Residue
      : extended;

```

```

begin
  deltatMin:=100;
  for i:=1 to NCells do
    with Cell[i]^ do
      begin
        Q0:=Q;
        deltat:=GetDeltat(i,CFL);
        if deltatMin>deltat then deltatMin:=deltat;
      end;

  for k:=1 to 5 do
    begin
      MaxResidue:=0;
      GetFluxModel;
      if k<=2 then GetArtificialDissipation;

      for i:=1 to NCells do
        with Cell[i]^ do
          for j:=1 to NVariables do
            begin
              Residue:=1/Volume*(CQ[j]-Dissipation[j]);
              if Abs(Residue)>MaxResidue then MaxResidue:=Abs(Residue);
              Q[j]:=Q0[j]-alpha[k]*deltatMin*Residue;
            end;

          if (NIter=1) and (k=1) then MaxResidue0:=MaxResidue;
        end;
      Time := Time+deltatMin;
      UpdateBoundaryConditions
    end;
  end;
end;

```

9.19. Rotina computacional implementada para critério de ignição.

```

procedure BodyType.CheckIgnition (Fuel : FuelType);

var
  i: Integer;
  P1, T1, T2, P2, CellTignition: Extended;

Begin
  for i:=1 to NCells do
    with Cell[i]^ do
      begin

```

```

P1:=GetPressure(i);
T1:=gamma*P1/(Q[Ro]);
T1:=T1*Tdoo;      {K}
P1:=(P1*Rodoo*adoo*adoo)/100000;    {bar}

if T1<=298.15 then T1:=300
else

    CellTignition:=nHeptane.GetIgnitionTime(P1,T1); {bar e K}{ms}

    if ((Time >= CellTignition) and (not Ignited)) then

        begin
            Ignited:= true;
            T2:=nHeptane.FAstq*nHeptane.HeatValue/cpAir+T1; {K}
            P2:=Q[Ro]*Rodoo*Rair*T2; {N/m^2}
            P2:=P2/(Rodoo*adoo*adoo);
            Q[e]:= P2/(gamma-1)+0.5*Q[Ro]*(Q[Rou]*Q[Rou]+Q[Rov]*Q[Rov]);
        end;
    end;
end;

```