

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA - CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA  
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

ANÁLISE TERMODINÂMICA DE UMA TURBINA DE GÁS OPERANDO COM  
CÂMARA DE COMBUSTÃO A PRESSÃO CONSTANTE E COM CÂMARA DE  
DETONAÇÃO

por

Ramiro Veronese de Vargas

Monografia apresentada ao Departamento de Engenharia Mecânica da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Engenheiro Mecânico.

Porto Alegre, maio de 2021

## DADOS INTERNACIONAIS DE CATALOGAÇÃO

### CIP - Catalogação na Publicação

de Vargas, Ramiro Veronese  
ANÁLISE TERMODINÂMICA DE UMA TURBINA DE GÁS  
OPERANDO COM CÂMARA DE COMBUSTÃO A PRESSÃO CONSTANTE E  
COM CÂMARA DE DETONAÇÃO / Ramiro Veronese de Vargas.  
-- 2021.  
29 f.  
Orientador: Andrés Armando Mendiburu Zevallos.

Trabalho de conclusão de curso (Graduação) --  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de  
Engenharia, Curso de Engenharia Mecânica, Porto  
Alegre, BR-RS, 2021.

1. Termodinâmica. 2. Rotating Detonation Engine. 3.  
Rendimento térmico. 4. Detonação. 5. Ciclo  
termodinâmico. I. Zevallos, Andrés Armando Mendiburu,  
orient. II. Título.

Elaborada pelo Sistema de Geração Automática de Ficha Catalográfica da UFRGS com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Ramiro Veronese de Vargas

ANÁLISE TERMODINÂMICA DE UMA TURBINA DE GÁS OPERANDO COM  
CÂMARA DE COMBUSTÃO A PRESSÃO CONSTANTE E COM CÂMARA DE  
DETONAÇÃO

ESTA MONOGRAFIA FOI JULGADA ADEQUADA COMO PARTE DOS  
REQUISITOS PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE  
**ENGENHEIRO MECÂNICO**  
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELA BANCA EXAMINADORA DO  
CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Prof. Mário Roland Sobczyk Sobrinho  
Coordenador do Curso de Engenharia Mecânica

Área de concentração: Energia e Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Andrés Armando Mendiburu Zevallos

Comissão de Avaliação:

Prof. Cirilo Seppi Bresolin

Prof. Paulo Smith Schneider

Prof. Volnei Borges

Porto Alegre, maio de 2021

## AGRADECIMENTOS

Agradeço especialmente a meu pai, Adelino, minha mãe, Marlise, ao meu tio, Ricardo, e a minha avó, Maria Dulce, e a todos que acreditaram em mim durante esta etapa da minha vida.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA - CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA  
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO – 2021

ANÁLISE TERMODINÂMICA DE UMA TURBINA DE GÁS OPERANDO  
COM CÂMARA DE COMBUSTÃO A PRESSÃO CONSTANTE E COM  
CÂMARA DE DETONAÇÃO

**Ramiro Veronese de Vargas**

ramiro\_veronese@hotmail.com

**Resumo.** O objetivo deste trabalho é realizar a comparação entre o rendimento térmico de um ciclo termodinâmico convencional de turbina de gás e o rendimento térmico de um ciclo termodinâmico de turbina de gás operando com uma câmara de detonação (Rotating Detonation Engine – RDE), variando a taxa de compressão. No ciclo, ar atmosférico passa pelo compressor e entra na câmara de combustão/detonação, onde se mistura com combustível e ocorre uma reação de combustão estequiométrica. Os produtos da reação deixam a câmara e entram em um diluidor, onde, adicionando ar advindo do compressor, são resfriados até 1600K. A mistura ar-produtos adentra a turbina e sai à atmosfera, gerando trabalho neste processo. São utilizados modelos matemáticos e computacionais que simulam as reações químicas de combustão estequiométrica em ambas as câmaras, considerando equilíbrio termodinâmico. O método de minimização de energia livre de Gibbs é utilizado para determinar a composição dos produtos da combustão. O combustível adotado é o gás de síntese. Os ganhos relativos em rendimento térmico do ciclo de RDE em relação ao da turbina convencional é situacional, variando entre 20,9% e -13,29% relativo ao rendimento térmico do ciclo convencional.

**Palavras-chave:** ciclo termodinâmico, detonação, combustão, rendimento térmico, RDE

**THERMODYNAMICAL ANALYSIS OF A GAS TURBINE OPERATING WITH A  
CONSTANT-PRESSURE COMBUSTION CHAMBER AND WITH A DETONATION  
CHAMBER**

**Abstract.** The objective of this study is to provide a comparison of the thermal efficiencies of a thermodynamical cycle of a conventional gas engine and a cycle of a engine operating a detonation chamber (Rotating Detonation Engine – RDE), varying the compression ratio. In the cycle, atmospheric air traversses the compressor and enters the combustion/detonation chamber, where it is mixed with fuel and undergoes a stoichiometric combustion reaction. The reaction products leave the chamber and enter in a mixer, where, adding air from the compressor, are cooled to 1600 K. The air-products mixture then enters the turbine and leaves it to the atmosphere, generating work in this process. Mathematical and computational models simulating the stoichiometric chemical combustion reactions in both chambers are utilized, considering thermodynamical equilibrium. The minimization of free Gibbs energy is used for determining the composition of the combustion products. The fuel utilized is a synthesis gas. The relative gains in thermal efficiency of the RDE cycle relative to the conventional engine are situational, varying between 20,9% and -13,29% relative to the thermal efficiency of the conventional cycle.

**Keywords:** thermodynamical cycle, detonation, combustion, thermal efficiency, RDE

## NOMENCLATURA

Símbolos	Significado	Unidade
$A$	Família de coeficientes	-
$a$	Coeficiente	-
$b$	Coeficiente	[J kg <sup>-1</sup> ]
$C$	Átomo de carbono	[kg s <sup>-1</sup> ]
$c$	Coeficiente	-
$CO$	Monóxido de carbono	-
$CO_2$	Dióxido de carbono	-
$CH_4$	Metano	-
$\bar{c}_p$	Calor específico molar a pressão constante	[kg s <sup>-1</sup> ]
$e$	Coeficiente	-
$f$	Fração de pressão	Adim.
$G$	Energia livre de Gibbs	[J]
$\bar{g}$	Energia livre de Gibbs molar	[J mol <sup>-1</sup> ]
$H$	Entalpia, átomo de hidrogênio	[J]
$H_2$	Hidrogênio gasoso	-
$H_2O$	Água (vapor, exceto quando especificado ao contrário)	-
$h$	Entalpia específica mássica	[J kg <sup>-1</sup> ]
$\bar{h}$	Entalpia molar	[J mol <sup>-1</sup> ]
$k$	Coeficiente de expansão adiabática	Adim.
$M$	Número de Mach	Adim.
$\dot{m}$	Vazão mássica	[kg s <sup>-1</sup> ]
$N$	Átomo de nitrogênio	-

$N_2$	Nitrogênio gasoso	-
$n$	Quantidade de espécie química	[mol]
$O$	Átomo de oxigênio	-
$O_2$	Oxigênio gasoso	-
$PCI$	Poder calorífico inferior	[J kg <sup>-1</sup> ]
$\overline{PCI}$	Poder calorífico inferior molar	[J mol <sup>-1</sup> ]
$p$	Pressão	[Pa]
$R$	Constante do gás	[J K <sup>-1</sup> kg <sup>-1</sup> ]
$\bar{R}$	Constante universal dos gases perfeitos	[J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> ]
$r$	Taxa de compressão	Adim.
$\bar{s}$	Entropia molar	[J K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup> ]
$T$	Temperatura	[K]
$u$	Velocidade	[m s <sup>-1</sup> ]
$W$	Trabalho	[J]
$w$	Massa molar	[kg mol <sup>-1</sup> ]
$x$	Quantidade de átomos de um elemento em uma molécula	-
$y$	Fração molar	Adim.

#### Índices e subscritos

$ar$	Ar
$B$	Entrada do bocal
$b$	Saída do bocal
$E$	Elemento químico, exaustão
$e$	Propriedade de estagnação
$F$	Combustível
$I$	Mistura de gases

$i$	Espécie química	
$o$	Ar do compressor	
$M$	Mistura ar-produtos da combustão	
$m$	Espécie presente em mistura ar-produtos da combustão	
$P$	Produtos da combustão	
$p$	Espécie presente em produtos da combustão	
$R$	Reagentes da combustão	
$r$	Espécie presente em reagentes da combustão	
$s$	Propriedade referente a processo isentrópico	
Sobrescritos		
''	Propriedade por área	
$o$	Propriedade medida em estado de referência	
$s$	Valor estequiométrico	
Símbolos gregos		
$\sigma$	Multiplicador de Lagrange	-
$\eta$	Rendimento térmico	Adim.
$\eta_c$	Eficiência isentrópica do compressor	Adim.
$\eta_T$	Eficiência isentrópica da turbina	Adim.
$\rho$	Massa específica	[kg m <sup>-3</sup> ]
$v_{ar}^s$	Coefficiente estequiométrico do ar	[mol]
Abreviaturas e acrônimos		
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry	
NASA	National Aeronautics and Space Administration	



NIST	National Institute of Standards and Technology
P. cte.	Pressão constante

## SUMÁRIO

<b>1. Introdução .....</b>	<b>1</b>
<b>2. Fundamentação.....</b>	<b>2</b>
2.1. Gases perfeitos .....	2
2.2. Reação global de combustão estequiométrica e balanço de massa.....	2
2.3. Poder calorífico inferior, poder calorífico inferior molar e entalpia.....	2
2.4. Combustão a pressão constante e temperatura de chama adiabática .....	3
2.5. Detonação em gases perfeitos e critério de Chapman-Jouguet.....	3
2.6. Equilíbrio químico e minimização de energia livre de Gibbs.....	4
2.7. Ciclo termodinâmico de turbina de gás com câmara de combustão a pressão constante.....	4
2.7.1. Compressor .....	5
2.7.2. Câmara de combustão .....	6
2.7.3. Diluidor .....	6
2.7.4. Turbina .....	6
2.7.5. Rendimento térmico do ciclo .....	7
2.8. Ciclo de detonação .....	7
2.7.1. Compressor .....	8
2.7.2. Câmara de detonação .....	8
2.7.3. Bocal .....	8
2.7.4. Diluidor, turbina e rendimento térmico.....	8
<b>3. Metodologia.....</b>	<b>9</b>
3.1. Parâmetros de comparação .....	9
3.2. Determinação de propriedades termodinâmicas .....	10
3.3. Ciclo de combustão a pressão constante .....	10
3.4. Ciclo de detonação .....	11
<b>4. Resultados .....</b>	<b>12</b>
4.1. Trabalho fornecido ao compressor.....	12
4.1. Trabalho fornecido pela turbina.....	13
4.1. Rendimento térmico.....	14
<b>5. Conclusão .....</b>	<b>15</b>
<b>Referências bibliográficas.....</b>	<b>16</b>

<b>Anexos.....</b>	<b>17</b>
Anexo 1 .....	17
<b>Apêndices.....</b>	<b>17</b>
Apêndice 1 .....	17
Apêndice 2 .....	18
Apêndice 3 .....	19
Apêndice 4 .....	20

## 1. INTRODUÇÃO

As turbinas a gás operando com câmaras de combustão a pressão constante são motores de combustão interna de operação contínua extensivamente utilizadas em diversos campos de aplicação, notadamente na propulsão de aeronaves, mas também na propulsão de navios e tanques de guerra e como geradores elétricos, bombas de fluido e compressores (BORGNAKKE; SONNTAG, VAN WYLEN, 2002); A queima de combustível em turbinas a gás ocorre na câmara de combustão, classicamente modelada como um processo de aquecimento do ar. Turns, (2011), desenvolve um modelo onde ocorre uma reação de combustão a pressão constante entre ar e combustível, resultando em gases-produto de combustão. A reação de combustão é de deflagração, ou seja, a velocidade dos produtos é subsônica.

