

Modelagem Matemática da Combustão de Misturas Combustíveis em Frente de Chama

V.G. KRIOUKOV, R.L. ISKHACOVA, F.R. BARASUOL, Programa de Pós Graduação em Modelagem Matemática, Universidade de Ijuí, Cx.P. 560, 98700-000 Ijuí, RS, Brasil.

Resumo. O trabalho refere-se à modelagem matemática dos processos em frente de chama pré-misto laminar. Para simulações numéricas aplica-se o modelo térmico da frente desenvolvido em [6], que é correto para pressões altas, e exige, essencialmente, um volume menor de cálculos. Os ensaios numéricos foram realizadas para as misturas: “ $(H_2 + NH_3) + ar$ ”, “ $NH_3 + ar$ ” e “ $(H_2 + NH_3) + ar$ ”. Entre os resultados observam-se as pequenas velocidades da frente e as consideráveis concentrações das substâncias NO_x na saída (para “ $NH_3 + ar$ ”). Observa-se ainda a uniformidade da onda de entalpia no interior da frente e o “entrelaçamento” das linhas da alteração de composição para as condições estequiométricas (para “ $(H_2 + NH_3) + ar$ ”).

1. Introdução

Durante a combustão surge, frequentemente, em instalações energéticas, uma forma particular de combustão chamada “frente de chama”. As suas propriedades, tais como velocidade da frente (V_f), temperatura final (T_s) e distribuição de espécies, influem nas características de trabalho das instalações. Já há dezenas de anos os pesquisadores investigam as propriedades da frente. O presente trabalho é dedicado a este tema e apresenta uma pesquisa teórica da combustão em frente laminar pré-mista que inclui a transferência de calor contra o fluxo (dos produtos de combustão para a mistura), a difusão de substâncias ao longo da frente e o grande número das reações químicas.

O esquema dos processos em frente é apresentado na Figura 1.

Para a sua descrição existem os diferentes modelos matemáticos: completos [1], parciais [2], simplificados [3].

Um modelo completo [1], que considera todos os fenômenos, é representado pelas equações diferenciais ordinárias

$$\frac{d(\rho V)}{dx} = 0 \quad (1.1)$$

$$-\rho V \frac{dr_i}{dx} + \frac{d}{dx} \left(\rho D_{im} \frac{dr_i}{dx} \right) + R_i \mu_i = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (1.2)$$

$$-c_p \rho V \frac{dT}{dx} + \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - \sum R_i \mu_i h_i = 0 \quad (1.3)$$

com as condições de contorno:

$$T = T_f \quad r_i = r_{if} \quad i = 1, 2, \dots, n \quad \text{para } x = -\infty$$

$$\frac{dT}{dx} = \frac{dr_i}{dx} = 0 \quad \text{para } x = \infty, \quad (1.4)$$

onde ρ é a densidade média, V é a velocidade, D_{im} é o coeficiente de difusão da i -ésima espécie dentro do meio reagente, R_i é a velocidade de alteração da combustão da i -ésima espécie no andamento das reações químicas, μ_i , h_i , r_i são, respectivamente, a massa molecular, a entalpia e a fração molar da i -ésima espécie, c_p é o calor específico médio, λ é a condutibilidade térmica média, T é a temperatura e f é o índice de condições iniciais.

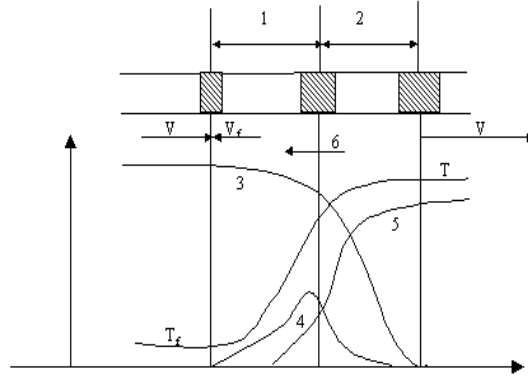


Figura 1: Esquema do Processo de combustão em frente de chama. 1-zona de aquecimento; 2-zona de reações; 3-reagentes; 4- substâncias intermediárias; 5- produtos de combustão; 6-transferência de calor e difusão

O algoritmo tradicional destinado a resolver este problema de contorno é volumoso, e usa a seguinte abordagem:

1. Às equações (1.1), (1.2), (1.3) acrescentam-se termos transientes

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho V)}{\partial x} = 0 \quad (1.5)$$

$$\rho \frac{\partial r_i}{\partial t} - \rho V \frac{\partial r_i}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{im} \frac{\partial r_i}{\partial x} \right) + R_i \mu_i = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (1.6)$$

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - c_p \rho V \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \sum R_i \mu_i h_i = 0 \quad (1.7)$$

2. Limitando o intervalo de integração a $-L \leq x \leq L$, escolhe-se uma malha não uniforme, por exemplo com 200 “camadinhas”: (Δx_k) , $k = 1, \dots, 200$. O valor L , que corresponde à metade da espessura da frente δ , é determinado

por modelos simplificados do tipo [3] com seu incremento de 20% a 30% para garantir a descrição da alteração das características no interior da frente.

