

## APLICAÇÃO DE MÉTODOS ADAPTATIVOS PARA A SIMULAÇÃO DE PROCESSOS DE COMBUSTÃO

**Paulo Brito\*, Luísa Durães\*, José Andrade de Campos\*\*, António Portugal\***

\* Departamento de Engenharia Química  
Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra  
Pólo II - Pinhal de Marrocos, 3030-290 COIMBRA  
e-mail: brito@eq.uc.pt

\*\* Departamento de Engenharia Mecânica  
Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra  
Pólo II - Pinhal de Marrocos, 3030-201 COIMBRA

**Palavras-chave:** Métodos Adaptativos, Refinamento de Malha, Combustão, Reacção da termite  $Fe_2O_3/Al$ .

**Resumo.** *Muitos dos modelos que envolvem combustão, nomeadamente da reacção da termite  $Fe_2O_3/Al$ , inserem-se numa classe de problemas cuja solução consiste na propagação de frentes abruptas de reacção exotérmica com dinâmica altamente não linear. Por outro lado, verifica-se a ocorrência de problemas de instabilidade (pulsção da frente, formação de modos de propagação rotacionais, etc), quando o valor de alguns parâmetros ultrapassa valores críticos. Dadas as condições extremas a que ocorrem as referidas reacções e à grande incerteza associada à estimativa de parâmetros importantes, esta classe de modelos constitui-se como um caso de estudo interessante para o teste de uma grande variedade de métodos numéricos adaptativos de integração (para geometrias uni- e multidimensionais). Deste modo, no presente trabalho aplica-se um método de adaptação de malha para a resolução de um modelo unidimensional que descreve o processo de combustão do sistema  $Fe_2O_3/Al$ . Conclui-se que o termo reactivo não se revela suficiente para auto-sustentar a propagação da frente, verificando-se um fenómeno de abrandamento e aceleração sucessivos, determinado pela competição entre as influências da condução de calor induzida pela condição fronteira e do calor libertado pela reacção. Conclui-se também ser necessária a análise mais aprofundada dos parâmetros e considerações do modelo e dos parâmetros numéricos, para uma descrição física mais consentânea com as características destes fenómenos. Pretende-se ainda futuramente estender o presente estudo a modelos de geometria radial bidimensionais, utilizando o método descrito e outros mais complexos – adaptação dinâmica e wavelets.*

## 1. INTRODUÇÃO

As reacções auto-propagadas de elevada temperatura nomeadamente, termites, intermetálicas ou oxidação de metais, assumem características de uma combustão. Em geral, estes processos são caracterizados pela sua elevada exotermicidade, conduzindo a temperaturas muito elevadas na zona de reacção e conseqüentemente dos reagentes e produtos envolvidos. Por esta razão, a reacção em sistemas deste tipo auto-propaga-se, gerando uma frente móvel de reacção: a energia libertada na conversão de reagentes a produtos numa dada região do sistema é suficiente para assegurar a iniciação dos reagentes na sua vizinhança (reacção auto-sustentada).

Nestes processos podem distinguir-se três etapas principais (vd. figura 1):

- iniciação;
- propagação da frente que separa os reagentes dos produtos incandescentes;
- arrefecimento dos produtos da combustão.

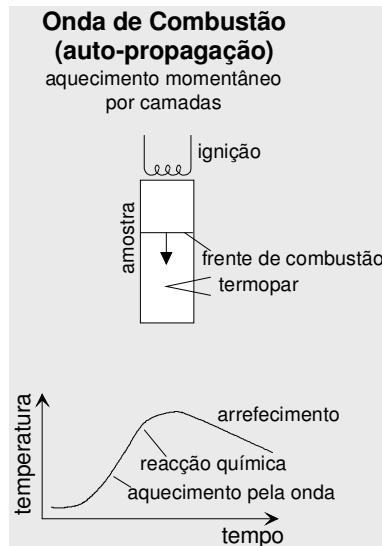


Figura 1. Termograma típico obtido em processos de combustão no modo de auto-propagação (adaptado de [1]).

Na fase de auto-propagação, a frente de combustão desloca-se com velocidade elevada, embora em regime subsónico. No entanto, a sua estabilidade e velocidade dependem de muitos parâmetros [2], nomeadamente: o tamanho e forma das partículas dos reagentes; a proporção dos constituintes das misturas reagentes; o grau de mistura e compactação das misturas reagentes; a geometria do sistema; a energia de ignição; a geração de calor pela reacção e velocidades de aquecimento e de arrefecimento (o balanço de calor em cada ponto do sistema é função das propriedades térmicas dos reagentes, produtos e meio reaccional, do isolamento do sistema e do calor da reacção em causa).

O balanço energético define a temperatura de combustão em cada ponto espacial do sistema ao longo do tempo. Esta é de tal forma elevada que é conveniente considerar a ocorrência de fusão (*liquid flame*) e mesmo gasificação dos reagentes e produtos.

A tabela 1 apresenta valores típicos para algumas propriedades frequentemente medidas em reacções auto-propagadas de elevada temperatura.