Por serem tão relevantes nestes campos, existe um alto interesse no desenvolvimento de turbinas a gás com melhor eficiência térmica; porém, existe uma estagnação neste campo devido às turbinas convencionais atuais possuírem rendimento térmico muito próximo do ideal teórico (LI et al., 2018).

As turbinas operando com motores rotativos de detonação (RDE, do inglês *Rotating Detonation Engine*) são uma tecnologia alternativa às turbinas convencionais. Neste tipo de turbina, a câmara de combustão é uma câmara de detonação, onde a velocidade dos produtos é supersônica. Os reagentes são alimentados através de uma câmara cilíndrica anular e uma onda de detonação percorre a câmara circunferencialmente. A detonação contínua é iniciada somente uma vez e opera em frequências típicas de 1-10Hz (BATTELLE, 2017). Os RDEs são uma inovação promissora pois com eles é possível atingir maior rendimento térmico em comparação às turbinas operando com câmaras de combustão convencionais (WOLAŃSKI, 2017).

Bigler et al. (2017) realizam um estudo comparativo entre ciclos termodinâmicos ideais representando turbinas a gás convencionais (utilizando o ciclo Brayton) e turbinas com RDEs, utilizando a ar como fluido de trabalho; o ciclo de detonação apresentou um rendimento térmico maior em função de todos os parâmetros analisados. O trabalho de Dai et al. (2019) desenvolvem um ciclo termodinâmico onde há uma vazão de sangramento no compressor, a 50% da pressão final, que alimenta a câmara de detonação; o ar restante arrefece os gases-produtos em um diluidor.

Sousa et al. (2017) compararam a performance de um ciclo convencional Brayton com turbina subsônica e um ciclo de detonação com turbina supersônica, através de diferentes taxas de compressão. O ciclo de detonação apresenta um ganho de rendimento térmico relativo de mais de 6,7% para taxas de compressão iguais.

O objetivo principal deste trabalho consiste em realizar uma comparação entre um ciclo termodinâmico representando uma turbina a gás convencional, com câmara de combustão a pressão constante, e um ciclo termodinâmico representando uma turbina operando com um RDE, ou seja, com câmara de detonação. Os parâmetros comparados são o trabalho fornecido ao compressor, o trabalho fornecido pela turbina e, principalmente, o rendimento térmico do ciclo; estes parâmetros são comparados através de uma faixa de razões de compressão diferentes.

Especificamente, foram desenvolvidos modelos matemáticos e computacionais que representem estes dois ciclos operando em regime permanente e considerando que os processos de combustão e detonação atingem o equilíbrio; estes não são considerados um processo de aquecimento do ar, mas sim como um processo de combustão entre ar e combustível, resultando em gases-produto. Os produtos da combustão são misturados com ar em um diluidor em um processo isentrópico a pressão constante.

## 2. FUNDAMENTAÇÃO

### 2.1. Gases perfeitos

Um gás perfeito obedece a Lei dos gases perfeitos, demonstrada pela Equação 1 (MORAN; SHAPIRO, 2009):

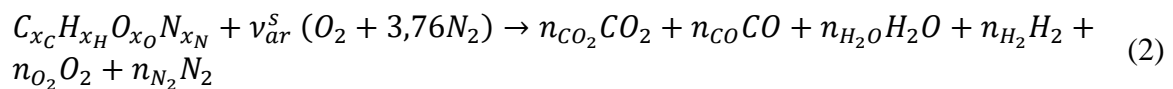
$$p = \rho \cdot R \cdot T \quad (1)$$

Onde  $p$  é a pressão do gás, em Pa;  $T$  é a temperatura do gás, em K;  $\rho$  é a densidade do gás, em kg/m<sup>3</sup>; e  $R$  é a constante do gás, em J/K.kg.  $R$  é relacionada à constante universal dos gases perfeitos  $\bar{R} = 8,134$  J/K.mol (NIST, 1971) através da igualdade  $R = \bar{R}/w$ , onde  $w$  é a massa molecular do gás, em kg/mol.

### 2.2. Reação global de combustão estequiométrica e balanço de massa

Uma reação de combustão estequiométrica é uma reação de combustão onde a quantidade de ar consumida é a estritamente suficiente para que haja combustão completa. Neste trabalho, o ar é aproximado como uma mistura de 21% de oxigênio e 79% de nitrogênio. Portanto, para cada mol de oxigênio, há  $0,79/0,21 = 3,76$  mol de nitrogênio, totalizando  $1 + 3,76 = 4,76$  mol de ar.

A reação global de combustão estequiométrica de 1 mol de combustível de fórmula empírica  $C_{x_C}H_{x_H}O_{x_O}N_{x_N}$ , onde  $x_C$ ,  $x_H$ ,  $x_O$  e  $x_N$  são, respectivamente, o número de átomos de carbono, hidrogênio, oxigênio e nitrogênio na molécula de combustível, é dada pela Equação 2:



Onde  $n_{CO_2}$ ,  $n_{CO}$ ,  $n_{H_2O}$ ,  $n_{H_2}$ ,  $n_{O_2}$  e  $n_{N_2}$  são as quantidades de  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $H_2O$ ,  $H_2$ ,  $O_2$  e  $N_2$  nos produtos da reação, em mol, e  $\nu_{ar}^s$  é o coeficiente de ar estequiométrico, em mol. O nitrogênio nesta reação é inerte. Os números de mols dessas quantidades são determinados aplicando o balanço de massa atômico; a quantidade de átomos de cada elemento tem de ser igual em ambos os lados da reação. O balanço de massa atômico de um elemento  $E$  é dado pela Equação 3:

$$\sum_r^R n_r \cdot x_{E,r} = \sum_p^P n_p \cdot x_{E,p} \quad (3)$$

Onde os índices  $r$  e  $p$  indicam, respectivamente, espécies químicas individuais nos reagentes e produtos; os índices  $R$  e  $P$ , nesta ordem, indicam os reagentes e produtos como um todo;  $n_r$  e  $n_p$ , ambas em mol, são respectivamente a quantidade da espécie  $r$  ou  $p$ , e  $x_{E,r}$  e  $x_{E,p}$  são o número de átomos do elemento  $E$  na molécula da respectiva espécie.

### 2.3. Poder calorífico inferior, poder calorífico inferior molar e entalpia

Turns (2011) define o poder calorífico inferior  $PCI$  de um combustível como a diferença de entalpias, por kg de combustível, entre os reagentes e produtos em uma reação de combustão completa em que toda água nos produtos está em estado gasoso. Os reagentes e produtos se encontram no estado de referência de  $p^o = 100.000$  Pa e  $T^o = 298,15$  K (IUPAC, 1982). Este

conceito pode ser expandido para o poder calorífico inferior molar  $\overline{PCI}$ , onde a definição é substituída por mol de combustível. O  $\overline{PCI}$  é definido pela Equação 4:

$$\begin{aligned}\overline{PCI} &= \frac{H_R - H_P}{n_F} = \frac{\sum_r^R H_r - \sum_p^P H_p}{1} = \sum_r^R n_r \cdot \bar{h}_r - \sum_p^P n_p \cdot \bar{h}_p \\ &= \sum_r^R n_r \cdot \bar{h}_r^o - \sum_p^P n_p \cdot \bar{h}_p^o\end{aligned}\quad (4)$$

Onde  $H_R$  e  $H_P$  são respectivamente as entalpias dos reagentes e produtos, em J;  $n_F$  é a quantidade de combustível, em mol, igual a 1;  $n_r$  e  $n_p$  são, nessa ordem, o número de mols das espécies químicas individuais que compõem os reagentes e produtos. Finalmente,  $h_r$  e  $h_p$  são as respectivas entalpias molares, em J/mol.

A entalpia possui duas parcelas, a entalpia de formação  $\bar{h}^o$  [J/mol], independente da temperatura e medida no estado-padrão, e a entalpia sensível  $\Delta\bar{h} = \Delta\bar{h}(T)$  [J/mol], que depende da temperatura e é igual a zero no estado-padrão. Na determinação do PCI os reagentes e produtos se encontram no estado padrão, logo,  $\bar{h}_r = \bar{h}_r^o$  e  $\bar{h}_p = \bar{h}_p^o$ .

#### 2.4. Combustão a pressão constante e temperatura de chama adiabática

Um processo de combustão a pressão constante ocorre em um sistema termodinâmico aberto (TURNES, 2011). A combustão a pressão constante é equacionada ao aplicar o balanço de energia (primeira lei da termodinâmica) a um volume de controle e considerando o processo adiabático, sem entrada ou saída de trabalho e desprezando as variações de energia cinética e potencial; isso implica que  $H_R = H_P$ , como mostrado na Equação 5.

$$\sum_r^R n_r \cdot (\bar{h}_r^o + \Delta\bar{h}_r(T_r)) = \sum_p^P n_p \cdot (\bar{h}_p^o + \Delta\bar{h}_p(T_p))\quad (5)$$

Onde  $T_r$  e  $T_p$  são as temperaturas em Kelvin de uma espécie química dos reagentes ou produtos, respectivamente. A temperatura de chama adiabática  $T_{ad}$  [K] é a temperatura na qual os produtos se encontram em equilíbrio termodinâmico, determinada de forma implícita pela Equação 5. Porém, o número de mols das espécies nos produtos deve ser determinado, seja assumindo combustão completa ou equilíbrio químico no final da reação.

#### 2.5. Detonação em gases perfeitos e critério de Chapman-Jouguet

Lee (2008) define a detonação como um regime de combustão onde a propagação da onda de chama é supersônica. A detonação é modelada matematicamente através do critério de Chapman-Jouguet, aplicando a primeira lei da termodinâmica a um volume de controle e considerando o processo adiabático, sem entrada ou saída de trabalho e sem variação de energia potencial; A detonação é equacionada através da conservação de massa, da quantidade de movimento e da energia, conforme mostrado respectivamente nas Eqs. 6-8 (LEE, 2008):

$$\dot{m}'' = \rho_p \cdot u_p = \rho_R \cdot u_R\quad (6)$$

$$p_P + \rho_P \cdot u_P^2 = p_R + \rho_R \cdot u_R^2 \quad (7)$$

$$h_P + \frac{u_P^2}{2} = h_R + \frac{u_R^2}{2} \quad (8)$$

Onde  $\bar{c}_p$  é o calor específico molar a pressão constante, em J/kg; os índices  $R$  e  $P$  se referem respectivamente aos reagentes e produtos, ou seja, aos estados termodinâmicos da mistura dos gases de combustão antes e depois da detonação.

## 2.6. Equilíbrio químico e minimização de energia livre de Gibbs

Os produtos da combustão estequiométrica passam por um processo de dissociação que altera sua composição final (TURNS, 2011), devido às reações elementares entre as espécies componentes. A composição dos gases produto no final da reação pode ser determinada aplicando o método das constantes de equilíbrio ou o método da minimização da energia livre de Gibbs. No presente trabalho foi aplicado o segundo desses métodos.

Para determinar a composição dos produtos da combustão foi utilizado o método de minimização de energia livre de Gibbs. A energia de livre Gibbs  $G$  [J] de uma mistura de gases-produto ideais  $P$ , em quantidade  $n_p$  [mol], a temperatura  $T$  [K] e pressão  $p_p$  [Pa] é dada pela Eq. 9:

$$G = \bar{R} \cdot T \cdot \sum_p^P n_p \cdot \left( \frac{\bar{g}_{T,i}^0}{\bar{R} \cdot T} + \ln \frac{n_p}{n_P} + \ln \frac{p_P}{p^0} \right) \quad (9)$$

Onde  $\bar{g}_{T,i}^0$  [J/mol] e  $n_p$  [mol] são, respectivamente, a energia livre molar de Gibbs de formação na temperatura  $T$  e a quantidade de cada espécie química  $p$  constituinte da mistura.

