

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**SOLUÇÃO DE ESCOAMENTOS REATIVOS EM BOCAIS DE  
EXPANSÃO USANDO O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS**

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE  
SANTA CATARINA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE  
MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA

**FERNANDO LAROCA**

FLORIANÓPOLIS, OUTUBRO DE 2000

SOLUÇÃO DE ESCOAMENTOS REATIVOS EM BOCAIS DE  
EXPANSÃO USANDO O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

**FERNANDO LAROCA**


ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE

**MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA**

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA

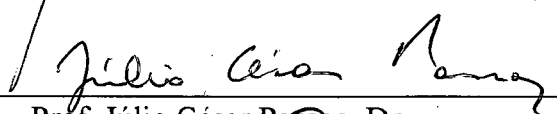
E APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO PROGRAMA

DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA



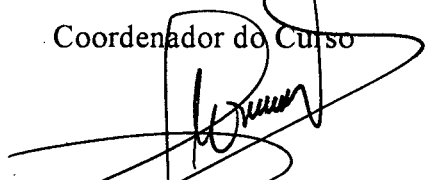
---

Prof. António Fábio Carvalho da Silva, Dr. Eng.  
Orientador




---

Prof. Júlio César Passos, Dr.  
Coordenador do Curso



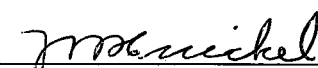
---

Prof. Clovis Raimundo Maliska, Ph. D.  
Presidente



---

Prof. Narciso Angel Ramos Arroyo, Dr.



---

Prof. José Nivaldo Hinckel, Ph. D.

BANCA EXAMINADORA:

*Às memórias de minha mãe, Aurora Gonçalves Laroca, e meu irmão, André Augusto Laroca.  
Ao meu pai, Sebastião Laroca, e às minhas irmãs, Christine, Kátia e Luciana.*

## AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo financiamento deste trabalho

Meus sinceros agradecimentos a todos os familiares e amigos que direta ou indiretamente colaboraram na elaboração desta dissertação. Aos meus queridos pais, Sebastião Laroca e Aurora Gonçalves Laroca (in memorian), pelo incentivo e também pelo grande apoio.

Ao meu professor e colega Carlos Henrique Marchi pelo incentivo e pelas revisões, sugestões e críticas dadas ao longo de todo o trabalho.

À minha grande amiga mestra Rafaela Frota Reinaldo pelas longas discussões e principalmente pelo seu apoio e carinho nos momentos difíceis.

Aos meus amigos Sandro Paulo Daldin e Danusa Beatriz de Vasconcelos pela ótima convivência durante o tempo que morei em Florianópolis. Ao meu amigo Luciano Amaury dos Santos pelo auxílio na depuração do código computacional aqui implementado. Ao Dr. José Nivaldo Hinckel, do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), e ao mestrando Jean C. D. Santos, do Instituto de Tecnologia da Aeronáutica (ITA), pelo auxílio na obtenção de grande parte dos relatórios e artigos utilizados como referência neste trabalho.

Aos professores Clovis Maliska, Roberto Jordan, Álvaro Prata, Narciso Arroyo, Vicente Nicolau e César Deschamps pelos cursos ministrados durante o cumprimento dos créditos. Aos colegas do SINMEC pelo suporte técnico computacional.

Aos membros da banca examinadora pelas críticas e sugestões apresentadas na defesa da dissertação.

E, finalmente, um agradecimento especial ao professor Fábio pela efetiva orientação, pelas críticas e sugestões dadas ao longo do trabalho.

## RESUMO

A previsão teórica de escoamentos compressíveis geralmente é feita admitindo-se a hipótese de fluido caloricamente perfeito. Quando as temperaturas alcançadas pelo escoamento são elevadas deve-se utilizar hipóteses mais realísticas, que contemplam as variações dos calores específicos e da composição química.

Nesta dissertação são apresentados os modelos matemático e numérico empregados para simular os escoamentos congelado e em equilíbrio químico local no interior de bocais do tipo convergente-divergente. O modelo matemático quase-unidimensional é constituído pelas equações de conservação da massa, da quantidade de movimento linear e da energia, além da equação de estado dos gases perfeitos. Como a equação de conservação da energia é escrita em termos da entalpia, também é utilizada uma expressão que relaciona essa propriedade com a temperatura e pressão. O método das constantes de equilíbrio é empregado para determinar a composição química. O modelo numérico, baseado no método dos volumes finitos com solução segregada, utiliza uma formulação adequada a qualquer regime de velocidade e funções de interpolação de segunda ordem aplicadas com correção adiada.

O objetivo do trabalho, utilizar o método dos volumes finitos para simular escoamentos em equilíbrio químico local, é alcançado com êxito. Os resultados aqui obtidos concordam bem com os da solução analítica para fluidos caloricamente perfeitos e com os do programa NASA SP-273 para escoamentos congelado e em equilíbrio químico local.

## ABSTRACT

The numerical simulations of compressible flows are usually carried out with the calorically perfect gas hypothesis. When the flow reaches high temperatures more realistic hypothesis, that consider the specific heat and chemical composition variations, should be used.

This work presents the mathematical and numerical models for the simulation of frozen and equilibrium nozzle flows. The mathematical model is providing by the quasi-one-dimensional Euler equations in conservation form and the perfect gas state equation. As the energy conservation equation is written in terms of enthalpy, it is also used an expression that relates the temperature and pressure with the enthalpy. The equilibrium constants method is used to obtain the chemical composition. The numerical model is based on the segregate finite volume method which uses a formulation capable to simulate any velocity regime and also second order interpolation functions.

The main purpose of this work, i. e., to use the segregate finite volume method to simulate equilibrium nozzle flows, was fully succeeded. The results here obtained agree with the analytical solution for the calorically perfect gas nozzle flow and with the NASA SP-273 program for the frozen and equilibrium nozzle flows.

## SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS .....	ix
LISTA DE TABELAS.....	xi
LISTA DE SÍMBOLOS.....	xii
<b>1 – INTRODUÇÃO.....</b>	<b>1</b>
1.1 – Escoamentos em bocais .....	3
1.2 – Revisão bibliográfica .....	7
1.3 – Resumo dos objetivos .....	11
1.4 – Organização do presente trabalho.....	12
<b>2 – MODELO MATEMÁTICO .....</b>	<b>13</b>
2.1 – Considerações iniciais.....	13
2.2 – Formulação Matemática .....	14
2.3 – Propriedades termodinâmicas .....	17
2.3.1 – Calor específico de uma espécie química .....	17
2.3.2 – Entalpia de uma espécie química .....	18
2.3.3 – Entalpia da mistura .....	19
2.3.4 – Calor específico da mistura .....	20
2.3.5 – Constante da mistura de gases .....	21
2.4 – Determinação da composição química.....	21
2.4.1 – Modelo de cinética química para $H_2/F_2$ .....	24
2.5 – Resumo do capítulo .....	27

<b>3 – MODELO NUMÉRICO .....</b>	<b>29</b>
<b>3.1 – Considerações iniciais.....</b>	<b>29</b>
<b>3.2 – Discretização das equações.....</b>	<b>30</b>
<b>3.2.1 – Funções de interpolação .....</b>	<b>33</b>
<b>3.2.2 – Equação de conservação da quantidade de movimento linear.....</b>	<b>36</b>
<b>3.2.3 – Equação de conservação da massa .....</b>	<b>38</b>
<b>3.2.4 – Equação de conservação da energia.....</b>	<b>42</b>
<b>3.2.5 – Equação de estado .....</b>	<b>43</b>
<b>3.3 – Aplicação das condições de contorno.....</b>	<b>43</b>
<b>3.3.1 – Condições de contorno na entrada do domínio .....</b>	<b>46</b>
<b>3.3.2 – Cálculo das variáveis na saída do domínio .....</b>	<b>48</b>
<b>3.4 – Determinação da temperatura a partir da entalpia .....</b>	<b>49</b>
<b>3.5 – Procedimento numérico para a determinação da composição química .....</b>	<b>50</b>
<b>3.6 – Procedimento iterativo de solução .....</b>	<b>52</b>
<b>3.7 – Resumo do capítulo .....</b>	<b>56</b>
<b>4 – RESULTADOS .....</b>	<b>57</b>
<b>4.1 – Considerações iniciais.....</b>	<b>57</b>
<b>4.2 – Geometria do problema e condições na câmara de combustão .....</b>	<b>57</b>
<b>4.3 – Escoamento de um gás caloricamente perfeito.....</b>	<b>61</b>
<b>4.4 – Escoamento congelado de uma mistura de gases .....</b>	<b>66</b>
<b>4.5 – Escoamento em equilíbrio químico.....</b>	<b>71</b>
<b>4.6 – Comentários sobre as diferentes hipóteses de escoamentos .....</b>	<b>78</b>
<b>5 – CONCLUSÃO.....</b>	<b>80</b>
<b>6 – REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>82</b>
<b>APÊNDICE 1 – COEFICIENTES DOS POLINÔMIOS INTERPOLADORES .....</b>	<b>88</b>
<b>APÊNDICE 2 – CONSTANTES DE EQUILÍBRIO .....</b>	<b>91</b>
<b>APÊNDICE 3 – VELOCIDADE DO SOM EM SISTEMAS REATIVOS .....</b>	<b>93</b>
<b>APÊNDICE 4 – PERFORMANCE DE MOTORES-FOGUETES .....</b>	<b>97</b>



## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 1 – Câmara de combustão e bocal convergente-divergente.....</b>	<b>4</b>
<b>Figura 2 – Condições de contorno no bocal.....</b>	<b>16</b>
<b>Figura 3 – Arranjo desencontrado de variáveis, nós e volumes de controle.....</b>	<b>32</b>
<b>Figura 4 – Entrada do domínio de cálculo.....</b>	<b>44</b>
<b>Figura 5 – Saída do domínio de cálculo.....</b>	<b>45</b>
<b>Figura 6 – Geometria do bocal utilizado neste trabalho.....</b>	<b>58</b>
<b>Figura 7 – Comparação entre as soluções obtidas com UDS e CDS.....</b>	<b>62</b>
<b>Figura 8 – escoamento caloricamente perfeito (<math>\gamma = 1,1625</math>; <math>R = 603,0 \text{ J/kg-K}</math>).....</b>	<b>64</b>
<b>Figura 9 – Resíduos da pressão e da massa ao longo do processo iterativo (UDS).....</b>	<b>65</b>
<b>Figura 10 – Resíduos da pressão e da massa ao longo do processo iterativo (CDS).....</b>	<b>65</b>
<b>Figura 11 – Calor específico a pressão constante da mistura congelada de gases.....</b>	<b>66</b>
<b>Figura 12 – Temperatura ao longo do bocal. escoamento congelado.....</b>	<b>67</b>
<b>Figura 13 – Pressão ao longo do bocal. escoamento congelado.....</b>	<b>68</b>
<b>Figura 14 – Massa específica ao longo do bocal. escoamento congelado.....</b>	<b>68</b>
<b>Figura 15 – Velocidade ao longo do bocal. escoamento congelado.....</b>	<b>69</b>
<b>Figura 16 – Número de Mach ao longo do bocal. escoamento congelado.....</b>	<b>69</b>
<b>Figura 17 – Resíduos da massa e da pressão ao longo do processo iterativo.....</b>	<b>70</b>
<b>Figura 18 – Composição química da mistura de gases - HF e H<sub>2</sub>.....</b>	<b>72</b>
<b>Figura 19 – Composição química da mistura de gases - H e F.....</b>	<b>72</b>

<b>Figura 20 – Calor específico ao longo do bocal. escoamento em equilíbrio químico.....</b>	<b>73</b>
<b>Figura 21 – Temperatura ao longo do bocal. escoamento em equilíbrio químico.....</b>	<b>73</b>
<b>Figura 22 – Pressão ao longo do bocal. escoamento em equilíbrio químico.....</b>	<b>74</b>
<b>Figura 23 – Massa específica ao longo do bocal. escoamento em equilíbrio químico.....</b>	<b>74</b>
<b>Figura 24 – Velocidade ao longo do bocal. escoamento em equilíbrio químico.....</b>	<b>75</b>
<b>Figura 25 – Número de Mach ao longo do bocal. escoamento em equilíbrio químico.....</b>	<b>75</b>
<b>Figura 26 – Resíduos da massa e da pressão ao longo do processo iterativo.....</b>	<b>77</b>
<b>Figura 27 – Número de Mach ao longo do bocal. Comparação entre os modelos.....</b>	<b>78</b>
<b>Figura 28 – Temperatura ao longo do bocal. Comparação entre os modelos.....</b>	<b>79</b>

## LISTA DE TABELAS

<b>Tabela 1 – Valores de <math>\phi</math> e do termo fonte <math>S^{\phi}</math> para as equações de conservação.....</b>	<b>31</b>
<b>Tabela 2 – Condições na câmara de combustão.....</b>	<b>60</b>
<b>Tabela 3 – Variáveis na saída do bocal (<math>A/A_t=64,5</math>).....</b>	<b>63</b>
<b>Tabela 4 – Parâmetros globais do motor-foguete. Escoamento caloricamente perfeito.....</b>	<b>63</b>
<b>Tabela 5 – Parâmetros globais do motor-foguete. Escoamento congelado.....</b>	<b>70</b>
<b>Tabela 6 – Parâmetros globais do motor-foguete. Escoamento em equilíbrio.....</b>	<b>76</b>
<b>Tabela 7 – Tempo computacional para determinação da composição química.....</b>	<b>77</b>

## LISTA DE SÍMBOLOS

$A$	área local da seção transversal ( $m^2$ )
$A_i$	símbolo da espécie química “i”
$a$	velocidade do som ( $m/s$ )
$a^u, a^p, a^h$	coeficientes das equações discretizadas
$a_{ij}$	coeficientes dos polinômios interpoladores das propriedades termodinâmicas
$b^c$	termo independente originado na linearização da equação de conservação da massa
$b_{ca}$	termo adicional devido à correção adiada
$b^u, b^p, b^h$	termos independentes das equações discretizadas
$C^p$	coeficiente da equação de estado linearizada
$C_f$	coeficiente de empuxo
$c^*$	velocidade característica ( $m/s$ )
$c_i$	fração mássica da espécie química “i”
$c_p$	calor específico a pressão constante da mistura de gases ( $J/kg K$ )
$c_{pi}$	calor específico a pressão constante da espécie química “i” ( $J/kg K$ )

$d_e, d_w$	coeficientes de correção da velocidade originados da aproximação da equação de conservação da quantidade de movimento linear
$f( )$	função dos termos entre parênteses
$F$	empuxo (N)
$h$	entalpia da mistura de gases (J/kg)
$h_i$	entalpia da espécie química “i” (J/kg)
$h_i^f$	entalpia de formação da espécie química “i” (J/kg)
$I_s$	impulso específico (s)
$K_{pj}$	constante de equilíbrio da reação “j” ( $\text{Pa}^{\Delta v_j}$ )
$L[ ]$	aproximação numérica da expressão entre colchetes
$M$	número de Mach
$\dot{M}_e, \dot{M}_w$	fluxos de massa nas faces do volume de controle (kg/s)
$M_m$	massa molecular da mistura de gases
$M_{mi}$	massa molecular da espécie química “i”
$M_p$	massa no volume de controle (kg)
$m$	massa da mistura de gases
$m_i$	massa da espécie química “i”
$m^p, m^u$	coeficientes da equação de conservação da massa linearizada
$N$	número de moles da mistura de gases
$N_i$	número de moles da espécie química “i”
$ne$	número de espécies químicas

$n_r$	número de reações químicas
$p$	pressão (Pa)
$p_i$	pressão parcial da espécie química “i” (Pa)
$p'$	correção de pressão (Pa)
$R$	constante da mistura de gases (J/kg K)
$R_i$	constante da espécie química “i” (J/kg K)
$R_u$	constante universal dos gases perfeitos (= 8314 J/kg K)
$res^m$	resíduo da conservação da massa
$S^\phi$	termo fonte da equação para $\phi$
$s$	entropia da mistura de gases (J/kg)
$T$	temperatura (K)
$t$	tempo
$u$	velocidade (m/s)
$X_i$	fração molar da espécie química “i”
$x$	coordenada espacial longitudinal
$Y$	raio da seção transversal do bocal

### Letras Gregas

$\alpha$	coeficiente da função de interpolação
$\beta_H$	coeficiente da correção adiada

$\delta X_i$	variação da fração molar
$\phi$	propriedade generalizada
$\gamma, \gamma_f$	razão entre os calores específicos
$\gamma_e$	expoente isentrópico da mistura em equilíbrio químico
$\eta$	número de elementos atômicos
$\varphi$	razão molar oxidante/combustível
$\nu_{ij}$	coeficiente estequiométrico da espécie química “i” na reação “j”
$\rho$	massa específica da mistura de gases ( $\text{kg/m}^3$ )
$\Delta$	indica uma variação discreta
$\Delta \nu_j$	variação do número de moles da reação química “j”
$\Delta t$	passo de tempo
$\partial$	indica derivada parcial

### Sobrescrito

H	referente a função de interpolação de alta ordem
L	referente a função de interpolação de baixa ordem
k	indica nível iterativo
o	propriedade do instante anterior
*	propriedade estimada ou da iteração anterior
'	indica correções

**Subscrito**

C	propriedade na câmara de combustão
e	posição ou propriedade na face este do volume de controle ou indica propriedade obtida para a mistura de gases em equilíbrio químico
f	indica propriedade obtida para a mistura congelada de gases
i	espécie química generalizada
n	número de pontos (nós) da malha onde são armazenados os escalares $p$ , $h$ , $T$ , $\rho$
P	posição ou propriedade no centro ou nó do volume de controle
R	propriedade dos reagentes
ref	indica condições de referência
t	posição ou propriedade na garganta do bocal
vac	propriedade ou parâmetro global obtido para o vácuo
w	posição ou propriedade na face oeste do volume de controle



## 1 - INTRODUÇÃO

---

A determinação das características do escoamento de um fluido é essencial no projeto de máquinas e equipamentos tais como trocadores de calor, compressores, bombas, motores de combustão interna, e em escoamentos aerodinâmicos, para os projetos de carros, aviões e foguetes. Essas características podem ser determinadas, basicamente, através de análise experimental ou de uma previsão teórica ou, ainda, ambas combinadas.

Para as análises experimentais são montadas bancadas de testes ou, no caso de escoamentos aerodinâmicos, são utilizados túneis de vento, onde são simuladas as condições do escoamento. As características do fluxo são determinadas através de sensores apropriadamente instalados em protótipos ou maquetes. Esses experimentos, geralmente, envolvem um custo bastante elevado.

A previsão teórica de um escoamento é feita usualmente resolvendo-se um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares, composto, principalmente, pelas equações de conservação da massa, da quantidade de movimento linear e da energia. Com a solução dessas equações são obtidos os campos de velocidade, pressão, temperatura e massa específica. Se o problema admitir algumas simplificações nas equações governantes, pode-se obter, às vezes com certa facilidade, sua solução analítica. Entretanto, na maioria das aplicações práticas os escoamentos possuem características que não admitem simplificações adequadas para permitir uma solução desse tipo, como, por exemplo, no caso de geometrias complexas ou quando não se puder admitir propriedades físicas constantes. Assim, a forma mais adequada para se fazer uma previsão teórica é através da simulação numérica, ou seja, da solução numérica das equações que modelam o escoamento.

A simulação numérica em dinâmica dos fluidos apresenta muitas vantagens em relação à previsão experimental. Além do baixo custo e pouco tempo para obtenção dos resultados, pode-se determinar as propriedades desejadas em um elevado número de pontos. Outra vantagem é a possibilidade de simular escoamentos que possuem características que dificultam, ou até impossibilitam, a realização da previsão experimental.

Apesar das vantagens das previsões teóricas, alguns problemas como os envolvendo turbulência ou radiação em meios participantes reativos ainda não foram adequadamente modelados, mesmo com os esforços dos pesquisadores.

Vários procedimentos são utilizados para fazer a simulação numérica em dinâmica dos fluidos. Grande parte desses são baseados nos métodos dos elementos finitos, das diferenças finitas e dos volumes finitos, sendo que o último será empregado neste trabalho.

Diferenças finitas é o método mais antigo, acredita-se que tenha sido aplicado pela primeira vez por Euler no século dezoito. Em linhas gerais, nesse método as equações são aproximadas, em um número finito de pontos do domínio, através da substituição das derivadas parciais por expressões obtidas a partir da série de Taylor. Esse procedimento resulta num sistema de equações algébricas que relaciona o valor das variáveis armazenadas num ponto do domínio em função das variáveis armazenadas em pontos vizinhos. Diversas técnicas foram desenvolvidas para tratar os acoplamentos e as não-linearidades das equações que modelam os problemas de convecção. Entre elas vale a pena citar as técnicas de MacCormack (MacCormack, 1969) e de Beam and Warming (Beam e Warming., 1976), muito utilizadas na simulação de escoamentos compressíveis.

No método dos volumes finitos as equações aproximadas são obtidas através da integração das equações de conservação das propriedades envolvidas (massa, quantidade de movimento linear, energia, etc.) num volume de controle elementar. Assim, as equações aproximadas representam as conservações das propriedades em nível de volumes elementares e, desta forma, esse método produz resultados realísticos mesmo utilizando malhas grosseiras (Maliska, 1995). Devido a essa vantagem e da semelhança com o método das diferenças finitas muitos pesquisadores passaram a empregar esse método. Ainda no método dos volumes finitos, geralmente, cada equação de conservação é resolvida separadamente para uma variável distinta e, para isso, após a integração as equações aproximadas são desacopladas e linearizadas. De acordo com o processo utilizado na linearização da equação de conservação da massa têm-se formulações para diferentes regimes de escoamento: incompressível, compressível ou qualquer

regime de velocidade. A formulação adequada a qualquer regime de velocidade, apresentada em Van Doormaal (1985) e em Silva e Maliska (1988), permite a simulação de escoamentos que tenham características incompressíveis em determinadas regiões do domínio e compressíveis em outras.

Entre as aplicações das simulações numéricas incluem-se os problemas que envolvem escoamentos reativos. Nesses escoamentos, além dos fenômenos característicos da dinâmica dos fluidos, ocorrem reações entre as espécies químicas que compõe o fluido. Estas reações fazem com que o fluido tenha sua composição química e, conseqüentemente, suas propriedades físico-químicas variando ao longo do escoamento. Desta forma, para fazer simulações de escoamentos reativos é necessário obter, também, o campo de frações mássicas das espécies químicas. Para tanto, além das equações de conservação, deve-se resolver as equações adicionais que modelam as reações químicas.

Escoamentos em reatores, em motores de combustão interna e a reentrada na atmosfera de veículos espaciais são alguns exemplos de problemas que envolvem escoamentos reativos.

Um dos objetivos do presente trabalho é aplicar o método dos volumes finitos, como descrito em Maliska (1995), na simulação de escoamentos reativos. Adicionalmente, além do interesse em escoamentos reativos, tem-se interesse particular no escoamento em bocais do tipo convergente-divergente. Como será visto adiante, o escoamento através desse tipo de bocal passa pelos regimes subsônico, transônico e supersônico, e portanto deve-se utilizar uma formulação adequada a qualquer regime de velocidade.

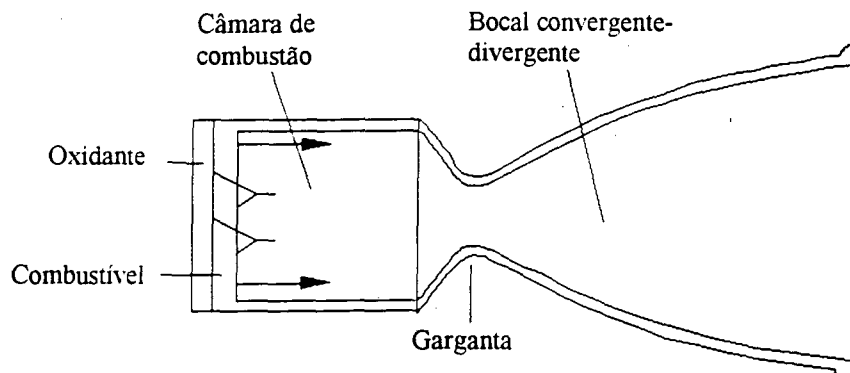
### **1.1 – Escoamentos em bocais**

Bocais do tipo convergente-divergente são componentes de motores à jato, tais como turbofans, turboreatores, estatoreatores, além de motores-foguetes. Esse componente é o responsável pela conversão da energia térmica em energia cinética dos produtos da combustão, fazendo com que esses gases atinjam velocidades supersônicas na saída do bocal. A elevada variação de quantidade de movimento linear experimentada pelos gases no interior do bocal resulta na força de empuxo do motor.

Em relação aos propelentes, existem, basicamente, dois tipos de motores-foguetes: os que utilizam propelentes sólidos e os que utilizam propelentes líquidos. Motores a propelentes sólidos possuem uma concepção muito mais simples, pois praticamente não há partes móveis. Esses motores são utilizados principalmente nos primeiros estágios de foguetes lançadores. O Veículo Lançador de Satélites (VLS) desenvolvido no Instituto de Aeronáutica e Espaço (IAE) utiliza esse tipo de motor.

Apesar da maior complexidade, as principais vantagens dos motores de propulsão líquida são as possibilidades de controle do empuxo e da extinção e re-ignição do processo de combustão. Devido a essas características, em geral motores-foguetes a propulente líquido são utilizados na transferência de órbita e controle de atitude em satélites. Além disso, os motores a propulsão líquida apresentam um elevado desempenho devido, principalmente, ao seu alto impulso específico. Em Sutton (1992) e Huzel e Huang (1992) há explicações em detalhes do funcionamento de motores-foguetes.

Na figura 1 está representada esquematicamente uma câmara de combustão e um bocal convergente-divergente utilizado num motor a bipropelente líquido.



**Figura 1 - Câmara de combustão e bocal convergente-divergente**

O par propelente é constituído por um combustível e um oxidante que são injetados e misturados na câmara de combustão. Ainda na câmara ocorre a reação de combustão entre o par propelente, liberando grande quantidade de energia, promovendo o aumento da energia térmica dos produtos da combustão e, conseqüentemente, a elevação da temperatura. Os gases, produtos

da combustão, que têm velocidade próxima de zero na câmara de combustão, se expandem e passam a escoar ao longo do bocal. A câmara de combustão é dimensionada de forma que o tempo de permanência dos propelentes no seu interior seja o suficiente para que seja atingido o equilíbrio químico entre as espécies produtos da combustão.

Como o escoamento é subsônico na entrada, pode-se ter na saída do bocal condições subsônicas ou supersônicas. Isso depende, principalmente, da diferença entre a pressão na câmara de combustão e a pressão ambiente na saída do bocal. Se essa diferença for muito pequena o escoamento será subsônico ao longo de todo o bocal. Se essa diferença for grande o suficiente, o escoamento passa de subsônico para supersônico na região próxima a garganta. Nesse caso, o escoamento segue supersônico até a saída do bocal ou, havendo choque na região divergente, o escoamento volta a ser subsônico.

Ao escoar ao longo do bocal as espécies químicas que compõem a mistura de gases, produtos da combustão, reagem entre si, dissociando-se e recombinao-se conforme as condições de temperatura e pressão. Se a velocidade ao longo do escoamento for muito alta, em comparação com as velocidades das reações químicas, o tempo de permanência dos gases no interior do bocal é pequeno de maneira que praticamente não há variação da composição química da mistura de gases dentro do bocal. Nesse caso o escoamento é considerado congelado.