Velocidade de propagação	0,1 – 20 cm s <sup>-1</sup>
Temperatura de combustão	2300 – 3800 K
Velocidade de aquecimento	103 – 106 K s <sup>-1</sup>
Fluxo de energia associado à ignição	10 – 200 cal cm <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup>
Tempo de indução para a ignição	0,2 – 1,2 s
Temperatura de ignição	800 – 1200 K

Tabela 1. Valores típicos para as grandezas frequentemente medidas em reacções auto-propagadas de elevada temperatura (adaptada de [1]).

A compreensão da cinética e mecanismo das reacções auto-propagadas e da subsequente formação de estruturas é difícil, mesmo para sistemas com apenas dois elementos, devido aos aspectos específicos destes processos. Para além das condições extremas de temperatura em que este tipo de fenómeno ocorre há que tomar em linha de conta as transformações térmicas e químicas que são rápidas e complexas. Fenómenos como a fusão dos reagentes e sua difusão (transferência de massa) na mistura reaccional, a formação de fases intermédias relacionadas com processos de nucleação e crescimento de grãos são determinantes para a compreensão do sistema em estudo. Para uma análise fundamentada é necessário recorrer a técnicas experimentais muito específicas, o que torna a investigação a este nível num desafio. Este facto impulsiona o desenvolvimento científico ao nível da modelação dos processos de combustão tendo aparecido já diversos trabalhos nesta área [3-6].

Os trabalhos de modelação deste tipo de processos podem basear-se em estratégias muito variadas de aproximação matemática do sistema. Assim, os modelos deduzidos podem diferir entre si em diversos aspectos, tais como [7-12]: a geometria do meio de propagação (cilíndrica, anelar, rectangular); a direcção preferencial de propagação (axial, radial, etc; ou horizontal, vertical, etc); o número de dimensões espaciais (uni-, bi- e tridimensional); o regime (quasi-estacionário ou transiente); e as considerações básicas do modelo (movimentação de componentes, mudanças de fase, existência de gases ou de partículas no meio reaccional, etc). Para além disso os estudos podem debruçar-se sobre as características de soluções analíticas (de modelos necessariamente muito simplificados), ou de soluções numéricas (através da aplicação de métodos numéricos de integração, frequentemente de carácter adaptativo). Outro campo de estudos muito divulgado concentra-se na análise dos diversos modos de propagação da frente térmica (pulsação, rotação, etc), e na detecção de fenómenos de instabilidade nessa mesma propagação [7-9,12].

No presente trabalho aplica-se um método de adaptação de malha para a resolução de um modelo unidimensional que descreve o processo de combustão do sistema Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Al.

## 2. MODELO MATEMÁTICO

Considera-se o sistema geral do tipo termite que se segue e um regime de propagação horizontal:



onde A é um metal redutor, B é o óxido do metal C, D é o óxido de A e  $v_A$ ,  $v_B$ ,  $v_C$  e  $v_D$  são os coeficientes estequiométricos mássicos. Assume-se que a mistura heterogénea inicial de reagentes forma uma matriz porosa sólida que é destruída a temperaturas superiores a  $T_m$ . A partir desta temperatura um dos reagentes (A) funde e todo o gás que possa estar aprisionado na matriz sólida se liberta. Por outro lado, a reacção apenas

ocorre a temperaturas superiores a  $T_R$ .

Para deduzir as equações do modelo, parte-se da equação geral da continuidade,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{quantidade de extensidade} \\ \text{que se acumula em } dV \text{ por} \\ \text{unidade de tempo} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{quantidade de extensidade} \\ \text{que entra em } dV \text{ por unidade} \\ \text{de tempo} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{quantidade de extensidade} \\ \text{que sai de } dV \text{ por unidade} \\ \text{de tempo} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{quantidade de extensidade} \\ \text{que se forma em } dV \text{ por} \\ \text{unidade de tempo} \end{array} \right\}$$

aplicada a um elemento de volume  $dV$  genérico. Considerando que:  $dV$  consiste numa secção do provete de comprimento  $dx$ , com uma área de secção recta constante; os reagentes e os produtos não se movimentam; a transferência de calor ocorre apenas por condução; e o termo de consumo ou de formação de componentes ou de energia é definido pela equação cinética, obtêm-se os balanços mássicos e energético que constituem o modelo matemático diferencial:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = -v_A W \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho_B}{\partial t} = -v_B W \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho_C}{\partial t} = +v_C W \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho_D}{\partial t} = +v_D W \quad (5)$$

$$c(\rho_A + \rho_B + \rho_C + \rho_D) \frac{\partial T}{\partial t} = \chi \Delta T + v_B Q W . \quad (6)$$

Na verdade a resolução deste modelo seria equivalente à integração de um sistema de duas equações diferenciais referentes ao balanço mássico parcial a um dos componentes e ao balanço energético, já que as massas volúmicas dos restantes componentes do sistema podiam ser calculadas através das relações estequiométricas entre eles. Outra alternativa seria deduzir o balanço mássico em relação à conversão da reacção. Optou-se por calcular simultaneamente a evolução temporal das concentrações de todos os componentes, utilizando como referência o composto A. Admite-se uma cinética de *Arrhenius* de primeira ordem:

$$W = kH(T - T_R) e^{-E/RT} \rho_A \quad (7)$$

onde  $H$  corresponde à função de *Heaviside*. A introdução desta função garante que a reacção só ocorre a partir de uma temperatura  $T_R$  pré-definida. A capacidade calorífica da mistura é calculada por,

$$c = c_0 + \rho_A L \delta(T - T_m) \quad (8)$$

em que  $\delta$  é a função delta de *Dirac* que quantifica a influência da fusão do reagente A à temperatura  $T_m$ . O termo de condução térmica é definido por

$$\Delta T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (9)$$

para uma propagação axial e,

$$\Delta T = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (10)$$

para um regime de propagação de chama radial.