Para minimizar a energia livre de Gibbs  $G$ , é aplicado o método dos multiplicadores de Lagrange. A Equação 10 é aplicada a cada espécie química  $p$ , de fórmula empírica  $C_{x_C} H_{x_H} O_{x_O}$  (CARVALHO JR. et al, 2018):

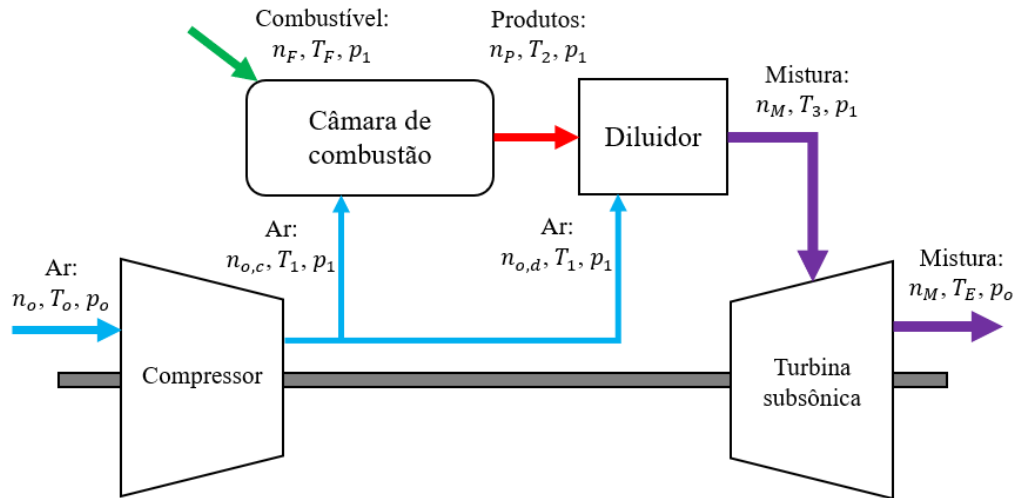
$$\frac{\bar{g}_{T,p}^0}{\bar{R} \cdot T} + \ln \frac{n_p}{n_P} + \ln \frac{p_P}{p^0} + 1 - \sigma_C - \sigma_H - \sigma_O = 0 \quad (10)$$

Onde  $\sigma_C$ ,  $\sigma_H$  e  $\sigma_O$  são os multiplicadores de Lagrange referentes ao carbono, hidrogênio e oxigênio, respectivamente. Adicionalmente, o balanço de massa atômico dado pela Eq. 3 é aplicado a cada elemento químico.

## 2.7. Ciclo termodinâmico de turbina a gás com câmara de combustão a pressão constante

O ciclo termodinâmico utilizado na modelagem de uma turbina a gás é classicamente o ciclo Brayton aberto com ar como fluido de trabalho (BORGNAKKE; SONNTAG, VAN WYLEN, 2012); o processo de combustão é tratado como um processo de aquecimento do ar. Neste trabalho, o fluido de trabalho é variável, conforme a Figura 2.1.

Figura 2.1: Esquema de ciclo termodinâmico de combustão a pressão constante.



Dependendo da etapa, o fluido pode ser ar, combustível, gases-produto ou uma mistura de ar e gases-produto – denominada aqui apenas como “mistura”. A combustão é tratada como um processo de combustão a pressão constante entre ar e combustível, resultando nos gases-produto da combustão.

Segundo De Souza (2014) as altas temperaturas dos gases-produto prejudicam a integridade da vasta maioria das turbinas comerciais existentes; é então necessária a adoção de um diluidor, um componente que promove a mistura entre os gases-produto e ar advindo do compressor, que se encontra em temperatura muito menor. A mistura, portanto, possui uma temperatura aceitável em relação às turbinas comerciais.

### 2.7.1. Compressor

Uma quantidade de ar  $n_o$  entra no compressor à pressão atmosférica e temperatura padrão  $p_o$  [Pa] e  $T_o$  [K] e sai à pressão final  $p_1$  [Pa] e temperatura final real  $T_1$  [K]. A razão de compressão  $r$  relaciona as duas pressões, conforme a Equação 11:

$$p_1 = r \cdot p_o \quad (11)$$

A eficiência isentrópica do compressor  $\eta_c$  é definida em termos das entalpias molares inicial  $\bar{h}_o$ , final real  $\bar{h}_1$  e final isentrópica  $\bar{h}_{1s}$ , todas em J/mol. Esta última é avaliada à temperatura isentrópica final  $T_{1s}$  [K], que é a temperatura final caso o processo de compressão fosse isentrópico. A eficiência isentrópica do compressor é dada pela Equação 12:

$$\eta_c = \frac{\bar{h}_{1s} - \bar{h}_o}{\bar{h}_1 - \bar{h}_o} \quad (12)$$

$T_{1s}$  é a temperatura referente à entropia de formação molar final isentrópica  $\bar{s}_{1s}^o$ , em J/K.mol; esta pode ser determinada pela Equação 13, válida para processos isentrópicos:

$$\bar{s}_{1s}^o = \bar{s}_o^o + \bar{R} \cdot \ln \frac{p_1}{p_o} \quad (13)$$



Onde  $\bar{s}_o^o$  é a entropia molar de formação inicial, em J/K.mol. O trabalho fornecido ao compressor  $W_C$ , em J, é dado pela Equação 14:

$$W_C = n_o \cdot (\bar{h}_1 - \bar{h}_o) \quad (14)$$

### 2.7.2. Câmara de combustão

Na câmara de combustão entram uma quantidade de ar de combustão  $n_{o,c}$  [mol], a temperatura  $T_1$  e pressão  $p_1$ , advinda do compressor, e uma quantidade de combustível  $n_f$  [mol] à mesma pressão  $p_1$  e à temperatura  $T_f$ . Ocorre um processo de combustão a pressão constante. O processo é considerado adiabático e sem perdas. Os gases-produto da combustão saem da câmara em uma quantidade  $n_p$ , em mol, e a uma temperatura  $T_2$ , em K.

### 2.7.3. Diluidor

O diluidor promove a mistura isentrópica e isobárica entre os gases-produto advindos da câmara de combustão e do ar advindo do compressor a uma quantidade  $n_{o,d}$ , em mol, a fim de resfriar os produtos da combustão. Para que a mistura entre o ar e os produtos da combustão – referida daqui em diante apenas como “mistura” – atinja uma temperatura  $T_3$ , a quantidade necessária de ar de diluição  $n_{o,d}$  é dada pela Equação 15:

$$n_{o,d} = \frac{n_p \cdot (\bar{h}_{p,3} - \bar{h}_{p,2})}{(\bar{h}_{o,d,3} - \bar{h}_{o,d,1})} \quad (15)$$

A quantidade de ar total,  $n_o$ , que entra no compressor é dada então pela Equação 16:

$$n_o = n_{o,c} + n_{o,d} \quad (16)$$

A quantidade de mistura  $n_M$  é dada pela Equação 17:

$$n_M = n_p + n_{o,d} \quad (17)$$

A quantidade  $n_M$  de uma espécie química  $i$  presente na mistura, em mol, é dada pela Eq. 18:

$$n_M = n_{p,i} + n_{o,d,i} \quad (18)$$

Onde  $n_{p,i}$  e  $n_{o,d,i}$  são, respectivamente, as quantidades dessa espécie presentes nos produtos e no ar de diluição, ambas em mol.

### 2.7.4. Turbina

A mistura entra na turbina em uma quantidade  $n_M$ , pressão  $p_1$  e temperatura  $T_3$ , e sai a pressão ambiente atmosférica  $p_o$  e temperatura de exaustão  $T_E$ . A turbina é considerada subsônica, devido às velocidades tipicamente subsônicas dos gases-produto após o processo de combustão (SOUSA et al., 2018).

A eficiência isentrópica da turbina  $\eta_T$  é definida em termos das entalpias molares inicial  $\bar{h}_3$ , final real  $\bar{h}_E$  e final isentrópica  $\bar{h}_{E_s}$ , todas em J/mol. Esta última é avaliada à temperatura isentrópica final  $T_{E_s}$  [K], que é a temperatura final caso o processo de expansão fosse isentrópico. A eficiência isentrópica da turbina é dada pela Equação 19:

$$\eta_T = \frac{\bar{h}_3 - \bar{h}_E}{\bar{h}_3 - \bar{h}_{ES}} \quad (19)$$

$T_{ES}$  é a temperatura referente à entropia de formação molar final isentrópica  $\bar{s}_{ES}^0$ , em J/K.mol; esta pode ser determinada pela Equação 20, válida para processos isentrópicos:

$$\bar{s}_{ES}^0 = \bar{s}_E^0 + \bar{R} \cdot \ln \frac{p_o}{p_1} \quad (20)$$

Onde  $\bar{s}_o^0$  é a entropia molar de formação inicial, em J/K.mol. O trabalho fornecido pela turbina  $W_T$ , em J, é dado pela Equação 21:

$$W_T = n_M \cdot (\bar{h}_3 - \bar{h}_E) \quad (21)$$

### 2.7.5. Rendimento térmico do ciclo

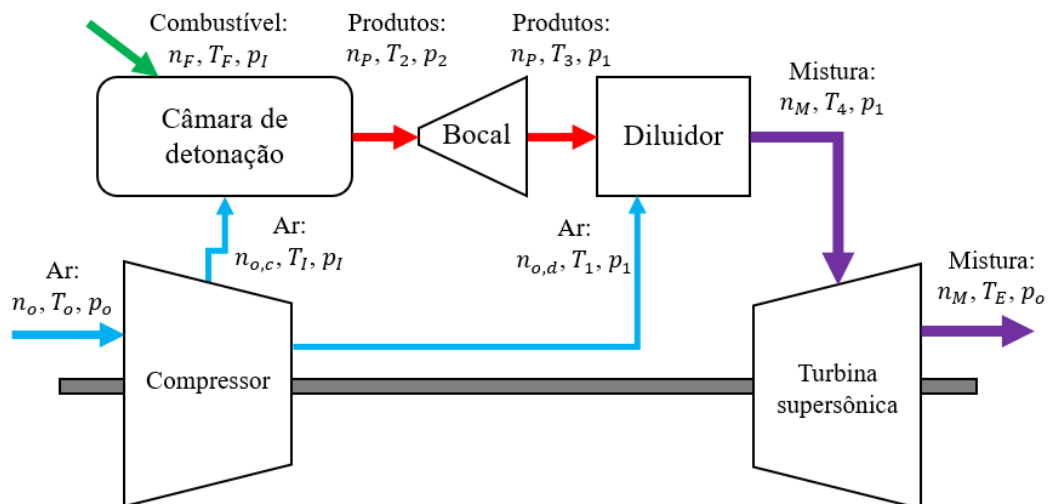
O rendimento térmico do ciclo é dado pela Equação 22:

$$\eta = \frac{W_T - W_C}{n_F \cdot \overline{PCI}} \quad (22)$$

### 2.8. Ciclo de detonação

Conforme a Figura 2.2, o ciclo termodinâmico utilizado na modelagem da turbina com câmara de detonação é similar ao caso da câmara de combustão a pressão constante. Porém, a quantidade de ar de combustão  $n_{o,c}$  sai do compressor em uma vazão de sangramento que não passa pelo processo de compressão completo

Figura 2.2: Esquema de ciclo termodinâmico de detonação.



O ar de combustão é sangrado do compressor na pressão e temperatura  $p_I$  e  $T_I$ , respectivamente, que são menores que  $p_1$  e  $T_1$ . A razão entre  $p_I$  e  $p_1$  é definida aqui como a razão de pressão  $f$ , dada pela Equação 23:

$$f = \frac{p_I}{p_1} \quad (23)$$

Há também a adição de um bocal divergente na saída da câmara de detonação, a fim de reduzir a pressão de saída  $p_2$  até  $p_1$ . Isso se deve ao processo de detonação elevar entre 15 a 20 vezes a pressão inicial dos reagentes (LEE, 2008).