3. As equações (1.5), (1.6), (1.7) são discretizadas na variável x :

$$\frac{d\rho_k}{dt} = -\frac{\rho_{k+1}V_{k+1} - \rho_{k-1}V_{k-1}}{\Delta x_k + \Delta x_{k+1}} \quad (1.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{dr_{ik}}{dt} = \frac{1}{\rho_i} & \left[\frac{\rho V (r_{ik+1} - r_{i,k-1})}{\Delta x_k + \Delta x_{k+1}} - \rho_{k+1} D_{im(k+1)} \frac{(r_{ik+1} - r_{ik})}{\Delta x_k^2} \right] + \\ & + \frac{1}{\rho_i} \left[-\rho_k D_{im(k)} \frac{(r_{ik} - r_{ik-1})}{\Delta x_k^2} + R_{ik} \mu_k \right] \end{aligned} \quad (1.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_k}{dt} = \frac{\rho V}{\rho_k} & \left(\frac{T_{k+1} - T_{k-1}}{\Delta x_k + \Delta x_{k+1}} \right) - \\ - \frac{\lambda_{k+1}(T_{k+1} - T_k) \lambda_k (T_k - T_{k-1})}{\Delta x_k^2} & + \sum_i R_{ik} \mu_i h_{ik} \end{aligned} \quad (1.10)$$

4. Resolve-se o sistema de equações (1.8), (1.9), (1.10) aplicando um método implícito.

Por exemplo, para um meio reagente com 23 espécies necessita-se resolver o sistema acoplado de $200 \cdot (23+2) = 5000$ equações diferenciais ordinárias. As equações de variações das espécies (1.9) são rígidas e exigem a aplicação de métodos implícitos, envolvendo um Jacobiano volumoso [4]. No exemplo, ele inclui $25 \times 25 \times 3 \times 200 \approx 0,36$ milhões de números. A cada 4 ou 5 passos de integração é necessário recalculá-lo, e em cada passo, resolver o sistema de 5000 equações algébricas não lineares. Por isso os problemas de frente de chama se resolvem com a utilização de supercomputadores, do tipo CRAY-1 [5].

2. Modelo Matemático

Com o aumento da pressão (P) observa-se nas equações (1.6) a diminuição da influência dos termos

$$\rho D_{im} \frac{dx_i}{dx}$$

relativamente aos termos restantes, isto porque

$$\rho \sim P; \quad D_{im} \sim 1/P; \quad R_i \sim P^2.$$

Então, para altas pressões, as equações da frente laminar podem ser escritas na forma:

$$\frac{d}{dx} \left(\lambda(x) \frac{dT}{dx} \right) - c_p V_f \rho_f \frac{dT}{dx} - \sum_i R_i h_i \mu_i = 0, \quad (2.1)$$

$$V_f \rho_f \frac{dr_i}{dx} + R_i \mu_i = 0 \quad i = 1 \dots n, \quad (2.2)$$

$$V \rho = V_f \rho_f, \quad (2.3)$$

que se chama “modelo térmico da frente”.

Aplicando a abordagem tradicional ao sistema (2.1), (2.2), (2.3) obtemos o mesmo volume de cálculos que para o sistema (1.1), (1.2), (1.3).

Mas o modelo térmico pode se apresentar sob outra forma, que permite realizar um algoritmo mais rápido e eficaz. Esta nova forma, e o algoritmo de sua resolução, foram apresentados detalhadamente em [6]:

Equação de energia:

$$\lambda \left(\frac{dT}{dx} \right) = \rho_f V_f (h - h_f). \quad (2.4)$$

Equação calorífica:

$$T - T_{ap} - \frac{\sum_i (h \mu_i - H_i^{ap}) \cdot r_i}{\sum_i C_{pi}^{ap} \cdot r_i} = 0. \quad (2.5)$$