O modelo inicial é normalizado considerando-se as variáveis adimensionais seguintes:

$$\rho_A^* = \frac{\rho_A}{\rho_A^0}; \rho_B^* = \frac{\rho_B}{\rho_B^0}; \rho_C^* = \frac{\rho_C}{\rho_C^0}; \rho_D^* = \frac{\rho_D}{\rho_D^0}; T^* = \frac{T}{T_R} \quad (11)$$

e

$$x^* = \frac{x}{X}; t^* = \frac{t}{\tau} \quad (12)$$

obtendo-se:

$$\frac{\rho_A^0}{\tau} \frac{\partial \rho_A^*}{\partial t^*} = -v_A W \quad (13)$$

$$\frac{\rho_B^0}{\tau} \frac{\partial \rho_B^*}{\partial t^*} = -v_B W \quad (14)$$

$$\frac{\rho_C^0}{\tau} \frac{\partial \rho_C^*}{\partial t^*} = +v_C W \quad (15)$$

$$\frac{\rho_D^0}{\tau} \frac{\partial \rho_D^*}{\partial t^*} = +v_D W \quad (16)$$

$$\frac{c}{c_0} (\rho_A^0 \rho_A^* + \rho_B^0 \rho_B^* + \rho_C^0 \rho_C^* + \rho_D^0 \rho_D^*) \frac{T_R}{\tau} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \frac{\chi}{c_0} \frac{T_R}{X^2} \Delta T + v_B \frac{Q}{c_0} W \quad (17)$$

com as condições iniciais:

$$t^* = 0 \Rightarrow \rho_A^* = m_A^i; \rho_B^* = m_B^i; \rho_C^* = 0; \rho_D^* = 0; T^* = \frac{T^i}{T_R} \quad (18)$$

e as condições fronteira,

$$\begin{aligned} x^* = 0 &\Rightarrow T = T_{\text{ignição}} \\ x^* = L &\Rightarrow \frac{\partial T^*}{\partial x^*} = 0 \end{aligned} \quad (19)$$

### 3. MÉTODO DE RESOLUÇÃO

O modelo matemático apresentado é resolvido através de um método numérico adaptativo baseado no refinamento sucessivo de uma malha inicial unidimensional não uniforme (*Grid Refinement Method* – GRM). O algoritmo geral do método aplicado é descrito de forma mais pormenorizada em [13-14] e é resumido na figura 2.

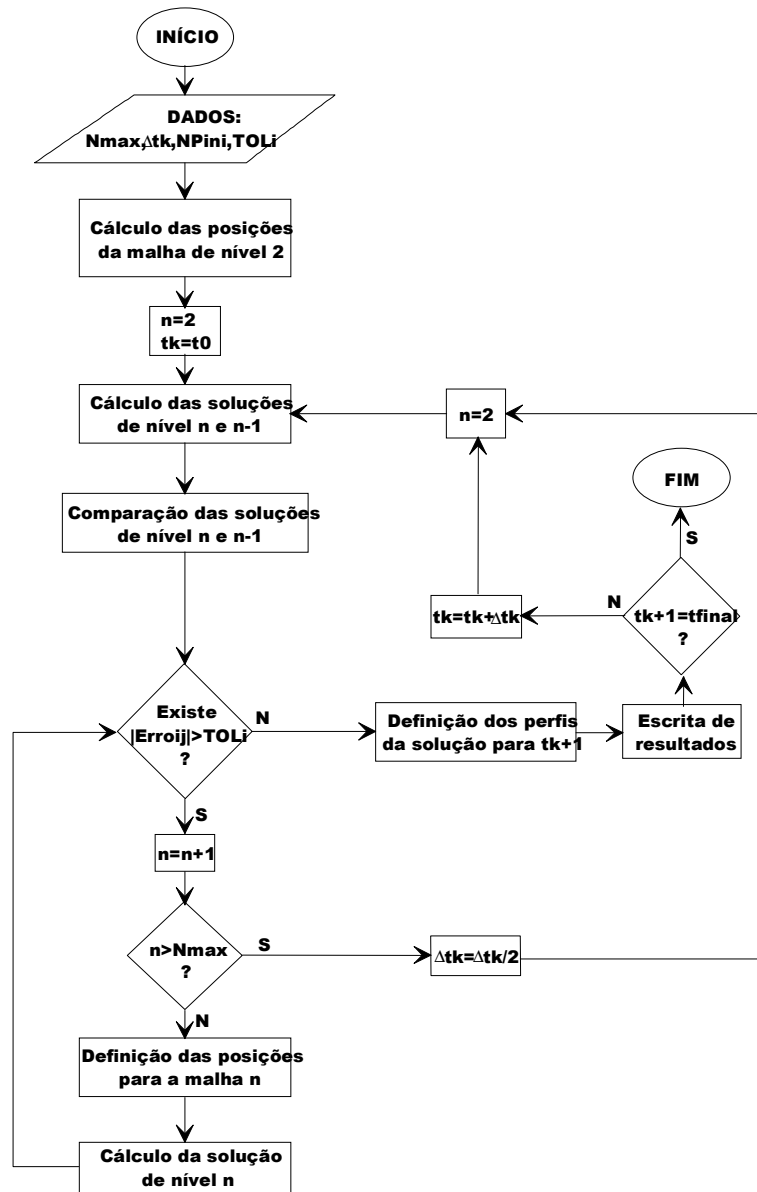


Figura 2. Fluxograma do algoritmo de refinamento sucessivo (GRM) [14].