Quando as velocidades das reações químicas são extremamente elevadas considera-se que em todos os pontos do escoamento a mistura de gases atinge o equilíbrio químico. Nesse caso o escoamento é considerado em equilíbrio químico local.

Os escoamentos congelado e em equilíbrio químico local são situações limites do escoamento reativo em desequilíbrio químico (ou não-equilíbrio químico). Nesse último caso as velocidades das reações não são elevadas o bastante para que se atinja o equilíbrio químico local. Além disso, o tempo de permanência dos gases dentro do bocal é o suficiente para que ocorra a variação da composição química da mistura de gases ao longo do escoamento.

Geralmente, em todas as situações citadas acima, considera-se que a mistura seja de gases termicamente perfeitos, isto é, o gás obedece a equação de estado dos gases perfeitos. Adicionalmente, os calores específicos de cada espécie química variam somente com a temperatura, enquanto que os calores específicos da mistura de gases, além de dependerem da temperatura, variam com a composição química.

Devido às elevadas temperaturas a que estão sujeitas, principalmente na parte convergente e na região da garganta, a parede do bocal deve ser refrigerada. Uma das maneiras de se efetuar a refrigeração é através da injeção de um filme de fluido, geralmente o próprio combustível, junto à parede. Outro sistema utiliza canais de refrigeração, dispostos axialmente ao longo do bocal, onde, dependendo do projeto, o fluido refrigerante escoar em contra corrente aos gases no interior do bocal. Também nesse caso o combustível pode ser utilizado como refrigerante e, assim, a refrigeração é denominada regenerativa. Em motores-foguetes de empuxo elevado geralmente são empregados esses dois sistemas de refrigeração combinados.

Para escolher e projetar o sistema de refrigeração é importante conhecer as características do escoamento dos gases no bocal, principalmente no que se refere às temperaturas e cargas térmicas na parede. Desta forma, pode-se determinar, por exemplo, qual é o fluxo de massa do filme de fluido refrigerante suficiente para a refrigeração. Também, na refrigeração regenerativa, pode-se determinar qual deve ser o fluxo de massa e a velocidade do refrigerante e, conseqüentemente, a área da seção transversal dos canais de refrigeração.

A determinação do perfil ótimo de um bocal também é influenciada pelas características do escoamento dos gases. Entende-se por perfil ótimo como sendo aquele em que o bocal produz máximo empuxo nas condições de operação. Em seu método de otimização, Rao (Rao, 1958) utilizou o método das características e considerou o escoamento como sendo de um fluido caloricamente perfeito e invíscido. Muitos projetos de motores-foguetes utilizam esse método com uma correção devido à camada limite (Pavli et alii, 1987 e Smith et alii, 1987).

Na previsão teórica do escoamento no interior do bocal, as utilizações de diferentes hipóteses (fluido caloricamente perfeito, congelado, em equilíbrio químico ou em desequilíbrio químico) resultam em características consideravelmente distintas. Fazer a simulação usando hipóteses mais próximas às das condições dos escoamentos reais pode significar uma grande economia na operação de motores-foguetes, seja aumentando a performance do motor-foguete, diminuindo o seu peso ou, ainda, diminuindo a quantidade de propelentes necessário para uma missão. Em foguetes lançadores essa economia pode representar uma carga útil mais elevada.

Assim, outro objetivo do presente trabalho é a simulação do escoamento reativo em bocais do tipo convergente-divergente.

## 1.2 – Revisão bibliográfica

Nesta seção é feita uma breve revisão bibliográfica de trabalhos envolvendo a simulação de escoamentos em motores-foguetes. Essa revisão pode ser dividida em duas partes. A primeira apresenta uma amostra de trabalhos realizados fora do Brasil, especialmente nos Estados Unidos, onde há mais de quatro décadas a agência espacial NASA (National Aeronautics and Space Administration) incentiva e coordena pesquisas também na área de propulsão. A segunda parte apresenta alguns trabalhos realizados no Brasil com o intuito de mostrar os esforços na pesquisa e desenvolvimento de códigos computacionais para a simulação de escoamentos em motores-foguetes.

Nos Estados Unidos um dos pioneiros nas pesquisas para o desenvolvimento de foguetes foi Robert Hutchings Goddard. Em 1926 Goddard obteve êxito no lançamento de um foguete a propelente líquido que, num voo de 2,5 segundos, atingiu 12,5 metros de altura (Bilstein, 1989). Com os avanços na metalurgia e nas técnicas para controle de voo, percebeu-se o grande potencial da utilização desses motores. A partir disso o governo norte-americano passou a financiar diversos projetos nessa área, incluindo pesquisas para determinar as características do escoamento nesses motores.

Em Zeleznik e Gordon (1962) é apresentado o modelo matemático e numérico para simular escoamentos unidimensionais em equilíbrio químico local. Nesse trabalho as variáveis do escoamento são obtidas através dos balanços de massa, entropia, e entalpia de estagnação. A composição química da mistura de gases é determinada através do método das constantes de equilíbrio.

Em Gordon e McBride (1971) é descrito o programa computacional NASA SP-273, que utiliza o mesmo modelo matemático de Zeleznik e Gordon (1962) e emprega o método da minimização da energia livre de Gibbs para determinar a composição química da mistura de gases. Esse programa permite a simulação de vários problemas envolvendo escoamento de gases em equilíbrio químico. A metodologia utilizada nesses trabalhos não pode ser estendida para modelos bidimensionais. Também não é possível incluir efeitos viscosos e de troca de calor.

O modelo para a simulação de escoamentos com taxas finitas de reações (em desequilíbrio químico) não é muito mais complexo do que para o equilíbrio químico. Porém requer maiores recursos computacionais, tanto em capacidade de armazenamento quanto em velocidade de processamento. Esse foi o principal fator que retardou sua utilização.

Bray (1959) propôs que o escoamento reativo no interior de bocais com entrada subsônica e saída supersônica pode ser separado em três regiões distintas. Na parte convergente, onde as velocidades são baixas e as temperaturas elevadas, considera-se que o escoamento está em equilíbrio químico local. Na parte divergente, onde as velocidades são elevadas e as temperaturas baixas, tem-se o escoamento congelado. E, apenas numa pequena faixa na região da garganta, onde o escoamento é transônico, tem-se o desequilíbrio químico. Para simular escoamentos reativos, Bray (1959) fez uma aproximação desconsiderando o desequilíbrio químico e, assim, o escoamento era simulado em equilíbrio químico até a garganta e a partir desse ponto segue congelado até a saída.

Em Westenberg e Favin (1963) é apresentado um dos primeiros trabalhos para a simulação de escoamentos em desequilíbrio químico no interior de bocais. Com um modelo matemático unidimensional, esse trabalho tratava de reações entre o par propelente hidrogênio-oxigênio ( $H_2-O_2$ ). O método de integração numérica empregado é o Runge-Kutta-Gill explícito, e eram necessários alguns dias de processamento com os computadores da época. Momtchiloff et alii (1963) e Sarli et alii (1963) utilizaram uma metodologia semelhante para simular o escoamento em bocais de motores de aviões a jato (ramjets), com reações do par hidrogênio-ar.

Usando o método das características, em Zupnik (1964) foi realizada a simulação do escoamento em bocais com um modelo para geometrias bidimensionais. Foram simulados os sistemas monopropelente com a decomposição do tetróxido de nitrogênio ( $N_2O_4$ ) e bipropelente com a reação do par hidrogênio-oxigênio ( $H_2-O_2$ ). A integração numérica é feita através do método de Runge-Kutta.

Em Nickerson et alii (1973) é descrito o programa computacional TDK (two-dimensional kinetics), utilizado em vários trabalhos (Pavli et alii, 1987; Kacynski et alii, 1987; Smith et alii, 1987; Kim e Stubbs, 1994). O programa usa o método das características na simulação do escoamento reativo, e foi planejado para ser utilizado em conjunto com outros programas desenvolvidos para a NASA. Uma parte desse trabalho é bloqueada e restrita a institutos de pesquisa e empresas norte-americanas.

Apesar do grande avanço dos computadores, pesquisadores da NASA ainda investem no desenvolvimento de códigos computacionais para a simulação de escoamentos em equilíbrio químico e até congelados no interior de bocais do tipo convergente-divergente, utilizando modelos unidimensionais. Por exemplo, em Gordon e McBride (1994) é apresentado uma versão atualizada do programa NASA SP-273. Em Witte e Tatum (1994) é mostrado um programa para



a simulação de escoamentos congelados, usando o modelo unidimensional. Nesse programa são utilizadas funções das propriedades termodinâmicas para temperaturas de até 20.000 K.

É interessante citar que uma das conclusões do trabalho de Habiballah et alii (1998) sugere que ainda é necessário mais pesquisa para o desenvolvimento de métodos numéricos que demandem menor tempo de computação na simulação e projeto de sistemas propulsivos. Nesse sentido, pode-se incluir o desenvolvimento e validação de códigos que utilizam modelos unidimensionais.

No Brasil, as pesquisas mais recentes na área espacial são incentivadas pela Missão Espacial Completa Brasileira (MECB) que tem por objetivo projetar, construir e colocar em órbita um conjunto de satélites de coleta de dados e de sensoriamento remoto utilizando uma tecnologia desenvolvida no país. O Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE) e o Instituto de Aeronáutica e Espaço (IAE) são os pilares da MECB, cabendo ao INPE o desenvolvimento dos satélites e as estações de solo correspondentes, e ao IAE o desenvolvimento do Veículo Lançador de Satélites (VLS). Maiores detalhes da MECB podem ser vistos no site (sítio) da Agência Espacial Brasileira (<http://www.agespacial.gov.br>).

Um dos primeiros trabalhos na simulação de escoamentos em bocais convergente-divergente para geometrias bidimensionais foi apresentado por Thompsom (1981). Nesse trabalho foi utilizada a hipótese de escoamento isentrópico e que o fluido é caloricamente perfeito e invíscido. Foi empregado o método das características e as equações diferenciais resolvidas através do método das diferenças finitas. Foram obtidos resultados para cinco bocais, variando o ângulo do divergente.

Em Azevedo (1990) é utilizado um modelo matemático bidimensional, representado pelas equações de Euler, para simular o escoamento de um gás caloricamente perfeito, não reativo, no interior de um bocal convergente-divergente usado em túneis de vento. As equações diferenciais são resolvidas através do método das diferenças finitas, usando a técnica de Beam & Warming (Beam e Warming., 1976). Nos trabalhos de Fico e Azevedo (1993) e Martins e Azevedo (1993) são utilizadas metodologias semelhantes, baseadas na técnica de Beam & Warming, com o mesmo objetivo de simular escoamentos caloricamente perfeitos em túneis de vento supersônico.

A simulação de um escoamento em desequilíbrio químico com um modelo matemático unidimensional pode ser visto em Barros et alii (1990). Nesse trabalho é empregado o método das características, como descrito em Zucrow e Hoffman (1977). As equações diferenciais são

integradas através do método implícito de Gear com passo variável. Foram obtidos resultados para bocais de razões de expansão 50:1 e 1030:1, com os sistemas bipropelentes hidrogênio-flúor ( $H_2-F_2$ ) e hidrogênio-oxigênio ( $H_2-O_2$ ), respectivamente.

O trabalho citado acima foi estendido em Barros et alii (1994) para o modelo bidimensional. Como a aplicação do método das características usado no trabalho restringe-se à região onde o regime de escoamento é supersônico, a linha de partida de propriedades conhecidas, após a linha sônica, é obtida através da série de Kliegel (Kliegel e Levine, 1965). As propriedades até a linha sônica são obtidas através do modelo unidimensional. Nesse trabalho são simulados os bocais com as mesmas geometrias e sistemas bipropelentes de Barros et alii (1990). Esses trabalhos são continuações da pesquisa para obtenção de perfis ótimos de bocais, iniciado em Paglione e Girardi (1988).

Marchi et alii (1992) fizeram simulações de escoamentos em bocais utilizando um modelo matemático bidimensional, em que o gás é considerado invíscido e caloricamente perfeito. As equações diferenciais foram resolvidas através do método dos volumes finitos, empregando a formulação adequada a qualquer regime de velocidade (Silva e Maliska, 1988) com o arranjo co-localizado de variáveis. Os resultados são comparados com os obtidos experimentalmente em Back et alii (1965).

Usando modelos unidimensionais, em Miraglia e Hinckel (1993) foram feitas simulações transientes de dois sistemas propulsivos: a monopropelente líquido, com o escoamento não-catalítico da hidrazina, e a bipropelente líquido, com o escoamento do par etanol-oxigênio. Nesse trabalho as propriedades do escoamento no interior do bocal supersônico são obtidas através do programa NASA SP-273 (Gordon e McBride, 1971). Da mesma forma, no trabalho de Rubin e Hinckel (1993), onde foi desenvolvido um código computacional para simular e projetar sistemas de refrigeração regenerativa em bocais do tipo convergente-divergente, o programa NASA SP-273 também é empregado para determinar as propriedades do fluxo de gases no interior do bocal.

Utilizando uma metodologia semelhante à empregada em Azevedo (1990), Yagua e Azevedo (1998) fizeram a simulação do escoamento no interior de um bocal para os casos em que um corpo é introduzido ou na parte convergente, ou na parte divergente. O objetivo desse trabalho foi o de fazer um estudo da técnica de malhas em multiblocos, empregando o método das diferenças finitas com o algoritmo Beam & Warming.

### 1.3 – Resumo dos objetivos

Verificou-se na resumida revisão bibliográfica apresentada na seção anterior que ainda hoje são utilizados modelos unidimensionais principalmente devido aos baixos custos computacionais. Além disso, vários trabalhos citados que usam modelos bidimensionais são para escoamentos não reativos de gases caloricamente perfeitos.

Os modelos baseados nos métodos das características, como utilizado em Thompson (1981) e Barros et alii (1994), restringem-se ao regime supersônico e, assim, é necessário conhecer as propriedades do escoamento sobre uma linha de partida sônica. Geralmente, essa linha de partida é obtida para o escoamento congelado, com uma série de hipóteses simplificativas.

Deve-se observar que não foram encontrados trabalhos utilizando o método dos volumes finitos com solução segregada e formulação adequada a qualquer regime de velocidade para escoamentos reativos.

A presente dissertação tem como principal objetivo apresentar um algoritmo em volumes finitos, utilizando uma formulação segregada e adequada a qualquer regime de velocidade, para a simulação do escoamento de uma mistura de gases termicamente perfeitos em equilíbrio químico no interior de bocais do tipo convergente-divergente. Para tanto, é empregado um modelo matemático quase-unidimensional obtido a partir das equações de Euler. A composição química da mistura de gases será determinada através do método das constantes de equilíbrio.

Uma das intenções é a de verificar o comportamento do método numérico utilizado frente a variação da composição química e das propriedades termodinâmicas do fluido ao longo do escoamento.

Pretende-se aqui fazer um trabalho didático, descrevendo todos os detalhes do algoritmo empregado, sendo que, algumas vezes, pode haver redundância nas explicações. Desta forma, este trabalho poderá servir como base para outros no desenvolvimento de códigos computacionais para simulações de escoamentos em desequilíbrio químico com modelos bi ou tridimensionais.

#### **1.4 – Organização do presente trabalho**

No Capítulo 2 é apresentado o modelo matemático quase-unidimensional que representa o escoamento no interior de um bocal do tipo convergente-divergente. São mostradas as funções utilizadas para avaliar as propriedades termodinâmicas. E, ainda, é apresentado o sistema de equações que descreve o equilíbrio químico local.

O modelo numérico empregado na solução das equações diferenciais bem como a maneira de se aplicar as condições de contorno são descritos no Capítulo 3. Nesse capítulo também é apresentado o procedimento numérico utilizado para determinar a composição química.

No Capítulo 4 são mostrados os resultados obtidos através do programa computacional desenvolvido nesta dissertação. Esses resultados são comparados com os obtidos através do programa NASA SP-273 (Gordon e McBride, 1971).

O capítulo 5 é dedicado às conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

## 2 - MODELO MATEMÁTICO

---

### 2.1 - Considerações iniciais

De uma maneira geral, o escoamento no interior de um bocal convergente-divergente é tridimensional, compressível, com regiões subsônicas, transônicas e supersônicas, com fricção e transferência de calor nas paredes. Além disso, quando as temperaturas alcançadas pelo escoamento forem elevadas o fenômeno das reações químicas tornam importantes.

Neste trabalho o escoamento será considerado quase-unidimensional porque, como mencionado no capítulo anterior, seu principal objetivo é simular o escoamento de uma mistura de gases em equilíbrio químico local, utilizando o método dos volumes finitos como descrito por Maliska (1995). Essa simplificação é muito empregada e existem na literatura muitos resultados para comparações (Barros et alii, 1990 e Zucrow e Hoffman, 1977), além da solução analítica para escoamentos quase-unidimensionais de fluidos caloricamente perfeitos (John, 1984). Não é difícil estender a metodologia empregada para o caso bidimensional axissimétrico.

Na seção 2.2 são apresentadas as equações que modelam o escoamento no interior de um bocal convergente-divergente e as hipóteses simplificativas utilizadas para obter essas equações. Na seção 2.3 são mostradas as expressões utilizadas para avaliar as propriedades termodinâmicas de cada espécie química e da mistura de gases. Finalmente, o modelo de cinética química usado para determinar a composição química da mistura de gases é apresentado na seção 2.4.

## 2.2 – Formulação Matemática

Como mencionado anteriormente, o modelo matemático é quase-unidimensional, isto é, considera-se o escoamento como unidimensional mas contemplando a variação da área da seção transversal. As forças de campo serão desconsideradas por serem desprezíveis. Além disso, as paredes são consideradas adiabáticas e as forças viscosas são desconsideradas, apesar de que a inclusão desses fenômenos não dificultaria a solução do problema através do método numérico empregado (Laroca et alii, 1998). O fluido será tratado como uma mistura de gases termicamente perfeitos com equilíbrio térmico entre as espécies químicas. As difusividades térmica e de massa serão desprezadas devido as altas velocidades presentes em quase toda a extensão do bocal. Abaixo é mostrada uma lista com o resumo das hipóteses simplificativas utilizadas para modelar o problema:

1. escoamento quase-unidimensional;
2. ausência de forças de campo;
3. ausência de forças viscosas;
4. ausência de difusividade térmica e de massa;
5. paredes adiabáticas e impermeáveis;
6. mistura de gases perfeitos;
7. equilíbrio térmico entre as espécies.

As equações que modelam os escoamentos quase-unidimensionais podem ser deduzidas a partir da integração das equações de Euler para escoamentos bidimensionais axissimétricos na área da seção transversal. Outra maneira é obter as equações diretamente dos balanços de massa, de quantidade de movimento linear, e de energia. Essa dedução pode ser vista em Anderson (1995).

A seguir são apresentadas as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento linear, e da energia, respectivamente, já admitindo as hipóteses simplificativas dadas acima.

$$\frac{\partial(\rho A)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u A)}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho u A)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u A u)}{\partial x} = -A \frac{\partial p}{\partial x} \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho A h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u A h)}{\partial x} = A \frac{\partial p}{\partial t} + A u \frac{\partial p}{\partial x} \quad (3)$$

onde  $A$  é a área local da seção transversal do bocal,  $h$  é a entalpia do fluido,  $p$  é a pressão,  $u$  é a velocidade,  $t$  é o tempo,  $x$  é a coordenada espacial, e  $\rho$  é a massa específica do fluido.

Para completar o sistema de equações utiliza-se a equação de estado dos gases termicamente perfeitos, mostrada abaixo,

$$p = \rho R T \quad (4)$$

onde  $R$  é a constante da mistura de gases e  $T$  é a temperatura. Deve-se ressaltar que como a composição química varia ao longo do bocal a “constante”  $R$  também varia ao longo do bocal e seu valor depende das frações mássicas e das constantes ( $R_i$ ) de cada gás, como será visto adiante.

Essas quatro equações constituem um sistema cujas variáveis a serem resolvidas ao longo do domínio são a velocidade ( $u$ ), a pressão ( $p$ ), a massa específica ( $\rho$ ), a entalpia ( $h$ ) e a temperatura ( $T$ ). Pode-se observar que a equação de conservação da energia está escrita em termos da entalpia e, assim, é necessária uma expressão que relacione a entalpia com a temperatura e a pressão. Como será visto adiante, a entalpia da mistura é uma função das entalpias e das frações mássicas de cada espécie química. Quando são consideradas as reações químicas, as frações mássicas dependem da temperatura e da pressão e, mesmo considerando o fluido como uma mistura de gases termicamente perfeitos, sua entalpia também depende dessas duas propriedades. As expressões utilizadas para avaliar as propriedades termodinâmicas, inclusive a entalpia, são mostradas na próxima seção. Com a expressão para o cálculo da variável entalpia em função da temperatura e pressão tem-se a equação adicional para o fechamento do problema.

O interesse neste trabalho é exclusivamente na solução de regime permanente. Porém, os termos transientes foram mantidos nas equações (1) a (3) para facilitar o controle da convergência do modelo numérico empregado para resolver as equações diferenciais.

As condições de contorno para a entalpia e pressão na entrada do bocal são obtidas em função das propriedades no reservatório ou câmara de combustão ( $p_c$  e  $h_c$ ). Não se deve prescrever todas as variáveis na entrada pois assim o fluxo de massa estaria prescrito, e este também é uma incógnita a ser determinada pela solução do problema. Desta forma, a velocidade na entrada do bocal é obtida através de uma extrapolação linear dos valores obtidos no interior do bocal. Isso é equivalente a fazer sua derivada de segunda ordem nula na entrada do domínio.

A solução do escoamento em bocais do tipo convergente-divergente não requer condições de contorno na saída quando o escoamento é supersônico nessa região. Entretanto, na implementação do esquema numérico, será necessário calcular o valor de diversas variáveis na saída do bocal. Para tanto é feita uma extrapolação linear dos valores do interior do bocal. Isso é equivalente a fazer suas derivadas de segunda ordem nulas na saída do domínio.

A figura 2 mostra um desenho esquemático ilustrando as condições de contorno no bocal. Os procedimentos de extrapolação empregados para a avaliação das variáveis na seção de saída do bocal e para obtenção das variáveis na entrada do bocal a partir das condições na câmara de combustão serão vistos em detalhes no Capítulo 3.

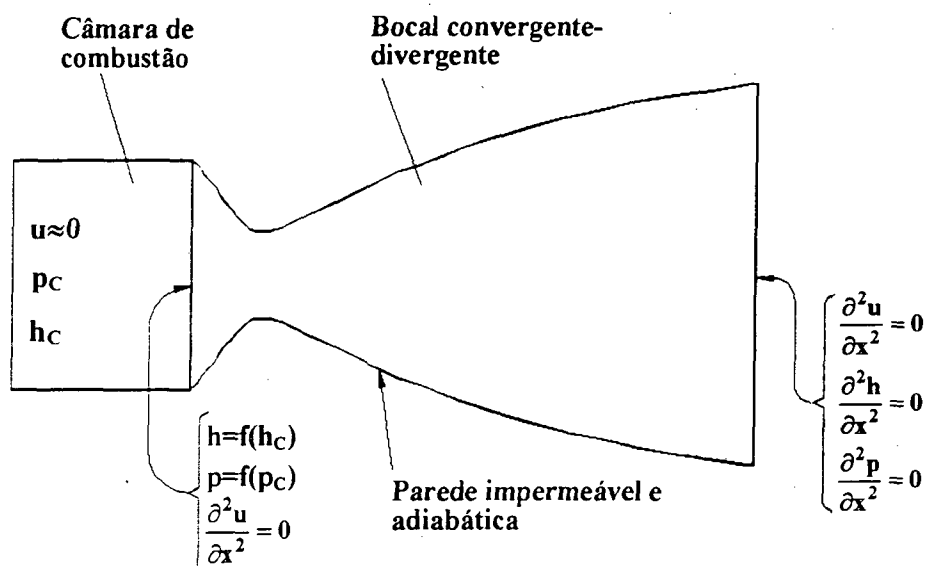


Figura 2 - Condições de contorno no bocal.



### 2.3 - Propriedades termodinâmicas

Neste trabalho o fluido que escoar no bocal é tratado de três maneiras: como um gás caloricamente perfeito, como uma mistura congelada de gases termicamente perfeitos e, finalmente, como uma mistura de gases termicamente perfeitos em equilíbrio químico local. Nos dois primeiros casos a composição química não varia ao longo do escoamento e no último a composição varia sempre no equilíbrio químico e só depende da temperatura e da pressão locais (Anderson, 1990).

Quando o fluido é um gás caloricamente perfeito os calores específicos ( $c_p$  e  $c_v$ ) são constantes e a entalpia é uma função linear da temperatura. Para esse caso uma solução analítica em regime permanente é bem conhecida (John, 1984).

Quando o fluido é um gás ou uma mistura congelada de gases termicamente perfeitos o calor específico à pressão constante passa a ser função da temperatura.

Finalmente, quando se trata de uma mistura de gases perfeitos em equilíbrio químico a composição química depende da temperatura e da pressão e, assim, o calor específico e a entalpia também passam a ser funções dessas mesmas propriedades.

Nesta seção é mostrado como são obtidos o calor específico e a entalpia de cada espécie química e da mistura de gases que compõem o fluido. Para tanto, o fluido será tratado da maneira mais geral, ou seja, como uma mistura de gases termicamente perfeitos em equilíbrio químico.

#### 2.3.1 – Calor específico de uma espécie química

Diversas funções podem ser ajustadas aos valores das propriedades termodinâmicas, em função da temperatura, fornecidas pelas tabelas JANAF (Chase, 1985). Nesta dissertação serão utilizados os polinômios interpoladores do quarto grau, propostos em McBride et alii (1993). Esses polinômios são dados por

$$c_{pi} = R_i \left( a_{i1} + a_{i2}T + a_{i3}T^2 + a_{i4}T^3 + a_{i5}T^4 \right) \quad (5)$$

onde  $c_{pi}$  é o calor específico a pressão constante da espécie química  $i$ ,  $R_i$  é a constante do gás “ $i$ ” e  $a_{ij}$  ( $j=1, \dots, 5$ ) são os coeficientes do polinômio.

A constante do gás ( $R_i$ ) é obtida através de

$$R_i = \frac{R_u}{M_{mi}} \quad (6)$$

onde  $M_{mi}$  é a massa molecular da espécie química "i" e  $R_u$  é a constante universal dos gases.

### 2.3.2 – Entalpia de uma espécie química

Para calcular a entalpia utiliza-se a definição de calor específico à pressão constante,

$$c_{pi} = \left( \frac{\partial h_i}{\partial T} \right)_p \quad (7)$$

onde  $h_i$  é a entalpia da espécie química i.

Como já foi mencionado, cada espécie química é considerada como um gás termicamente perfeito, ou seja, a entalpia e o calor específico só dependem da temperatura. Desta forma, a expressão acima pode ser reescrita por

$$c_{pi} = \frac{dh_i}{dT} \quad (8)$$

ou seja,

$$dh_i = c_{pi} dT \quad (9)$$

Integrando a equação (9) de uma temperatura de referência de 298,15 K até uma temperatura T chega-se a

$$h_i = \int_{298,15}^T c_{pi} dT + h_i^f \quad (10)$$

onde  $h_i^f$  é a entalpia de formação à 298,15 K da espécie química “i”.