Equação da continuidade:

$$\frac{P \mu V}{R_0 T} - \rho_f V_f = 0. \quad (2.6)$$

As equações da cinética química são utilizadas em forma exponencial:

$$\frac{d\gamma_i}{dx} = \frac{1}{V} \left(-e^{\gamma_i} \sum_j \nu_{ij} \Omega_j + \sum_q \sum_j \nu_{qj} \Omega_j \right), \quad (2.7)$$

onde $i, p, q = 1 \dots n, \quad j = 1 \dots 2m,$

$$\Omega_j = k_j (P/R_0 T)^{\bar{m}_j} \exp \left(- \sum_p n_{pj} \gamma_p \right), \quad (2.8)$$

$$\bar{m}_j = m_j - 1 + \sum_p n_{pj}, \quad \gamma_i = - \ln r_i, \quad (2.9)$$

$$\nu_{ij} = \nu''_{is} - \nu'_{is}, \quad n_{ij} = \nu'_{is}, \quad j = s, \quad s = 1 \dots m, \quad (2.10)$$

$$\nu_{ij} = \nu'_{is} - \nu''_{is}, \quad n_{ij} = \nu''_{is}, \quad j = s + m, \quad s = 1 \dots m. \quad (2.11)$$

Nestas fórmulas m_j é o índice de participação da partícula catalítica na j -ésima reação, R_0 é a constante universal dos gases, μ é a massa molecular média, T_{ap} é a temperatura de apoio, H_i^{ap} é a entalpia de apoio da i -ésima espécie, C_{pi}^{ap} é o calor específico de apoio da i -ésima espécie, h é a entalpia do meio reagente, n é o número dos tipos de espécies, m é o número de reações elementares inversíveis no mecanismo de reações, ν'_{ij} e ν''_{ij} são os coeficientes estequiométricos da reação elementar

$$\sum_i \nu'_{ij} A_i \Leftrightarrow \sum_i \nu''_{ij} A_i, \quad (2.12)$$

sendo A_i - o símbolo químico da espécie "i".

A condutibilidade térmica (λ) é variável na coordenada "x" e se calcula pelas fórmulas da física molecular dos gases [7]. No sistema (2.4), (2.5), (2.6), (2.7) são incógnitas as variáveis T , h , V , γ_i e o parâmetro V_f . Sob esta forma do modelo térmico, as condições de contorno no limite "quente" (1.4) substituem-se pela igualdade

$$h(x = \infty) = h_f, \quad (2.13)$$

onde h_f é a entalpia no limite "frio" ($x = -\infty$).

Então, o problema de contorno na forma tradicional (1.1), (1.2), (1.3) se transforma num conjunto de problemas iniciais em que a condição (2.13) pode ser satisfeita integrando-se as equações (2.4), (2.5), (2.6), (2.7) para vários valores de V_f aplicando-se, por exemplo, o método de bisseção. Como resultado, o volume total dos cálculos, em comparação com o algoritmo tradicional, é reduzido até mil vezes, e o problema pode ser resolvido num "Pentium".

3. Ensaaios Numéricos

3.1. Comparação com o “Modelo Completo”

A Figura 2 apresenta a variação da velocidade V_f em função da pressão no meio reagente $CH_4 + ar$ ($\alpha_{ox} = 1$, $T_f = 300^\circ K$). Os resultados obtidos pelo nosso aplicativo “FRONT” (modelo térmico) são comparados com os dados [1] (modelo completo). Para pressões $P = 1, \dots, 5 atm$ a diferença entre as velocidades é grande e a influência da difusão é considerável. Mas para $P = 5, \dots, 10 atm$ esta diferença é pequena, o que fundamenta a aplicação do modelo térmico para altas pressões.