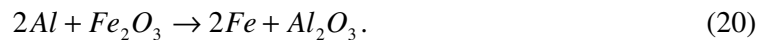
O algoritmo adaptativo é executado em subproblemas gerados por um procedimento de selecção de submalhas de refinamento. Esta selecção é executada através da comparação da solução obtida sobre duas malhas: uma malha larga (nível 1) e uma malha fina (nível 2), construída pela bissecção dos intervalos da malha de nível anterior. Os nodos que não verificam o critério do erro são agrupados em submalhas sobre as quais os subproblemas adaptativos são gerados e integrados. Em cada malha, as derivadas espaciais são aproximadas por diferenças finitas não uniformes e a integração temporal é efectuada com recurso ao integrador numérico DDASSL [15]. A estimativa do erro em cada ponto de discretização é calculada pelo valor absoluto da diferença entre os valores de solução obtidos pela integração temporal (para um passo temporal constante) nas duas malhas de nível consecutivo. Os perfis totais das variáveis nas submalhas são completados por interpolação dos valores conhecidos.

No caso do GRM, o procedimento de selecção de submalhas é repetido sucessivamente até que o critério do erro seja verificado por todos os nodos de todas as malhas ou se atinja um nível de refinamento máximo pré-definido. Neste último caso, o procedimento é repetido com um passo temporal mais reduzido. Geram-se subproblemas diferenciais em malhas sucessivamente mais finas, cuja integração temporal é repetida e o algoritmo apenas ultrapassa um determinado nível temporal quando todos os nodos verificam o critério de convergência. Em cada subproblema introduzem-se, nas extremidades interiores do problema original, condições fronteira artificiais de *Dirichlet*, fixando-se o valor para o qual tenha ocorrido convergência no nodo fronteira, na resolução de subproblemas de nível inferior. Este procedimento é muito simples e impede a ocorrência de descontinuidades entre perfis de solução de nível diferente. No entanto, pode contribuir para a introdução de erros significativos nalguns problemas específicos.

## 4. APRESENTAÇÃO E DISCUSSÃO DE RESULTADOS

### 4.1. Condições da simulação

De forma a testar o modelo, considerou-se o sistema reaccional seguinte, designado por termite:



É necessário notar que em (20) os coeficientes apresentados correspondem a coeficientes estequiométricos molares.

Os valores para os parâmetros do modelo estão resumidos na tabela 1.

$\rho_A^0 = 2,7 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$	$\nu_A = 1,000$
$\rho_B^0 = 5,25 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$	$\nu_B = 2,959$
$\rho_C^0 = 7,87 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$	$\nu_C = 2,070$
$\rho_D^0 = 3,97 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$	$\nu_D = 1,889$
$R = 2,0 \text{ cal/(mol.K)}$	$k = 2 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$
$E = 50000 \text{ cal/mol}$	$Q/c_0 = 3500 \text{ K}$
$\chi/c_0 = 0,1 \text{ kg/(m.s)}$	$L/c_0 = 1300 \text{ K}$
$T_m = 1000 \text{ K}$	$T_R = 1500 \text{ K}$
$m_A^i = 0,35$	$m_B^i = 0,65$
$T^i = 300 \text{ K}$	$X = 2,5 \text{ cm}$
$\tau = 40 \times 10^{-2} \text{ s}$	$T_{\text{ignição}} = 3800 \text{ K}$

Tabela 2. Parâmetros para a simulação.

Os valores dos parâmetros da tabela 2 são na sua generalidade baseados nos dados propostos em [11].

### 4.2. Discussão de resultados

Nas figuras 3-6 são apresentados os resultados obtidos para a simulação do modelo normalizado em estudo, utilizando os seguintes valores para os parâmetros numéricos:  $tol$  (integrador temporal) =  $1 \times 10^{-6}$ ;  $passo\ temporal$  = 0,05;  $tol$  (algoritmo adaptativo) =  $1 \times 10^{-2}$  para todas as variáveis;  $nível\ máximo\ de\ refinamento$  = 8. Usou-se como malha de nível 1 uma grelha uniforme com 21 pontos, interpolações lineares e discretizações espaciais centradas com 5 pontos.

Com base nos perfis obtidos para as concentrações mássicas de reagentes e produtos

(vd. figuras 3-4) verificou-se a existência de coerência nos resultados no posicionamento e na forma das frentes ao longo do tempo. Para além disso, como os valores das concentrações após o consumo total do reagente A (reagente limitante) obedecem à estequiometria considerada para a reacção, a confiança nos resultados é reforçada.