Substituindo a equação (5) na equação (10) tem-se a expressão empregada para avaliar a entalpia,

$$h_i = R_i \left( a_{i1} T + a_{i2} \frac{T^2}{2} + a_{i3} \frac{T^3}{3} + a_{i4} \frac{T^4}{4} + a_{i5} \frac{T^5}{5} + a_{i6} \right) \quad (11)$$

Os coeficientes  $a_{ij}$  ( $j=1, \dots, 6$ ) que aparecem nas equações (5) e (11) dependem apenas da espécie química e são encontrados em McBride et alii (1993). O valor do coeficiente  $a_{i6}$  contempla a parcela devido a entalpia de formação à 298,15 K ( $h_i^f$ ). Esses coeficientes são mostrados no Apêndice 1.

### 2.3.3 – Entalpia da mistura

Quando o fluido é uma mistura de gases sua entalpia é obtida através de (Zucrow et al., 1977)

$$h = \sum_{i=1}^{ne} c_i \cdot h_i \quad (12)$$

onde  $h$  é a entalpia da mistura,  $c_i$  é a fração mássica da espécie química  $i$ , e  $ne$  é o número de espécies químicas presentes na mistura

Substituindo a equação (11) na equação acima resulta na expressão que relaciona a entalpia com a temperatura e a pressão, dada por,

$$h = \sum_{i=1}^{ne} \left[ c_i \cdot R_i \left( a_{i1}T + a_{i2} \frac{T^2}{2} + a_{i3} \frac{T^3}{3} + a_{i4} \frac{T^4}{4} + a_{i5} \frac{T^5}{5} + a_{i6} \right) \right] \quad (13)$$

Embora a pressão não apareça explicitamente nesta equação, as frações mássicas das espécies dependem dessa propriedade, além da temperatura.

### 2.3.4 – Calor específico da mistura

O calor específico à pressão constante da mistura, que é utilizado mais adiante para determinar outras propriedades como a velocidade do som e o número de Mach, pode ser obtido através de sua definição,

$$c_p = \left( \frac{\partial h}{\partial T} \right)_p \quad (14)$$

onde  $c_p$  é o calor específico à pressão constante da mistura.

Substituindo a equação (12) na equação (14) obtém-se

$$c_p = \sum_{i=1}^{ne} \left( \frac{\partial(c_i \cdot h_i)}{\partial T} \right)_p \quad (15)$$

Utilizando a regra para derivada do produto, encontra-se,

$$c_p = \sum_{i=1}^{ne} c_i \cdot \left( \frac{\partial h_i}{\partial T} \right)_p + \sum_{i=1}^{ne} \left( \frac{\partial c_i}{\partial T} \right)_p \cdot h_i \quad (16)$$

Substituindo a equação (7) na equação (16) tem-se a expressão para avaliar o calor específico à pressão constante,

$$c_p = \sum_{i=1}^{ne} c_i \cdot c_{pi} + \sum_{i=1}^{ne} \left( \frac{\partial c_i}{\partial T} \right)_p \cdot h_i \quad (17)$$

Verifica-se na equação (17) que, se o escoamento for congelado (composição química constante) o segundo termo se anula e o calor específico da mistura resulta da média ponderada dos calores específicos das espécies químicas. A expressão utilizada para calcular a derivada  $(\partial c_i / \partial T)_p$  é apresentada no final do Apêndice 3.

### 2.3.5 – Constante da mistura de gases

A constante da mistura de gases, utilizada na equação de estado (equação 4), pode ser avaliada por

$$R = \sum_{i=1}^{ne} c_i \cdot R_i \quad (18)$$

Como esperado, pode-se observar nas equações (13), (17) e (18) que, para obter as propriedades de uma mistura de gases, é necessário conhecer sua composição química, ou seja, as frações mássicas das espécies que a compõe. A próxima seção mostra como determinar a composição química de uma mistura de gases em equilíbrio químico local, a partir da pressão, temperatura e razão oxidante/combustível da câmara de combustão.

## 2.4 – Determinação da composição química

Nesta seção são utilizadas a lei de Dalton e as condições de equilíbrio químico, além do balanço no número de átomos, para compor um sistema de equações empregado para determinar a composição química de uma mistura de gases em equilíbrio químico local (Anderson, 1991). Para isso, é utilizado o método das constantes de equilíbrio (Kuo, 1986).

Dentre as várias alternativas para especificar a composição química de uma mistura de gases será utilizada, apenas por conveniência, a que descreve a composição através das frações mássicas. Como já foi visto na seção anterior, as frações mássicas são empregadas para determinar as propriedades da mistura. Entretanto, para facilitar a comparação com outros autores, os resultados serão fornecidos em termos das frações molares, pois a grande maioria dos trabalhos os apresentam dessa forma. As frações mássicas e molares são definidas por, respectivamente,

$$c_i = \frac{m_i}{m} = \frac{\rho_i}{\rho} \quad (19)$$

e

$$X_i = \frac{N_i}{N} = \frac{p_i}{p} \quad (20)$$

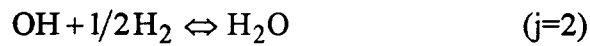
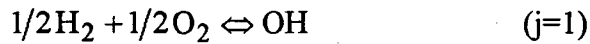
onde  $c_i$  é a fração mássica da espécie  $i$ ,  $m_i$  é a massa da espécie  $i$ ,  $m$  é a massa da mistura,  $\rho_i$  é a massa específica da espécie  $i$ ,  $\rho$  é a massa específica da mistura,  $X_i$  é a fração molar da espécie  $i$ ,  $N_i$  é o número de moles da espécie  $i$ ,  $N$  é o número de moles da mistura,  $p_i$  é a pressão parcial da espécie  $i$ , e  $p$  é a pressão da mistura.

Considere, inicialmente, um modelo genérico de um conjunto de reações independentes

$$0 \Leftrightarrow \sum_{i=1}^{ne} \nu_{ij} A_i \quad (j=1, \dots, nr) \quad (21)$$

onde  $A_i$  é o símbolo da espécie química  $i$  e  $\nu_{ij}$  é o coeficiente estequiométrico da espécie química  $i$  na reação  $j$ , sendo  $\nu_{ij}$  positivo para produto (lado direito da reação) e negativo para reagente (lado esquerdo da reação), “nr” é o número de reações e “ne” é o número de espécies químicas.

Para entender melhor a convenção adotada, seja o sistema de quatro espécies ( $ne=4$ ),  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $OH$  e  $H_2O$ , com duas reações ( $nr=2$ ),



Assim, comparando as reações acima com as representadas pela equação (21), tem-se,

$$A_1 = \text{H}_2 \quad v_{11} = -1/2 \quad v_{12} = -1/2$$

$$A_2 = \text{O}_2 \quad v_{21} = -1/2 \quad v_{22} = 0$$

$$A_3 = \text{OH} \quad v_{31} = 1 \quad v_{32} = -1$$

$$A_4 = \text{H}_2\text{O} \quad v_{41} = 0 \quad v_{42} = 1$$

Para que a composição química seja a de equilíbrio é necessário que as frações molares das espécies químicas que a compõem a mistura de gases satisfaçam simultaneamente as “nr” condições de equilíbrio, dadas pela equação,

$$\prod_{i=1}^{nc} X_i^{v_{ij}} = \left( \frac{p}{p_{\text{ref}}} \right)^{-\Delta v_j} \cdot K_{p_j}(T) \quad (j=1, \dots, nr) \quad (22)$$

onde  $X_i$  é a fração molar da espécie  $i$ ,  $K_{p_j}(T)$  é a constante de equilíbrio da reação  $j$  (para cada reação essa constante depende somente da temperatura),  $p_{\text{ref}}$  é a pressão de referência de 1 atm (101,3 kPa), e  $\Delta v_j$  é a variação do número de moles da reação  $j$ , dada por

$$\Delta v_j = \sum_{i=1}^{nc} v_{ij} \quad (j=1, \dots, nr) \quad (23)$$

O Apêndice 2 mostra como se obter as constantes de equilíbrio a partir das propriedades termodinâmicas da mistura de gases.

Além dessa condição de equilíbrio, a composição da mistura também deve satisfazer a lei de Dalton. Essa lei diz que a pressão da mistura é igual a soma das pressões parciais dos gases que a compõe. Matematicamente,

$$p = \sum_{i=1}^{ne} p_i \quad (24)$$

Dividindo a equação acima pela pressão da mistura ( $p$ ) e considerando a equação (20) resulta na forma com que a lei de Dalton é empregada,

$$1 = \sum_{i=1}^{ne} X_i \quad (25)$$

Para completar o sistema, deve ser feito um balanço de massa para cada elemento atômico presente na mistura. Ou seja, os produtos da reação devem possuir o mesmo número de átomos, de cada elemento químico, que os reagentes.

A seguir, serão deduzidas as equações utilizadas para determinar a composição em equilíbrio químico da mistura de gases consideradas nesse trabalho (Zucrow e Hoffman, 1977). Essa dedução também pode ser considerada um exemplo para explicar melhor o método das constantes de equilíbrio.

#### 2.4.1 - Modelo de cinética química para $H_2/F_2$

O par bipropelente utilizado aqui é o  $H_2/F_2$ , sendo  $H_2$  o combustível e  $F_2$  o oxidante. Esse par não é o mais utilizado em aplicações práticas mas é adotado para se fazer comparações com outros trabalhos.

O par bipropelente é injetado na câmara de combustão, onde ocorre a reação entre eles. Os produtos dessa reação compõe a mistura de gases que escoam ao longo do bocal convergente-divergente. À medida que escoam, os produtos da reação se dissociam ou se recombinaem, fazendo com que a composição química varie ao longo do bocal.

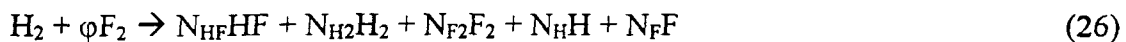
Um dos pontos importantes na determinação da composição química dos produtos de uma reação é saber quais espécies deverão ser consideradas. Por exemplo, a medida que a temperatura aumenta as moléculas tendem a se dissociar e essas reações de dissociação, bem como as espécies resultantes dessas dissociações, deverão ser incluídas no modelo de reação. Se



uma espécie importante for desconsiderada o modelo de cinética química não representará adequadamente o fenômeno (Anderson, 1991).

Os possíveis produtos da reação entre  $H_2$  e  $F_2$  são as espécies químicas HF,  $H_2$ , H,  $F_2$ , F,  $H_2F_2$ ,  $H_3F_3$ ,  $H_4F_4$ ,  $H_5F_5$ , e  $H_6F_6$  (Gordon e McBride, 1971). Será visto adiante que a determinação da composição química recai num sistema não-linear com número de equações igual ao número de espécies. Assim, quanto maior o número de espécies, maior o sistema não-linear e o esforço computacional para resolvê-lo. Desta forma deve-se desconsiderar as espécies químicas que se apresentam em quantidades desprezíveis. Como as frações mássicas da demais espécies são muito pequenas e para facilitar a comparação com outros trabalhos, os produtos considerados são HF,  $H_2$ , H,  $F_2$  e F (Zucrow e Hoffman, 1977 e Barros et alii, 1990).

Seja, portanto, a reação global do par bipropelente  $H_2/F_2$ , dada por



onde  $\phi$  é a razão molar oxidante/combustível, que é uma condição inicial do problema, e  $N_{HF}$ ,  $N_{H_2}$ ,  $N_{F_2}$ ,  $N_H$  e  $N_F$  são os números de moles de cada espécie.

Para determinar as frações molares dos produtos da reação representada pela equação (26) é feito inicialmente um balanço do número de átomos de flúor (F), que resulta em

$$2\phi = N_{HF} + 2N_{F_2} + N_F \quad (27)$$

e um balanço do número de átomos de hidrogênio, que conduz a

$$2 = N_{HF} + 2N_{H_2} + N_H \quad (28)$$

Dividindo as equações acima pelo número total de moles (N) e combinando com a equação (20) chega-se respectivamente a

$$\frac{2\phi}{N} = X_{HF} + 2X_{F_2} + X_F \quad (29)$$

e

$$\frac{2}{N} = X_{HF} + 2X_{H_2} + X_H \quad (30)$$

Combinando as equações (29) e (30) para eliminar a variável N resulta em

$$\frac{X_{HF} + 2X_{F_2} + X_F}{X_{HF} + 2X_{H_2} + X_H} = \phi \quad (31)$$

Obedecida a equação (31) significa que a conservação do número de átomos de H e F é satisfeita.

Uma segunda expressão é obtida da Lei de Dalton, na forma da equação (25),

$$X_{HF} + X_{H_2} + X_{F_2} + X_H + X_F = 1 \quad (32)$$

E, finalmente, tem-se as equações dadas pelas condições de equilíbrio químico. Em geral, se a mistura tem “ne” espécies químicas e “n” elementos atômicos (no exemplo são dois elementos, H e F), então são necessárias “ne – n” equações químicas independentes, com suas respectivas constantes de equilíbrio. Neste exemplo ne = 5 e n = 2, assim, nr = 3. As equações químicas independentes podem ser (Zucrow e Hoffman, 1977)

$$1/2H_2 \Leftrightarrow H \quad \frac{X_H}{X_{H_2}^{1/2}} = \left( \frac{p}{p_{ref}} \right)^{-1/2} \cdot Kp_1(T) \quad (33)$$

$$1/2F_2 \Leftrightarrow F \quad \frac{X_F}{X_{F_2}^{1/2}} = \left( \frac{p}{p_{ref}} \right)^{-1/2} \cdot Kp_2(T) \quad (34)$$

$$1/2H_2 + 1/2F_2 \Leftrightarrow HF \quad \frac{X_{HF}}{X_{H_2}^{1/2} \cdot X_{F_2}^{1/2}} = \left( \frac{p}{p_{ref}} \right)^0 \cdot Kp_3(T) \quad (35)$$

As constantes de equilíbrio das reações acima são determinadas a partir das propriedades termodinâmicas, como mostrado no Apêndice 2.

As equações (31) a (35) constituem um sistema não-linear através do qual, conhecidas a pressão, a temperatura e a razão oxidante/combustível, são determinadas as cinco frações molares ( $X_{HF}$ ,  $X_{H_2}$ ,  $X_{F_2}$ ,  $X_H$ ,  $X_F$ ). A maneira de resolver esse sistema é vista no Capítulo 3.

Uma vez obtidas as frações molares, a expressão abaixo é empregada para determinar as frações mássicas,

$$c_i = X_i \frac{M_{mi}}{M_m} \quad (36)$$

onde  $M_m$  é a massa molecular da mistura de gases, dada por

$$M_m = \sum_{i=1}^{ne} X_i \cdot M_{mi} \quad (37)$$

Nesta seção foi mostrado como se determina a composição química da mistura de gases, em dadas condições de razão oxidante/combustível, temperatura e pressão. Para tanto, são utilizadas as condições de equilíbrio (equação 22), a lei de Dalton (equação 25) e o balanço no número de átomos. Para o par propelente  $H_2-F_2$ , utilizado nesta dissertação, a composição química é determinada pela solução do sistema não-linear dado pelas equações (31) a (35).

## 2.5 - Resumo do capítulo

Neste capítulo foi apresentado o modelo matemático utilizado para simular o escoamento em equilíbrio químico local no interior de um bocal convergente-divergente. Esse modelo é constituído pelas equações (1) a (4).

No procedimento numérico que será empregado essas equações são resolvidas segregadamente, isto é, a equação (1) é resolvida para a pressão ( $p$ ), a equação (2) é resolvida para a velocidade ( $u$ ), a equação (3) é resolvida para a entalpia ( $h$ ) e, finalmente, a equação (4) é resolvida para a massa específica ( $\rho$ ). Como a equação de estado (equação 4) é escrita em função da temperatura, a equação (13) é resolvida para a temperatura e, além disso, a equação (18) é usada para obter a constante do gás. Nas equações (13) e (18) aparecem explicitamente as frações mássicas que são obtidas resolvendo o sistema de equações não-lineares composto pelas equações (31) a (35) junto com a equação (36), a partir da temperatura e da pressão.

## 3 - MODELO NUMÉRICO

---

### 3.1 - Considerações iniciais

No Capítulo 2 foi apresentada a formulação matemática que representa o escoamento quase-unidimensional em equilíbrio químico. Uma solução analítica dessas equações somente é possível para o caso limite do escoamento congelado de um fluido caloricamente perfeito.

Para resolver o sistema de equações diferenciais, dada pelas equações (1) a (3), é empregado um procedimento numérico baseado no método dos volumes finitos (Patankar, 1980; Maliska, 1995).

No método utilizado as equações são resolvidas de forma segregada, ou seja, as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento linear e da energia são resolvidas, respectivamente, para a pressão, a velocidade e a entalpia. Para tanto, é feito o desacoplamento entre as equações, o que consiste em estimar os valores para algumas variáveis que aparecem nas equações. Desta forma, no processo de desacoplamento, as equações de conservação da quantidade de movimento e da energia também são linearizadas.

Pode-se observar que na equação de conservação da massa não aparece explicitamente a pressão. Assim, essa equação é, inicialmente, linearizada através de uma formulação adequada a qualquer regime de velocidade (Silva e Maliska, 1988). Então, são utilizados o método SIMPLEC (Van Doormaal e Raithby, 1984) para o acoplamento pressão-velocidade e a equação de estado para o acoplamento pressão-massa específica.

Com a discretização e a linearização, cada equação diferencial é aproximada por um sistema de equações algébricas, lineares, cujo número de equações e incógnitas é igual ao

número de volumes de controle. Nessa discretização é utilizada a função de interpolação de diferenças centrais (CDS) aplicado com correção adiada (Lilek et alii, 1997). Nas representações matriciais dos sistemas lineares, as matrizes dos coeficientes resultam tridiagonais e esses sistemas são resolvidos pelo algoritmo de Thomas (Thomas, 1949; Maliska, 1995).

O procedimento descrito nesta seção é semelhante ao mostrado em Silva e Maliska (1988) e Maliska (1995). A diferença é que neste trabalho a equação da energia é escrita em termos da entalpia.

O modelo numérico empregado é descrito neste capítulo. Na seção 3.2 são apresentadas as equações diferenciais integradas no domínio discretizado. A forma de aplicar as condições de contorno é descrita na seção 3.3. A maneira de determinar o campo de temperaturas, a partir do campo de entalpias, é apresentada na seção 3.4. Na seção 3.5 é mostrado como o modelo matemático que descreve o equilíbrio químico, visto na seção 2.4, é resolvido. Finalmente, o algoritmo de solução é descrito na seção 3.6.

### **3.2 - Discretização das equações**

O princípio básico do método dos volumes finitos consiste em subdividir (discretizar) o domínio do problema em volumes de controle, nos quais as equações diferenciais são integradas. Nesse processo de integração, a equação algébrica resultante é linearizada através da avaliação de alguns de seus termos no nível iterativo anterior. Desta forma, cada equação diferencial é aproximada por um sistema de equações algébricas, lineares, cujo número de equações é igual ao número de volumes de controle. Para o caso unidimensional a matriz desse sistema linear usualmente é tridiagonal.

Uma importante decisão no modelo numérico diz respeito ao arranjo das variáveis. No arranjo co-localizado de variáveis as equações de conservação são integradas no mesmo volume de controle e as variáveis são armazenadas no centro desse volume.

No arranjo desencontrado de variáveis são utilizados volumes de controle distintos para integrar a equação de conservação da quantidade de movimento e as equações de conservação da massa e energia. Nesse arranjo as velocidades são armazenadas nas faces dos volumes de controle onde é aplicada a conservação da massa e as pressões estão armazenadas nas faces dos

volumes de controle aos quais é aplicada a conservação da quantidade de movimento linear. Em Maliska (1995) é feita uma discussão mais aprofundada sobre esses dois tipos de arranjos. Neste trabalho, como o modelo é quase-unidimensional, optou-se pela utilização do arranjo desencontrado. As vantagens do uso do arranjo co-localizado se tornam nítidas na solução de problemas tridimensionais, especialmente em coordenadas generalizadas devido a redução dos locais onde é necessário calcular as métricas da transformação.

A figura 3 (Van Doormaal, 1985) apresenta os volumes de controle para integração das equações de conservação no arranjo desencontrado de variáveis para uma geometria quase-unidimensional. Pode-se ver nessa figura que as pressões e demais escalares ( $\rho$ ,  $T$ ,  $h$ ,  $X_i$ , etc.) estão armazenados no centro dos volumes de controle para integração das equações de conservação da massa e energia. As velocidades são armazenadas nas faces desses volumes e no centro dos volumes de controle para integração da equação de conservação da quantidade linear, quando a malha é igualmente espaçada.

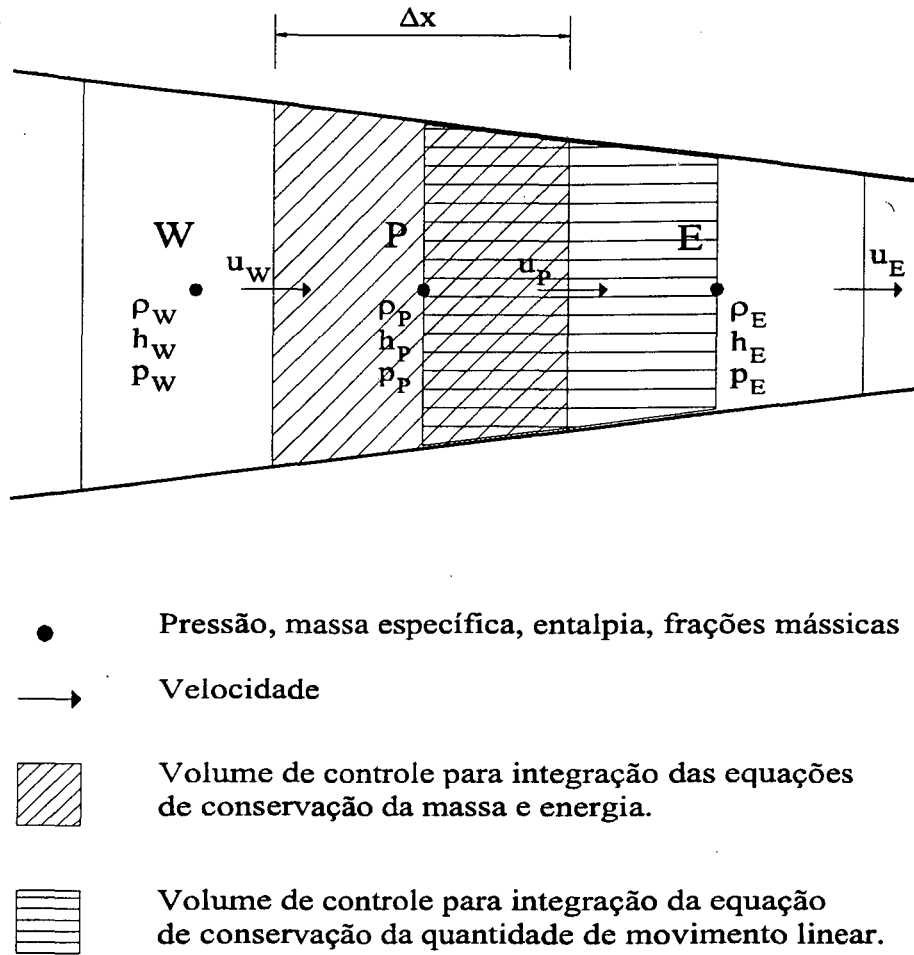
As equações de conservação da massa, energia e quantidade de movimento linear podem, em forma genérica, serem representadas por

$$\frac{\partial(\rho A\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u A\phi)}{\partial x} = S^\phi \quad (38)$$

Para recuperar as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento linear e da energia (equações 1 a 3) substitui-se  $\phi$  por 1, “u” e “h”, respectivamente, e  $S^\phi$  pelo termo fonte apropriado. A tabela 1 apresenta os valores de  $\phi$  e  $S^\phi$  para cada equação de conservação.

**Tabela 1** – Valores de  $\phi$  e do termo fonte  $S^\phi$  para as equações de conservação.

Equação de conservação	$\phi$	$S^\phi$
Massa	1	0
Quantidade de movimento linear	u	$-A \frac{\partial p}{\partial x}$
Energia	h	$A \frac{\partial p}{\partial t} + Au \frac{\partial p}{\partial x}$



**Figura 3** – Arranjo desencontrado de variáveis, nós e volumes de controle.

Integrando a equação (38) num volume de controle elementar e no intervalo de tempo  $\Delta t$ , tem-se

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{x_w}^{x_e} \left[ \frac{\partial(\rho A \phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u A \phi)}{\partial x} \right] dx \cdot dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_{x_w}^{x_e} S^\phi dx \cdot dt \quad (39)$$

onde  $x_w$  e  $x_e$  são as coordenadas da face oeste (w) e este (e) do volume de controle.

Utilizando a formulação totalmente implícita (Maliska, 1995), a equação (39) resulta em



$$\frac{M_P \cdot \phi_P - M_P^0 \cdot \phi_P^0}{\Delta t} + \dot{M}_e \cdot \phi_e - \dot{M}_w \cdot \phi_w = L[S^\phi]_P \quad (40)$$

onde o sobrescrito "0" indica que o termo é avaliado no início do intervalo de tempo, os subscritos "e" e "w" indicam que as propriedades são avaliadas nas faces este e oeste dos volumes de controle,  $L[S^\phi]_P$  é uma aproximação numérica para o termo fonte e,  $M_P$ ,  $\dot{M}_e$  e  $\dot{M}_w$  são, respectivamente, a massa do volume de controle e os fluxos de massa nas faces este e oeste desse volume. A aproximação numérica do termo fonte  $S^\phi$  será vista mais adiante.

Na equação (40), a massa do volume de controle é dada por

$$M_P = (\rho A)_P (x_e - x_w) \quad (41)$$

e os fluxos de massa nas faces este e oeste do volume de controle são avaliados, respectivamente, por

$$\dot{M}_e = (\rho u A)_e \quad (42)$$

$$\dot{M}_w = (\rho u A)_w \quad (43)$$

Apesar da propriedade  $\phi$  ser armazenada no centro do volume de controle, pela equação (40) verifica-se que para avaliar os fluxos convectivos é necessário avaliar seus valores nas faces dos volumes. Para tanto utiliza-se uma função de interpolação.

### 3.2.1 – Funções de interpolação

Para relacionar os valores das propriedades nas faces dos volumes de controle a partir das propriedades armazenadas nos centros dos volumes adjacentes são utilizadas as funções ou esquemas de interpolação. Os esquemas mais empregados junto ao método dos Volumes Finitos

em problemas unidimensionais são o UDS (Upstream Difference Scheme) (Courant et alii, 1952; Patankar 1980), o CDS (Central Difference Scheme) (Patankar, 1980), o esquema exponencial (Spalding, 1972), o QUICK (Leonard, 1979), o WUDS (Weighted Upstream Difference Scheme) (Raithby e Torrance, 1974) e o Power-Law (Patankar, 1980). Em Marchi(1993) é feita uma análise de vários esquemas de interpolação.

A função de interpolação à montante ou UDS é um das mais simples. Para essa função de interpolação o valor da propriedade na face é igual ao valor da propriedade no centro do volume a montante. O volume a montante muda de acordo com o sentido da velocidade. Assim, se a velocidade for positiva,

$$\phi_w = \phi_W \quad ; \quad \phi_e = \phi_P \quad (44)$$

Se a velocidade for negativa,

$$\phi_w = \phi_P \quad ; \quad \phi_e = \phi_E \quad (45)$$

Ou, escrevendo de uma forma geral, para as faces oeste e leste, respectivamente,

$$\phi_w = (1/2 + \alpha_w)\phi_W + (1/2 - \alpha_w)\phi_P \quad (46)$$

$$\phi_e = (1/2 + \alpha_e)\phi_P + (1/2 - \alpha_e)\phi_E \quad (47)$$

onde  $\alpha_w$  e  $\alpha_e$  são os coeficientes para as faces oeste e leste, respectivamente. Para o esquema UDS esses coeficientes valem  $1/2$  se  $u \geq 0$  ou  $-1/2$  se  $u < 0$ .