### 2.8.1. Compressor

Uma quantidade de ar  $n_o$  entra no compressor a pressão e temperatura ambiente  $p_o$  [Pa] e  $T_o$  [K] e sai em duas vazões diferentes. A primeira delas representa uma quantidade  $n_{o,c}$  [mol] à pressão final  $p_1$  [Pa] e temperatura final real  $T_1$  [K], com destino à câmara de diluição. A segunda delas representa uma quantidade de ar  $n_{o,c}$  [mol] destinada à câmara de detonação à pressão  $p_I$  [Pa] e temperatura real intermediária  $T_I$  [K].

As equações utilizadas no cálculo de  $p_1$  e  $T_1$  são as mesmas utilizadas no compressor do ciclo de combustão a pressão constante. O equacionamento referente a  $p_I$  e  $T_I$  é idêntico ao de  $p_1$  e  $T_1$  substituindo apenas o índice 1, referente ao estado final do ar, pelo índice  $I$ , referente ao estado intermediário, conforme as Equações 24 e 25:

$$\eta_c = \frac{\bar{h}_{I_s} - \bar{h}_o}{\bar{h}_I - \bar{h}_o} \quad (24)$$

$$\bar{s}_{I_s}^o = \bar{s}_o^o + \bar{R} \cdot \ln \frac{p_I}{p_o} \quad (25)$$

O trabalho fornecido ao compressor  $W_C$ , em J, é dado pela Equação 26:

$$W_C = n_o \cdot (\bar{h}_I - \bar{h}_o) + n_{o,d} \cdot (\bar{h}_1 - \bar{h}_I) \quad (26)$$

### 2.8.2. Câmara de detonação

Na câmara de detonação entram uma quantidade de ar de combustão  $n_{o,c}$  [mol], a temperatura  $T_I$  e pressão  $p_I$ , advinda do compressor, e uma quantidade de combustível  $n_f$  [mol] à mesma pressão  $p_I$  e à temperatura  $T_F$ . Ocorre um processo de detonação. O processo é considerado adiabático e sem perdas. Os gases-produto da combustão saem da câmara em uma quantidade  $n_p$ , em mol, a uma temperatura  $T_2$ , em K, e a uma pressão  $p_2$ , em Pa. Para a obtenção da composição dos gases produto é necessário resolver as equações da conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia, em regime permanente. Além do mais, é necessário integrar esta solução com a minimização da energia livre de Gibbs para determinar a composição dos produtos (informação verbal)<sup>1</sup>.

### 2.8.3. Bocal

O bocal divergente aumenta a velocidade dos gases de combustão, reduzindo (SAAD, 1991) a sua pressão e temperatura. A pressão de saída adotada é  $p_1$ . Inicialmente os produtos da combustão estão em regime sônico, portanto, na saída do bocal terão uma velocidade supersônica. Considerando o bocal isentrópico, Fox et al. (2010) definem o equacionamento pertinente, representado pelas Equações 27-30:

<sup>1</sup> Informação cedida pelo Prof. Andrés Armando Mendiburu Zevallos, durante sessão de orientação deste trabalho, em março de 2021.

$$\frac{T_2}{T_e} = 1 + \frac{k_2 - 1}{2} \cdot M_b^2 \quad (27)$$

$$\frac{p_2}{p_e} = \left(1 + \frac{k_2 - 1}{2} \cdot M_b^2\right)^{\frac{k_2}{k_2 - 1}} \quad (28)$$

$$\frac{T_3}{T_e} = 1 + \frac{k_3 - 1}{2} \cdot M_B^2 \quad (29)$$

$$\frac{p_3}{p_e} = \left(1 + \frac{k_3 - 1}{2} \cdot M_B^2\right)^{\frac{k_3}{k_3 - 1}} \quad (30)$$

Onde  $M_b$  e  $M_B$  são, respectivamente, os números de Mach na entrada e na saída do bocal,  $T_e$  [K] é a temperatura de estagnação, e  $p_e$  [Pa] é a pressão de estagnação. Devido ao regime de detonação, o escoamento é considerado sônico na garganta do bocal, portanto,  $M_b = 1$ . Essa consideração é oriunda da teoria de Chapman – Jouguet, utilizada para estudar a onda de detonação em regime permanente (LEE, 2008).

### 2.8.3. Diluidor, turbina e rendimento térmico

O equacionamento referente a estas seções é exatamente igual ao apresentado nas seções 2.6.3-5.

## 3. METODOLOGIA

### 3.1. Parâmetros de comparação

A comparação realizada entre os ciclos de combustão a pressão constante e de detonação é efetuada comparando o trabalho fornecido ao compressor  $W_C$ , o trabalho fornecido pela turbina  $W_T$  e o rendimento térmico  $\eta$  de cada ciclo. Estes parâmetros são comparados através de uma faixa de taxas de compressão  $r$  entre 4 e 40. São analisadas três situações de ciclo de detonação, de fração de pressão  $f$  iguais a 0,3, 0,5 e 0,7. As pressões intermediárias  $p_I$  relativas a cada caso são mostradas na Tabela 3.1. Todos os casos são analisados levando em consideração a combustão completa de 1 mol de combustível à temperatura de referência  $T_F = 298, 15$  K.

Tabela 3.1: Pressão intermediária  $p_I$ , em kPa, para cada caso analisado de detonação.

r	4	6	8	10	15	20	25	30	35	40
$f = 0,3$	123,9	185,9	247,9	309,9	464,9	619,9	774,9	929,92	1084,9	1239,9
$f = 0,5$	206,6	309,9	413,3	516,6	774,9	1033,2	1291,5	1549,8	1808,1	2066,5
$f = 0,7$	289,3	433,9	578,62	723,2	1084,9	1446,5	1808,1	2169,8	2531,4	2893,1

A temperatura de saída da câmara de diluição considerada é de 1600 K, valor típico máximo que a maior parte das turbinas comerciais existentes podem suportar sem degradação dos materiais componentes (DE SOUZA, 2014). As eficiências isentrópicas do compressor e da turbina são tomadas como 0,85 e 0,9, valores típicos para estes equipamentos (SOUSA, 2017). O ar entra no compressor na temperatura de referência  $T^o = 298, 15$  K e na pressão atmosférica  $p_o = 103.325$  Pa, saindo da turbina também à esta pressão.

O combustível utilizado é o gás de síntese oriundo de um gaseificador de contracorrente que utiliza oxigênio como agente da gaseificação, que pode ser obtido a partir da gaseificação de biomassa ou resíduos. A Tabela 3.2 mostra a composição do gás de síntese (BABU, 2013).

Tabela 3.2. Composição do gás de síntese em frações molares.

Espécie química	Fração molar
Monóxido de carbono ( $CO$ )	0,48
Hidrogênio ( $H_2$ )	0,32
Dióxido de carbono ( $CO_2$ )	0,15
Nitrogênio ( $N_2$ )	0,03
Metano ( $CH_4$ )	0,02

A entalpia molar de formação do combustível  $\bar{h}_F^o$  é igual a -113.568,72 J/mol e o  $\overline{PCI}$  é igual a 229.284,78 J/mol. O coeficiente  $v_{ar}^s$  é de 0,44 mol. Os cálculos dessas grandezas se encontram no Apêndice 1. A quantidade de ar de reação  $n_{o,d}$  é igual a  $0,44 \cdot 4,76 = 2,0944$  mol.

### 3.2. Determinação de propriedades termodinâmicas

A determinação das propriedades termodinâmicas das espécies químicas relevantes em função da temperatura é realizada através de equações empíricas conhecidas como Coeficientes NASA–Glenn (GORDON et al., 2002). Essas equações permitem calcular o calor específico molar a pressão constante  $\bar{c}_{p,i}$ , em J/K.mol, a entalpia molar  $\bar{h}_i$ , em J/mol, a entropia molar de referência  $\bar{s}_i^o$ , em J/K.mol, e a energia livre molar de Gibbs de referência  $\bar{g}_i^o$ , em J/mol. As propriedades são calculadas no estado de referência cuja pressão  $p^o$  é igual a 100.000 Pa.

Os coeficientes dependem da espécie química em particular e assumem valores diferentes para faixas de temperaturas de 200 a 1000K e de 1000K a 6000K. O Anexo 1 apresenta as equações e os coeficientes referentes às espécies referidas neste trabalho.

O índice  $A_i$  de uma espécie química  $i$  refere-se à família de coeficientes relativos à esta espécie; por exemplo,  $\bar{h}_i = \bar{h}_i(T_i, A_i)$  significa que  $\bar{h}_i$  é função da temperatura  $T_i$  e dos coeficientes da família  $A_i$ . Para uma mistura de espécies químicas  $I$ , um coeficiente qualquer  $e_I$  da família  $A_I$  é dado pela Equação 31:

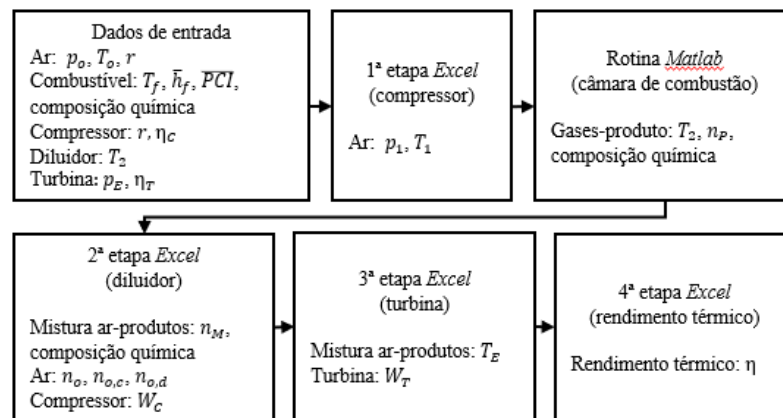
$$e_I = \sum_i^I y_i \cdot e_i \quad (31)$$

Onde  $y_i$  é a fração molar de uma espécie química constituinte da mistura e  $e_i$  é o coeficiente respectivo dessa espécie. O índice  $I$  representa o somatório dos termos relativos a todos os componentes da mistura.

### 3.3. Ciclo de combustão a pressão constante

Toda a simulação é realizada em um programa desenvolvido no *software* Microsoft Excel, com exceção da simulação da combustão a pressão constante, que é realizada via uma rotina desenvolvida no *software* Matlab. Ambas as rotinas utilizam o método iterativo de Newton-Rapson. O esquema passo-a-passo da simulação é apresentado na Figura 3.1:

Figura 3.1: Esquema da simulação computacional do ciclo de combustão a pressão constante.



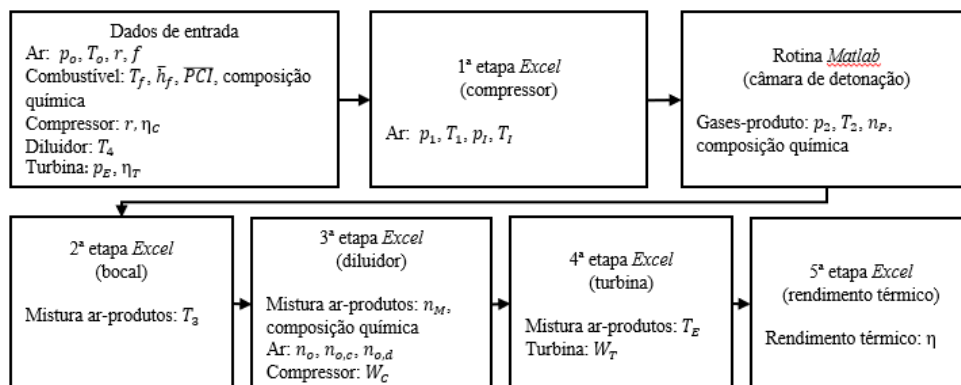
Os dados de entrada são submetidos ao programa desenvolvido em Excel, que utiliza as equações da seção 2.7.1; os dados obtidos são submetidos à rotina do *software* Matlab, que simula a combustão a pressão constante resolvendo simultaneamente as equações apresentadas nas seções 2.4 e 2.6, determinando a composição dos gases-produto através do método de minimização de energia livre de Gibbs (informações sobre a composição encontram-se no Apêndice 2). Os dados obtidos via Matlab são então submetidos novamente ao programa do software Excel, que calcula o trabalho fornecido ao compressor  $W_C$ , o trabalho fornecido pela turbina  $W_T$  e o rendimento térmico  $\eta$  utilizando as equações apresentadas na seção 2.7.