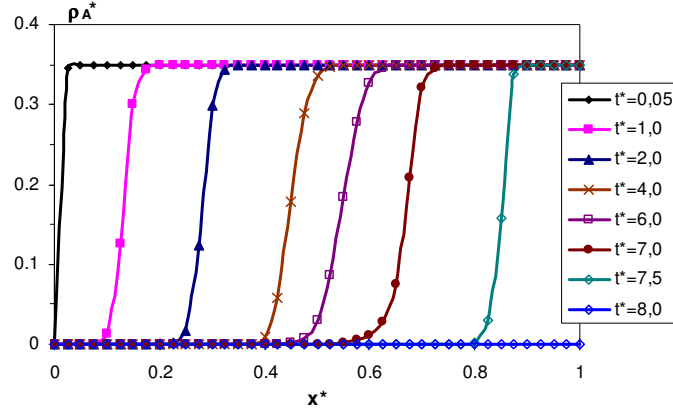


Figura 3. Perfis de concentração mássica normalizada de A ( $X = 2,5$  cm,  $\tau = 40 \times 10^2$  s).

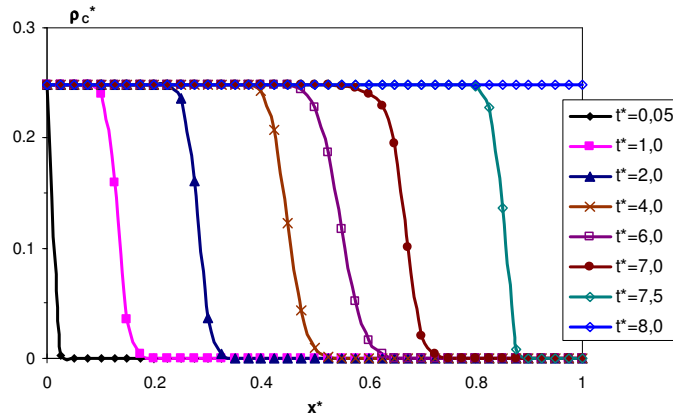


Figura 4. Perfis de concentração mássica normalizada de C ( $X = 2,5$  cm,  $\tau = 40 \times 10^2$  s).

No que diz respeito à dinâmica de propagação da frente de reacção, existe competição entre as influências da condução de calor e do calor libertado pela reacção (induzidas pela perturbação inicial em degrau introduzida em  $x^* = 0$ ). Pode-se concluir que no início o termo reactivo domina a dinâmica da frente, mas não se revela suficiente para auto-sustentar a propagação da frente. Assim, esta propaga-se com uma velocidade aparentemente constante até cerca de  $t^* = 2,0$  (vd. figura 3), abrandando até que o efeito de condução de calor a partir da fronteira se faça sentir (fenómeno mais lento). Quando a acumulação de calor no sistema é suficiente para que a temperatura na frente ultrapasse a temperatura de reacção (vd. figura 5), observa-se uma segunda iniciação da reacção. Assim, a partir de  $t^* \approx 6,0$  (vd. figura 3) constata-se a aceleração da referida frente até ser consumida a totalidade do reagente A existente no domínio espacial considerado. Por outro lado, a condição fronteira admitida em  $x^* = 1,0$  também condiciona o perfil de temperatura quando a onda se aproxima desta posição. A análise da evolução dos perfis de refinamento (vd. figura 6) é consistente com as observações

anteriormente referidas. Verifica-se que as regiões de maior refinamento coincidem com as posições da frente em cada instante de tempo, quando a velocidade de propagação desta é apreciável. Por outro lado, no período de abrandamento da onda, constata-se a completa inexistência de refinamento.

O efeito das iniciações sucessivas poderá ser melhor observado considerando uma escala espacial mais alargada. Nesse sentido, optou-se por simular o processo utilizando  $X = 25$  cm.

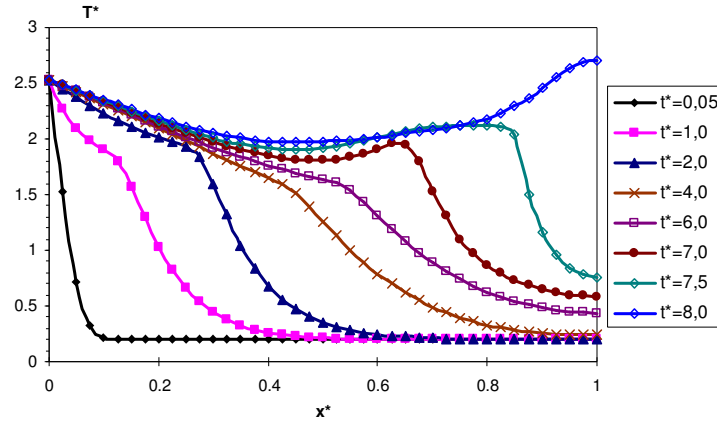


Figura 5. Perfis de temperatura normalizada ( $X = 2,5$  cm,  $\tau = 40 \times 10^{-2}$  s).