Sabe-se que soluções obtidas com esquemas de interpolação de 1ª. ordem como o UDS apresentam elevados níveis de difusão ou dissipação numérica. A difusão numérica suaviza os gradientes existentes nas soluções. Para evitar o aparecimento da dissipação numérica utiliza-se funções de interpolação de ordem mais alta.

Os esquemas de interpolação que utilizam o número de Peclet como parâmetro ou variável de entrada, tais como o esquema exponencial, Power-Law e WUDS , não podem ser

utilizados porque neste trabalho a difusividade é desprezada e, assim, esses esquemas iriam recair no esquema UDS.

A função de interpolação CDS (Central Difference Scheme) usa uma interpolação linear. Se a malha for igualmente espaçada, a propriedade na face é obtida da média das propriedades armazenados nos centros dos volumes adjacentes. Matematicamente,

$$\phi_w = \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \quad ; \quad \phi_e = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \quad (48)$$

ou, considerando as equações (46) e (47), os coeficientes  $\alpha_w$  e  $\alpha_e$  são nulos.

Essa função de interpolação é de segunda ordem e é muito menos dissipativa do que o UDS. Entretanto, a utilização desse esquema pode resultar numa matriz com coeficientes negativos ou com a diagonal principal não dominante, causando instabilidades no processo iterativo. Essas instabilidades dificultam a convergência da solução.

Para evitar os transtornos mencionados acima a função de interpolação CDS pode ser aplicada com correção adiada (Lilek et alii, 1997). A correção adiada consiste em calcular a matriz dos coeficientes com um esquema de baixa ordem, por exemplo o UDS. A diferença entre os esquemas de alta e baixa ordem é tratada explicitamente no termo independente. Assim, uma propriedade na face este, por exemplo, é obtida por

$$\phi_e = \phi_e^L + \beta_H (\phi_e^H - \phi_e^L)^* \quad (49)$$

onde os sobrescritos L e H referem-se aos esquemas de baixa (low) e alta (high) ordem, respectivamente, o sobrescrito "\*" refere-se à propriedade estimada ou conhecida de uma iteração anterior e,  $\beta_H$  é uma constante prescrita entre zero (sem correção) e 1 (com correção adiada).

Desta forma, o processo iterativo fica mais estável e, quando a convergência é atingida, a propriedade na face é igual àquela obtida com um esquema de ordem mais elevada.

Substituindo-se a equação (47) na equação (49) resulta em

$$\phi_e = \left(1/2 + \alpha_e^L\right) \phi_P + \left(1/2 - \alpha_e^L\right) \phi_E + \beta_H \left[ \left(\alpha_e^H - \alpha_e^L\right) \phi_P^* + \left(-\alpha_e^H + \alpha_e^L\right) \phi_E^* \right] \quad (50)$$

De forma análoga, para a face oeste, obtém-se que

$$\phi_w = \left(1/2 + \alpha_w^L\right) \phi_W + \left(1/2 - \alpha_w^L\right) \phi_P + \beta_H \left[ \left(\alpha_w^H - \alpha_w^L\right) \phi_W^* + \left(-\alpha_w^H + \alpha_w^L\right) \phi_P^* \right] \quad (51)$$

Quando se faz  $\alpha_e^H = \alpha_e^L$  e  $\alpha_w^H = \alpha_w^L$  não está se utilizando a correção adiada, já que os termos que multiplicam  $\beta_H$  nas equações (50) e (51) se anulam, resultando no esquema de baixa ordem. Isso é equivalente a fazer  $\beta_H$  igual a zero, como já seria de se esperar tendo em vista a equação (49). Para uma malha igualmente espaçada, quando se faz  $\alpha_e^L = \alpha_w^L = 1/2$  e  $\alpha_e^H = \alpha_w^H = 0$ , o esquema de baixa ordem utilizado é o UDS, enquanto o CDS é o esquema de ordem mais alta na correção adiada. Nas deduções que se seguem, será adotado por generalidade como esquema de interpolação o CDS com correção adiada. Para utilizar CDS sem correção adiada pode-se fazer  $\beta_H = 0$  e  $\alpha_e^L = \alpha_w^L = 0$ .

No presente caso, em que o escoamento é unidimensional e, portanto, só há um sentido de escoamento já conhecido, e que sempre os esquemas UDS e CDS, respectivamente, são adotados como esquemas de baixa e alta ordem, todo o procedimento que segue poderia assumir  $\alpha_e^L = \alpha_w^L = 1/2$  e  $\alpha_e^H = \alpha_w^H = 0$ . Entretanto, para facilitar trabalhos futuros no emprego de outros esquemas de interpolação e a extensão para o caso bidimensional, optou-se em apresentar as equações na forma geral.

Feita a avaliação das propriedades nas faces dos volumes de controle, a seguir será feita a discretização das equações de conservação.

### 3.2.2 – Equação de conservação da quantidade de movimento linear

Particularizando a equação (40) para a conservação da quantidade de movimento linear, que será utilizada para o cálculo do campo de velocidade ( $u$ ), resulta em

$$\frac{M_P u_P - M_P^0 u_P^0}{\Delta t} + \dot{M}_e u_e - \dot{M}_w u_w = -A_P (p_E - p_P) \quad (52)$$

onde o lado direito da equação acima é a aproximação numérica do termo fonte ( $L[S^u]_P$ ). Após a integração, a derivada presente nesse termo fonte é aproximada pelo método das diferenças finitas.

Avaliando as velocidades nas faces ( $u_e$  e  $u_w$ ) através das funções de interpolação, equações (50) e (51) para  $\phi=u$ , na equação (52) e rearranjando os termos chega-se a

$$a_P^u \cdot u_P = a_w^u \cdot u_w + a_e^u \cdot u_e + b_P^u \quad (53)$$

onde os coeficientes são dados, respectivamente, por (Maliska, 1995)

$$a_w^u = \dot{M}_w \left( \frac{1}{2} + \alpha_w^L \right) \quad (54)$$

$$a_e^u = -\dot{M}_e \left( \frac{1}{2} - \alpha_e^L \right) \quad (55)$$

$$a_P^u = \frac{M_P^0}{\Delta t} + a_w^u + a_e^u \quad (56)$$

e o termo independente é dado por

$$b_P^u = \frac{M_P^0 u_P^0}{\Delta t} - A_P (p_E - p_P) + \beta_H b_{ca}^u \quad (57)$$

onde o último termo, vindo da correção adiada, é dado por

$$b_{ca}^u = \dot{M}_w \left[ \left( \alpha_w^H - \alpha_w^L \right) \cdot u_w^* + \left( -\alpha_w^H + \alpha_w^L \right) \cdot u_P^* \right] - \dot{M}_e \left[ \left( \alpha_e^H - \alpha_e^L \right) \cdot u_P^* + \left( -\alpha_e^H + \alpha_e^L \right) \cdot u_e^* \right] \quad (58)$$

Para todos os efeitos, o termo  $b_p^u$  é conhecido e o sistema de equações resultante em representação matricial assume a forma tridiagonal.

Uma importante observação deve ser feita em relação à avaliação dos fluxos de massa presentes nas equações (52), (54) e (55). Esses fluxos de massa devem ser avaliados na faces dos volumes de controle para a quantidade de movimento. Nessas faces são conhecidas as massas específicas mas não as velocidades. O procedimento aqui empregado consiste em avaliar os fluxos de massa através da média aritmética dos fluxos de massa que satisfazem a conservação da massa, conforme figura 3.

### 3.2.3 – Equação de conservação da massa

Particularizando a equação (40) para a equação de conservação da massa, que será utilizada para obter o campo de pressão, e substituindo as equações (41), (42) e (43) resulta em,

$$\frac{(\rho A)_p - (\rho A)_p^0}{\Delta t} (x_e - x_w) + (\rho u A)_e - (\rho u A)_w = 0 \quad (59)$$

Vale lembrar que, como está sendo utilizado o arranjo desencontrado de variáveis, a velocidade na face este do volume de conservação da massa é a  $u_p$  e na face oeste é a  $u_w$  (ver figura 3).

O escoamento num bocal convergente-divergente possui regiões subsônicas, transônicas e supersônicas. Desta forma, é necessário utilizar uma formulação adequada a qualquer regime de velocidade (Van Doormaal, 1985; Silva, 1991). O que caracteriza se a formulação é compressível ou incompressível é a forma de linearização adotada para o produto  $(\rho u)$  na equação de conservação da massa. Na formulação para qualquer regime de velocidade, tanto a massa específica quanto a velocidade devem permanecer ativas durante a solução da equação de conservação da massa. Isso é obtido através da seguinte linearização para o produto  $\rho \cdot u$ :

$$\rho \cdot u = \rho^* \cdot u + \rho \cdot u^* - \rho^* \cdot u^* \quad (60)$$

onde o sobrescrito “\*” refere-se à propriedade estimada ou conhecida de uma iteração anterior.

Quando a equação (60) é avaliada nas faces dos volumes de controle para a conservação da massa, a variável  $u^*$  é a velocidade  $u_P^*$  disponível da solução da conservação da quantidade de movimento linear. A variável  $\rho$  na face é avaliada através do esquema de interpolação a partir das massas específicas nos centros dos volumes. A variável  $\rho^*$  na face é calculada diretamente através do esquema de interpolação de alta ordem utilizado, sem a correção adiada, a partir dos volumes disponíveis nos centros dos volumes de controle.

Assim, para resolver a equação (59) deve-se, inicialmente, fazer a linearização dada pela equação (60), além da interpolação da massa específica nas faces dos volumes, através das equações (50) e (51). Com essas substituições a equação (59) resulta em

$$m_P^p \cdot \rho_P + m_e^p \cdot \rho_E + m_w^p \cdot \rho_W + m_e^u \cdot u_P + m_w^u \cdot u_W = b^c \quad (61)$$

onde os coeficientes são calculados, respectivamente, por

$$m_P^p = \frac{A_P}{\Delta t} (x_e - x_w) + \left( \frac{1}{2} + \alpha_e^L \right) u_P^* A_e - \left( \frac{1}{2} - \alpha_w^L \right) u_W^* A_w \quad (62)$$

$$m_e^p = \left( \frac{1}{2} - \alpha_e^L \right) u_P^* A_e \quad (63)$$

$$m_w^p = - \left( \frac{1}{2} + \alpha_w^L \right) u_W^* A_w \quad (64)$$

$$m_e^u = \rho_e^* A_e \quad (65)$$

$$m_w^u = \rho_w^* A_w \quad (66)$$

$$b^c = \frac{\rho_P^0 A_P}{\Delta t} (x_e - x_w) + m_e^u u_P^* + m_w^u u_W^* + \beta_H b_{ca}^p \quad (67)$$

com

$$b_{ca}^{p'} = \left[ (\alpha_w^H - \alpha_w^L) \cdot \rho_w^* + (\alpha_w^H - \alpha_w^L) \cdot \rho_p^* \right] u_w^* A_w - \left[ (\alpha_e^H - \alpha_e^L) \cdot \rho_p^* + (\alpha_e^H - \alpha_e^L) \cdot \rho_e^* \right] u_p^* A_e \quad (68)$$

Além da linearização do produto  $\rho \cdot u$ , a equação de conservação da massa deve ser transformada numa equação para calcular a pressão. Para isso utilizam-se expressões que relacionam a velocidade e a massa específica com a pressão ou com uma correção da pressão.

O método SIMPLEC (Van Doormaal e Raithby, 1984) é utilizado para tratar o acoplamento pressão-velocidade. Nesse método, a velocidade  $u_p$  que deve conservar a massa “responde” a uma correção  $p'$  no campo de pressão através de

$$u_p = u_p^* - d_e (p'_E - p'_P) \quad (69)$$

onde  $u_p^*$  é a velocidade obtida da solução da equação de conservação da quantidade de movimento linear, e que não satisfaz em princípio a conservação da massa, com um campo estimado  $p^*$ ,  $d_e$  é o coeficiente de correção para a velocidade,  $p'_E$  e  $p'_P$  são correções de pressões.

A equação (69), uma simplificação da equação da quantidade de movimento linear, e sua análoga para a face oeste ( $w$ ), são substituídas na equação (61). O procedimento envolvido na obtenção da equação (69) pode ser acompanhado com detalhes em Silva (1991) e Maliska (1995).

No método SIMPLEC,  $d_e$  é dado por

$$d_e = \frac{A_p}{a_p^u - (a_e^u + a_w^u)} \quad (70)$$



Para transformar a equação (61) numa equação para o cálculo da correção do campo de pressões, é necessário relacionar também as massas específicas com as correções  $p'$ . Empregando o procedimento proposto por Van Doormaal (1985), tem-se que

$$\rho_P = \rho_P^* + C_P^\rho \cdot p'_P \quad (71)$$

onde

$$C_P^\rho = \left( \frac{1}{RT} \right)_P \quad (72)$$

Finalmente, substituindo as equações (69) e (71) na equação (61) a equação de conservação da massa origina uma equação para a correção da pressão. Essa equação resulta em

$$a_P^{p'} \cdot p'_P = a_W^{p'} \cdot p'_W + a_E^{p'} \cdot p'_E + b_P^{p'} \quad (73)$$

onde os coeficientes são dados, respectivamente, por

$$a_P^{p'} = m_P^\rho \cdot C_P^\rho + m_e^u \cdot d_e - m_w^u \cdot d_w \quad (74)$$

$$a_E^{p'} = -m_e^\rho \cdot C_E^\rho + m_e^u \cdot d_e \quad (75)$$

$$a_W^{p'} = -m_w^\rho \cdot C_W^\rho - m_w^u \cdot d_w \quad (76)$$

$$b_P^{p'} = \frac{\rho_P^0 A_P}{\Delta t} (x_e - x_w) - m_P^\rho \rho_P^* - m_e^\rho \rho_E^* - m_w^\rho \rho_W^* + \beta_H b_{ca}^{p'} \quad (77)$$

Desta forma, a equação de conservação da massa deu origem a um sistema linear para calcular o campo de correção da pressão. Esse sistema é tridiagonal quando representado na

forma matricial. O termo  $b_p^{p'}$  é o resíduo da equação de conservação da massa linearizada, que se anula quando a conservação da massa é satisfeita.

O novo campo de pressões é obtido por

$$p_p = p_p^* + p'_p \quad (78)$$

### 3.2.4 – Equação de conservação da energia

Por último, o campo de entalpia ( $h$ ) é obtido através da equação de conservação da energia (equação 3). Particularizando a equação (40) para a conservação da energia ( $\phi=h$ ), a aproximação do termo fonte é dada por

$$L[S^h]_p = A_{pu_p} \frac{(p_E - p_W)}{2} + A_p \frac{(p_p - p_p^o)}{\Delta t} (x_e - x_w) \quad (79)$$

Novamente, as propriedades nas faces são substituídas pelas funções de interpolação, equações (50) e (51), para  $\phi=h$ , e, rearranjando os termos, a equação da conservação da energia é escrita através de

$$a_p^h \cdot h_p = a_w^h \cdot h_w + a_e^h \cdot h_e + b_p^h \quad (80)$$

onde os coeficientes são dados por

$$a_w^h = \dot{M}_w \left( \frac{1}{2} + \alpha_w^L \right) \quad (81)$$

$$a_e^h = -\dot{M}_e \left( \frac{1}{2} - \alpha_e^L \right) \quad (82)$$

$$a_p^h = \frac{M_p^o}{\Delta t} + a_w^h + a_e^h \quad (83)$$

$$b_P^h = \frac{M_P^o h_P^o}{\Delta t} + A_{PuP} \frac{(p_E - p_W)}{2} + A_P \frac{(p_P - p_P^o)}{\Delta t} (x_e - x_w) + \beta_H b_{ca}^h \quad (84)$$

com

$$b_{ca}^h = \dot{M}_w [(\alpha_w^H - \alpha_w^L) \cdot h_w^* + (-\alpha_w^H + \alpha_w^L) \cdot h_P^*] - \dot{M}_e [(\alpha_e^H - \alpha_e^L) \cdot h_P^* + (-\alpha_e^H + \alpha_e^L) \cdot h_E^*] \quad (85)$$

Assim, a equação de conservação da energia originou um sistema linear tridiagonal, quando representado na sua forma matricial, que é resolvido para obter o campo de entalpia.

### 3.2.5 – Equação de estado

A equação de estado na forma

$$\rho = \frac{p}{RT} \quad (86)$$

é usada para o cálculo da massa-específica toda vez que o campo de temperatura é avaliado. Essa equação não requer tratamento adicional.

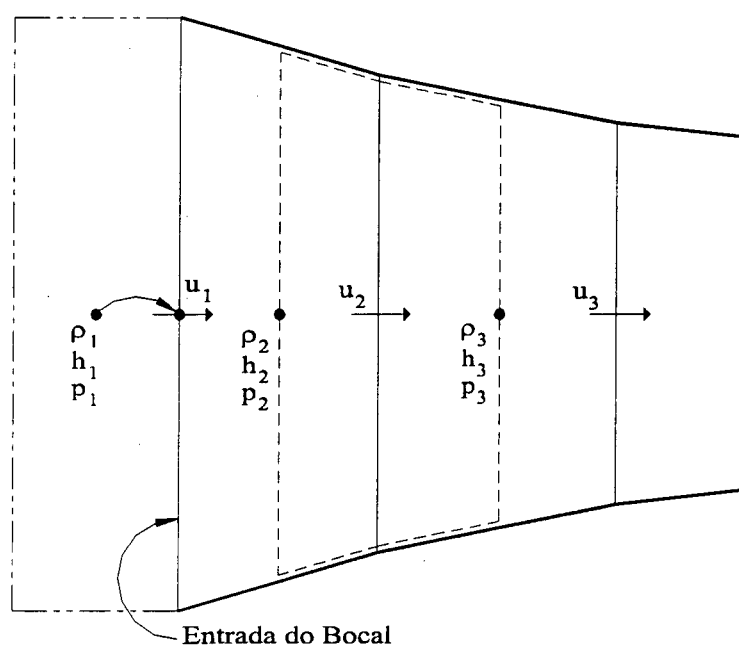
## 3.3 - Aplicação das condições de contorno

Já foi comentado na introdução que o escoamento é subsônico na entrada do bocal e supersônico na saída. Nesta seção será exposto como as variáveis são prescritas na entrada e extrapoladas na saída do escoamento.

Antes de apresentar as condições de contorno, será feita, a seguir, uma observação em relação ao esquema de armazenamento e indexação das variáveis na entrada e saída do bocal.

Como o arranjo de variáveis é desconstruído, no interior do domínio é usado o esquema mostrado na figura 3, em que as velocidades armazenadas nas respectivas faces deste dos volumes de controle possuem os mesmos índices que os escalares ( $p$ ,  $h$ ,  $T$ ,  $\rho$ , etc.) armazenados nos centros desses volumes.

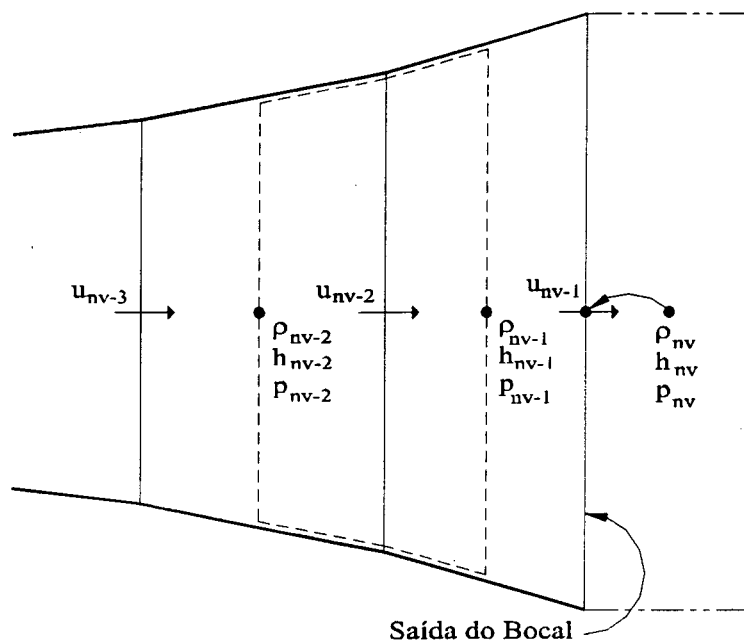
A velocidade armazenada na entrada do domínio tem o sub-índice 1, ou seja, é referenciada como  $u_1$ , como mostra a figura 4. Portanto, os escalares  $p$ ,  $T$ ,  $h$  e  $\rho$  com esse mesmo índice deveriam estar armazenados (localizados) no centro de um inexistente volume de controle a esquerda do domínio de solução, como mostra a figura. Como não existe esse volume de controle e por outro lado é necessário calcular ou prescrever os valores de  $p$ ,  $T$ ,  $h$  e  $\rho$  na entrada do bocal, as variáveis  $p_1$ ,  $T_1$ ,  $h_1$  e  $\rho_1$  são localizadas na entrada.



**Figura 4** – Entrada do domínio de cálculo.

Por outro lado, na face de saída do domínio está armazenada a velocidade com sub-índice “ $n-1$ ”. No centro do último volume estão armazenados os escalares  $p_{n-1}$ ,  $T_{n-1}$ ,  $h_{n-1}$  e  $\rho_{n-1}$ . As variáveis  $p_n$ ,  $T_n$ ,  $h_n$  e  $\rho_n$  estariam localizados no centro de um inexistente volume de controle a

direita da saída do domínio. Pelas mesmas razões acima apontadas, recebem o sub-índice “n” os escalares armazenados na face de saída do bocal, como mostrado na figura 5.



**Figura 5** – Saída do domínio de cálculo.

Em resumo, na face de entrada estão armazenados  $p_1$ ,  $T_1$ ,  $h_1$ ,  $\rho_1$  e  $u_1$ , e na face de saída  $p_n$ ,  $T_n$ ,  $h_n$ ,  $\rho_n$  e  $u_{n-1}$ .

Todas as velocidades armazenadas no domínio de solução, nos centros dos respectivos volumes de controle e nas faces de entrada e saída do bocal, fazem parte do sistema de equações lineares originado pela discretização da equação de conservação da quantidade de movimento linear em conjunto com as condições de contorno. Da mesma maneira, todas as correções de pressão e entalpia armazenadas fazem parte dos sistemas de equações lineares originados pelas discretizações das equações de conservação da massa e da energia e suas condições de contorno, respectivamente. Assim, o número de incógnitas nos sistemas de equações para o cálculo da entalpia e da correção de pressão é igual a “n” e para o cálculo da velocidade igual a “n-1”.

### 3.3.1 – Condições de contorno na entrada do domínio

Com escoamento subsônico na entrada, a tentativa de se prescrever a velocidade, a temperatura e a pressão implicaria que o fluxo de massa no bocal também estaria prescrito. Porém, na realidade esse último é uma incógnita que deve ser determinada pela solução do problema. Por outro lado, sob o ponto de vista matemático, através das relações características é possível verificar que uma variável na fronteira deve ser extrapolada do interior do domínio enquanto que as demais variáveis podem ser especificadas no contorno (Azevedo, 1990; Anderson, 1995). Dessa forma, na entrada do bocal serão calculadas a pressão, a entalpia, a temperatura e a massa específica em função das condições na câmara, enquanto que a velocidade será extrapolada a partir da própria solução no interior do bocal.

Uma das maneiras de fazer essa extrapolação é através de

$$u_1 = u_2 + \left( \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_2} \right) (u_2 - u_3)^* \quad (87)$$

onde  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$  são as coordenadas das velocidades  $u_1$ ,  $u_2$  e  $u_3$ , respectivamente.

O asterisco indica que a diferença entre as velocidades  $u_2$  e  $u_3$  é aplicada explicitamente. Isso é feito para que a matriz resultante do sistema de equações seja tridiagonal. Quando houver a convergência do processo iterativo as variáveis da penúltima iteração serão iguais às variáveis da última iteração, dentro de uma determinada tolerância.

Quando o interesse é obter soluções para o regime permanente, pode-se calcular a velocidade na entrada igualando o fluxo de massa na entrada com o fluxo de massa na saída do primeiro volume do interior do domínio, resultando em

$$u_1 = u_2 \left( \frac{\rho_{2w} \cdot A_2}{\rho_1 \cdot A_1} \right) \quad (88)$$

onde  $\rho_{2w}$  é a massa específica localizada na face oeste do volume 2. O valor dessa massa específica é calculado através da função de interpolação de alta ordem utilizada.

As condições de contorno para a entalpia e a pressão na entrada são aplicadas considerando um escoamento adiabático e reversível, portanto isentrópico, entre o reservatório e a entrada do bocal. Assim sendo, as condições de estagnação na entrada do bocal serão iguais às do fluido na câmara de combustão ou reservatório. Como a entalpia na câmara é conhecida, a entalpia na entrada pode ser calculada através de

$$h_1 = h_C - \rho_1^* \frac{u_1^2}{2} \quad (90)$$

onde o asterisco sobre  $\rho_1$  indica que essa variável assume o último valor disponível.

A expressão que dá a variação da entropia entre a câmara de combustão e a entrada do domínio é utilizada para obter a pressão na entrada. Essa expressão é dada por

$$\int_{s_c}^{s_1} [ds] = \int_{T_c}^{T_1} \left[ c_p \frac{dT}{T} \right] - R_1 \int_{p_c}^{p_1} \left[ \frac{dp}{p} \right] \quad (91)$$

onde  $s_1$ ,  $T_1$  e  $p_1$  são, respectivamente, a entropia, a temperatura e a pressão na entrada, e  $s_c$ ,  $T_c$  e  $p_c$  são a entropia, a temperatura e pressão na câmara de combustão ou reservatório, e  $R_1$  é a constante de gás na entrada do bocal, que pode-se assumir constante desde as condições do reservatório.

Como o escoamento é isentrópico entre a câmara de combustão e a entrada do bocal, o termo do lado esquerdo da equação (91) é nulo. O primeiro termo do lado direito é a variação da entropia no estado padrão, isto é, a variação da entropia caso a pressão fosse a de referência (1 atm). Essa variação de entropia é expressa por

$$s_1^o - s_c^o = \int_{T_c}^{T_1} \left[ c_p \frac{dT}{T} \right] \quad (92)$$

onde  $s_1^o$  e  $s_c^o$  são, respectivamente, a entropia de estado padrão na entrada do bocal e na câmara de combustão.

Assim, explicitando a pressão  $p_1$  na equação (91) e empregando a equação (92), chega-se a

$$p_1 = p_C \cdot \exp\left(\frac{s_1^o - s_C^o}{R_1}\right)^* \quad (93)$$

onde, mais uma vez o asterisco indica que os termos no interior dos parênteses são avaliados com os campos disponíveis.

A equação da conservação da massa é resolvida para uma correção da pressão ( $p'$ ) e, desta forma, ao aplicar a condição de contorno dada pela equação (93) a correção de pressão na entrada do domínio deve ser nula. O coeficiente de correção da velocidade,  $d_e$ , que aparece na equação (69), também é nulo. Com isso, a equação (69) se reduz a  $u_1 = u_1^*$ , ou seja, variações de pressão não alteram a velocidade na entrada do domínio durante o ciclo iterativo de solução da equação de conservação da massa.