Todas as propriedades termodinâmicas do ar, dos produtos da combustão e da mistura são calculadas utilizando o método descrito na seção 3.2 simultaneamente ao processo descrito acima. O equacionamento detalhado passo-a-passo é apresentado no Apêndice 3.

### 3.3. Ciclo de detonação

Similar ao ciclo de combustão a pressão constante, a simulação é realizada toda em Microsoft Excel, com exceção da câmara de detonação, realizada em Matlab. O esquema passo-a-passo da simulação é apresentado na Figura 3.2:

Figura 3.2: Esquema da simulação computacional do ciclo de detonação.



Os dados de entrada são submetidos ao programa desenvolvido em Excel, que utiliza as equações da seção 2.8.1; os dados obtidos são submetidos à rotina do *software* Matlab, que simula a detonação resolvendo simultaneamente as equações apresentadas nas seções 2.5 e 2.6,

determinando a composição dos gases-produto através do método de minimização de energia livre de Gibbs (informações sobre a composição encontram-se no Apêndice 2). Os dados obtidos via Matlab são então submetidos novamente ao programa do software Excel, que calcula o trabalho fornecido ao compressor  $W_C$ , o trabalho fornecido pela turbina  $W_T$  e o rendimento térmico  $\eta$  utilizando as equações apresentadas na seção 2.7 e 2.8.

Todas as propriedades termodinâmicas do ar, dos produtos da combustão e da mistura são calculadas utilizando o método descrito na seção 3.2 simultaneamente ao processo descrito acima. O equacionamento detalhado passo-a-passo é apresentado no Apêndice 4.

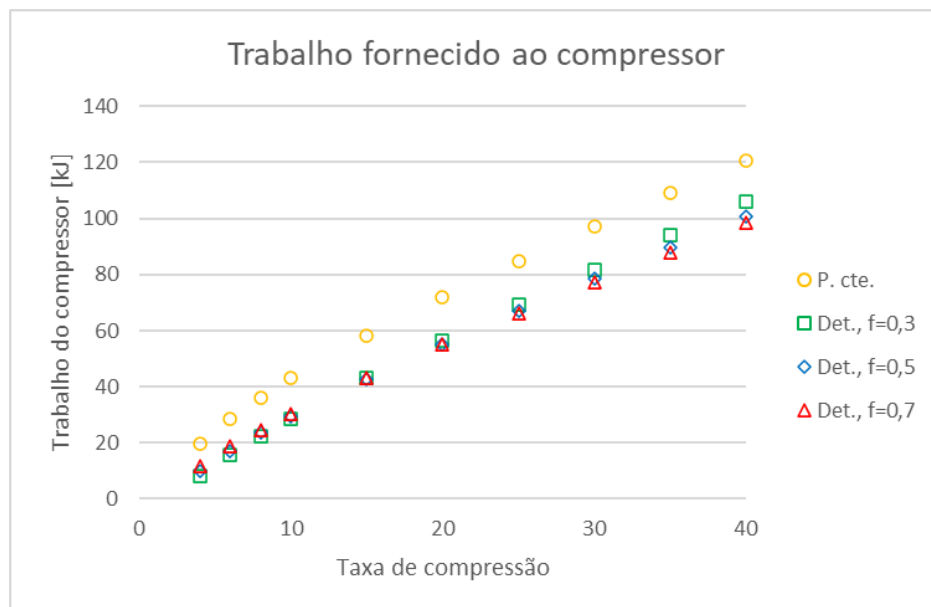
## 4. RESULTADOS

Os resultados obtidos através dos modelos computacionais, referentes à eficiência térmica e aos trabalhos líquidos do compressor e da turbina em cada situação analisada são mostrados apresentados e comentados a seguir.

### 4.1. Trabalho fornecido ao compressor

O trabalho fornecido ao compressor é similar entre os três casos analisados do ciclo de detonação (Figura 4.1). Para a mesma razão de compressão, quanto maior a fração de pressão, maior é a parcela do trabalho referente à compressão do ar de combustão; porém, devido à menor temperatura de saída do bocal dos produtos da combustão (Tabela 4.1), esse efeito é compensado pela menor quantidade de ar de diluição necessária para resfriar os gases-produto até 1600 K.

Figura 4.1: Trabalho fornecido ao compressor em função da taxa de compressão.



O trabalho fornecido ao compressor no ciclo de combustão a pressão constante é significativamente maior em relação aos ciclos de detonação; isto ocorre por dois motivos: primeiro, para uma mesma taxa de compressão  $r$ , todo ar que entra no compressor é comprimido a esta taxa, em contraste com o ciclo de detonação, onde apenas o ar de diluição é comprimido até  $r$ , sendo o restante comprimido até somente  $r_1$ ; segundo, as temperaturas de entrada dos produtos da combustão no diluidor são maiores no caso de combustão a pressão constante devido à ausência do bocal, onde os gases-produto são resfriados desde a temperatura de onda.

Tabela 4.1: Temperatura de entrada na turbina [K]; para pressão constante, igual à temperatura de chama adiabática; para detonação, igual à temperatura de saída do bocal.

r	4	6	8	10	15	20	25	30	35	40
P. cte.	2202,2	2237,8	2265,4	2288,3	2333,1	2367,	2396,3	2420,8	2442,4	2461,7
$f = 0,3$	2059,2	2129,4	2180,7	2221,4	2297,4	2353,2	2397,6	2434,7	2466,5	2494,6
$f = 0,5$	1952,7	2019,6	2068,6	2107,5	2180,3	2234	2276,7	2312,7	2343,2	2370,3
$f = 0,7$	1886,0	1950,8	1998,4	2036,3	2107,3	2159,5	2201,3	2236,2	2266,3	2292,9

## 4.2. Trabalho fornecido pela turbina

As temperaturas e pressões de entrada e a pressão de saída na turbina são sempre as mesmas em todos os cenários analisados, portanto, os únicos fatores que influenciam a variação de entalpia entre entrada e saída são o número de mols total e a composição química dos gases-produto, o número de mols de ar de diluição e a temperatura de saída da mistura de ar e gases-produto.

A parcela do trabalho relativa à expansão dos produtos da combustão é um fator negligenciável na comparação caso-a-caso, pois a composição química e o número de mols total dos gases-produto são similares em todos os casos estudados (informações relativas ao número de mols e frações molares dos produtos da combustão são apresentadas no Apêndice 2).

Conforme a Tabela 4.2, as temperaturas de saída da mistura de ar e gases-produto dos ciclos de combustão a pressão constante e de detonação são muito próximas entre si quando comparadas à mesma taxa de compressão. Logo, este também é um fator negligenciável.

Tabela 4.2: Temperatura de saída na turbina [K].

r	4	6	8	10	15	20	25	30	35	40
P. cte.	1225,2	1132,3	1070,1	1023,8	944,0	890,6	850,9	819,6	793,8	772,1
$f = 0,3$	1226,3	1132,7	1069,9	1023,2	942,6	888,6	848,6	817,1	791,2	769,4
$f = 0,5$	1229,3	1136,1	1073,5	1026,8	946,2	892,2	852,1	820,5	794,5	772,6
$f = 0,7$	1231,5	1138,5	1076,0	1029,4	948,8	894,7	854,6	822,8	796,8	774,8

Quanto maior a fração de pressão no ciclo de detonação, menor é a temperatura de saída do bocal – portanto, menor será a quantidade de ar de diluição necessária, consequentemente diminuindo o trabalho realizado pela turbina. O trabalho fornecido pela turbina no ciclo de detonação é quase sempre menor que o fornecido no ciclo de combustão a pressão constante (Fig. 4.2), exceto no caso de fração de pressão igual a 0,3 onde o trabalho é levemente maior para taxas de compressão maiores que 25 - situação em que a temperatura de entrada na câmara de diluição supera a do ciclo de pressão constante, sendo necessária uma maior quantidade de ar de diluição.

## 4.3. Rendimento térmico

As curvas de rendimento térmico dos ciclos de detonação possuem comportamento similar, porém, o maior rendimento térmico foi obtido para a menor fração de pressão considerada no presente trabalho, conforme mostrado na Figura 4.3.



Figura 4.2: Trabalho fornecido pela turbina em função da taxa de compressão.

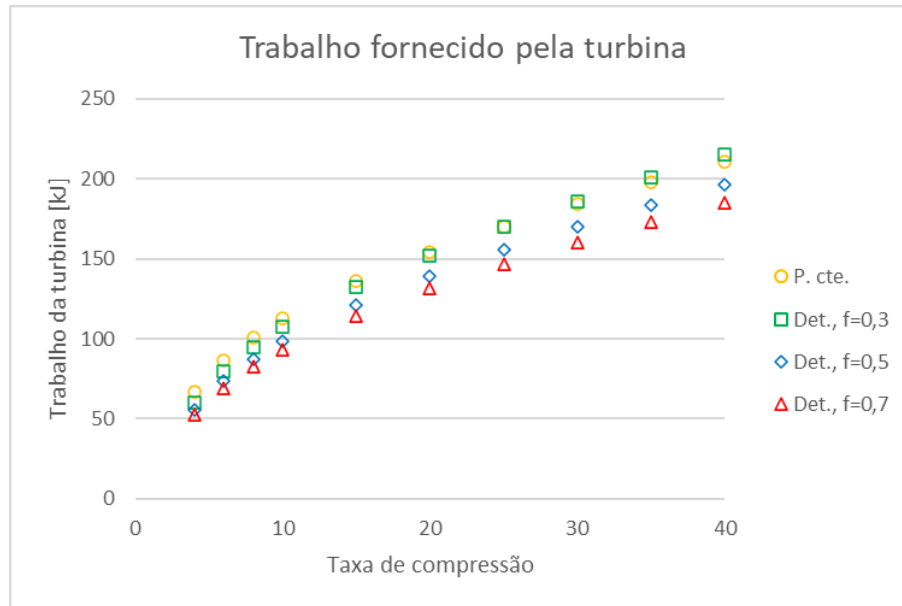
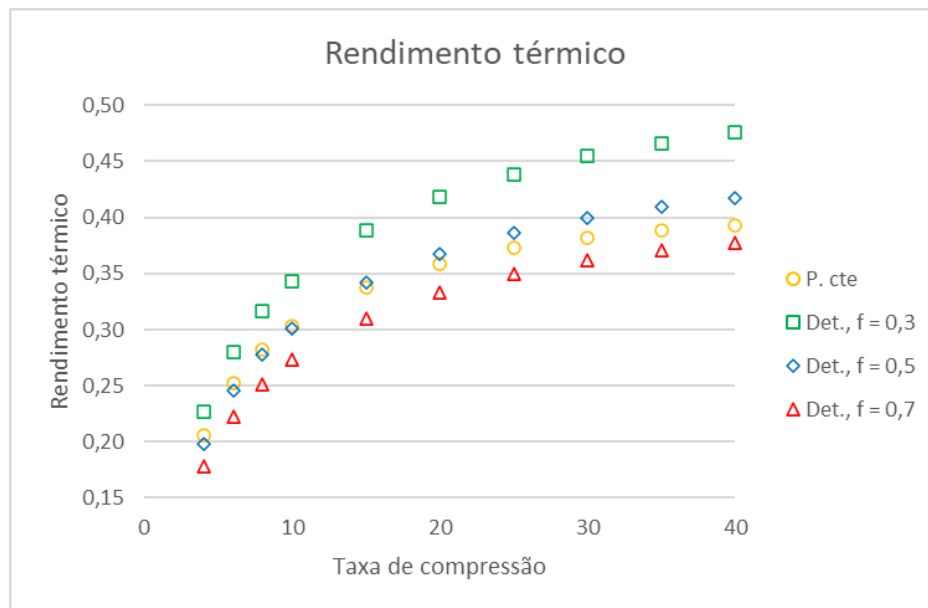


Figura 4.3: Rendimento térmico em função da taxa de compressão.