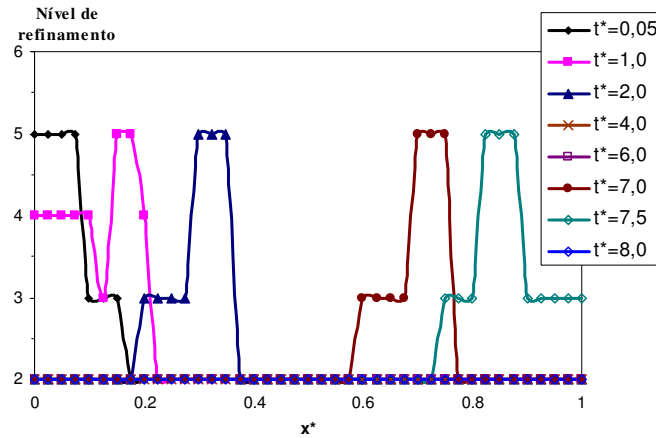


Figura 6. Perfis de refinamento de malha ( $X = 2,5$  cm,  $\tau = 40 \times 10^{-2}$  s).

Nas figuras 7-9 são apresentados os resultados para o caso da simulação em que  $X = 25$  cm e  $\tau = 40$  s, na qual se utilizam os mesmos valores para os parâmetros numéricos, com excepção do *passo temporal* = 0,01. Observa-se o mesmo efeito de abrandamento e aceleração da simulação anterior. No entanto, a posição do primeiro abrandamento não é coincidente com o verificado no caso anterior; além disso, a frente de propagação chega mesmo a parar entre  $t^* = 0,10$  e  $t^* = 2,10$  (que corresponde a cerca de minuto e meio). Não é claro se estas discrepâncias se devem a factores numéricos e/ou à influência da condição fronteira. Contudo, as considerações feitas na simulação anterior, relativamente à descrição física dos fenómenos observados, aparentam ser válidas igualmente no caso presente. A análise dos perfis de refinamento permite observar um comportamento semelhante ao constatado no caso anterior. No entanto, é possível

verificar que, quando é necessário, ou seja, nos períodos em que a velocidade de deslocamento da frente é maior, o esforço de refinamento é consideravelmente superior.

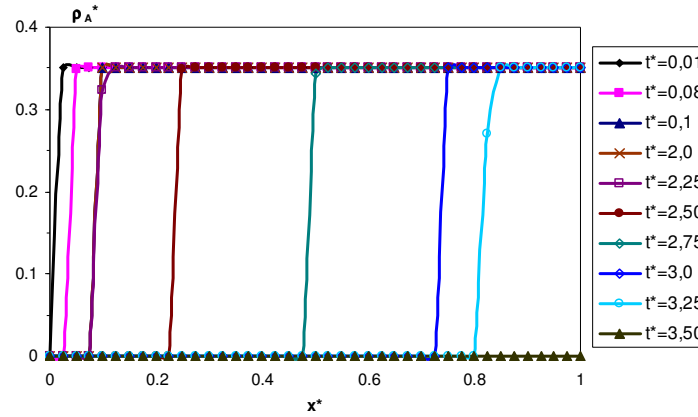


Figura 7. Perfis de concentração mássica normalizada de A ( $X = 25$  cm,  $\tau = 40$  s).

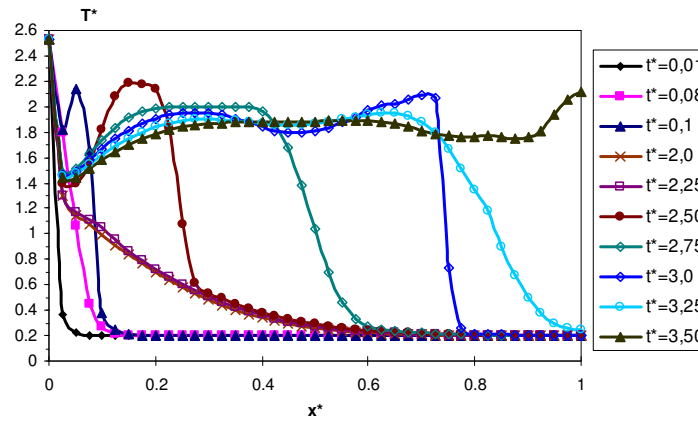


Figura 8. Perfis de temperatura normalizada ( $X = 25$  cm,  $\tau = 40$  s).

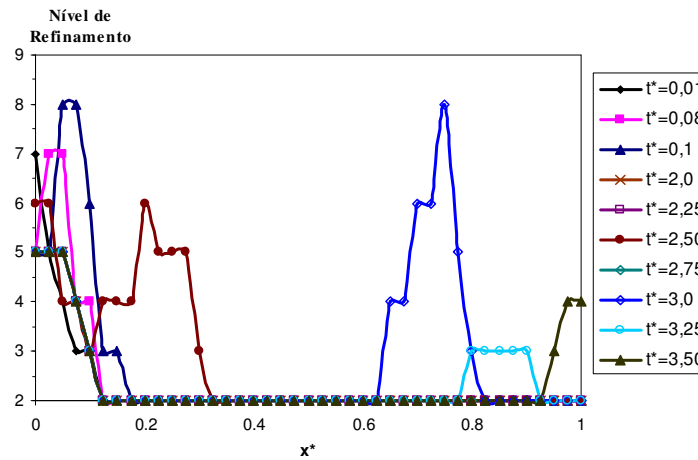


Figura 9. Perfis de refinamento de malha ( $X = 25$  cm,  $\tau = 40$  s).