Conhecidas a pressão e a entalpia na entrada do bocal, a temperatura, as frações mássicas e a massa específica são calculadas através dos procedimentos que serão vistos nas seções 3.4 e 3.5 e através da equação de estado (equação 86).

### 3.3.2 – Cálculo das variáveis na saída do domínio

Na saída o escoamento é supersônico e, assim, não é necessário prescrever condições de contorno pois as propriedades nessa região dependem exclusivamente do escoamento a montante. Entretanto o procedimento numérico requer os valores das propriedades na saída do domínio. Desta maneira, as variáveis devem “flutuar” em função do resultado no interior do bocal. Para tanto, a velocidade, a pressão e a entalpia são extrapoladas linearmente utilizando os valores armazenados nos dois últimos volumes. Isso é equivalente a fazer as derivadas de segunda ordem nulas na saída do domínio. Matematicamente, as “condições de contorno” na saída são, respectivamente,



$$u_{n-1} = u_{n-2} + \left( \frac{x_{n-1} - x_{n-2}}{x_{n-2} - x_{n-3}} \right) (u_{n-2} - u_{n-3})^* \quad (94)$$

$$p_n = p_{n-1} + \left( \frac{x_n - x_{n-1}}{x_{n-1} - x_{n-2}} \right) (p_{n-1} - p_{n-2})^* \quad (95)$$

$$h_n = h_{n-1} + \left( \frac{x_n - x_{n-1}}{x_{n-1} - x_{n-2}} \right) (h_{n-1} - h_{n-2})^* \quad (96)$$

As coordenadas espaciais “x” que aparecem nas equações acima referem-se à posição da propriedade com mesmo subscrito. Assim, as coordenadas “ $x_{n-1}$ ”, “ $x_{n-2}$ ” e “ $x_{n-3}$ ” que aparecem na equação (94) referem-se às posições em que são armazenadas as velocidades “ $u_{n-1}$ ”, “ $u_{n-2}$ ” e “ $u_{n-3}$ ”, respectivamente. De forma semelhante, nas equações (95) e (96), as coordenadas “ $x_n$ ”, “ $x_{n-1}$ ” e “ $x_{n-2}$ ” referem-se às posições em que são armazenadas as pressões “ $p_n$ ”, “ $p_{n-1}$ ” e “ $p_{n-2}$ ” e as entalpias “ $h_n$ ”, “ $h_{n-1}$ ” e “ $h_{n-2}$ ”.

Na saída do domínio, ao resolver a equação de conservação da massa, a correção para a pressão,  $p'$ , é obtida da extrapolação das correções dos dois últimos volumes, da mesma forma que é mostrado na equação (95). E, também, o coeficiente de correção da velocidade é obtido por extrapolação dos coeficientes dos dois últimos volumes, da mesma maneira que é feito com a velocidade (equação 94).

A temperatura, a massa específica e as frações molares na face de saída são obtidas em função da pressão e entalpia nesses locais.

### 3.4 - Determinação da temperatura a partir da entalpia

Uma vez determinada a entalpia da mistura de gases, é necessário obter sua temperatura para, então, calcular a massa específica a partir da equação de estado e determinar a composição química da mistura.

A equação (13), que relaciona a entalpia da mistura de gases ( $h$ ) com sua temperatura e pressão, é resolvida para a temperatura, mantendo a pressão constante. Como essa equação não é

linear, é utilizado um procedimento numérico iterativo baseado no método de Newton. Nesse procedimento a entalpia é aproximada pela série de Taylor, entretanto, desprezando os termos a partir da segunda ordem. Essa expressão é dada por

$$h = h^* + \left( \frac{\partial h}{\partial T} \right)_p (T - T^*) \quad (97)$$

Pode-se observar que a derivada que aparece na equação acima é a definição de calor específico à pressão constante (equação 14). Resolvendo a equação (97) para a temperatura resulta na seguinte expressão:

$$T = T^* + \frac{(h - h^*)}{c_p} \quad (98)$$

onde  $c_p$  é avaliado através da equação (17) com uma temperatura estimada ou de uma iteração anterior.

Assim, com uma temperatura estimada  $T^*$  é calculada uma entalpia  $h^*$  e o valor do calor específico correspondente. Com a entalpia  $h$  conhecida é calculado um novo valor para a temperatura através da equação (98). Então, faz-se a temperatura  $T^*$  igual à temperatura  $T$  calculada e repete-se o processo até que um critério de convergência seja satisfeito.

Nesse processo iterativo a composição química é mantida fixa e o calor específico a pressão constante é reavaliado a cada iteração.

### 3.5 - Procedimento numérico para a determinação da composição química

As composições químicas no centro de cada volume de controle e nas seções de entrada e saída do bocal são determinadas a partir das pressões e temperaturas locais através do sistema dado pelas equações (31) a (35). Essas equações não são lineares e requerem um procedimento iterativo para serem resolvidas. O procedimento utilizado é baseado no método de Newton-

Raphson para sistemas de equações. Para tanto, o sistema de equações é, inicialmente, escrito na forma

$$\begin{aligned}
 f_1(X_1, \dots, X_{ne}) &= 0 \\
 \dots \\
 f_j(X_1, \dots, X_{ne}) &= 0 \\
 \dots \\
 f_{ne}(X_1, \dots, X_{ne}) &= 0
 \end{aligned} \tag{99}$$

Então, as equações são aproximadas pela série de Taylor, desprezando os termos iguais ou superiores à segunda ordem, resultando no sistema linear com “ne” variáveis e equações, dado por

$$\begin{aligned}
 \left( \frac{\partial f_1}{\partial X_1} \right)^k \delta X_1 + \dots + \left( \frac{\partial f_1}{\partial X_{ne}} \right)^k \delta X_{ne} &= f_1^k \\
 \dots \\
 \left( \frac{\partial f_j}{\partial X_1} \right)^k \delta X_1 + \dots + \left( \frac{\partial f_j}{\partial X_{ne}} \right)^k \delta X_{ne} &= f_j^k \\
 \dots \\
 \left( \frac{\partial f_{ne}}{\partial X_1} \right)^k \delta X_1 + \dots + \left( \frac{\partial f_{ne}}{\partial X_{ne}} \right)^k \delta X_{ne} &= f_{ne}^k
 \end{aligned} \tag{100}$$

onde o sobrescrito “k” indica o nível iterativo e  $\delta X_j$  é dado por

$$\delta X_i = X_i^k - X_i^{k+1} \tag{101}$$

onde o sobrescrito “k+1” indica o próximo nível iterativo.

Com as frações molares estimadas ou da última iteração, o sistema linear dado pela equação (100) é resolvido através do método de Gauss para  $\delta X_i$ . As estimativas para as frações

molares do próximo nível iterativo ( $X_i^{k+1}$ ) são obtidas através da equação (101). Repete-se o ciclo até que um critério de convergência seja satisfeito.

Uma importante observação deve ser feita em relação a solução desse sistema não-linear. No decorrer do processo iterativo algumas frações molares podem assumir valores negativos. Como podem ser vistos nas equações (33) a (35), é necessário calcular a raiz quadrada dessas frações molares, inviabilizando a sequencia do processo iterativo. Desta maneira, quando uma fração molar resultar negativa seu valor será artificialmente alterado para  $10^{-8}$ . Esse procedimento não altera a solução final das equações.

### 3.6 - Procedimento iterativo de solução

Nesta seção é apresentado o algoritmo empregado na simulação do escoamento em equilíbrio químico no interior de um bocal.

Uma estrutura iterativa para resolver o problema aqui apresentado poderia envolver diversos ciclos iterativos, sendo esses ciclos devidos ao transiente, à linearização e acoplamentos das equações. Entretanto alguns ciclos iterativos são omitidos porque, através de experiências numéricas, verificou-se que executando-os apenas uma vez reduz-se bastante o tempo computacional sem alterar o resultado final. Deseja-se encontrar a solução para o regime permanente e, assim, o ciclo iterativo devido ao transiente também é executado apenas uma vez por passo de tempo.

O procedimento iterativo utilizado nessa dissertação é:

1. Especificação das condições de pressão, temperatura e razão oxidante/combustível dos reagentes injetados na câmara de combustão ou reservatório.
2. Determinação da temperatura e composição química dos produtos na câmara de combustão a partir das reações elementares e respectivas constantes de equilíbrio.
3. Especificação das condições iniciais de pressão, temperatura e velocidade ao longo do bocal. Para facilitar a convergência, essas condições são obtidas da solução analítica do escoamento isentrópico de um gás caloricamente perfeito no interior de um bocal.

4. Com os valores iniciais de pressão e temperatura, é obtida a composição química ao longo do bocal com a solução, através do procedimento descrito na seção 3.5, do sistema dado pelas equações (31) a (35).
5. Através das equações (17) e (18), respectivamente, são determinados o calor específico à pressão constante ( $c_p$ ) e a constante do gás ( $R$ ) ao longo do bocal.
6. Com os campos estimados de velocidade e massa específica, são avaliados os fluxos de massa nas faces dos volumes de controle usados para resolver a equação de conservação da massa, através das equações (42) e (50).

A partir do próximo item tem-se o início do ciclo iterativo do tempo.

7. São estimados os campos de pressão, entalpia, temperatura, massa específica e velocidade para o instante  $t+\Delta t$ . Geralmente os campos estimados são os próprios valores iniciais ou os valores disponíveis da iteração anterior (instante  $t$ ).

A partir do próximo item tem-se o início do ciclo iterativo da equação da conservação da quantidade de movimento linear.

8. Através das equações (54) a (56) são obtidos os coeficientes do sistema linear para a equação de conservação da quantidade de movimento linear ( $a^u$ ).
9. Através da equação (70) são obtidos os coeficientes de correção da velocidade ( $d_e$ ).

A partir do próximo item tem-se o início do ciclo iterativo da conservação da massa.

10. São calculados os coeficientes do sistema linear da equação da conservação da massa ( $a^p$ ), através das equações (74) a (76).
11. É calculado o termo fonte do sistema linear da equação de conservação da quantidade de movimento linear ( $b^u$ ), através da equação (57).
12. Através das equações (88) e (94) são obtidas as condições de contorno para a velocidade.
13. O sistema linear da equação de conservação da quantidade de movimento, equação (53) é resolvido para a velocidade. O campo de velocidade obtido neste item não satisfaz a conservação da massa porque foi obtido utilizando campos estimados de pressão e massa específica.
14. O termo fonte ou resíduo da equação de conservação da massa linearizada ( $b^p$ ) é calculado através da equação (77).
15. Através das equações (93) e (95) são obtidas as condições de contorno para a pressão ( $p$ ) e correção de pressão ( $p'$ ).
16. O sistema linear da equação de conservação da massa, equação (73), é resolvido para o campo de correção de pressão ( $p'$ ).

17. Com o campo de correção de pressão ( $p'$ ), os campos de pressão e massa específica são corrigidos através das equações (78) e (71).

18. O campo de velocidade é corrigido através da equação (69).

Fim do ciclo iterativo da conservação da massa, iniciado no item 10. No final desse ciclo iterativo, se o resíduo da equação de conservação da massa linearizada (calculado no item 14) for nulo, dentro de uma determinada tolerância, significa que foi obtido um campo de velocidade que satisfaz as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento linear, com um campo calculado de massa específica para os campos estimados de temperatura e composição química (frações mássicas). Deve-se observar, entretanto, que os coeficientes da equação da conservação da quantidade de movimento foram obtidos com fluxos de massa estimados.

19. Os fluxos de massa nas faces dos volumes de controle são avaliados através das equações (42) e (50).

Fim do ciclo iterativo da conservação da quantidade de movimento linear, iniciado no item 8.

20. São calculados os coeficientes do sistema linear da equação de conservação da energia através das equações (81) a (83).

A partir do próximo item tem-se o início do ciclo iterativo da conservação da energia.

21. Através da equação (84) é calculado o termo fonte do sistema linear da equação de conservação de energia.

22. As condições de contorno para a entalpia são obtidas através das equações (90) e (96).

23. O sistema linear da equação de conservação da energia, equação (80), é resolvido para o campo de entalpia.

24. A equação (98) é resolvida para determinar o campo de temperatura que gera o campo de entalpia obtido no item anterior.

Fim do ciclo iterativo da conservação da energia, iniciado no item 21. Nesse ciclo iterativo foram obtidos campos de entalpia e temperatura para um campo estimado (e fixo) de composição química (frações mássicas).

25. A composição química ao longo do bocal é determinada a partir dos campos de pressão e temperatura disponíveis, resolvendo, através do procedimento descrito na seção 3.5, o sistema não-linear dado pelas equações (31) a (35).

26. Através das equações (17) e (18), respectivamente, são determinados o calor específico à pressão constante ( $c_p$ ) e a constante do gás ( $R$ ) ao longo do bocal.

27. Com os campos disponíveis de pressão, temperatura e constante do gás, é obtido o campo de massa específica através da equação de estado (equação 86).

28. Os fluxos de massa nas faces dos volumes de controle são avaliados através das equações (42) e (50).

Retornar ao item 7 até que seja atingido o número de iterações desejadas ou até que as condições de regime permanente, obedecido determinado critério, sejam alcançados.

Os sistemas lineares tridiagonais dos itens 13, 16 e 23 são resolvidos através do algoritmo de Thomas (Thomas, 1949; Maliska, 1995).

O ciclo iterativo para a conservação da massa, compreendido entre os itens 10 a 18 do algoritmo de solução, deve-se, principalmente, ao acoplamento pressão-velocidade. Através de experiências numéricas, verificou-se que esse ciclo iterativo pode ser executado apenas duas vezes para que o esforço computacional seja diminuído, obviamente, sem prejudicar a convergência da solução.

Da mesma forma, para reduzir o esforço computacional, o ciclo iterativo para a solução da equação da quantidade de movimento, compreendido entre os itens 8 e 19, é executado apenas uma vez.

O critério de parada do ciclo iterativo da conservação da energia (itens 21 a 24), que também inclui o procedimento iterativo para determinar a temperatura (ver seção 3.4), é feito através da variação sofrida pela temperatura de uma iteração para outra. O ciclo iterativo é finalizado quando

$$\left| T_P - T_P^* \right|_{\text{máx}} \leq \text{Tol}^T \quad (102)$$

onde  $\text{Tol}^T$  é a tolerância utilizada. Para obter os resultados apresentados no próximo capítulo utilizou-se  $\text{Tol}^T = 10^{-5}$  K, num limite de no máximo cinco iterações.

A condição para término do procedimento iterativo de solução (regime permanente) é verificada através do resíduo da pressão,

$$\left| p_P - p_P^* \right|_{\text{máx}} \leq \text{Tol}^P \quad (103)$$

onde  $Tol^P$  é a tolerância. Em todos os resultados apresentados utilizou-se  $Tol^P = 10^{-8}$  Pa.

Ainda é feita a verificação do regime permanente através do resíduo da massa. Neste trabalho o resíduo da massa é definido por

$$r^m = \left| \dot{m}_1 - \dot{m}_{e,P} \right|_{\text{máx}} \quad (104)$$

onde  $\dot{m}_1$  é o fluxo de massa na entrada do bocal,  $\dot{m}_{e,P}$  é o fluxo de massa na face este do volume de controle P. Em todas as simulações observou-se que, uma vez satisfeita a equação (103), o resíduo da massa sempre é menor do que  $10^{-8}$  kg/s (para um fluxo de massa da ordem de  $10^{-1}$  kg/s), já que o critério estabelecido pela equação (103) com a tolerância especificada está próxima ao erro de máquina.

### 3.7 – Resumo do capítulo

Neste capítulo foi apresentado o modelo numérico empregado na obtenção da solução das equações que modelam o escoamento de uma mistura de gases em equilíbrio químico no interior de um bocal convergente-divergente.

Na seção 3.2 é mostrada a discretização, através do método dos volumes finitos, das equações de conservação da massa, da quantidade de movimento linear e da energia. Essas equações diferenciais parciais, em conjunto com as condições de contorno, dão origem a sistemas de equações lineares que são resolvidos para os campos de pressão, velocidade e entalpia. As condições de contorno, e a forma como são aplicadas, são apresentadas na seção 3.3. Na seção 3.4 é mostrado o método numérico utilizado para determinar o campo de temperatura a partir do campo de entalpia. O procedimento numérico utilizado para resolver o sistema de equações não-lineares que descrevem o equilíbrio químico local de uma mistura de gases, determinando sua composição química, é apresentado na seção 3.5. Finalmente, o algoritmo de solução implementado no programa computacional é descrito em detalhes na seção 3.6.



## **4 - RESULTADOS**

---

### **4.1 - Considerações iniciais**

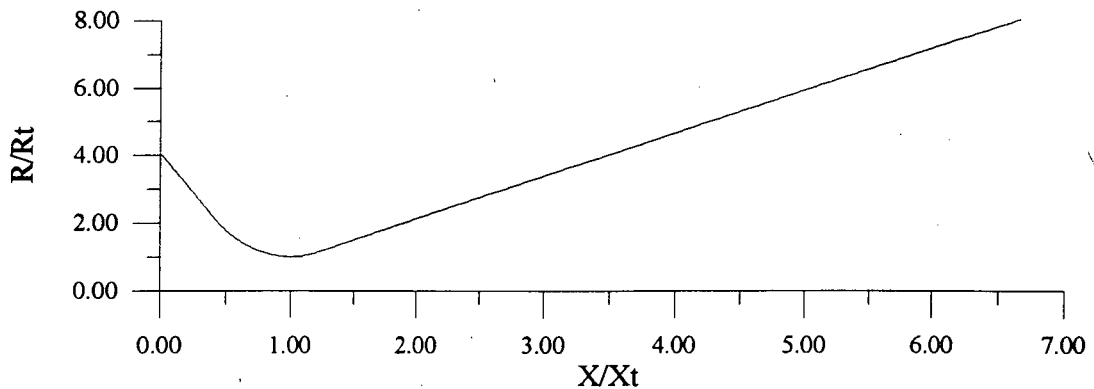
Nos Capítulos 2 e 3 foram mostrados, respectivamente, a formulação matemática e o modelo numérico utilizados para simular escoamentos em equilíbrio químico local no interior de bocais do tipo convergente-divergente. Neste capítulo são apresentados os resultados das simulações numéricas realizadas através do programa computacional elaborado para esta dissertação, utilizando a geometria do bocal convergente-divergente mostrada em Barros et alii (1990).

Na seção 4.2 a geometria do bocal é descrita em detalhes e são apresentadas as condições na câmara de combustão. Na seção 4.3 é feita a verificação do programa computacional através da comparação das soluções exata e numérica, obtidas para escoamentos caloricamente perfeitos. Na seção 4.4 são mostrados os resultados das simulações para escoamentos congelados. Os resultados obtidos para escoamentos em equilíbrio químico local são apresentados na seção 4.5.

### **4.2 - Geometria do problema e condições na câmara de combustão**

As condições iniciais e o bocal utilizados nas simulações foram retirados de Barros et alii (1990). O bocal possui um comprimento total igual a 0,400 m; o ângulo do convergente cônico é de 45°; a posição da garganta ( $X_t$ ) é de 0,06 m; o raio da garganta ( $R_t$ ) é igual a 0,0127 m, o raio de curvatura na garganta é igual a 0,0508 m e o ângulo do divergente cônico é de 15°. A razão

entre a área na saída do bocal e a área na garganta é igual a 64,5. A figura 6 mostra um gráfico com a geometria do bocal.



**Figura 6** – Geometria do bocal utilizado neste trabalho.

Os propelentes  $H_2$  e  $F_2$  são injetados e atomizados na câmara de combustão a uma temperatura ( $T_R$ ) de 298,15 K, com uma razão mássica de mistura oxidante/combustível igual a 12, e a uma pressão de 698,5 kPa. Com a reação de combustão há um aumento substancial da temperatura dos gases no interior da câmara. Essa temperatura e a composição química na câmara são calculadas considerando que a mistura é homogênea e que a reação é adiabática, a pressão constante e completa. Considera-se, também, que a velocidade dos gases é tão pequena que sua energia cinética pode ser desprezada.

Assim, para determinar as condições na câmara é feito um balanço de energia entre os reagentes e os produtos da combustão, o que resulta em (Zucrow e Hoffman, 1977 e Kuo, 1986)

$$h_R(T_R, c_{i,R}) = h_C(T_C, c_{i,C}) \quad (105)$$

onde os subscritos “R” e “C” indicam, respectivamente, propriedades dos reagentes (propelentes) e do produtos da combustão na câmara. Desta maneira,  $T_C$  é a temperatura dos produtos da combustão adiabática e a pressão constante.

Para uma dada reação,  $h_R$  pode ser facilmente calculada através da equação (13), uma vez que a razão oxidante/combustível e a temperatura dos reagentes são especificadas. A temperatura e a composição química dos produtos da combustão devem ser determinadas através da equação

(13) e do sistema não-linear formado pelas equações (31) a (35), de maneira a satisfazer a equação (105).

Devido ao caráter não-linear da equação (13), principalmente porque as frações mássicas ( $c_i$ ) também dependem da temperatura dos produtos da combustão, um procedimento numérico iterativo é utilizado para determinar a temperatura dos produtos da combustão. O procedimento, baseado no método da bisseção, é descrito a seguir:

1. São especificadas a temperatura e a razão oxidante/combustível dos reagentes, além da pressão na câmara de combustão;
2. A entalpia dos reagentes é calculada através da equação (13);
3. São escolhidas as temperaturas estimadas  $T_1$  e  $T_2$ , de maneira que a solução  $T_C$  esteja nesse intervalo;
4. São obtidas as entalpias  $h_1(T_1)$  e  $h_2(T_2)$ , através da equação (13);
5. É calculada uma estimativa para  $T_C$ , através de  $T_C^i = \frac{T_1 + T_2}{2}$ ;
6. Com  $T_C^i$ , a entalpia  $h_C^i$  é obtida através da equação (13);
7. Se  $h_C^i - h_R > 0$  faz-se  $T_2 = T_C^i$ , caso contrário faz-se  $T_1 = T_C^i$ ;
8. Retorna-se ao item 4 até que  $|h_C^i - h_R| \leq \text{tolerância}$ , ou até que seja atingido o número máximo de iterações. A tolerância utilizada foi de 0,1 J/kg.

É importante enfatizar que o cálculo das entalpias, que aparece nos itens 2, 4 e 6, inclui a obtenção da composição química (seção 2.4) para a temperatura estimada em cada item, com a razão oxidante/combustível e a pressão da câmara especificadas. O procedimento mostrado acima corresponde ao item 2 do procedimento de solução apresentado na seção 3.6.

O objetivo desse procedimento, obter a temperatura a partir da entalpia, é o mesmo que aquele mostrado na seção 3.4, através do método de Newton-Raphson. O motivo para empregar um procedimento baseado no método da bisseção é que para diferentes reações, pressões na câmara de combustão e razões oxidante/combustível não se tem idéia qual seria uma estimativa inicial para a temperatura da combustão. Se essa estimativa não for boa o procedimento baseado no método de Newton-Raphson pode divergir. Por outro lado, o método descrito acima demanda mais tempo de processamento.

Na tabela 2 é feita uma comparação entre as propriedades na câmara de combustão obtidas no presente trabalho, e com o programa NASA SP-273 (Gordon e McBride, 1971), para as condições descritas acima. Também há uma coluna referente aos resultados retirados de Zucrow e Hoffman (1977). Nessa tabela,  $\gamma_f$  é a razão entre os calores específicos,  $\gamma_e$  é o expoente isentrópico, “a” é a velocidade do som e os subscritos “f” e “e” indicam propriedades da mistura de gases congelada e em equilíbrio químico, respectivamente. Na equação (17) viu-se a expressão empregada para determinar o calor específico a pressão constante de uma mistura de gases. O segundo termo dessa equação contempla o efeito da variação da composição química. Quando é simulado o escoamento congelado, considera-se que a composição química na câmara de combustão seja a mesma que a do equilíbrio químico, mas sem ocorrer reações entre as espécies químicas. Ou seja,  $c_{pf}$  é a média ponderada dos calores específicos a pressão constante das espécies químicas, enquanto que a  $c_{pe}$  é o calor específico a pressão constante do mistura de gases em equilíbrio químico. O Apêndice 3 apresenta as expressões para calcular o expoente isentrópico e a velocidade do som em sistemas reativos.

**Tabela 2 – Condições na câmara de combustão.**

Propriedade	Presente trabalho	NASA SP-273	Zucrow et alii (1977)
p (kPa)	689,5	689,5	689,5
T (K)	4131,6	4132,6	4133
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	0,2767	0,2767	–
X <sub>HF</sub> (adim)	0,6270	0,6268	0,6268
X <sub>H2</sub> (adim)	0,09503	0,09543	0,09537
X <sub>F2</sub> (adim)	< 10 <sup>-5</sup>	< 10 <sup>-5</sup>	< 10 <sup>-5</sup>
X <sub>H</sub> (adim)	0,2351	0,2346	0,2347
X <sub>F</sub> (adim)	0,04290	0,04317	0,04314
R (J/kg.K)	603,03	602,96	–
$c_{pf}$ (J/kg.K)	2399,6	2399,7	–
$\gamma_f$ (adim)	1,3357	1,3356	–
$c_{pe}$ (J/kg.K)	10860,9	10863,4	–
$\gamma_e$ (adim)	1,1625	1,1626	–
a (m/s)	1701,89	1702,03	–

Pode-se observar na tabela 2 que as condições na câmara de combustão foram corretamente determinadas, apresentando uma boa concordância com os valores obtidos através de outros programas. As diferenças, que são pequenas, podem ser creditadas, principalmente, ao fato de que no programa NASA SP-273 a composição química é obtida através da minimização da função de Gibbs e despreza as espécies químicas que apresentam frações molares menores do que  $10^{-5}$ .

### 4.3 - Escoamento de um gás caloricamente perfeito

Inicialmente, foram feitas simulações para o escoamento isentrópico de um gás caloricamente perfeito com a finalidade de verificar a implementação do programa computacional. Nesse caso, o fluido é monoespécie e tem seus calores específicos constantes. Assim, a expressão que relaciona a entalpia em função da temperatura é obtida da integração da equação (10), resultando em,

$$h = c_p(T - T_{ref}) + h^f \quad (106)$$

Como a entalpia é uma função linear da temperatura, é desnecessário utilizar o processo iterativo para determinação da temperatura em função da entalpia descrito na seção 3.4.

Com essas simplificações, soluções teóricas exatas para o problema são bem conhecidas (John, 1984). Por exemplo, o número de Mach ( $M$ ) está relacionado à razão entre a área local e a área da garganta ( $A/A_t$ ), além da razão entre os calores específicos ( $\gamma$ ), através de

$$\frac{A}{A_t} = \frac{\left(1 + \frac{\gamma-1}{2}\right)^{(\gamma+1)/(2-2\gamma)}}{M \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)^{(\gamma+1)/(2-2\gamma)}} \quad (107)$$

As simulações são realizadas para um gás com razão de calores específicos igual a 1,1625 e constante do gás ( $R$ ) igual a 603,0 J/kg-K. e com as seguintes condições na câmara de combustão: temperatura de estagnação ( $T_C$ ) igual a 4131,6 K e pressão de estagnação ( $P_C$ ) igual a 689,5 kPa.

Os resultados das simulações feitas utilizando-se apenas a função de interpolação UDS (Courant, 1952), fazendo-se  $\beta_H = 0$  na equações (57), (77) e (84), apresentaram difusão numérica (Maliska, 1995). Por exemplo, empregando-se 200 volumes de controle de mesmo tamanho, para o número de Mach foi encontrada uma diferença de 4% entre as soluções numérica e analítica. Com 400 volumes de controle essa diferença cai para 2%. A figura 7 apresenta o gráfico com as curvas do número de Mach obtidas empregando 400 volumes de controle e funções de interpolação UDS e CDS.

