

NOME: JEISON DUVAN DIAZ RODRIGUEZ

TITULO DA DISSERTAÇÃO:

ANALYSIS OF FLAME PROPAGATION FOR FUEL SURROGATES USING OUTWARDLY SPHERICAL FLAMES IN CLOSED VESSEL

ANALISE DE PROPAGAÇÃO DE CHAMAS PARA SUBSTITUTOS DE COMBUSTIVEL USANDO CHAMAS ESFÉRICAS EM REATORES DE VOLUME CONSTANTE

RESUMO

A taxa de propagação da chama é uma característica física e química da combustão de oxidantes e combustíveis pré-misturados; representa uma característica própria na análise de motores de combustão interna, análise de riscos de explosão de gás, desenvolvimento de modelos cinéticos químicos, entre outros. A propagação de chamas esféricas em reatores fechados é um dos principais métodos de medição de chamas laminares. É o método de medição que mais fornece condições relevantes para um motor de combustão interna. É por isso que neste trabalho adotamos essa configuração para medir principalmente hidrocarbonetos leves, como o metano, e substitutos de combustíveis, como etanol, iso-octano, n-heptano e misturas de combustíveis chamados substitutos neste trabalho. As simulações foram realizadas principalmente para 298K a 398K em 1 atm de pressão. Foi desenvolvida uma abordagem que permitiu desenvolver uma metodologia para calcular a velocidade da chama laminar a partir de simulações computacionais para compará-las com aquelas realizadas pelos autores ao longo do tempo. O Software Chem1D foi usado para simular as chamas dentro do reator. Chem1D é um solver de equações de transporte e cinética química, usando mecanismos de reação que o usuário fornece. Este código foi desenvolvido na Technische Universiteit Eindhoven na Holanda. Estabelece-se principalmente uma iso-superfície que neste trabalho é o calor máximo liberado em um intervalo de tempo, e a partir daí são extraídas duas grandezas que também podem ser obtidas a partir de um método experimental: o raio (r) e o tempo (t). Com estas duas variáveis, a velocidade de propagação da chama é encontrada e, finalmente, a extrapolação linear e não linear é aplicada para determinar a taxa de propagação não esticada. Os resultados foram comparados com a literatura e a análise foi fornecida.

Palavras-chave: Reator de volume constante, velocidade de chama laminar, substitutos de combustíveis.

ABSTRACT:

The rate of flame propagation is a physical and chemical characteristic of the combustion of premixed oxidants and fuels; it represents an own characteristic in the analysis of internal combustion engines, analysis of risks of gas explosion, development of chemical kinetic models, among others. The propagation of spherical flames in closed reactors is one of the main methods of measuring laminar flames. It is the method of measurement that most provides conditions relevant to an internal combustion engine. That is why in this work we adopted this configuration to measure mainly light hydrocarbons such as methane, and fuel substitutes such as ethanol, iso-octane, n-heptane and mixtures of fuels called surrogates in this work. The simulations were conducted mainly for 298K to 398K in 1 atm of pressure. An approach was developed that allowed to develop a methodology to calculate the laminar flame velocity from computational simulations to compare them with those experiments done by the authors over time. The Chem1D Software was used to simulate the flames inside the reactor. Chem1D is a solver of transport equations and chemical kinetics, using reaction mechanisms that the user provides. This code was developed at Technische Universiteit Eindhoven in The Netherlands. It is mainly established an iso-surface that in this work is the maximum heat released in a time step, and from there are extracted two quantities that can also be obtained from an experimental method: the radius (r) and the time (t). With these two variables the velocity of flame propagation is found and finally linear and non-linear extrapolation is applied to determine the rate of unstretched propagation. The results were compared with the literature and the analysis was provided.

Key-words: closed vessel, laminar flame speed, fuel surrogates, constant volume reactor.