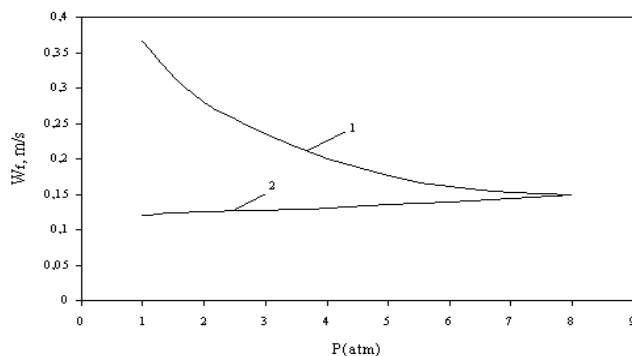
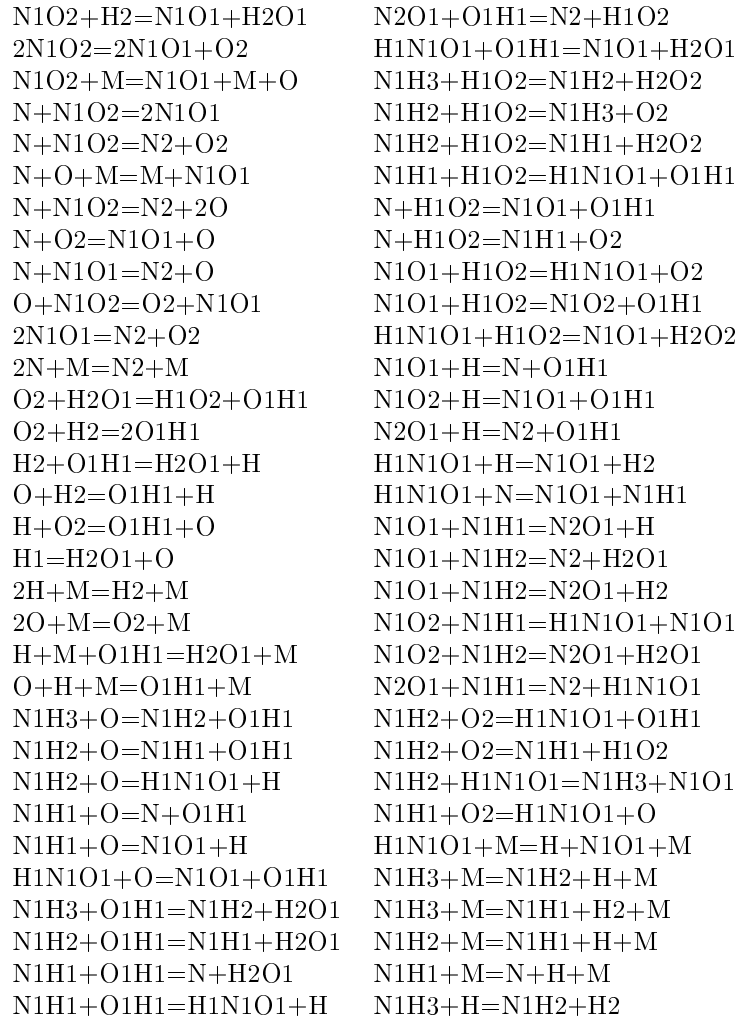


Figura 2: Variação da velocidade da frente de chama (W_f) em função da pressão 1-Modelo completo (Co'ffee et al [1]); 2-Modelo térmico ($CH_4 + ar$)

3.2. Meios reagentes: “ $H_2 + ar$ ” e “ $NH_3 + ar$ ”

O aplicativo “FRONT” é invariante em relação aos meios reagentes e possibilita realizar os cálculos rapidamente. Por isso, foram realizadas muitas simulações numéricas para diferentes meios reagentes. Neste sub-item apresentam-se os resultados dos ensaios para os meios $H_2 + ar$ e $NH_3 + ar$, nas condições $T_f = 300^\circ K$, $P = 5 atm$, $\alpha_{ox} = 0.6, \dots, 1.4$. Usando como base os trabalhos [1] e [5], estabelecemos o seguinte mecanismo das reações:



Note-se que o meio “ $H_2 + ar$ ” é pesquisado detalhadamente em vários trabalhos [1],[8], mas não encontramos na bibliografia investigações sobre o sistema reagente “ $NH_3 + ar$ ”. A Figura 3 apresenta as principais características do processo, V_f , δ_f (espessura da frente), T_s e $\theta = (h_{max} - h_f)/C_p$, em função de α_{ox} , para ambos os meios reagentes. A grandeza θ caracteriza a quantidade máxima de calor transferida, por condução térmica, no interior da frente na direção “x”. Os resultados evidenciam a grande superioridade da velocidade $V_f(H_2)$ sobre $V_f(NH_3)$. As temperaturas dos produtos de combustão na saída da frente (T_s) possuem valores bastante altos e $T_s(H_2) > T_s(NH_3)$ em todo o intervalo de variação de α_{ox} . As espessuras das frentes (δ_f) são grandezas convencionais e habitualmente se determinam como zonas com gradientes consideráveis de temperatura. Sabe-se que a espessura δ_f é aproximadamente proporcional a $1/V_f$. De acordo com esta regra,

temos na Figura 3 que $\delta_f(NH_3) \gg \delta_f(H_2)$. Observa-se também a variação considerável de $\delta_f(NH_3)$ em dependência de α_{ox} . As características $\theta(NH_3)$ e $\theta(H_2)$ são próximas e apresentam pequenas variações no intervalo $\alpha_{ox} = 0.6, \dots, 1.4$.