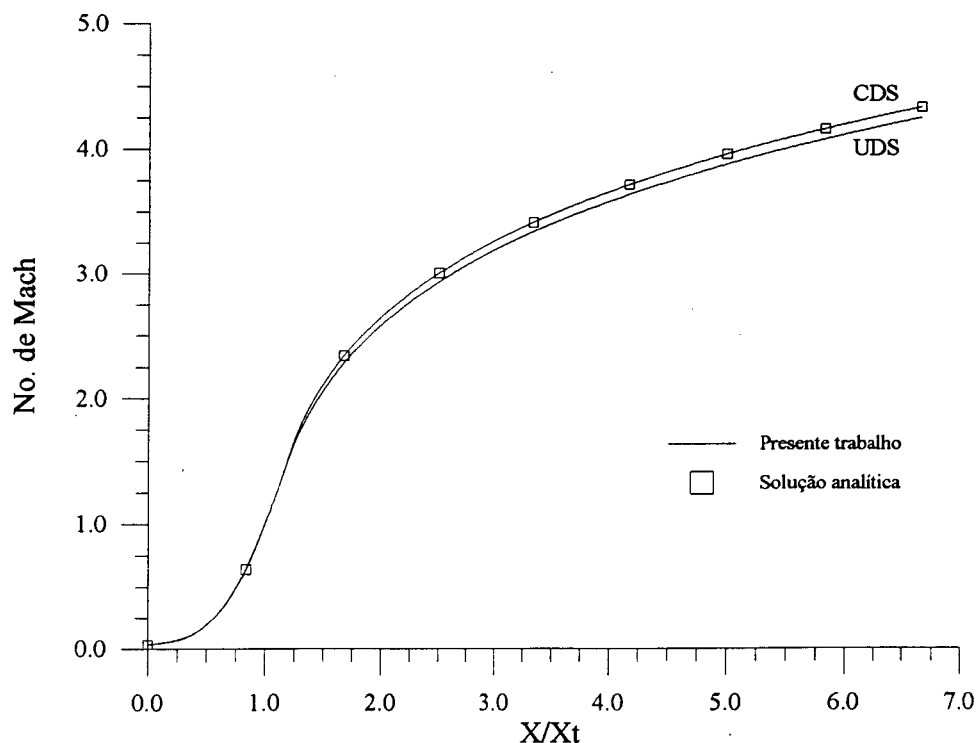
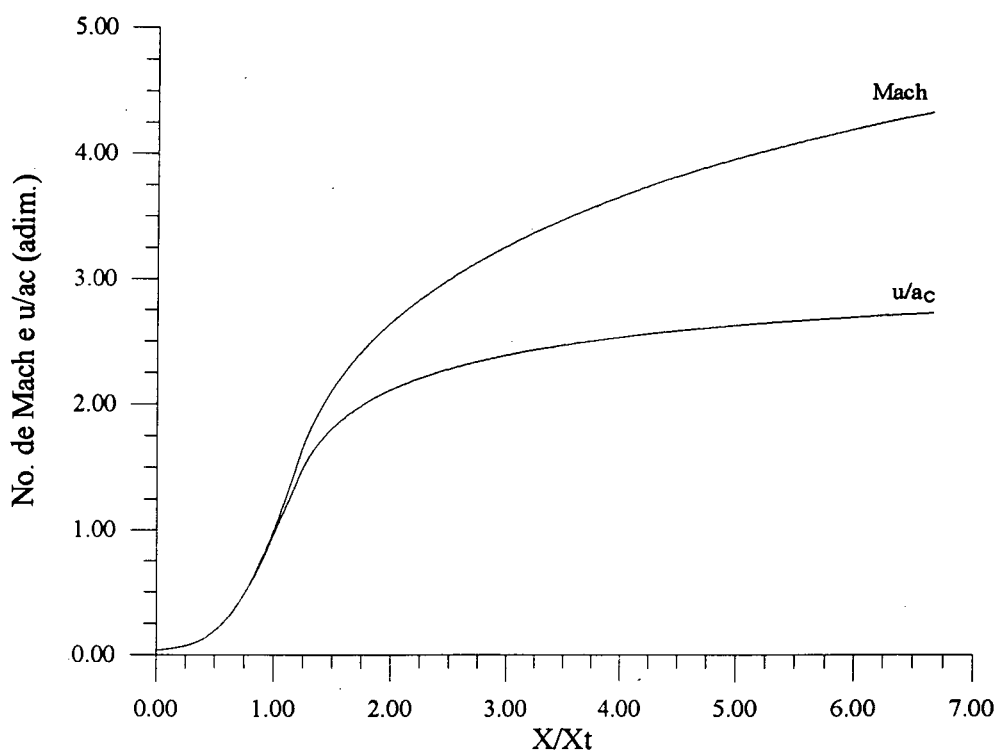


Figura 7 – Comparação entre as soluções obtidas com UDS e CDS.

Os resultados mostrados a seguir foram obtidos utilizando-se a função de interpolação CDS (Patankar, 1980) aplicada com correção adiada (Lilek et alii, 1997). Pode-se observar



**Figura 8** – escoamento caloricamente perfeito ( $\gamma = 1,1625$ ;  $R = 603,0 \text{ J/kg-K}$ ).

Esses resultados demonstram que o processo de solução, as condições de contorno, e a discretização foram corretamente implementados para o escoamento caloricamente perfeito. O que distingue essa solução para a do caso em equilíbrio químico é que nesse caso o cálculo da temperatura é mais simples, pois os calores específicos não variam. Além disso, também não há necessidade de obter a composição química.

Para fazer as simulações foi usado um micro-computador Pentium II - 300 MHz com 64 Mbytes de memória RAM. O tempo de processamento para obter a solução empregando 400 volumes de controle e função de interpolação UDS foi de 1,2 minutos em 2520 iterações. Empregando 400 volumes de controle e a função de interpolação CDS o tempo de processamento é de 2,5 minutos em 5071 iterações. As curvas dos resíduos da pressão e da massa, definidos através das equações (103) e (104), ao longo do processo iterativo utilizando as funções de interpolação UDS e CDS são mostradas nas figuras 9 e 10, respectivamente.

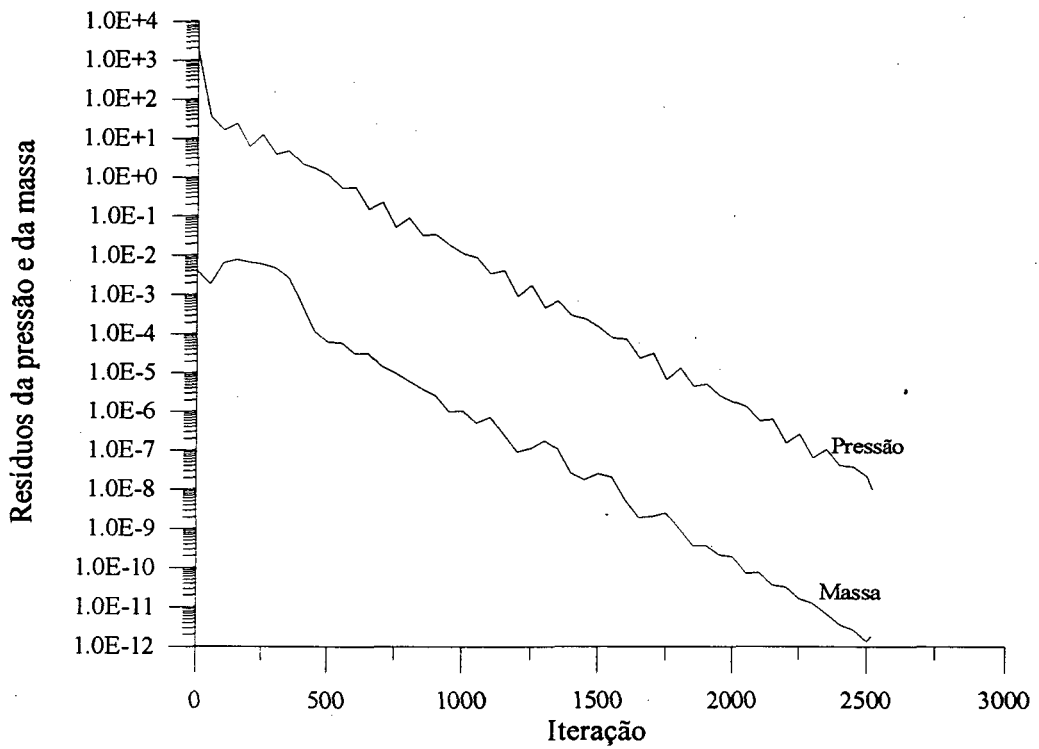


Figura 9 - Resíduos da pressão e da massa ao longo do processo iterativo (UDS).

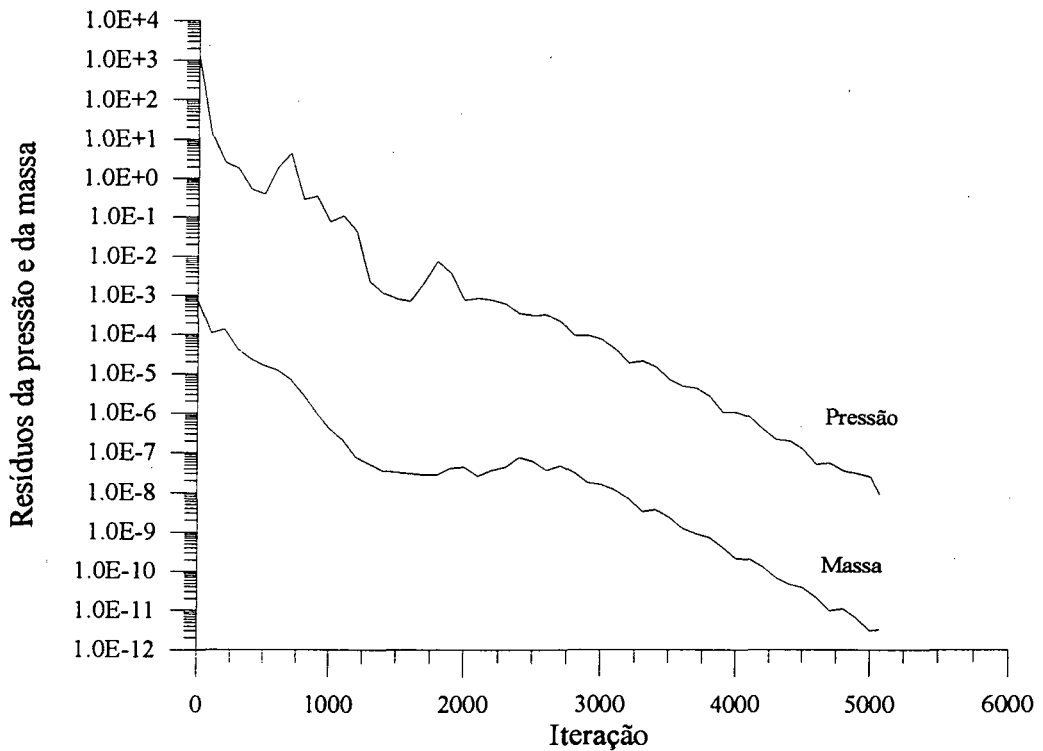


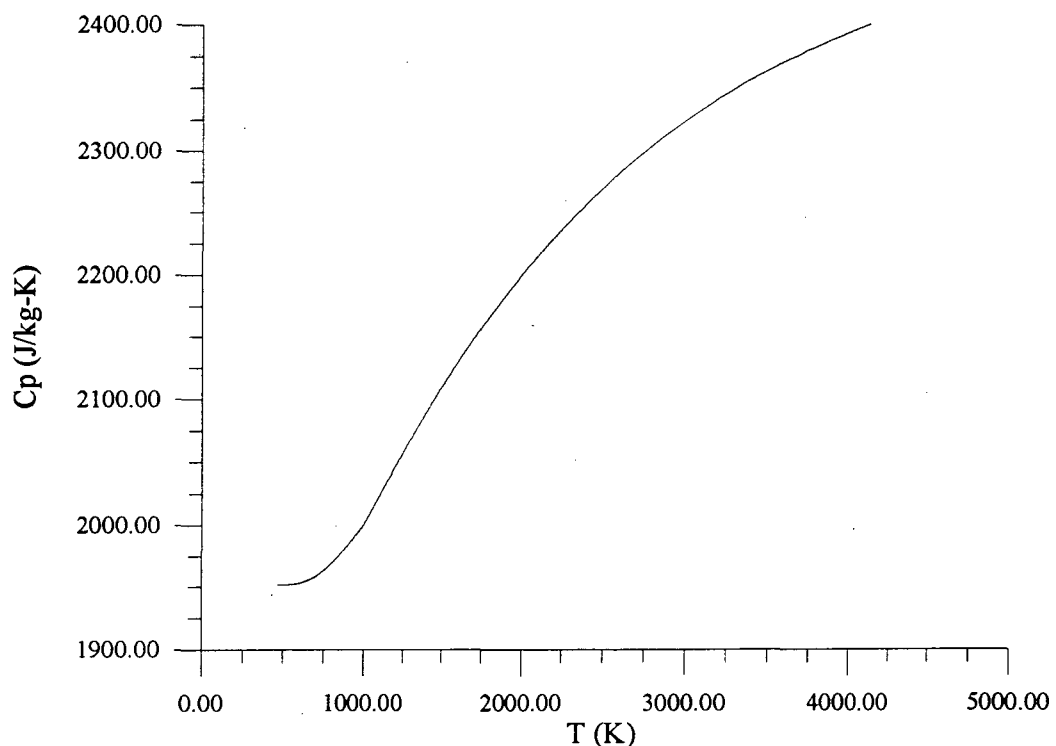
Figura 10 - Resíduos da pressão e da massa ao longo do processo iterativo (CDS).



#### 4.4 - escoamento congelado de uma mistura de gases

Para verificar a implementação do algoritmo frente a variação do calor específico em função da temperatura, foi simulado o escoamento congelado no interior do bocal cuja geometria é mostrada na figura 6. São utilizadas como condições do problema as apresentadas na seção 4.2 e resumidas na tabela 2.

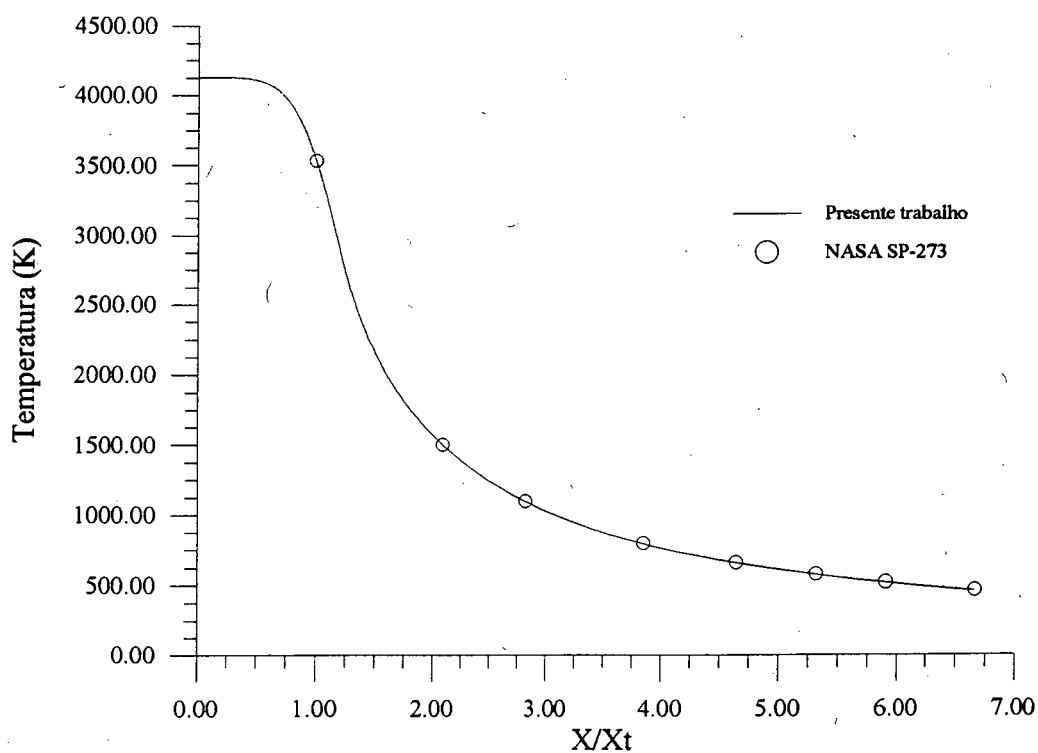
No caso do escoamento congelado tem-se uma mistura de gases com composição química fixa e calor específico a pressão constante variando somente em função da temperatura, conforme as equações (5) e (17). A fim de se ter uma idéia do comportamento do calor específico a pressão constante, na figura 11 é mostrada a variação dessa propriedade, para a mistura congelada de gases.



**Figura 11** – Calor específico a pressão constante da mistura congelada de gases.

Os resultados apresentados a seguir foram obtidos com uma malha igualmente espaçada de 400 volumes de controle. O passo de tempo ( $\Delta t$ ) é igual a  $3,1 \times 10^{-7}$  s e utilizou-se como estimativa inicial das variáveis os valores obtidos através da solução analítica do escoamento isentrópico de um gás caloricamente perfeito, com  $\gamma = 1,40$  e  $R = 290,7$  J/kg K. Também nesse caso utilizou-se a função de interpolação CDS aplicada com correção adiada.

As figuras 12 a 16 apresentam os gráficos das variáveis temperatura, pressão, massa específica, velocidade e número de Mach para o escoamento congelado. Esses resultados são comparados com os obtidos através do programa NASA SP-273 (Gordon e McBride, 1971).



**Figura 12** – Temperatura ao longo do bocal. Escoamento congelado.

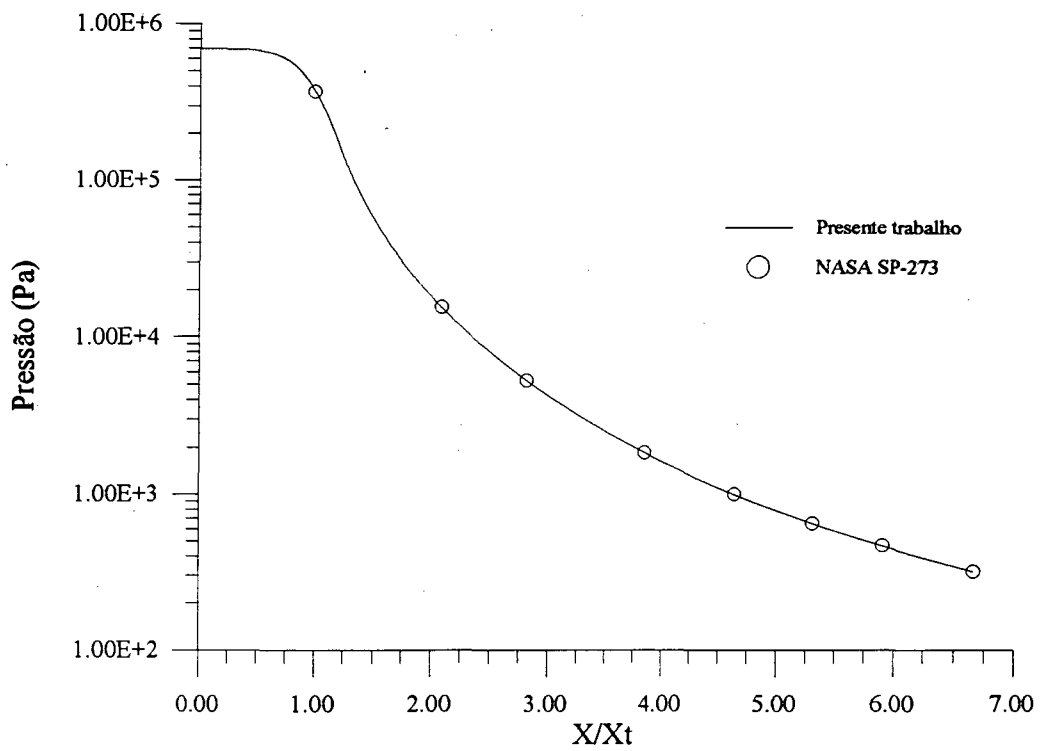


Figura 13 – Pressão ao longo do bocal. Escoamento congelado.

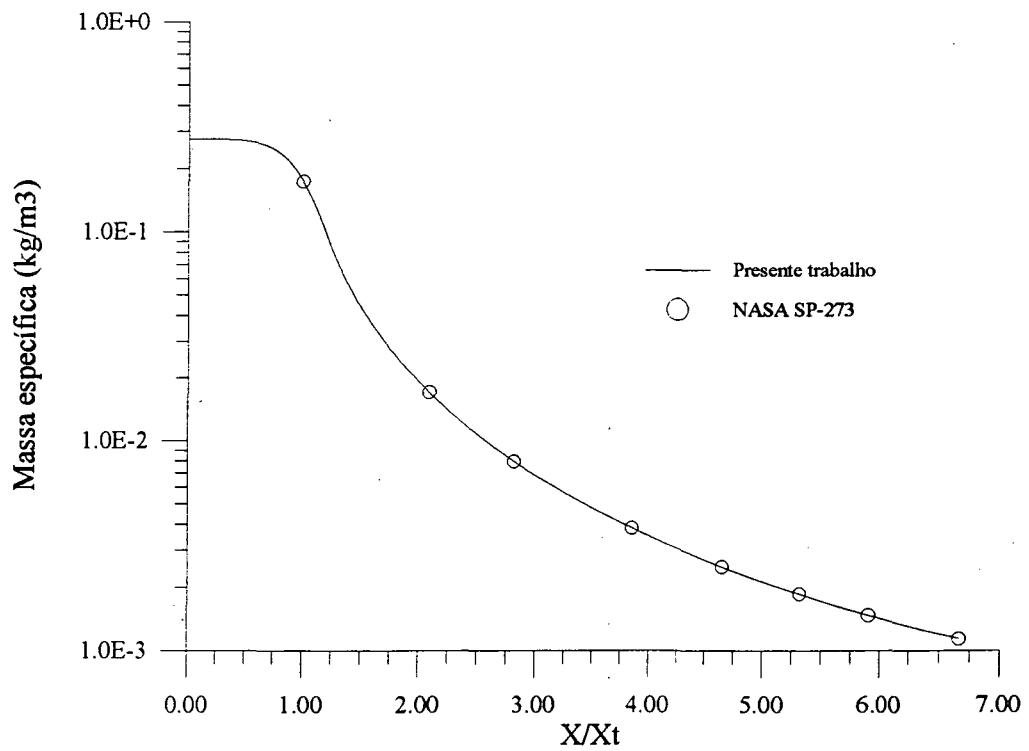
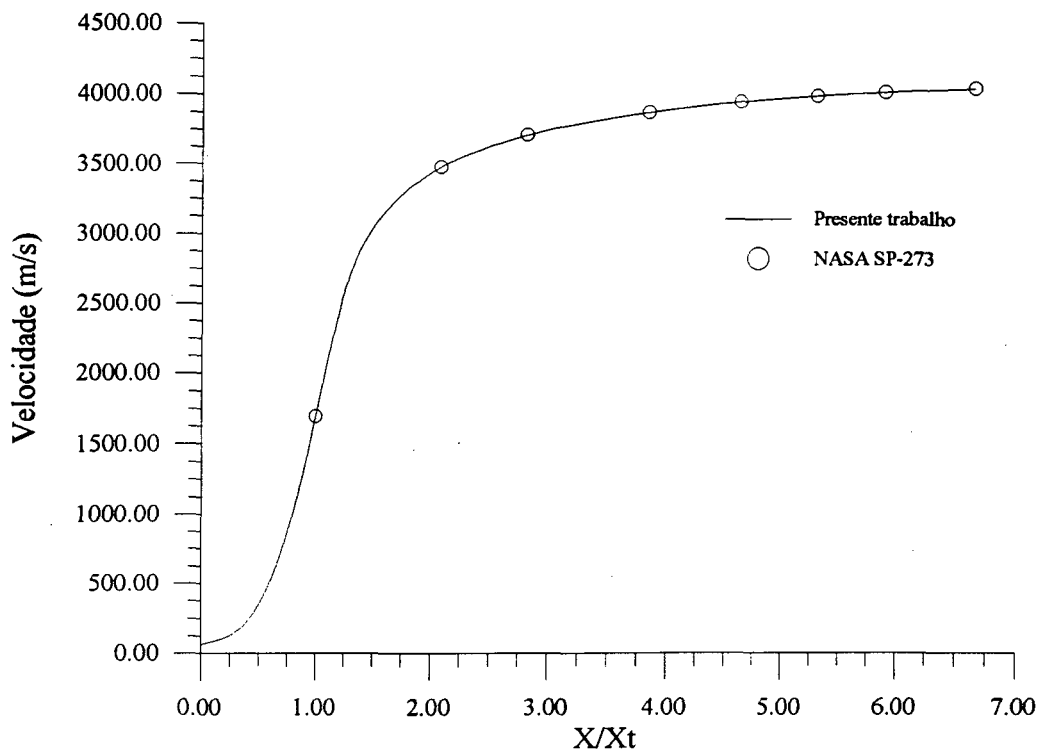
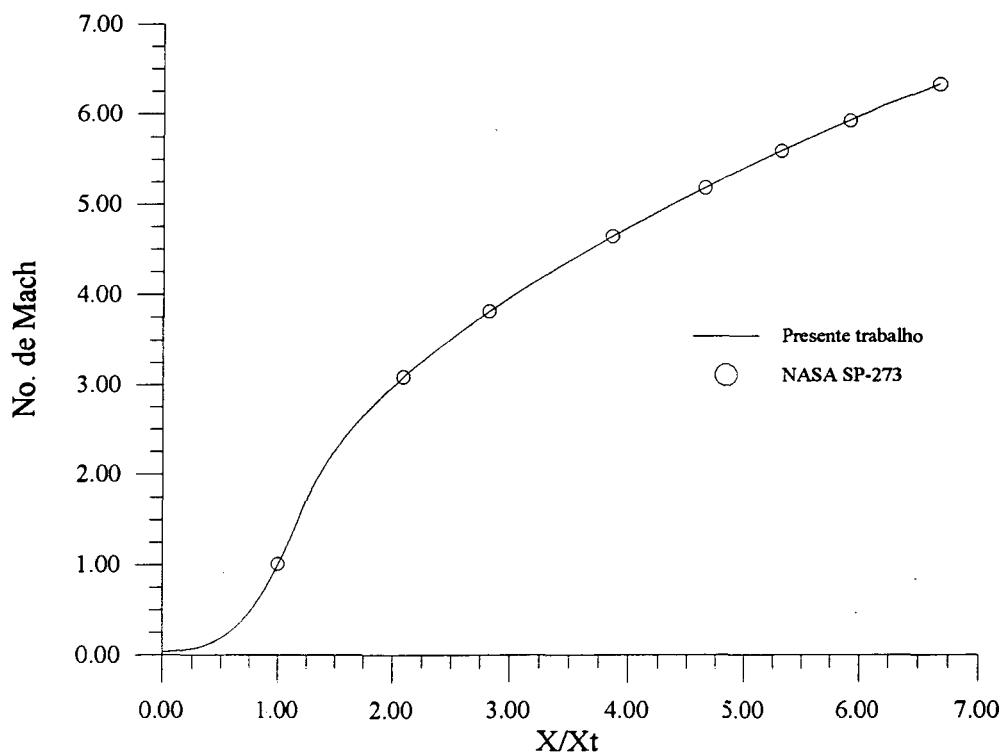


Figura 14 – Massa específica ao longo do bocal. Escoamento congelado.