Comparadas ao caso de combustão a pressão constante, nota-se que apenas o caso de detonação à  $f = 0,3$  possui maior rendimento térmico para toda a faixa de  $r$  analisada. À  $f = 0,5$ , o rendimento térmico supera a combustão a pressão constante somente após  $r$  aproximadamente igual a 10. O rendimento térmico do ciclo de detonação à  $f = 0,7$  não supera o rendimento térmico do ciclo de combustão a pressão constante. Os ganhos relativos de rendimento térmico de cada ciclo de detonação, em relação à pressão constante, são mostrados na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Ganhos de rendimento térmico do ciclo de detonação em relação ao ciclo de pressão constante.

r	4	6	8	10	15	20	25	30	35	40
f = 0,3	10,63%	11,09%	12,00%	12,90%	14,87%	16,46%	17,79%	18,94%	19,96%	20,90%
f = 0,5	-3,55%	-2,60%	-1,59%	-0,70%	1,10%	2,48%	3,59%	4,56%	5,36%	6,11%
f = 0,7	-13,29%	-11,95%	-10,85%	-9,95%	-8,24%	-7,01%	-6,04%	-5,23%	-4,55%	-3,94%

As curvas de rendimento térmico do ciclo de detonação possuem um crescimento maior que a curva do ciclo de combustão a pressão constante conforme o aumento da taxa de compressão. Assim, é possível inferir que o rendimento térmico do ciclo de detonação com  $f = 0,7$  supere o rendimento térmico do ciclo de combustão a pressão constante para razões de compressão mais elevadas; porém, somente simulações posteriores podem confirmar esta inferência.

Devido ao fato de o ciclo de detonação se utilizar de uma turbina supersônica, a variação de energia cinética poderia se tornar um componente significativo no balanço de energia da turbina. Em futuros trabalhos esta variação de energia cinética deveria ser considerada, sendo necessária uma análise fluidodinâmica do ciclo de detonação; isto foge do escopo deste trabalho. Infere-se, entretanto, que o rendimento do ciclo de detonação seria ainda mais elevado para todo  $f$  caso o efeito da variação de energia cinética fosse considerado.

## 5. CONCLUSÃO

A comparação entre os resultados dos modelos matemático e computacional dos ciclos termodinâmicos de turbinas a gás com câmara de detonação e câmara de combustão a pressão constante mostram que o aumento do rendimento térmico no primeiro em relação ao segundo é situacional. Para razões de pressão  $f$  baixas, o rendimento do ciclo de detonação é maior, mas diminui conforme o aumento de  $f$ . Por outro lado, para altos valores de  $f$ , o ciclo de combustão a pressão constante se mostra termicamente mais eficiente.

O ciclo de pressão constante possui um consumo de trabalho no compressor significativamente maior do que todas as situações analisadas no ciclo de detonação, que possuem consumo de trabalho similar entre si. Porém, nesses casos, o trabalho entregue pela turbina também é maior no ciclo de combustão a pressão constante. O desempenho da turbina aumenta quanto menor a fração de pressão, e só se mostra comparável à combustão a pressão constante para  $f = 0,3$ . Nesse caso, os ganhos relativos de rendimento térmico aumentam conforme a taxa de compressão, variando de 10,63% para  $r = 4$ , até 20,90% para  $r = 40$ .

A abordagem do ciclo de detonação pode ser realizada de maneira diferente; pode-se, ao invés de considerar um bocal divergente na saída da câmara de combustão, utilizar um bocal convergente na entrada de ar do diluidor, a fim de aproveitar ao máximo o ganho de pressão da detonação na forma de trabalho fornecido pela turbina. Os ciclos podem ser comparados através de outros parâmetros, como consumo específico de combustível e emissão de espécies químicas poluentes, situações que podem ser avaliadas em trabalhos futuros.

É possível também comparar os resultados alterando a temperatura no diluidor, aqui considerada apenas como 1600 K. Do mesmo modo, é possível realizar uma comparação para razões ar-combustível ricas ou pobres, e não somente à razão de combustão estequiométrica. Por fim, conforme Moran e Shapiro (2009), ambos os ciclos podem ter seu rendimento térmico aumentado através da adoção de regeneradores e de processos de reaquecimento e inter-resfriamento, e então comparados nesta situação de ganho de rendimento.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BABU, P. **Biomass Gasification, Pyrolysis and Torrefaction: Practical Design and Theory**. 2. ed. Amsterdam: Elsevier, 2013.
- BATTELLE, R. et al. Rotating Detonation Engine Implementation into an Open-Loop T63 Gas Turbine Engine. In: AIAA AEROSPACE SCIENCES MEETING, 55., 2017, Grapevine. Disponível em: <<https://arc.aiaa.org/doi/10.2514/6.2017-1747>>
- BIGLER, Blaine R.; HARGUS, William A.; PAULSON, Eric J. Idealized Efficiency Calculations for Rotating Detonation Engine Rocket Applications. In: AIAA/SAE/ASEE JOINT PROPULSION CONFERENCE, 53., 2017, Atlanta. Disponível em: <[https://www.researchgate.net/publication/318296076\\_Idealized\\_Efficiency\\_Calculations\\_for\\_Rotating\\_Detonation\\_Engine\\_Rocket\\_Applications](https://www.researchgate.net/publication/318296076_Idealized_Efficiency_Calculations_for_Rotating_Detonation_Engine_Rocket_Applications)>
- BORGNAKKE, C.; SONNTAG, R.E.; VAN WYLEN, G. J. **Fundamentos da Termodinâmica**: Tradução da 5ª edição americana. São Paulo: Edgard Blücher, 2002.
- CARVALHO JR., J. A. et al. **Combustão aplicada**. 1. ed. Florianópolis: EdUFSC, 2018.
- MORAN, M. J.; SHAPIRO, H. N. **Princípios de Termodinâmica para Engenharia**. 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2009.
- DAI, Y. et al. Investigation of the Pressure Gain Characteristics and Cycle Performance in Gas Turbines Based on Interstage Bleeding Detonation Combustion. **Applied Mechanics and Materials**, [s. l.], v. 782, p. 3–12, 2019. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/1099-4300/21/3/265>>
- DE SOUZA, Z. **Plantas de Geração Térmica a Gás: Turbina a Gás, Turbocompressor, Recuperador de Calor, Câmara de Combustão**. 1. ed. Rio de Janeiro: Interciência, 2014.
- FOX, R. W.; MCDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J.; **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2010.
- GORDON, S.; MCBRIDE, B. J.; ZEHE, M. J. **NASA Glenn Coefficients for Calculating Thermodynamic Properties of Individual Species**. Washington D.C.: NASA, 2002.
- IUPAC. Notation for states and processes, significance of the word standard in chemical thermodynamics, and remarks on commonly tabulated forms of thermodynamic functions. **Pure & Applied Chemistry**, [s. l.], v. 54, n. 6, p. 1239–1250, 1982. Disponível em: <<http://media.iupac.org/publications/pac/1982/pdf/5406x1239.pdf>>
- LEE, J. H. S. **The Detonation Phenomenon**. 1. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2008.
- LI, Z. et al. A Thermodynamic Analysis of the Pressure Gain of Continuously Rotating Detonation Combustor for Gas Turbine. **Applied Sciences**, [s. l.], v. 8, n. 4, p. 535–553, 2018. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2076-3417/8/4/535>>
- MORATA, Elena C.; PANAIGUA, Guillermo; SOUSA, Jorge. Thermodynamic analysis of a gas turbine engine with a rotating detonation combustor. **Applied Energy**, [s. l.], v. 195, p. 247–256, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.03.045>>
- NIST. JANAF Thermochemical Tables. 2. ed. Gaithersburg: National Bureau of Standards, 1971.
- SAAD, M. A. **Compressible Fluid Flow**. 2. ed. Hoboken: Prentice Hall, 1992.
- URNS, S. **An Introduction to Combustion: Concepts and Applications**. 3. ed. New York: McGraw-Hill, 2012.
- WOLAŃSKI, Piotr. Application of the Continuous Rotating Detonation to Gas Turbine. **Entropy**, [s. l.], v. 21, n. 3, p. 265–284, 2015. Disponível em: <[https://www.researchgate.net/publication/281123369\\_Application\\_of\\_the\\_Continuous\\_Rotating\\_Detonation\\_to\\_Gas\\_Turbine](https://www.researchgate.net/publication/281123369_Application_of_the_Continuous_Rotating_Detonation_to_Gas_Turbine)>

## ANEXO 1 – EQUAÇÕES E COEFICIENTES GLENN-NASA PARA ESPÉCIES RELEVANTES

Coeficientes para $T$ entre 200 K e 1000 K							
Espécie	CO	CO <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	O <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>
$a_1$	1,489.10 <sup>4</sup>	4,944.10 <sup>4</sup>	-1,767.10 <sup>5</sup>	4,078.10 <sup>4</sup>	-3,948.10 <sup>4</sup>	-3,426.10 <sup>4</sup>	2,210.10 <sup>4</sup>
$a_2$	-2,922.10 <sup>2</sup>	-6,264.10 <sup>2</sup>	2,786.10 <sup>3</sup>	-8,009.10 <sup>2</sup>	5,756.10 <sup>2</sup>	4,847.10 <sup>2</sup>	-3,818.10 <sup>2</sup>
$a_3$	5,725.10 <sup>0</sup>	5,302.10 <sup>0</sup>	-1,203.10 <sup>1</sup>	8,215.10 <sup>0</sup>	9,318.10 <sup>-1</sup>	1,119.10 <sup>0</sup>	6,083.10 <sup>0</sup>
$a_4$	-8,176.10 <sup>-3</sup>	2,504.10 <sup>-3</sup>	3,918.10 <sup>-2</sup>	-1,270.10 <sup>-2</sup>	7,223.10 <sup>-3</sup>	4,294.10 <sup>-3</sup>	-8,530.10 <sup>-3</sup>
$a_5$	1,457.10 <sup>-5</sup>	2,127.10 <sup>-7</sup>	-3,619.10 <sup>-5</sup>	1,754.10 <sup>-5</sup>	7,343.10 <sup>-6</sup>	6,836.10 <sup>-7</sup>	1,384.10 <sup>-5</sup>
$a_6$	-1,088.10 <sup>-8</sup>	-7,690.10 <sup>-10</sup>	2,023.10 <sup>-8</sup>	-1,203.10 <sup>-8</sup>	4,956.10 <sup>-9</sup>	-2,023.10 <sup>-9</sup>	-9,626.10 <sup>-9</sup>
$a_7$	3,028.10 <sup>-12</sup>	2,850.10 <sup>-13</sup>	-4,978.10 <sup>-12</sup>	3,368.10 <sup>-12</sup>	-1,337.10 <sup>-12</sup>	1,039.10 <sup>-12</sup>	2,520.10 <sup>-12</sup>
$b_1$	-1,303.10 <sup>4</sup>	-4,528.10 <sup>4</sup>	-2,331.10 <sup>4</sup>	2,682.10 <sup>3</sup>	-3,304.10 <sup>4</sup>	-3,339.10 <sup>3</sup>	7,108.10 <sup>2</sup>
$b_2$	7,859.10 <sup>0</sup>	7,048.10 <sup>0</sup>	8,904.10 <sup>1</sup>	3,044.10 <sup>1</sup>	1,724.10 <sup>1</sup>	1,850.10 <sup>1</sup>	1,076.10 <sup>1</sup>
Coeficientes para $T$ entre 1000 K e 6000 K							
$a_1$	1,177.10 <sup>5</sup>	4,619.10 <sup>5</sup>	3,730.10 <sup>6</sup>	1,035.10 <sup>6</sup>	5,608.10 <sup>5</sup>	-1,038.10 <sup>6</sup>	5,877.10 <sup>5</sup>
$a_2$	-1,789.10 <sup>3</sup>	-1,945.10 <sup>3</sup>	-1,384.10 <sup>4</sup>	-2,417.10 <sup>3</sup>	-8,372.10 <sup>2</sup>	2,345.10 <sup>3</sup>	-2,239.10 <sup>3</sup>
$a_3$	8,292.10 <sup>0</sup>	5,917.10 <sup>0</sup>	2,049.10 <sup>1</sup>	4,646.10 <sup>0</sup>	2,975.10 <sup>0</sup>	1,820.10 <sup>0</sup>	6,067.10 <sup>0</sup>
$a_4$	-9,223.10 <sup>-5</sup>	-5,664.10 <sup>-4</sup>	-1,962.10 <sup>-3</sup>	2,292.10 <sup>-3</sup>	1,252.10 <sup>-3</sup>	1,268.10 <sup>-3</sup>	-6,140.10 <sup>-4</sup>
$a_5$	4,864.10 <sup>-9</sup>	1,340.10 <sup>-7</sup>	4,727.10 <sup>-7</sup>	6,837.10 <sup>-7</sup>	3,741.10 <sup>-7</sup>	2,188.10 <sup>-7</sup>	1,492.10 <sup>-7</sup>
$a_6$	-1,891.10 <sup>-12</sup>	-1,788.10 <sup>-11</sup>	-3,729.10 <sup>-11</sup>	9,426.10 <sup>-11</sup>	5,937.10 <sup>-11</sup>	2,054.10 <sup>-11</sup>	-1,923.10 <sup>-11</sup>
$a_7$	6,330.10 <sup>-16</sup>	9,621.10 <sup>-16</sup>	1,624.10 <sup>-15</sup>	-4,822.10 <sup>-15</sup>	-3,607.10 <sup>-15</sup>	-8,193.10 <sup>-16</sup>	1,062.10 <sup>-15</sup>
$b_1$	-3,908.10 <sup>4</sup>	-2,467.10 <sup>3</sup>	7,532.10 <sup>4</sup>	-1,384.10 <sup>4</sup>	5,340.10 <sup>3</sup>	-1,689.10 <sup>4</sup>	1,283.10 <sup>4</sup>
$b_2$	2,657.10 <sup>1</sup>	1,387.10 <sup>1</sup>	-1,219.10 <sup>2</sup>	7,978.10 <sup>0</sup>	2,203.10 <sup>0</sup>	1,739.10 <sup>1</sup>	1,587.10 <sup>1</sup>