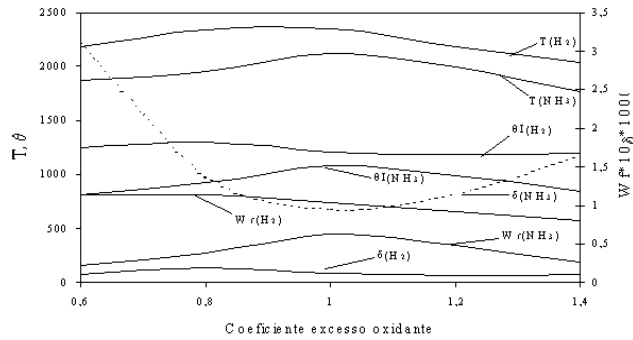


Figura 3: Variação das características principais da frente em função de α_{ox}

A Figura 4 apresenta as variações das concentrações dos reagentes $r_{H_2}(H_2)$, $r_{O_2}(H_2)$, $r_{NH_3}(NH_3)$ e $r_{O_2}(NH_3)$, além da variação das concentrações $r_{H_2O}(H_2)$, $r_{H_2O}(NH_3)$, que são espécies principais nos produtos de combustão, em função da coordenada relativa $\delta^* = x/\delta_f$.

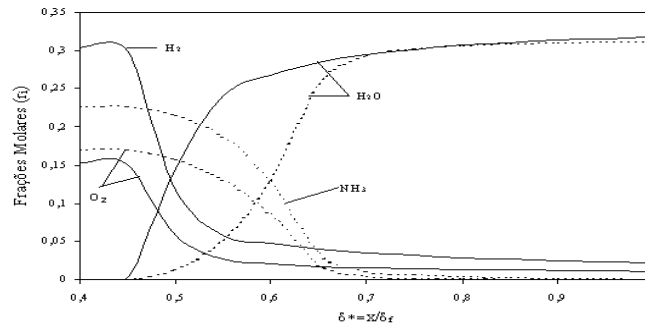


Figura 4: Variação das frações molares dos reagentes e H_2O , em função de δ^* (coordenada relativa) (—) $-H_2 + ar$; (....) $-NH_3 + ar$

A zona de aquecimento estende-se até $\delta^* \approx 0,4$ e a queima dos combustíveis começa quando $\delta^* \approx 0,45$, para ambos os casos. A mistura “ $H_2 + ar$ ” reage mais rápido e, até $\delta^* = 0,55$, sobra no meio somente 5% de H_2 . Mas depois a variação do H_2 ocorre lentamente. A mistura “ $NH_3 + ar$ ” reage lentamente até $\delta^* = 0,55$,

sobrando no meio 20% de NH_3 . Depois a velocidade de combustão aumenta até que $\delta^* = 0,7$ e a espécie NH_3 praticamente desaparece. As linhas de $H_2O(H_2)$ e $H_2O(NH_3)$ refletem estas particularidades da combustão para ambos os meios reagentes.

As Figura 5 e 6 apresentam o comportamento das substâncias intermediárias O , H , OH , NO , NO_2 , NH , NH_2 e HNO no plano $\delta^* \times r_i$.

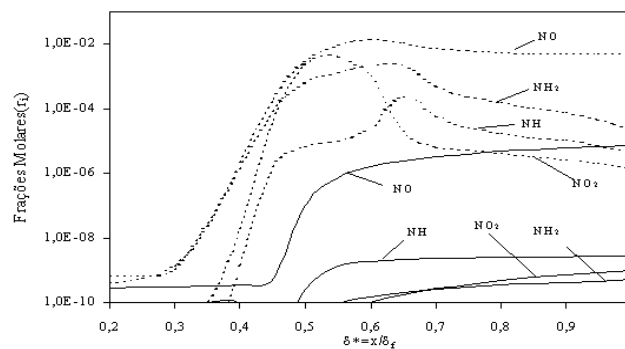


Figura 5: Variação das frações molares das substâncias intermediárias ao longo da frente em função de δ^* (coordenada relativa) (—) - $H_2 + ar$; (....) - $NH_3 + ar$

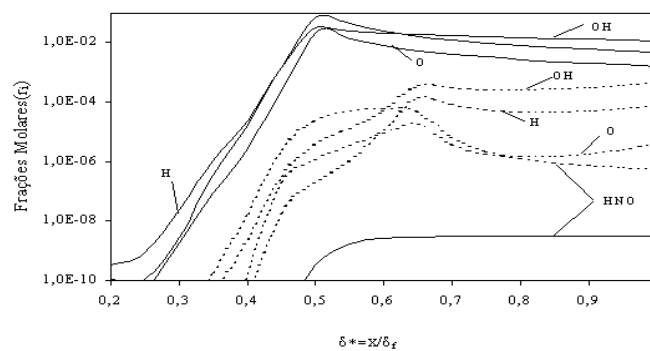


Figura 6: Variação das frações molares dos radicais O , H , OH , HNO em função de δ^* (—) - $H_2 + ar$; (....) - $NH_3 + ar$