**Figura 15** – Velocidade ao longo do bocal. Escoamento congelado.



**Figura 16** – Número de Mach ao longo do bocal. Escoamento congelado.

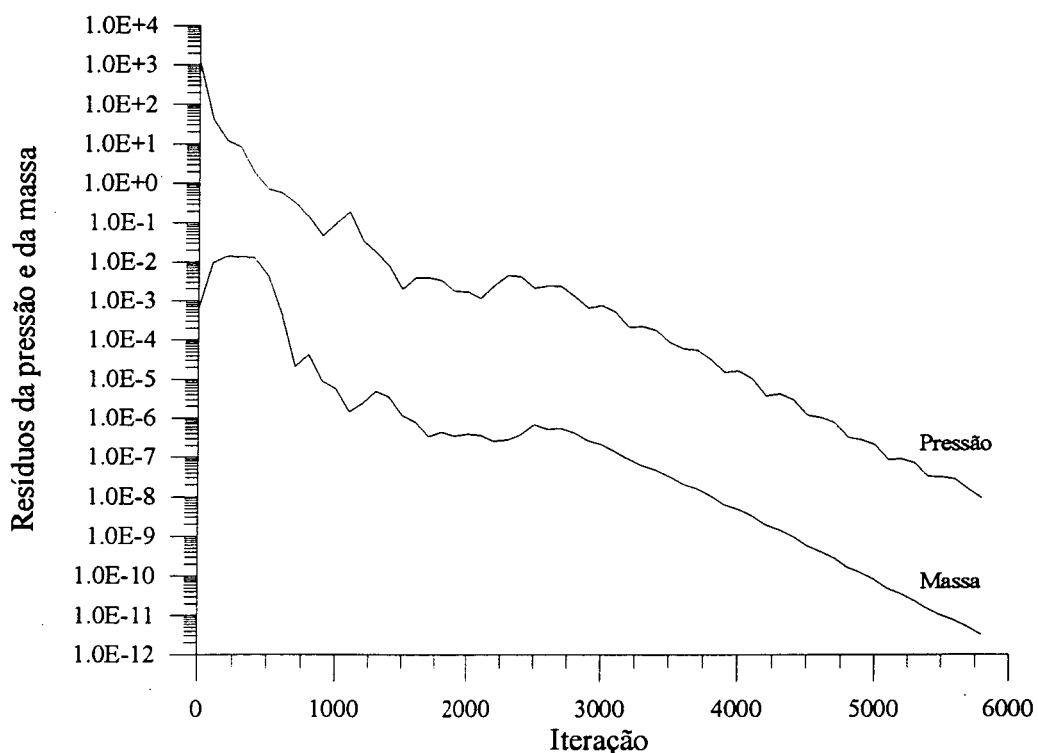
Na tabela 5 são apresentados parâmetros globais que indicam a performance do motor-foguete. Nessa tabela,  $\dot{m}$  é o fluxo de massa dos propelentes através do bocal,  $F_{vac}$  é o empuxo desenvolvido pelo motor no vácuo,  $I_{svac}$  é o impulso específico no vácuo,  $c^*$  é a velocidade característica e  $C_f$  é o coeficiente de empuxo. As definições desses parâmetros podem ser encontradas no Apêndice 4.

**Tabela 5** – Parâmetros globais do motor-foguete. Escoamento congelado.

	$\dot{m}$ (kg/s)	$F_{vac}$ (N)	$I_{svac}$ (s)	$c^*$ (m/s)	$C_f$
Presente trabalho (congelado)	0,14925	611,18	417,5	2340,9	1,7494
NASA SP-273 (congelado)	0,14924	611,03	417,4	2341,3	1,7487

Pode-se observar que todos os resultados aqui obtidos para o escoamento congelado apresentaram excelente concordância com os obtidos através do programa NASA SP-273.

No mesmo micro-computador descrito na seção 4.3, o tempo de processamento para obter a solução do escoamento congelado foi de 5 minutos em 5802 iterações. As curvas dos resíduos da pressão e da massa ao longo do processo iterativo são mostradas na figura 17.



**Figura 17** - Resíduos da pressão e da massa ao longo do processo iterativo.

#### 4.5 - Escoamento em equilíbrio químico

Finalmente, são apresentados nesta seção os resultados obtidos para o escoamento em equilíbrio químico no interior do bocal descrito na seção 4.2. As condições do problema estão resumidas na tabela 2.

No caso do escoamento em equilíbrio químico, a composição química da mistura de gases varia de acordo com as condições locais de temperatura e pressão. O calor específico a pressão constante é uma função da temperatura e também da composição química, como pode ser visto nas equações (5) e (17).

Para se obter os resultados apresentados a seguir são usadas a mesma malha e estimativas iniciais utilizadas na simulação do escoamento congelado. Também é usado o mesmo passo de tempo. Esses dados estão descritos na seção 4.4. Da mesma maneira que para o escoamento congelado, todos os resultados aqui obtidos são comparados com os do programa NASA SP-273 (Gordon e McBride, 1971).

As figuras 18 e 19 mostram a variação da composição química ao longo do escoamento. Não foi traçado o gráfico da espécie química  $F_2$  porque em toda a extensão do domínio sua fração molar resultou menor do que  $10^{-7}$ , ou seja, praticamente nula.

Os gráficos das frações molares das espécies químicas HF e  $H_2$  apresentam boa concordância com os obtidos através do programa NASA SP-273. Entretanto, pode-se observar na figura 19 que há pequenas discrepâncias nas frações molares das espécies H e F. Essas frações tem valores baixos na saída escoamento e, assim, as discrepâncias são proporcionalmente maiores nessa região.

A variação do calor específico a pressão constante ao longo do escoamento é mostrada na figura 20. Nesse gráfico também pode se observar uma pequena diferença entre os valores encontrados no presente trabalho e os obtidos com o programa NASA SP-273.

Nas figuras 21 a 25 são apresentados os gráficos das variáveis temperatura, pressão, massa específica, velocidade e número de Mach ao longo do escoamento.

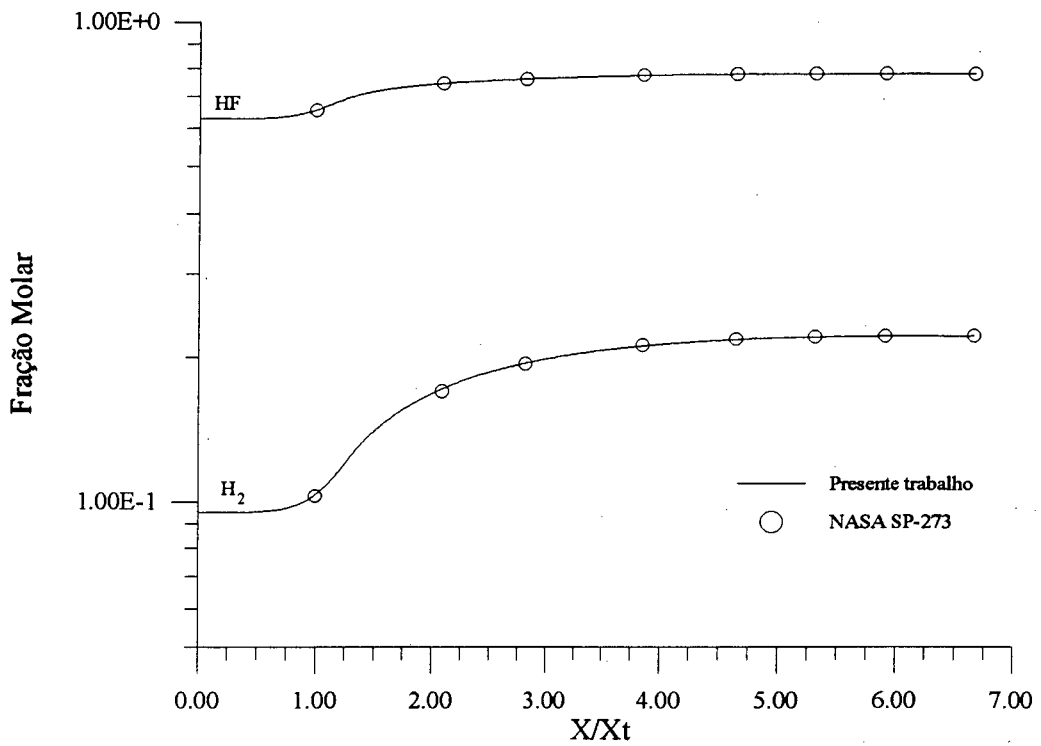


Figura 18 – Composição química da mistura de gases - HF e H<sub>2</sub>.

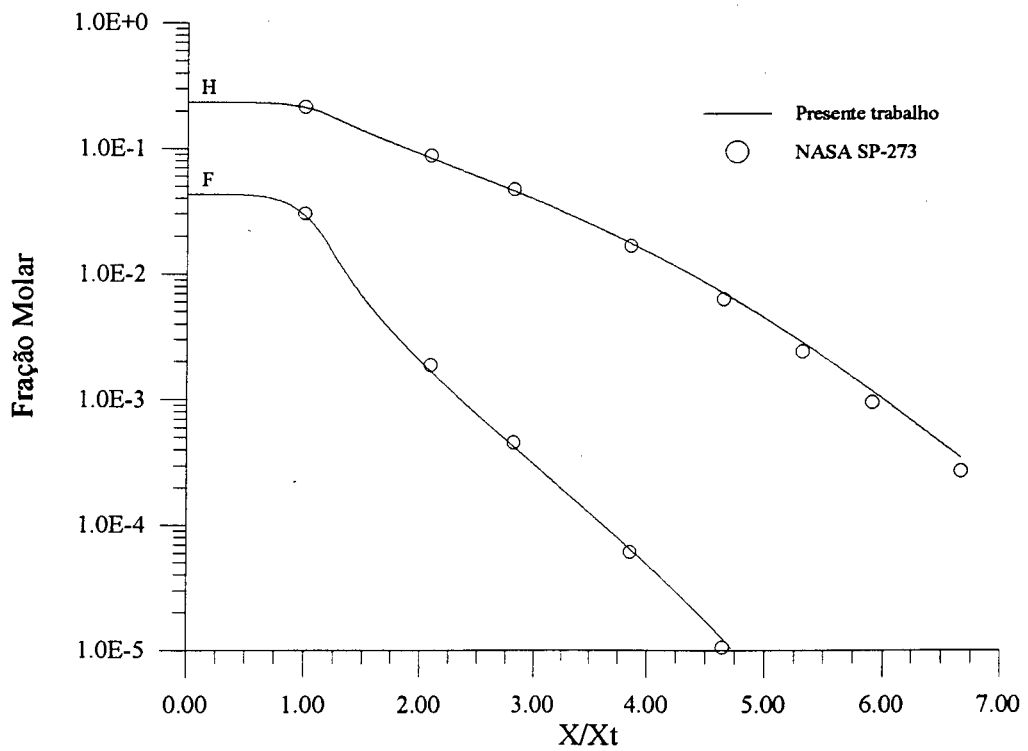


Figura 19 – Composição química da mistura de gases - H e F.

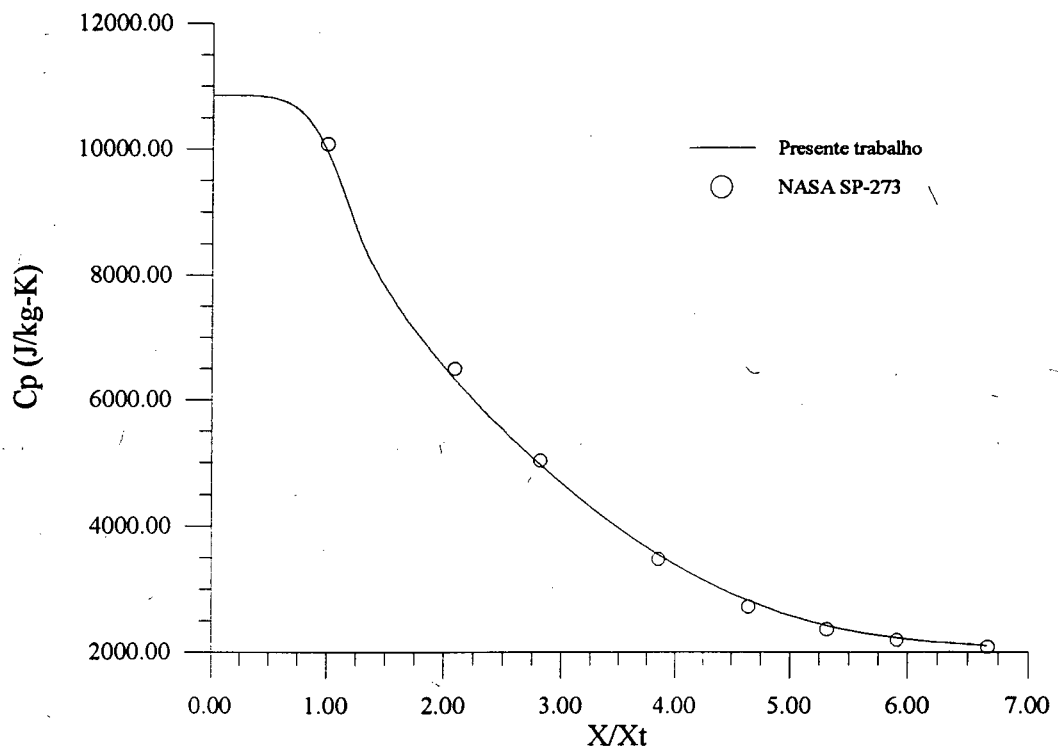


Figura 20 – Calor específico ao longo do bocal. escoamento em equilíbrio químico.

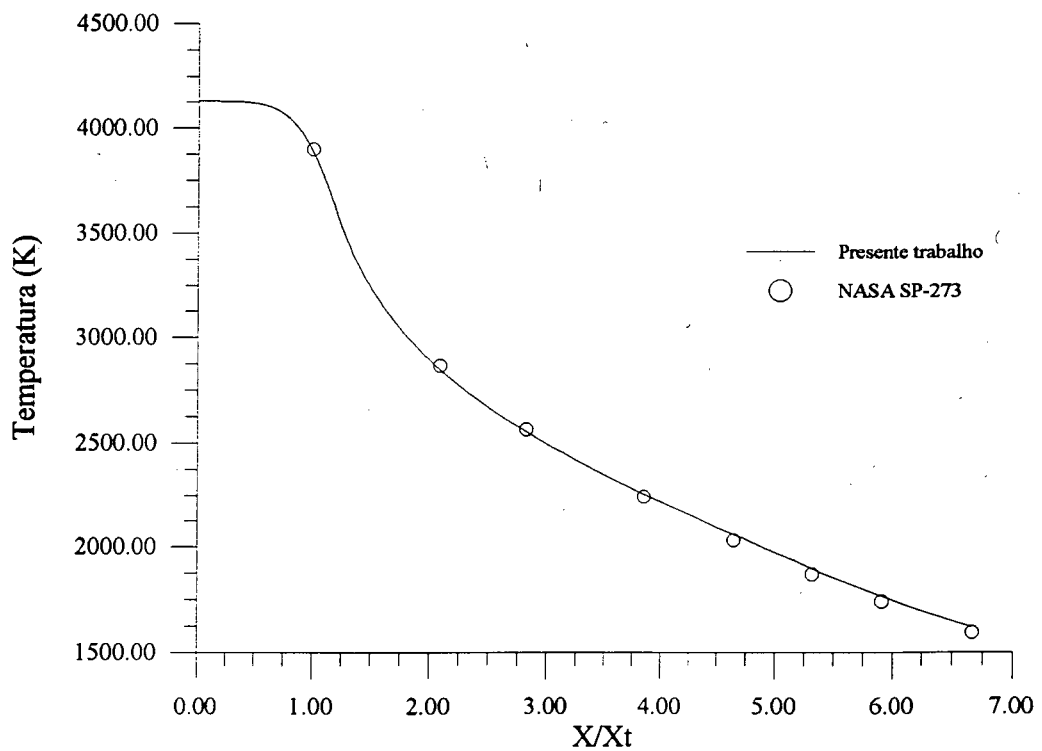


Figura 21 – Temperatura ao longo do bocal. escoamento em equilíbrio químico.



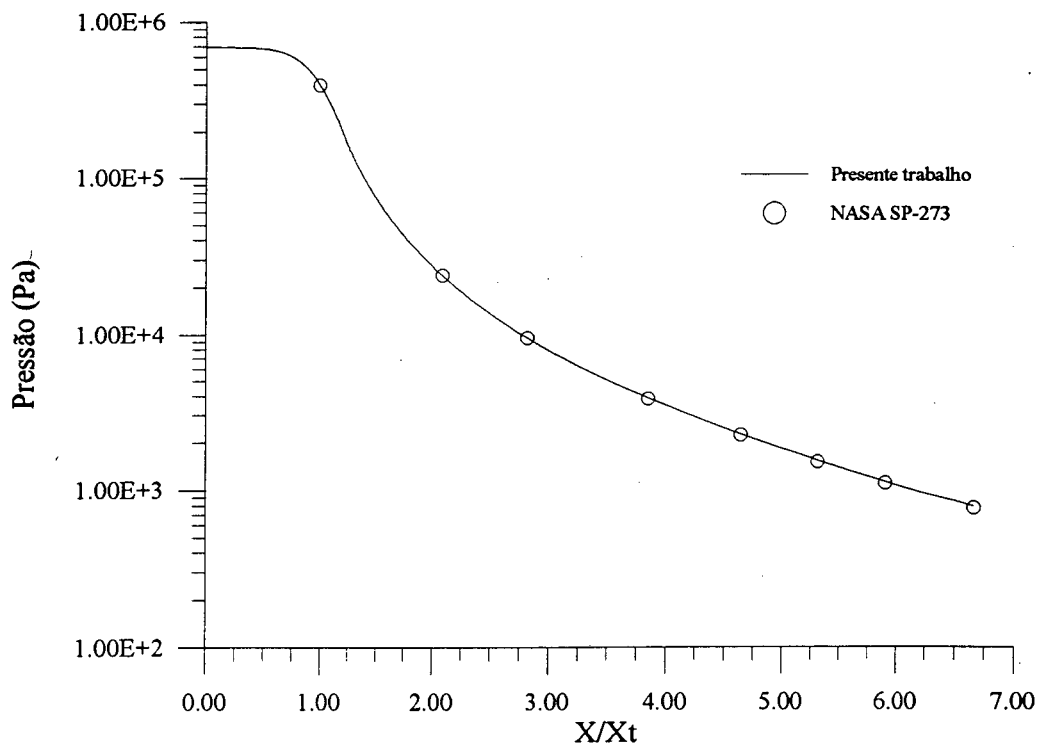


Figura 22 – Pressão ao longo do bocal. escoamento em equilíbrio químico.

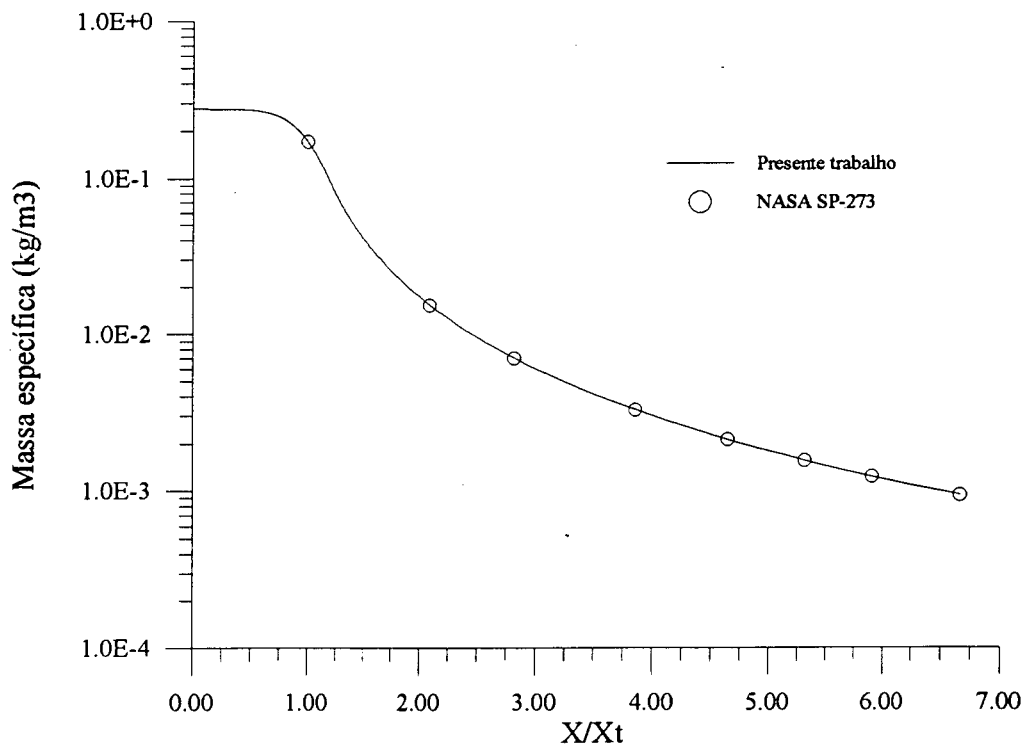


Figura 23 – Massa específica ao longo do bocal. escoamento em equilíbrio químico.

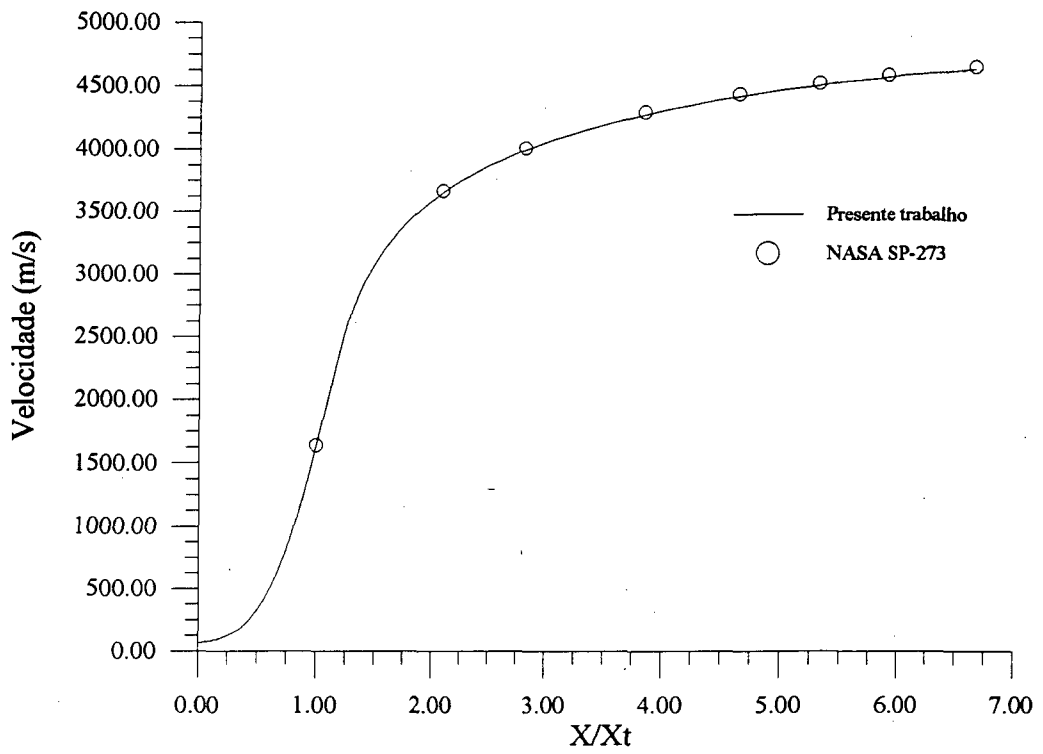


Figura 24 – Velocidade ao longo do bocal. Escoamento em equilíbrio químico.

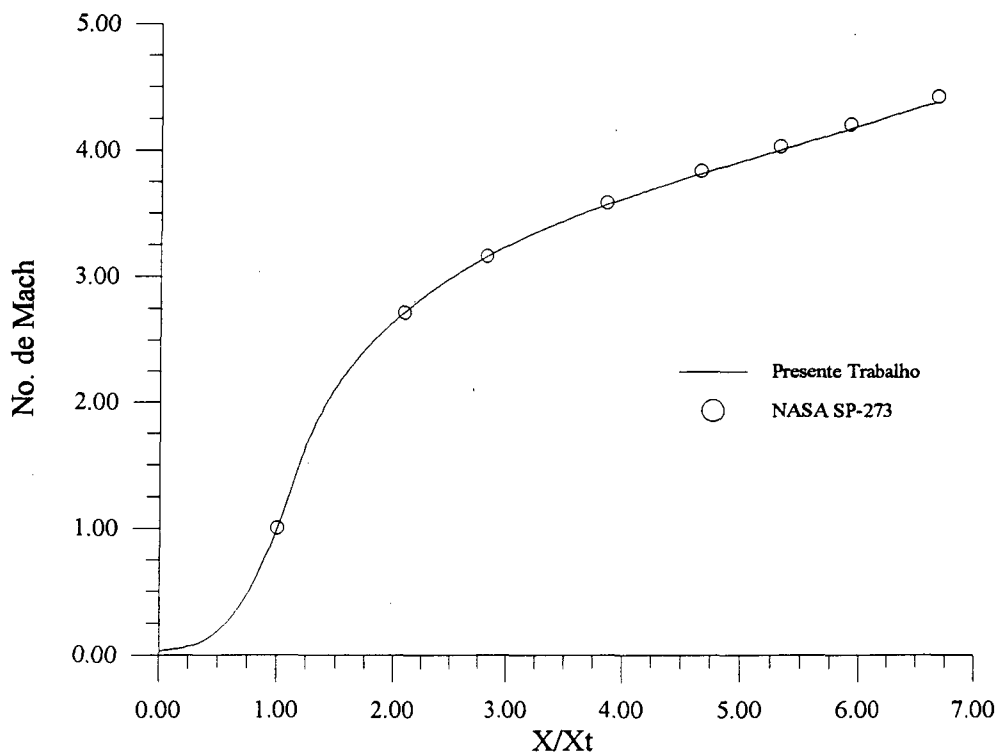


Figura 25 – Número de Mach ao longo do bocal. Escoamento em equilíbrio químico.

Na tabela 6 são apresentados os parâmetros globais do motor foguete. Verifica-se, comparando esses parâmetros, que as pequenas diferenças encontradas entre os resultados obtidos no presente trabalho e com o programa NASA SP-273 não são significativas em nível do desempenho teórico do motor-foguete.

**Tabela 6** – Parâmetros globais do motor-foguete. Escoamento em equilíbrio.

	$\dot{m}$ (kg/s)	$F_{vac}$ (N)	$I_{Svac}$ (s)	$c^*$ (m/s)	$C_f$
Presente trabalho (equilíbrio)	0,14240	685,61	490,8	2453,4	1,9624
NASA SP-273 (equilíbrio)	0,14187	684,22	492,1	2462,5	1,9584

Como as metodologias empregadas aqui e no programa NASA SP-273 são bastante distintas, era de se esperar uma pequena diferença entre seus resultados. É difícil encontrar o motivo exato dessa diferença; a causa mais provável é a forma de se obter a composição química, como citado no final da seção 4.2, uma vez que para o escoamento congelado as variáveis ficaram muito próximas das obtidas com o programa da referência.