Nas regiões onde a frente de propagação tem velocidade aproximadamente constante,

esta assume valores entre 0,5-1 cm/s, consistentes com os valores típicos presentes na tabela 1 e na literatura [16].

Para confirmar que a reacção não é auto-sustentada com os parâmetros considerados no modelo, simulou-se novamente o problema nas condições da primeira simulação, mas optando por uma perturbação em pulso estreito ( $\Delta t^* = 0,1$ ) para a ignição. Neste caso, não se mantém o nível de energia na fronteira esquerda e consequentemente a influência da condução de calor a partir dessa posição não se faz sentir ao longo do tempo. Assim sendo, a contribuição energética do calor de reacção por si só não é suficiente para manter a propagação e a frente extingue-se, confirmando o que foi referido (vd. figuras 10-11).

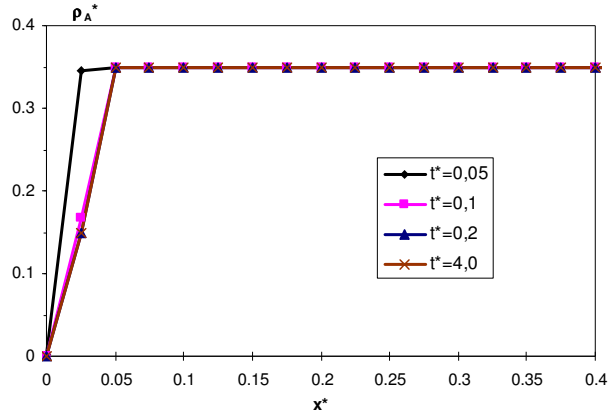


Figura 10. Perfis de concentração mássica normalizada de A ( $X = 2,5$  cm,  $\tau = 40 \times 10^{-2}$  s, perturbação em pulso).

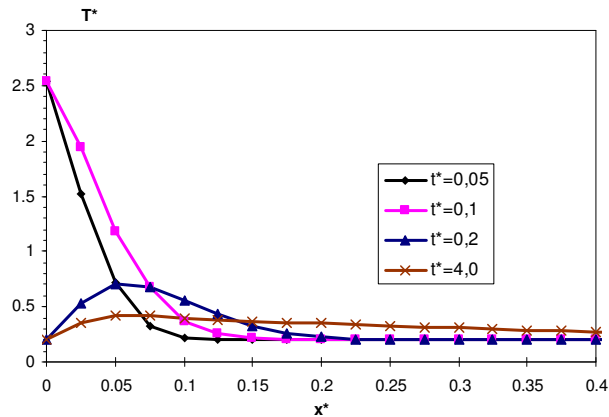


Figura 11. Perfis de temperatura normalizada de A ( $X = 2,5$  cm,  $\tau = 40 \times 10^{-2}$  s, perturbação em pulso).

No futuro será necessário rever os valores dos parâmetros, já que se revelaram pouco adequados para possibilitarem a descrição física deste tipo de fenómenos.

### 4.3. Motivações para trabalho futuro

A medida experimental da velocidade da frente de combustão para as misturas  $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{Al}$  é realizada em caixas circulares de aço inox (diâmetro: 50 mm; altura: 10 mm) com tampa interna em PMMA. Os perfis radiais de propagação da frente de combustão

podem ser observados através de vídeo-crono-fotografia digital, como se exemplifica na figura 12. Obtêm-se também termogramas do processo de combustão, utilizando termopares do tipo C (W-Rh). Observa-se a ocorrência de irregularidades e *hot-spots* nos perfis de propagação da frente de combustão que só serão satisfatoriamente previstos recorrendo a modelos multi-dimensionais. De forma a atingir este objectivo, pretende-se estender o presente estudo a modelos de geometria radial bidimensionais, utilizando o método descrito anteriormente, para além de outros mais complexos (adaptação dinâmica e *wavelets*).

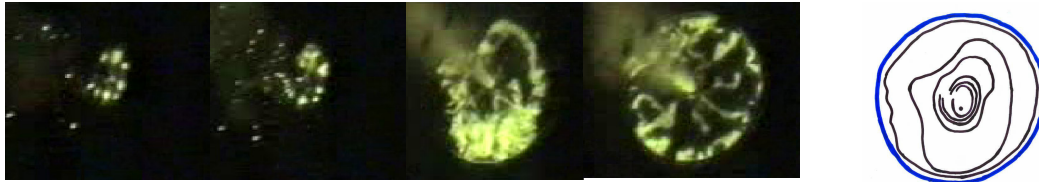


Figura 12. Vista de topo da propagação da frente de combustão em geometria radial para uma mistura estequiométrica  $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{Al}$ . À direita, os perfis de propagação da frente de combustão correspondentes (intervalo de amostragem – 0,04 s).