Analisando-se estas figuras pode-se observar que

- as concentrações das espécies O , H e OH passam por valores máximos em ambos os meios reagentes, o que confirma o seu papel como substâncias inter-

mediárias (sabe-se que estas substâncias possuem valores superequilibrados no interior da frente);

- as concentrações de O , H e OH são mais elevadas, e elas aparecem antes no meio “ $H_2 + ar$ ” do que no meio “ $NH_3 + ar$ ” (esta propriedade é a causa da combustão ser mais rápida no meio “ $H_2 + ar$ ”);
- os níveis das concentrações de NH , NH_2 , NO , NO_2 e HNO são mais elevados e atingem máximos no meio “ $NH_3 + ar$ ”, ressaltando o papel principal destas substâncias na queima do amoníaco;
- no meio “ $H_2 + ar$ ”, as mesmas substâncias do item anterior apresentam concentrações baixas e não têm máximos, não influenciando na formação dos produtos de combustão;
- no meio “ $H_2 + ar$ ”, na saída da frente, T_s é alta e a composição final dos produtos de combustão tem que se aproximar do estado de equilíbrio químico, que inclui, não somente H_2O e N_2 ($\alpha_{ox} = 1$), mas também OH , H , O , O_2 e H_2 . Ou seja, H_2 e O_2 não podem se consumir completamente. Por isso, para o meio “ $H_2 + ar$ ”, na saída da frente, conservam-se quantidades (de 1% a 3%) de hidrogênio e de oxigênio;
- no meio “ $NH_3 + ar$ ”, no estado do equilíbrio químico ($\alpha_{ox} = 1$), além das substâncias principais H_2O e N_2 , também estão presentes NO , OH , O e NO_2 , e podem ocorrer H_2 e O_2 em concentrações muito pequenas. Mas, por causa da complexidade da estrutura (4 átomos), a molécula do amoníaco não pode existir. Por isso, no interior da frente, o combustível NH_3 é completamente consumido.

Resumindo, podemos observar as seguintes propriedades da frente de chama no meio “ $NH_3 + ar$ ”:

- a velocidade da combustão (V_f) é pequena;
- juntamente com as substâncias O , H e OH , os radicais NO , NO_2 , NH , NH_2 , HNO desempenham papel principal na combustão;
- as concentrações dos poluentes NO e NO_2 na saída da frente são muito elevadas (até 10000 ppm).

3.3. Meio reagente “[$zH_2 + (1 - z)NH_3$] + ar”

Encontram-se na bibliografia os poucos trabalhos em que se pesquisam as misturas combustíveis (por exemplo [9]) e não encontramos investigações para misturas das substâncias combustíveis com velocidades V_f bastante diferentes entre si. Um exemplo destas substâncias é apresentado acima, quando $V_f(H_2) \approx 1m/s$ e $V_f(NH_3) \approx 0,1m/s$. Abaixo mostram-se os resultados das simulações numéricas para a mistura do tipo “[$z.H_2 + (1 - z)NH_3$] + ar”, com $z = 0,2, \dots, 0,8$, em condições estequiométricas para $T_f = 3000K$ e $P = 5 atm$.

A Figura 7 apresenta as características principais da frente em função de z . Evidencia-se que a velocidade V_f aumenta de forma monótona de 0.1 até 1m/s, à medida que z

aumenta, mas a espessura δ_f possui um caráter contrário, sendo que, para além de $z = 0.6$, não diminui. Observa-se que a temperatura T_s possui um pequeno mínimo para $z = 0.6$ e o valor θ varia pouco com z .