$$\bar{c}_{p,i} = \bar{c}_{p,i}(T_i, A_i) = \bar{R} \cdot (a_{1i} \cdot T_i^{-2} + a_{2i} \cdot T_i^{-1} + a_{3i} + a_{4i} \cdot T_i + a_{5i} \cdot T_i^2 + a_{6i} \cdot T_i^3 + a_{7i} \cdot T_i^4)$$

$$\bar{h}_i = \bar{h}_i(T_i, A_i) = \bar{R} \cdot (-a_{1i} \cdot T_i^{-1} + a_{2i} \cdot \ln T_i + a_{3i} \cdot T_i + a_{4i} \cdot \frac{T_i^2}{2} + a_{5i} \cdot \frac{T_i^3}{3} + a_{6i} \cdot \frac{T_i^4}{4} + a_{7i} \cdot \frac{T_i^5}{5} + b_{1i})$$

$$\bar{s}_i^o = \bar{s}_i^o(T_i, A_i) = \bar{R} \cdot (-a_{1i} \cdot \frac{T_i^{-2}}{2} + a_{2i} \cdot T_i^{-1} + a_{3i} \cdot \ln T_i + a_{4i} \cdot T_i + a_{5i} \cdot \frac{T_i^2}{2} + a_{6i} \cdot \frac{T_i^3}{3} + a_{7i} \cdot \frac{T_i^4}{4} + b_{2i})$$

$$\bar{g}_i^o = \bar{h}_i - T_i \cdot \bar{s}_i^o$$

### APÊNDICE 1 – CÁLCULO DE $\bar{h}_F$ , $\overline{PCI}$ E DE $v_{ar}^s$ DO GÁS DE SÍNTESE

#### Cálculo de $v_{ar}^s$

Reação global:  $0,48CO + 0,32H_2 + 0,15CO_2 + 0,02CH_4 + 0,03N_2 + v_{ar}^s (O_2 + 3,76N_2) \rightarrow n_{CO_2}CO_2 + n_{H_2O}H_2O + n_{N_2}N_2$

Balço de massa do carbono:  $0,48 + 0,15 + 0,02 \cdot n_{CO_2} :: n_{CO_2} = 0,65$

Balço de massa do hidrogênio:  $2,0,32 + 4,0,02 = 2 \cdot n_{H_2O} :: n_{H_2O} = 0,36$

Balço de massa do oxigênio:  $0,48 + 2,0,15 + 2 \cdot v_{ar}^s = 2 \cdot n_{CO_2} + n_{H_2O} :: v_{ar}^s = 0,44$

Balço de massa do nitrogênio:  $2,0,03 + 2,3,76 \cdot v_{ar}^s = 2 \cdot n_{N_2} :: n_{N_2} = 1,6844$

### Cálculo de $\bar{h}_F^o$

$$\bar{h}_F^o = 0,48 \cdot \bar{h}_{CO}^o + 0,32 \cdot \bar{h}_{H_2}^o + 0,15 \cdot \bar{h}_{CO_2}^o + 0,02 \cdot \bar{h}_{CH_4}^o + 0,03 \cdot \bar{h}_{N_2}^o$$

$$\bar{h}_F^o = 0,48 \cdot (-110,527) + 0,32 \cdot (0) + 0,15 \cdot (-393,522) + 0,02 \cdot (-74,873) + 0,03 \cdot (0)$$

$$\bar{h}_F^o = -53,05296 - 59,0283 - 1,48746 = -113,56872 \text{ kJ/mol} = -113.568,72 \text{ J/mol}$$

### Cálculo do $\overline{PCI}$

$$\overline{PCI} = \sum_r^R n_r \cdot \bar{h}_r^o - \sum_p^P n_p \cdot \bar{h}_p^o = 0,48 \cdot \bar{h}_{CO}^o + 0,32 \cdot \bar{h}_{H_2}^o + 0,15 \cdot \bar{h}_{CO_2}^o + 0,02 \cdot \bar{h}_{CH_4}^o + 0,44 \cdot \bar{h}_{O_2}^o + (0,03 + 0,44 \cdot 3,76) \cdot \bar{h}_{N_2}^o - 0,65 \cdot \bar{h}_{CO_2}^o - 0,36 \cdot \bar{h}_{H_2O}^o - 1,6844 \cdot \bar{h}_{N_2}^o$$

$$\overline{PCI} = 0,48 \cdot (-110,527) + 0,32 \cdot (0) - 0,5 \cdot (-393,522) + 0,02 \cdot (-74,873) + 0,44 \cdot (0) - 0,36 \cdot (-241,845)$$

$$\overline{PCI} = -53,05296 + 196,761 - 1,48746 + 87,0642 = 229,28478 \text{ kJ/mol} = 229.284,78 \text{ kJ/mol}$$

## APÊNDICE 2 – COMPOSIÇÃO DOS GASES-PRODUTO DA COMBUSTÃO

Combustão a pressão constante										
r	4	6	8	10	15	20	25	30	35	40
$n_{CO_2}$ [mol]	0,63015	0,62964	0,62913	0,62864	0,62753	0,62656	0,62569	0,6249	0,62416	0,62348
$n_{CO}$ [mol]	0,01985	0,02036	0,02087	0,02136	0,02247	0,02344	0,02431	0,02511	0,02584	0,02652
$n_{H_2O}$ [mol]	0,35787	0,35786	0,35784	0,35781	0,35775	0,3577	0,35764	0,35759	0,35755	0,3575
$n_{H_2}$ [mol]	0,00213	0,00214	0,00216	0,00219	0,00225	0,0023	0,00236	0,00241	0,00245	0,0025
$n_{O_2}$ [mol]	0,01099	0,01125	0,01152	0,01177	0,01236	0,01287	0,01333	0,01376	0,01415	0,01451
$n_{N_2}$ [mol]	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844
$n_{total}$ [mol]	2,70539	2,70566	2,70592	2,70617	2,70675	2,70727	2,70773	2,70816	2,70855	2,70891
Detonação, $f = 0,3$										
$n_{CO_2}$ [mol]	0,58302	0,58398	0,58454	0,58489	0,58535	0,58551	0,58555	0,58551	0,58542	0,58531
$n_{CO}$ [mol]	0,06698	0,06602	0,06546	0,06511	0,06465	0,06449	0,06445	0,06449	0,06458	0,06469
$n_{H_2O}$ [mol]	0,34607	0,34629	0,34642	0,3465	0,3466	0,34664	0,34664	0,34663	0,34661	0,34658
$n_{H_2}$ [mol]	0,00605	0,0059	0,00581	0,00574	0,00564	0,00558	0,00554	0,00552	0,0055	0,00549
$n_{O_2}$ [mol]	0,03236	0,03185	0,03154	0,03134	0,03106	0,03093	0,03087	0,03086	0,03087	0,0309
$n_{N_2}$ [mol]	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844
$n_{total}$ [mol]	2,71888	2,71844	2,71817	2,71798	2,7177	2,71754	2,71746	2,71741	2,71738	2,71736
Detonação, $f = 0,5$										
r	4	6	8	10	15	20	25	30	35	40
$n_{CO_2}$ [mol]	0,5842	0,58489	0,58524	0,58542	0,58555	0,58545	0,58527	0,58503	0,58481	0,58456
$n_{CO}$ [mol]	0,0658	0,06511	0,06476	0,06458	0,06445	0,06455	0,06473	0,06497	0,06519	0,06544
$n_{H_2O}$ [mol]	0,34634	0,3465	0,34658	0,34662	0,34664	0,34662	0,34657	0,34651	0,34646	0,3464
$n_{H_2}$ [mol]	0,00587	0,00574	0,00567	0,00562	0,00554	0,00551	0,00548	0,00548	0,00547	0,00547

Detonação, $f = 0,5$										
$n_{O_2}$ [mol]	0,03173	0,03134	0,03112	0,031	0,03087	0,03087	0,03091	0,03099	0,03106	0,03115
$n_{N_2}$ [mol]	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844
$n_{total}$ [mol]	2,71833	2,71798	2,71777	2,71763	2,71746	2,71739	2,71736	2,71738	2,71739	2,71742
Detonação, $f = 0,7$										
$n_{CO_2}$ [mol]	0,58479	0,58529	0,58549	0,58555	0,58542	0,58514	0,58481	0,58446	0,5841	0,58375
$n_{CO}$ [mol]	0,06521	0,06471	0,06451	0,06445	0,06458	0,06486	0,06519	0,06554	0,0659	0,06625
$n_{H_2O}$ [mol]	0,34648	0,34659	0,34663	0,34664	0,34661	0,34654	0,34646	0,34638	0,34629	0,34621
$n_{H_2}$ [mol]	0,00576	0,00566	0,00559	0,00555	0,0055	0,00548	0,00547	0,00547	0,00547	0,00548
$n_{O_2}$ [mol]	0,0314	0,03109	0,03095	0,03089	0,03087	0,03095	0,03106	0,03119	0,03132	0,03146
$n_{N_2}$ [mol]	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844	1,6844
$n_{total}$ [mol]	2,71804	2,71774	2,71758	2,71748	2,71738	2,71736	2,71739	2,71744	2,71748	2,71755

### APÊNDICE 3 – EQUAÇÕES UTILIZADAS NA SIMULAÇÃO DA CÂMARA DE COMBUSTÃO A PRESSÃO COSNTANTE

As equações são apresentadas na ordem em que foram resolvidas durante a simulação computacional; cada passo é separado por ponto final. Equações separadas por vírgula são resolvidas simultaneamente como um sistema.