## 5. CONCLUSÕES

Conclui-se que a dinâmica de propagação da frente de reacção é determinada pela competição entre as influências da condução de calor e do calor libertado pela reacção. O termo reactivo não se revela suficiente para auto-sustentar a propagação da frente, verificando-se um efeito de abrandamento em dadas regiões do espaço, até que o efeito de condução de calor a partir da fronteira se faça sentir. Posteriormente, quando a acumulação de calor no sistema é suficiente para que a temperatura na frente estagnada ultrapasse a temperatura de reacção, observa-se uma nova iniciação da reacção nessa posição. Portanto, conclui-se ser necessária a revisão dos valores dos parâmetros do modelo para possibilitar uma descrição física mais consentânea com as características destes fenómenos. Os resultados podem ainda ser influenciados por factores numéricos e/ou considerações específicas do modelo, que terão de ser analisados futuramente.

## 6. NOMENCLATURA

- $c$  – capacidade calorífica [ $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ];
- $E$  – energia de activação [ $\text{cal}/\text{mol}$ ];
- $k$  – factor pré-exponencial [ $\text{s}^{-1}$ ];
- $L$  – calor latente de fusão de A [ $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$ ];
- $m_A$  – fracção volumétrica de metais [-];
- $m_B$  – fracção volumétrica de óxidos [-];
- $Q$  – calor libertado na combustão por unidade mássica de B [ $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$ ];
- $R$  – constante dos gases ideais [ $\text{cal}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ];
- $t$  – tempo [s];
- $T$  – temperatura [K];
- $W$  – velocidade de reacção [ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ ];
- $x$  – coordenada espacial [m];
- $X$  – comprimento total do provete na direcção de propagação [m].

*Caracteres gregos*

$\chi$  – condutividade térmica da mistura [-];  
 $\nu$  – coeficiente estequiométrico mássico relativo [-];  
 $\rho$  – massa volúmica aparente [ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ];  
 $\rho^0$  – massa volúmica efectiva [ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ];  
 $\tau$  – tempo final [s].

*Índices*

A – referente ao composto A;  
B – referente ao composto B;  
C – referente ao composto C;  
D – referente ao composto D;  
i – inicial;  
m – fusão;  
R – reacção;  
\* – normalizado.

**REFERÊNCIAS**

- [1] A.G. Merzhanov, A.E. Sytshev, *About self-Propagating high-temperature synthesis*, in <http://www.ism.ac.ru> (2001).
- [2] J.J. Moore, H.J. Feng, Combustion synthesis of advanced materials: Part I. Reaction parameters, *Progress in Materials Science*, **39**, 243-273 (1995).
- [3] J.J. Moore, H.J. Feng, Combustion synthesis of advanced materials: Part II. Classification, applications and modelling, *Progress in Materials Science*, **39**, 275-316 (1995).
- [4] A.G. Merzhanov, Structural aspects of the flame propagation theory, *Pure & Appl. Chem.*, **62** (5), 861-875 (1990).
- [5] B.V. Norozhilov, Non-linear SHS phenomena: experiment, theory, numerical modeling, *Pure & Appl. Chem.*, **64** (7), 955-964 (1992).
- [6] A. Makino, Fundamental aspects of the heterogeneous flame in the self-propagating high-temperature synthesis (SHS) process, *Prog. Energy & Comb. Sci.*, **27**, 1-74 (2001).
- [7] Vit.A. Volpert, Vl.A. Volpert, S.P. Davtyan, I.N. Megrabova, N.F. Surkov, Two dimensional combustion modes in condensed flow, *SIAM J. Appl. Math.*, **52** (2), 368-383 (1992).
- [8] B.J. Matkowski, V. Volpert, Spiral gasless condensed phase combustion, *SIAM J. Appl. Math.*, **54** (1), 132-146 (1994).
- [9] C.S. Raymond, V.A. Volpert, Stability of uniformly propagating SHS waves in porous solids with melting and flow of reactants, *Chem. Eng. Sci.*, **51** (19), 4443-4462 (1996).
- [10] C.S. Raymond, K.G. Shkadinsky, V.A. Volpert, Gravitational effects on liquid flame thermite systems, *Comb. Sci. & Tech.*, **131**, 107-129 (1998).
- [11] K.G. Shkadinsky, G.V. Shkadinskaya, B.J. Matkowski, Gas-phase influence on quasisteady “liquid flames” in gravitational fields, *Comb. Sci. & Tech.*, **157**, 87-110 (2000).
- [12] T.P. Ivleva, A.G. Merzhanov, Three-dimensional spinning waves in the case of gas-free combustion, *Doklady Phys.*, **45** (4), 136-141 (2000).

- [13] P.M.P. Brito, A.A.T.G. Portugal, Application of adaptive methods based on finite difference discretizations in the simulation of a tubular reactor system, in *ACOMEN'98 – Advanced Computational Methods in Engineering*, Ghent, Bélgica, 697-704 (1998).
- [14] P. Brito, *Aplicação de métodos numéricos adaptativos na integração de sistemas algébrico-diferenciais caracterizados por frentes abruptas*, Tese de Mestrado, DEQ-FCTUC, Coimbra, Portugal (1998).
- [15] L.R. Petzold, *A description of DASSL: a differential/algebraic system solver*, Sandia Tech. Rep. 82-8637 (1982).
- [16] J. Morgado, L. Durães, J. Campos, A. Portugal, Iron oxide/aluminum fast thermite reaction, in *Shock Compression of Condensed Matter-2003*, Furnish, M. (Ed.), of *AIP Conference Proceedings Series*, American Institute of Physics, New York, USA, (2003) (aguarda publicação).