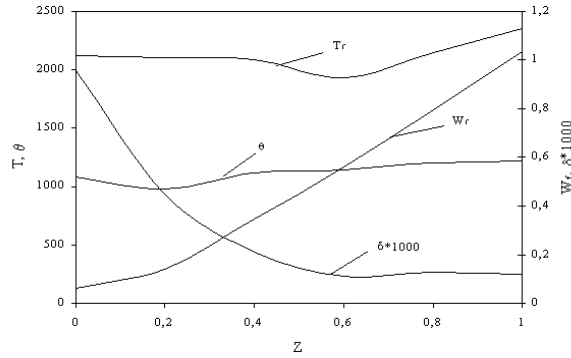


Figura 7: Dependência das características principais da frente em função de z

As variações das substâncias O_2 e H_2O ao longo da frente (em função da coordenada δ^*), para os valores $z = 0.2, 0.4$ e 0.8 , estão apresentadas na Figura 8. No decorrer da combustão o oxigênio reage mais rápido para $z = 0.8$ do que para $z = 0.2$, porque as reações entre O_2 e H_2 são mais intensivas do que entre O_2 e NH_3 . Entre as curvas $H_2O(z = 0.2)$, $H_2O(z = 0.4)$ e $H_2O(z = 0.8)$ observa-se “entrelaçamento” próximo de ($\delta^* = 0.75$), e a geração mais rápida de H_2O para $z = 0.8$.

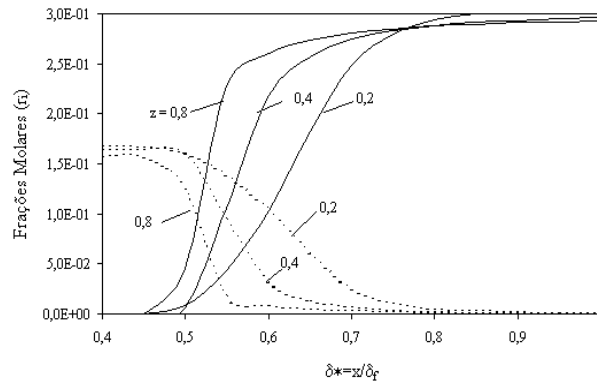


Figura 8: Variação das frações molares das substâncias O_2 e H_2O ao longo da frente para diferentes valores de z .
 (...) - O_2 ; (—) - H_2O

A Figura 9 apresenta a taxa de combustão das substâncias combustíveis H_2 e

NH_3 . As curvas de variação de NH_3 não apresentam “entrelaçamento”, ao contrário das curvas de H_2 . Observa-se que o amoníaco queima completamente no interior da frente, para todos os valores de z . Mas, o hidrogênio, começando a reagir mais rápido, diminui a sua “queda” e, na saída da frente, aparece em concentrações visíveis. A concentração máxima de H_2 na saída ($\sim 5\%$) corresponde a $z = 0.4$. Em condições estequiométricas, esta propriedade é surpreendente. Mas, considerando que uma quantidade de O_2 foi gasta para formar NO_x , este efeito se explica pela falta de oxigênio.

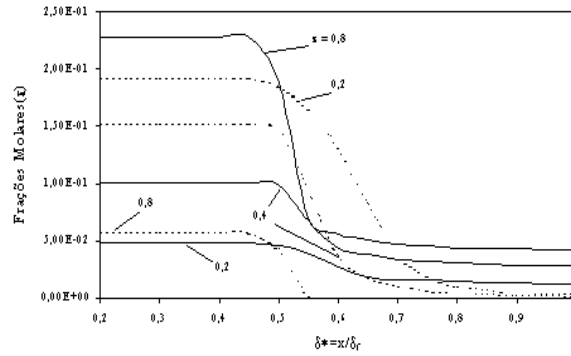


Figura 9: Alteração das substâncias H_2 e NH_3 ao longo da frente. (...) - NH_3 ; (—) - H_2

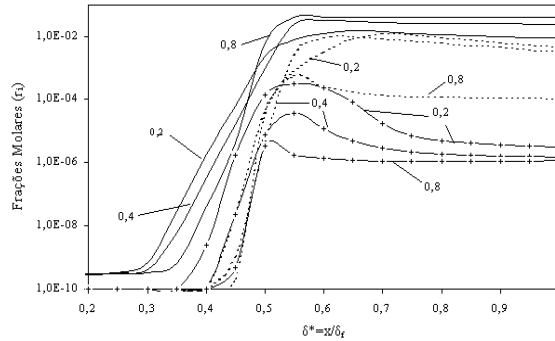


Figura 10: Variação das frações molares das substâncias intermediárias NO , N_2O e NO_2 ao longo da frente. (—) - NO ; (....) - N_2O ; (-+-) - NO_2

A variação das concentrações das substâncias NO , NO_2 e N_2O está apresentada na Figura 10. As concentrações mais elevadas se observam para a espécie NO , até

5%, sendo um componente dos produtos de combustão. Mas as substâncias N_2O e NO_2 desempenham o “papel” de espécies intermediárias e apresentam concentrações máximas dentro da frente. O fenômeno do “entrelaçamento” é observado para todas as três substâncias. Para explicá-lo, observe-se que dois fatores contrapostos influem na formação das substâncias nitrogenadas:

- quanto maior for a concentração de NH_3 (ou seja quanto menor for z) maiores serão as concentrações das substâncias nitrogenadas;
- estas espécies, entretanto, são os radicais que se formam no meio reagente, principalmente, em presença de O, H e do radical OH. Estes últimos são gerados em reações que envolvem O_2 e H_2 (Figura 6). Por isso, o aumento de H_2 (ou seja, o aumento do valor de z) contribui para a formação de NO , N_2O e NO_2 .