#### Compressor

$$p_1 = r \cdot p_o \cdot e_o = \sum_i^{ar} y_{o,i} \cdot e_{o,i}, \bar{s}_o^o = \bar{s}_o^o(T_o, A_o), \bar{s}_{1s}^o = \bar{s}_o^o + \bar{R} \cdot \ln \frac{p_1}{p_o}, e_{1s} = \sum_i^{ar} y_{1s,i} \cdot e_{1s,i},$$

$$\bar{s}_{1s}^o = \bar{s}_{1s}^o(T_{1s}, A_{1s}), \bar{h}_o = \bar{h}_o(T_o, A_o), \bar{h}_{1s} = \bar{h}_{1s}(T_{1s}, A_{1s}), \eta_C = \frac{\bar{h}_{1s} - \bar{h}_o}{\bar{h}_1 - \bar{h}_o}, c_1 = \sum_i^{ar} y_{1,i} \cdot c_{1,i},$$

$$\bar{h}_1 = \bar{h}_1(T_1, A_1).$$

#### Câmara de combustão

$$\sum_r^R n_r \cdot x_{E,r} = \sum_p^P n_p \cdot x_{E,p} \text{ (para todos elementos)}, \sum_r^R n_r \cdot \bar{h}_r = \sum_p^P n_p \cdot \bar{h}_p, \bar{h}_i = \bar{h}_i(T_i, A_i),$$

$$\bar{s}_i^o = \bar{s}_i^o(T_i, A_i), A_i = A_i(T_i) \text{ (para todas espécies presentes em R e P)}, \frac{\bar{g}_{T,p}^o}{\bar{R} \cdot T} + \ln \frac{n_p}{n_p} + \ln \frac{p_p}{p_o} +$$

$$1 - \sigma_C - \sigma_H - \sigma_O = 0, \bar{g}_p^o = \bar{h}_p - T_2 \cdot \bar{s}_p^o \text{ (para todas espécies presentes em P)}.$$

#### Diluidor

$$e_{P,3} = \sum_i^P y_{P,3,i} \cdot e_{P,3,i}, \bar{h}_{P,3} = \bar{h}_{P,3}(T_3, A_{P,3}), e_{P,2} = \sum_i^P y_{P,2,i} \cdot e_{P,2,i}, \bar{h}_{P,2} = \bar{h}_{P,2}(T_2, A_{P,2}),$$

$$e_{o,d,1} = \sum_i^{ar} y_{o,d,1,i} \cdot e_{o,d,1,i}, \bar{h}_{o,d,1} = \bar{h}_{o,d,1}(T_1, A_{o,d,3}), e_{o,d,3} = \sum_i^P y_{o,d,3,i} \cdot e_{o,d,3,i}, \bar{h}_{o,d,3} =$$

$$\bar{h}_{o,d,3}(T_4, A_{o,d,3}), n_{o,d} = \frac{n_p \cdot (\bar{h}_{P,3} - \bar{h}_{P,2})}{(\bar{h}_{o,d,3} - \bar{h}_{o,d,1})}, n_o = n_{o,c} + n_{o,d}, W_C = n_o \cdot (\bar{h}_1 - \bar{h}_o), n_M = n_p +$$

$$n_{o,d}, n_{M,i} = n_{P,i} + n_{o,d,i} \text{ (para cada espécie de M)}.$$

#### Turbina

$$e_3 = \sum_i^M y_{3,i} \cdot e_{3,i}, \bar{s}_3^o = \bar{s}_3^o(T_3, A_3), \bar{s}_{E3}^o = \bar{s}_E^o + \bar{R} \cdot \ln \frac{p_1}{p_o}, e_{E3} = \sum_i^M y_{E3,i} \cdot e_{E3,i}, \bar{s}_{E3}^o =$$

$$\bar{s}_{E3}^o(T_{E3}, A_{E3}), \bar{h}_3 = \bar{h}_3(T_3, A_3), \bar{h}_{E3} = \bar{h}_{E3}(T_{E3}, A_{E3}), \eta_T = \frac{\bar{h}_3 - \bar{h}_E}{\bar{h}_3 - \bar{h}_{E3}}, e_E = \sum_i^M y_{E,i} \cdot e_{E,i}, \bar{h}_E =$$

$$\bar{h}_E(T_E, A_E), W_T = n_o \cdot (\bar{h}_3 - \bar{h}_E).$$

### Rendimento térmico

$$\eta = \frac{W_T - W_C}{PCI}.$$

## APÊNDICE 4 – EQUAÇÕES UTILIZADAS NA SIMULAÇÃO DA CÂMARA DE DETONAÇÃO

As equações são apresentadas na ordem em que foram resolvidas durante a simulação computacional; cada passo é separado por ponto final. Equações separadas por vírgula são resolvidas simultaneamente como um sistema.

### Compressor

$$\begin{aligned} p_1 &= r \cdot p_o \cdot f = \frac{p_I}{p_f} \cdot e_o = \sum_i^{ar} y_{o,i} \cdot e_{o,i}, \bar{s}_o^o = \bar{s}_o^o(T_o, A_o), \bar{s}_{I_s}^o = \bar{s}_o^o + \bar{R} \cdot \ln \frac{p_I}{p_o}, e_{I_s} = \\ \sum_i^{ar} y_{I_s,i} \cdot e_{I_s,i}, \bar{s}_{I_s}^o &= \bar{s}_{I_s}^o(T_{I_s}, A_{I_s}), \bar{h}_o = \bar{h}_o(T_o, A_o), \bar{h}_{I_s} = \bar{h}_{I_s}(T_{I_s}, A_{I_s}), \eta_C = \frac{\bar{h}_{I_s} - \bar{h}_o}{\bar{h}_I - \bar{h}_o}, c_I = \\ \sum_i^{ar} y_{I,i} \cdot c_{1,i}, \bar{h}_I &= \bar{h}_I(T_I, A_I), \bar{s}_{1_s}^o = \bar{s}_o^o + \bar{R} \cdot \ln \frac{p_1}{p_o}, e_{1_s} = \sum_i^{ar} y_{1_s,i} \cdot e_{1_s,i}, \bar{s}_{1_s}^o = \bar{s}_{1_s}^o(T_{1_s}, A_{1_s}), \\ \bar{h}_{1_s} &= \bar{h}_{1_s}(T_{1_s}, A_{1_s}), \eta_C = \frac{\bar{h}_{1_s} - \bar{h}_o}{\bar{h}_1 - \bar{h}_o}, c_1 = \sum_i^{ar} y_{1,i} \cdot c_{1,i}, \bar{h}_1 = \bar{h}_1(T_1, A_1). \end{aligned}$$

### Câmara de detonação

$$\begin{aligned} \sum_r^R n_r \cdot x_{E,r} &= \sum_P^P n_P \cdot x_{E,p} \text{ (para todos elementos)}, \frac{p_1}{p_2} = (\alpha_2 - \frac{\rho_3}{\rho_2} + 2 \cdot q) / (\alpha_1 \cdot \frac{\rho_1}{\rho_2} - 1), q = \\ \frac{h_1^o - h_2^o}{p_1/\rho_1}, \alpha_1 &= \frac{k_1 + 1}{k_1 - 1}, \alpha_2 = \frac{k_2 + 1}{k_2 - 1}, k_1 = \frac{c_{p,1}}{c_{p,1} - \bar{R}}, k_2 = \frac{c_{p,2}}{c_{p,2} - \bar{R}}, \bar{c}_{p,i} = \bar{c}_{p,i}(T_i, A_i), \bar{h}_i = \bar{h}_i(T_i, A_i), \\ \bar{s}_i^o &= \bar{s}_i^o(T_i, A_i), A_i = A_i(T_i) \text{ (para todas espécies presentes em R e P)}, \frac{\bar{g}_{T,p}^o}{\bar{R} \cdot T} + \ln \frac{n_p}{n_P} + \ln \frac{p_P}{p^o} + \\ 1 - \sigma_C - \sigma_H - \sigma_O &= 0, \bar{g}_p^o = \bar{h}_p - T_2 \cdot \bar{s}_p^o \text{ (para todas espécies presentes em P)}, \end{aligned}$$

### Bocal

$$\begin{aligned} e_2 &= \sum_p^P y_{2,p} \cdot e_{2,p} \cdot \bar{c}_{p,2} = \bar{c}_{p,2}(T_2, A_2), k_2 = \frac{c_{p,2}}{c_{p,2} - \bar{R}} \cdot \frac{T_2}{T_e} = 1 + \frac{k_2 - 1}{2} \cdot \frac{p_2}{p_e} = (1 + \frac{k_2 - 1}{2})^{\frac{k_2}{k_2 - 1}} \cdot \frac{p_3}{p_e} = \\ (1 + \frac{k_2 - 1}{2} \cdot M_B^2)^{\frac{k_2}{k_2 - 1}} \cdot \frac{T_3}{T_e} &= 1 + \frac{k_2 - 1}{2} \cdot M_B^2. \end{aligned}$$

### Diluidor

$$\begin{aligned} e_{P,3} &= \sum_i^P y_{P,3,i} \cdot e_{P,3,i}, \bar{h}_{P,3} = \bar{h}_{P,3}(T_3, A_{P,3}), e_{P,4} = \sum_i^P y_{P,4,i} \cdot e_{P,4,i}, \bar{h}_{P,4} = \bar{h}_{P,4}(T_4, A_{P,4}), \\ e_{o,d,1} &= \sum_i^{ar} y_{o,d,1,i} \cdot e_{o,d,1,i}, \bar{h}_{o,d,1} = \bar{h}_{o,d,1}(T_1, A_{o,d,3}), e_{o,d,4} = \sum_i^P y_{o,d,4,i} \cdot e_{o,d,4,i}, \bar{h}_{o,d,4} = \\ \bar{h}_{o,d,4}(T_4, A_{o,d,4}), n_{o,d} &= \frac{n_P \cdot (\bar{h}_{P,4} - \bar{h}_{P,3})}{(\bar{h}_{o,d,4} - \bar{h}_{o,d,1})}, n_o = n_{o,c} + n_{o,d}, W_C = n_o \cdot (\bar{h}_I - \bar{h}_o) + \\ n_{o,d} \cdot (\bar{h}_1 - \bar{h}_I), n_M &= n_P + n_{o,d}, n_{M,i} = n_{P,i} + n_{o,d,i} \text{ (para cada espécie de M)}. \end{aligned}$$

### Turbina

$$\begin{aligned} e_4 &= \sum_i^M y_{4,i} \cdot e_{4,i}, \bar{s}_4^o = \bar{s}_4^o(T_4, A_4), \bar{s}_{E_s}^o = \bar{s}_E^o + \bar{R} \cdot \ln \frac{p_1}{p_o}, e_{E_s} = \sum_i^M y_{E_s,i} \cdot e_{E_s,i}, \bar{s}_{E_s}^o = \\ \bar{s}_{E_s}^o(T_{E_s}, A_{E_s}), \bar{h}_4 &= \bar{h}_4(T_4, A_4), \bar{h}_{E_s} = \bar{h}_{E_s}(T_{E_s}, A_{E_s}), \eta_T = \frac{\bar{h}_4 - \bar{h}_E}{\bar{h}_4 - \bar{h}_{E_s}}, e_E = \sum_i^M y_{E,i} \cdot e_{E,i}, \bar{h}_E = \\ \bar{h}_E(T_E, A_E), W_T &= n_o \cdot (\bar{h}_4 - \bar{h}_E). \end{aligned}$$

### Rendimento térmico

$$\eta = \frac{W_T - W_C}{PCI}.$$