No resultado, pela influência desses dois fatores, surge a possibilidade de “entrelaçamento” das linhas de variação das frações molares das substâncias nitrogenadas. O mesmo efeito é observado para as espécies NH , NH_2 e NHO (Figura 11). Também se evidencia que elas passam por valores de super-equilíbrio, e desempenham papéis de substâncias intermediárias.

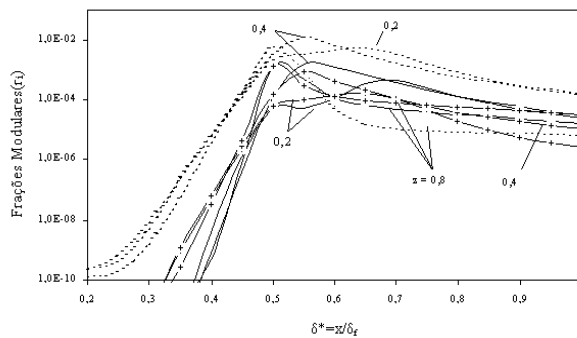


Figura 11: Variação das frações molares das substâncias intermediárias NH , NH_2 e HNO ao longo da frente. (—) - NH ; (...) - H_2 ; (---) - HNO

4. Conclusão

1- O modelo térmico da frente de chama laminar (proposto em [6]) gera resultados corretos para $P > 5 atm$ e, ao mesmo tempo, reduz em aproximadamente 1000 vezes o volume dos cálculos. Como resultado, amplia-se muito o conjunto de meios reagentes a serem pesquisados, incluindo as misturas combustíveis.

2- Foram determinadas as características da frente de chama do meio reagente “ $NH_3 + ar$ ” para $P = 5 atm$ e $\alpha_{ox} = 0.6, \dots, 1.4$. Observam-se as pequenas velocidades da frente e as grandes concentrações das substâncias NO_x na sua saída.

3- Foram realizadas simulações numéricas para a mistura “[$z.H_2 + (1-z).NH_3$] + ar”. Observa-se a quase uniformidade da “onda” de entalpia no interior da frente, o “entrelaçamento” das curvas de variação da composição em função de z , e a necessidade de se realizar pesquisas com misturas combustíveis e aprofundar a sua análise.

Referências

- [1] T.P. Co'ffee, A.J. Kotlar and M.S. Miller, The overall reaction concept in premixed laminar steady-state flames. I. Stoichiometries, *Combustion and flame*, **43** (1983), 155-169.
- [2] J.O. Olsson and L.L. Anderson, Sensitivity analysis based in an efficient brute-force method, applied to an experimental CH_4 / O_2 premixed laminar flame, *Combustion and flame*, **67** (1987).
- [3] D.A. Frank-Kamenetskii, “Diffuse and heat transfer in chemical kinetics”, 2nd ed., Plenum Press, New York, 1969.
- [4] J.D. Lambert, “Computational methods in ordinary differential equations”, London, John Wiley & Sons, 1974.
- [5] C.K. Westbrook, F.L. Draer and R.P. Schuy, A comprehensive mechanism for the pyrolysis and oxidation of ethylen, *XIX Simpósio Internacional de combustão e Instalações*, 1982, 153-166.
- [6] R. Iskhacova, D. Knost and A. Abdulline, Frente de Chama: Modelagem e pesquisa das características detalhadas, *Anais do XVI congresso Brasileiro de Engenharia mecânica*, São Paulo, 1997 (CD-ROM).
- [7] J. Hirshfelder, “Teoria molecular dos gases e líquidos”, Moscow. Ed. Literatura Estrangeira, 1961.
- [8] S.H. Chuna, An integral analysis of the structure and propagation of stretched premixed flame. Stoichiometries, *Combustion and flame*, **72** (1988), 325-336.
- [9] S. Rafael and E. Sher, Reaction kinetics of hydrogen-enriched methane-air and propane-air flame. Stoichiometries, *Combustion and flame*, **78** (1989), 326-338.