Apesar dessa pequenas diferenças, pode-se concluir que também para o caso do escoamento em equilíbrio químico os resultados encontrados concordaram bem com os do programa NASA SP-273.

No mesmo micro-computador descrito na seção 4.3, o tempo de processamento para obter a solução do escoamento em equilíbrio químico foi de 21,0 minutos em 7144 iterações. O tempo de processamento aumentou bastante porque, além de aumentar o número de iterações, o custo computacional para determinar a composição química é elevado. A fim de diminuir o custo computacional pode-se, por exemplo, determinar a composição química a cada 5 iterações no tempo, sem prejudicar a convergência do processo. Com isso a solução é praticamente a mesma e o tempo de processamento diminuiu para 10,0 minutos com aproximadamente o mesmo número de iterações.

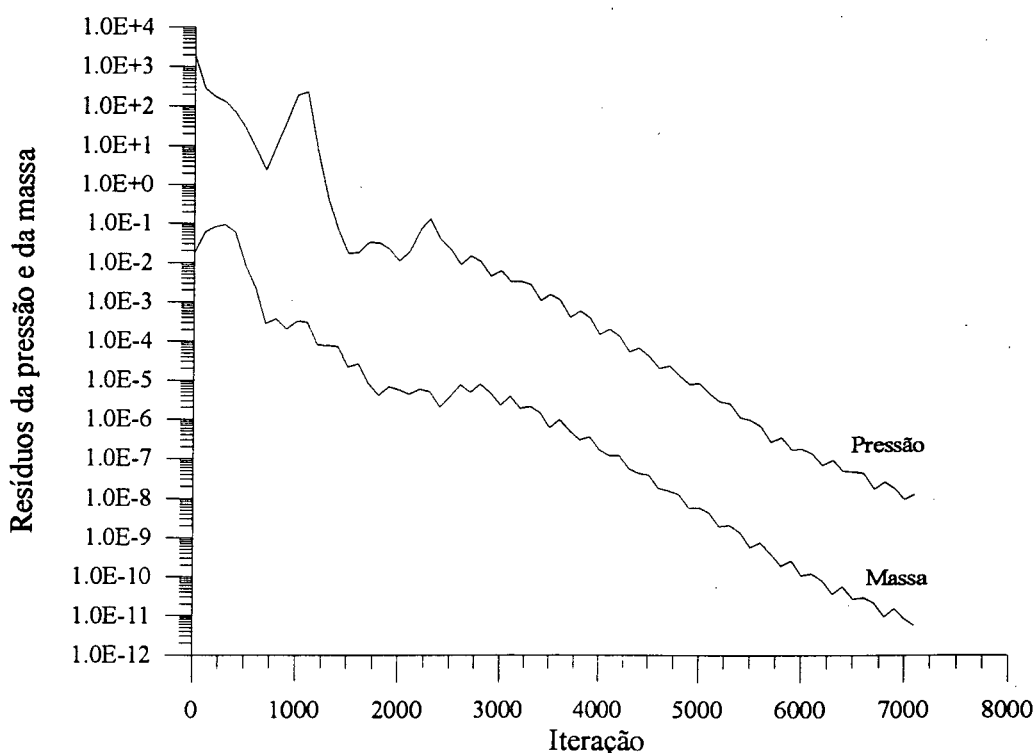
A tabela 7 apresenta os tempos de processamento para diferentes frequências de determinação da composição química. A penúltima coluna mostra os tempos de processamento utilizados na determinação da composição química ao longo de todo o processo iterativo e a última coluna mostra a relação entre esses tempos e os tempos totais de processamento.

**Tabela 7** – Tempo computacional para determinação da composição química.

Composição química determinada a cada:	Tempo total de processamento.	Tempo para determinação da comp. química.	Tempo para determin. da comp. química em relação ao tempo total.
1 iteração global	21,0 minutos	12,0 minutos	57%
5 iterações globais	10,0 minutos	2,4 minutos	24%
10 iterações globais	9,4 minutos	1,2 minutos	12%
20 iterações globais	9,2 minutos	0,7 minuto	7,6%
30 iterações globais	9,2 minutos	0,4 minuto	4,3%

Nos quatro primeiros casos mostrados na tabela 7 o número total de iterações foi de aproximadamente 7140. No último caso, em que a composição química é determinada a cada 30 iterações globais o número total de iterações foi de 7200 iterações. Verificou-se que determinar a composição química numa frequência maior do que 10 iterações praticamente não altera o tempo total de computação. Além disso, se essa frequência for maior do que 50 iterações o processo iterativo fica muito instável e não converge.

As curvas dos resíduos da pressão e da massa ao longo do processo iterativo para o primeiro caso da tabela 7 são mostradas na figura 26.

**Figura 26** – Resíduos da pressão e da massa ao longo do processo iterativo.

#### 4.6 - Comentários sobre as diferentes hipóteses de escoamentos

No que diz respeito à presença de reações químicas, as previsões teóricas utilizando diferentes hipóteses de escoamentos resultam em propriedades bem distintas. Como mencionado no Capítulo 1, as hipóteses de escoamentos congelado e em equilíbrio químico são os casos limites do escoamento em desequilíbrio químico. A fim de ilustrar esse fato, nas figuras 27 e 28 são apresentados os perfis de número de Mach e de temperatura para essas três hipóteses. As curvas referentes ao desequilíbrio químico foram obtidas por Barros et alii (1990) com as mesmas condições na câmara e geometria descritas na seção 4.2.

Pode-se observar que, de uma maneira geral, os valores das propriedades obtidas com a hipótese de escoamento em desequilíbrio químico ficam entre os valores das obtidas com as hipóteses de escoamento congelado e em equilíbrio químico.

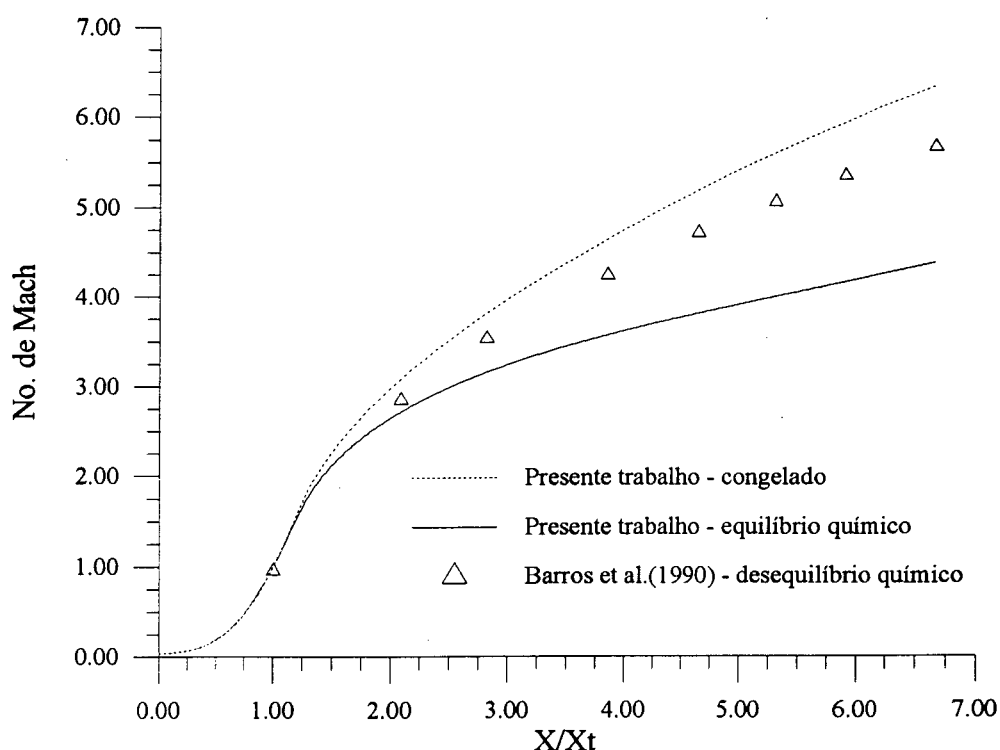
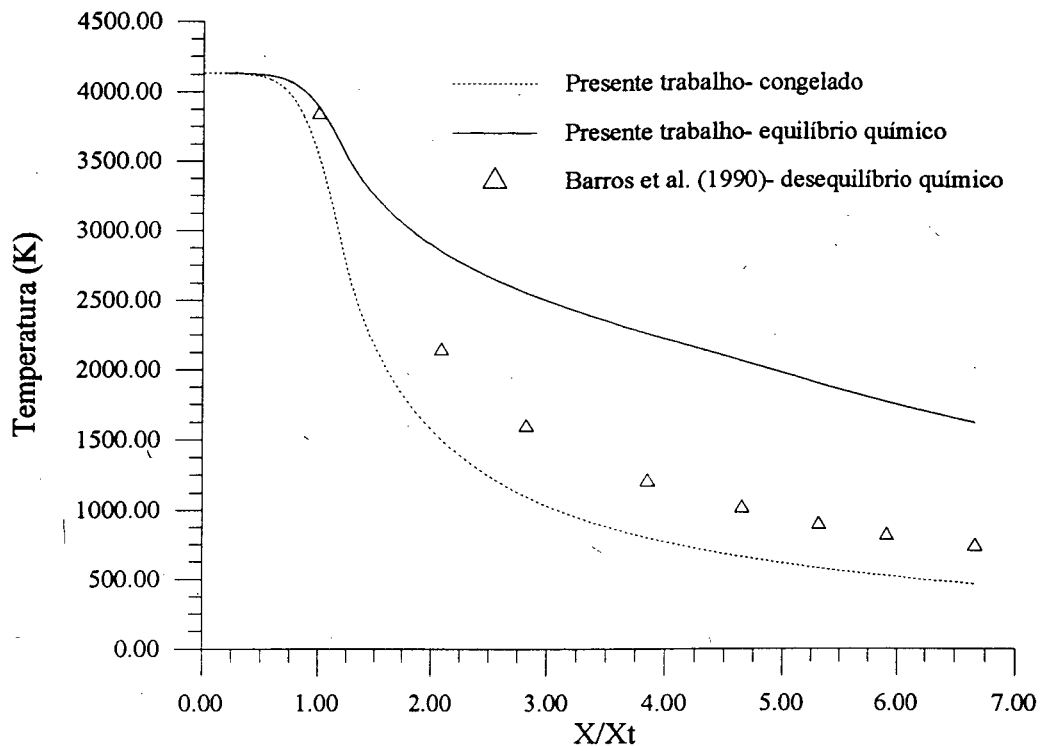


Figura 27 – Número de Mach ao longo do bocal. Comparação entre os modelos.



**Figura 28** – Temperatura ao longo do bocal. Comparação entre os modelos.

Obviamente, a previsão teórica da performance de um motor-foguete também é sensível às diferentes hipóteses de escoamentos. Por exemplo, a hipótese de escoamento em equilíbrio químico conduz a uma estimativa de empuxo de aproximadamente 685 N, portanto maior do que a do escoamento congelado com cerca de 611 N. A estimativa de empuxo obtido com a hipótese de desequilíbrio químico fica entre os valores dos casos limites, segundo os resultados de Barros et alii (1990), em torno de 640 N para o bocal analisado. Uma possível explicação para esse comportamento é que devido a dissociação e recombinação das espécies há uma liberação de energia, elevando as energias térmica e cinética do escoamento. Como o modelo congelado não leva em conta as reações químicas nenhuma energia é liberada; enquanto que no modelo em equilíbrio químico considera-se que as reações se completam instantaneamente, liberando o máximo possível da energia.

Em escoamentos aerodinâmicos hipersônicos as diferenças entre as soluções congelada e em equilíbrio químico se acentuam. Nesse caso a utilização da hipótese de fluido caloricamente perfeito pode apresentar resultados irrealísticos (Anderson, 1990).

## 5 - CONCLUSÃO

---

Nesta dissertação foram apresentados os modelos matemático e numérico empregados para simular os escoamentos congelado e em equilíbrio químico local no interior de bocais do tipo convergente-divergente.

O modelo matemático quase-unidimensional é constituído pelas equações de conservação, obtidas a partir das equações de Euler, e a equação de estado dos gases perfeitos. Como a equação de conservação da energia é escrita em termos da entalpia, também é utilizada uma expressão que relaciona essa propriedade com a temperatura e pressão. Além disso, a composição química é determinada através do método das constantes de equilíbrio.

O modelo numérico é baseado no método dos volumes finitos com solução segregada, utilizando uma formulação adequada a qualquer regime de velocidade e funções de interpolação de segunda ordem (CDS). O acoplamento pressão-velocidade é feito através do método SIMPLEC.

Foram simulados três diferentes hipóteses de escoamentos: de um fluido caloricamente perfeito, de uma mistura de gases congelada e de uma mistura de gases em equilíbrio químico local.

Na simulação do escoamento de um fluido caloricamente perfeito, feita para verificar o código computacional implementado, observou-se que com o emprego da função de interpolação CDS pode-se utilizar malhas mais grosseiras para obter resultados próximos aos da solução analítica. Entretanto recomenda-se que sua aplicação seja feita através da correção adiada, com a função de interpolação UDS como esquema de baixa ordem, para evitar instabilidades durante o processo iterativo, o que pode até conduzir a divergência da solução. Apesar disso, para os problemas analisados é possível aplicar a função de interpolação CDS sem correção adiada.

As simulações dos escoamentos de uma mistura de gases congelada e em equilíbrio químico apresentaram resultados que concordaram bem com os do programa NASA SP-273, que foi utilizado como referência.

É importante ressaltar que a metodologia empregada no programa NASA SP-273 somente pode ser usada para escoamentos congelados ou em equilíbrio químico, unidimensionais, invíscidos, e adiabáticos. Apesar de que no presente trabalho não se fez simulações de escoamentos viscosos e com transferência de calor, a metodologia aqui empregada pode ser facilmente estendida para contemplar esses fenômenos. Também é possível estender essa metodologia para geometrias bi ou tridimensionais, com coordenadas cartesianas ou generalizadas.

O principal objetivo do trabalho, utilizar o método dos volumes finitos para simular escoamentos em equilíbrio químico local no interior de bocais do tipo convergente-divergente, foi alcançado com êxito. Entende-se que o objetivo de se fazer um trabalho didático, para servir de base para trabalhos futuros, também tenha sido atingido.

Fazer simulações o mais próximo possível dos escoamentos reais é sempre a grande meta. Com essa premissa são feitas as sugestões para trabalhos futuros. O autor acredita que o próximo passo seja empregar o método dos volumes finitos em escoamentos em desequilíbrio químico. Ainda, pode-se estender essa metodologia para geometrias bidimensionais, incluindo-se os efeitos viscosos e de transferência de calor. Uma vez que as velocidades alcançadas na saída do escoamento são elevadas, ao se incluir os efeitos viscosos deve-se utilizar modelos de turbulência. Na transferência de calor também pode-se incluir os efeitos da radiação em meios participantes. Essas são apenas algumas das diversas sugestões que podem ser dadas.

É interessante ressaltar que a metodologia aqui empregada não se restringe aos escoamentos compressíveis em bocais. Com as modificações apropriadas, essa metodologia também pode ser utilizada em outros escoamentos que também envolvam a variação de propriedades termodinâmicas e da composição química.



## 6 - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

---

1. ANDERSON JR, John David. **Aerodynamics and high temperature gas dynamics**. New York: McGraw-Hill, 1989.
2. ANDERSON JR, John David. **Modern compressible flow**. 2 ed. New York: McGraw Hill, 1990.
3. ANDERSON JR, John David. **Computacional fluid dynamics - the basics with applications**. New York: McGraw-Hill, 1995.
4. AZEVEDO, João L. Figueiras. **Euler solutions of transonic nozzle flows**. Anais do III Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, Itapema, SC, p. 243-248, 1990.
5. BACK, L. H.; MASSIER, P. F.; GIER, H. L. **Comparsion of measured and predicted flows through conical supersonic nozzles, with emphasis on the transonic region**. AIAA Journal, Vol. 3, No. 9, p. 1606-1614, 1965
6. BARROS, José E. Mautone; ALVIM FILHO, Gordiano F.; PAGLIONE, Pedro. **Estudo de escoamento reativo em desequilíbrio químico através de bocais convergente-divergente**. Anais do III Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, Itapema, SC, p. 771-776, 1990.
7. BARROS, José E. Mautone; PAGLIONE, Pedro; ALVIM FILHO, Gordiano F. **Escoamento reativo em desequilíbrio químico através de bocais convergente-divergente pelo método das características**. Anais do V Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, São Paulo, SP, p. 153-157, 1994.

8. BEAM, R. M.; WARMING R. F. **An implicit finite-difference algorithm for hyperbolic systems in conservation law form.** Journal of Computational Physics, Vol. 22, p. 87-110, 1976.
9. BILSTEIN, Roger E. **Orders of magnitude - A history of the NACA and NASA, 1915-1990.** Washington DC: NASA SP-4406, 1989
10. BRAY, K. N. C. **Atomic recombination in a hypersonic wind tunnel nozzle.** Journal of Fluid Mechanics, Vol. 6, p. 1-32, 1959.
11. CHASE JR, M. W. **JANAF thermochemical tables.** 3<sup>rd</sup> ed. Parts 1 & 2, Journal of Physical and Chemical Reference Data, Vol. 14, No. 1, 1985.
12. COURANT, R.; ISAACSON, E.; REES, S. M. **On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences.** Comm. Pure and Applied Mathematics, Vol. 5, p. 243-255, 1952.
13. FICO JR, Nide G. C. R; João L. Figueiras. **On the use of CFD techniques for transonic wind tunnel design.** Anais do XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Brasília, DF, p. 801-804, 1993.
14. GORDON, Sanford; McBRIDE, Bonnie J. **Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks, and Chapman-Jouguet detonations.** Cleveland, Ohio: NASA SP-273, 1971.
15. GORDON, Sanford; MCBRIDE, Bonnie J. **Computer program for calculation of complex chemical equilibrium and applications.** Cleveland, Ohio: NASA RP-1311, 1994.
16. HABIBALLAH, M.; VINGERT, L.; DUTHOIT, V.; VUILLERMOZ, P. **Research as a key in the design methodology of liquid-propellant combustion devices.** Journal of Propulsion and Power, Vol. 14, No. 5, p. 782-788, 1998.
17. HUZEL, Dieter K.; HUANG, David H. **Modern engineering for design of liquid-propellant rocket engines.** Washington DC: AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 147, 1992.
18. JOHN, James E. A. **Gas Dynamics.** 2<sup>nd</sup> ed. New York: Allyn & Bacon, 1984.

19. KACYNSKI, Kenneth J.; PAVLI, Albert J.; SMITH, Tamara A. **Experimental evaluation of heat transfer on a 1030:1 area ratio rocket nozzle.** Cleveland, Ohio: NASA TP-2726, 1987.
20. KLIEGEL, J. R.; LEVINE, J. N.; **Transonic flow in small throat radius of curvature nozzles.** AIAA Journal, Vol. 7, No. 7, p. 1375-1378, 1965.
21. KIM, Suk C.; STUBBS, Robert M. **Numerical study of a low-pressure concept for nuclear thermal rockets.** Journal of Propulsion and Power, Vol. 10, No. 1, p. 25-31, 1994.
22. KUO, Kenneth K. **Principles of combustion.** 2<sup>nd</sup> ed. New York: John Wiley, 1986.
23. LAROCA, Fernando; MARCHI, Carlos Henrique; SILVA, António Fábio C. **Soluções de escoamentos quase-unidimensionais de fluidos compressíveis e viscosos em tuberias com troca de calor,** Anais do VII Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, Rio de Janeiro, RJ, p. 1031-1036, 1998.
24. LEONARD, B. P. **A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation.** Computational Methods in Applied Mechanics Engineering, Vol. 19, p. 59-98, 1979.
25. LILEK, Z.; S. MUZAFERIJA, S.; PERIC, M. **Efficiency and accuracy aspects of a full-multigrid simple algorithm for three-dimensional flows.** Numerical Heat Transfer, Part B, Vol. 31, p. 23-42, 1997.
26. MACCORMACK, R. W. **The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering.** AIAA Paper No. 69-354, 1969.
27. MALISKA, Clóvis Raimundo. **Transferência de calor e mecânica do fluidos computacional.** Rio de Janeiro: LTC Editora SA, 1995.
28. MARCHI, Carlos Henrique; SILVA, António Fábio C.; MALISKA, Clóvis Raimundo. **Solução numérica de escoamentos invíscidos em tuberias com velocidade supersônica na saída.** Anais do IV Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, Rio de Janeiro, RJ, p. 145-148, 1992.
29. MARCHI, Carlos Henrique. **Esquemas de alta ordem para a solução de escoamentos de fluidos sem dispersão numérica.** Jornal da Associação Brasileira de Ciências Mecânicas, Vol. XV, No. 3, p. 231-249, 1993.

30. MARTINS, Rodrigo J.; AZEVEDO, João L. Figueiras. **A finite difference method for flow simulation at all speeds.** Anais do XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Brasília, DF, p. 105-108, 1993.
31. McBRIDE, Bonnie J.; GORDON, Sanford; RENO, Martin A. **Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species.** NASA Technical Memorandum 4513, Cleveland, Ohio, USA, 1993.
32. MIRAGLIA, José; HINCKEL, José Nivaldo. **Modelagem e simulação de motores foguete a propelente líquido à gás.** Anais do XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Brasília, DF, p.741-744, 1993.
33. MOMTCHILOFF, I. N.; TABACK, E. D.; BUSWELL, R. F. **Kinetics in hydrogen-air flow systems I. Calculation of ignition delays for hypersonic ramjets.** 9<sup>th</sup>. Symposium International on Combustion, p. 220-230. New York: Academic Press, 1963.
34. NICKERSON, G. R.; COATS, D. E.; BARTZ, J. L. **Engineering programmings and users manual; Two-Dimensional Kinetics reference computer program.** Cleveland, Ohio: NASA CR-152999, 1973.
35. PAGLIONE, Pedro; GIRARDI, Roberto da Mota. **Análise teórica e experimental para bocais de tração máxima.** Anais do VII Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, Águas de Lindóia, SP, p. 45-48, 1988.
36. PATANKAR, Suhas V. **Numerical heat transfer and fluid flow.** New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
37. PAVLI, Albert J.; KACYNSKI, Kenneth J.; SMITH, Tamara A. **Experimental thrust performance of a high-area-ratio rocket nozzle.** Cleveland, Ohio: NASA TP-2720, 1987.
38. RAITHBY, G. D.; TORRANCE, K. E. **Upstream-weighted differencing schemes and their application to elliptic problems involving fluid flow.** Computer & Fluids, Vol. 2, p. 191-206, 1974.
39. RAO, G. V. R. **Exhaust nozzle contour for optimum thrust.** Jet Propulsion, p. 377-382, June, 1958.

40. RUBIN, Rafael Levy; HINCKEL, José Nivaldo. **Regenerative cooling for liquid propellant rocket thrust chambers**. Anais do XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Brasília, DF, p. 737-740, 1993.
41. SARLI, V. J.; BLACKMAN, A. W.; BUSSWELL, R. F. **Kinetics in hydrogen-air flow systems II. Calculations of nozzle flows for ramjets**. 9<sup>th</sup>. Symposium International on Combustion, p. 230-240. New York: Academic Press, 1963.
42. SILVA, António Fábio C.; MALISKA, Clóvis Raimundo, **Uma formulação segregada em volumes finitos para escoamentos incompressíveis e/ou compressíveis em coordenadas generalizadas**. Anais do II Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, Águas de Lindóia, SP, p. 11-14, 1988.
43. SILVA, António Fábio C. **Um procedimento em volumes finitos para a solução de escoamentos de qualquer velocidade**. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, Brasil, 1991.
44. SMITH, Tamara A.; PAVLI, Albert J.; KACYNSKI, Kenneth J. **Comparison of theoretical and experimental thrust performance of a 1030:1 area ratio rocket nozzle at a chamber pressure of 2413 kN/m<sup>2</sup> (350 psia)**. Cleveland, Ohio: NASA TP-2725, 1987.
45. SPALDING, D. B. **A novel finite difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives**. International Journal of Numerical Methods in Engineering, Vol. 4, p. 551-559, 1972.
46. SUTTON, G. P. **Rocket Propulsion Elements**. 6 ed. New York: Wiley, 1992
47. THOMAS, L. H. **Elliptic problems in linear difference equations Over a network**. Watson Sci. Comput. Lab. Report, Columbia University, New York, 1949.
48. THOMPSON, Carlos Alberto. **Escoamento supersônico em tubeiras**. Anais do VI Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Rio de Janeiro, RJ, p. 83-97, 1981.
49. VAN DOORMAAL, J. P.; RAITHBY, G. D. **Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible flow**. Numerical Heat Transfer, Vol. 7, p. 146-163, 1984.
50. VAN DOORMAAL, J. P. **Numerical methods for the solution of incompressible and compressible fluid flows**. Ph.D. Thesis, University of Waterloo, Canada, 1985.

51. WESTEMBERG, A. A.; FAVIN, S. **Complex chemical kinetics in supersonic nozzle flow.** 9<sup>th</sup>. Symposium International on Combustion, p. 785-798. New York: Academic Press, 1963.
52. WITTE, David W.; TATUM, Kenneth E. **Computer code for determination of thermally perfect gas properties.** Hampton, Virginia: NASA TP-3447, 1994.
53. YAGUA, Leonor C. Q.; AZEVEDO, João L. Figueiras. **Esquemas de malhas sobrepostas para as equações de Euler em geometrias bidimensionais em escoamentos compressíveis.** Anais do VII Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, Rio de Janeiro, RJ, p. 1-6, 1998.
54. ZELEZNIK, Frank J. and GORDON, Sanford. **A general IBM 704 or 7090 computer program for computation of chemical equilibrium compositions, rocket performance and Chapman-Jouguet detonations.** Cleveland, Ohio: NASA TND-1454, 1962.
55. ZUCROW, Maurice J.; HOFFMAN, Joe D. **Gas dynamics- multidimensional flow.** Vol. II. New York: John Wiley and Sons, 1977.
56. ZUPNIK, T. F. **Application of the method of characteristics including reaction kinetics to nozzle flow.** AIAA Paper No. 64-97, 1964

## APÊNDICE 1 - COEFICIENTES DOS POLINÔMIOS INTERPOLADORES

---

São mostrados aqui os polinômios interpoladores utilizados nesta dissertação na obtenção das propriedades termodinâmicas. Esses polinômios foram retirados de McBride et alii (1993).

Para determinar o calor específico a pressão constante, a entalpia e a entropia de estado padrão, respectivamente, são utilizadas as seguintes expressões:

$$\bar{c}_{pi} = R_i \left( a_{i1} + a_{i2}T + a_{i3}T^2 + a_{i4}T^3 + a_{i5}T^4 \right) \quad (5)$$

$$h_i = R_i \left( a_{i1}T + a_{i2} \frac{T^2}{2} + a_{i3} \frac{T^3}{3} + a_{i4} \frac{T^4}{4} + a_{i5} \frac{T^5}{5} + a_{i6} \right) \quad (11)$$

$$s_i^{\circ} = R_i \left( a_{i1} \ln T + a_{i2}T + a_{i3} \frac{T^2}{3} + a_{i4} \frac{T^3}{4} + a_{i5} \frac{T^4}{5} + a_{i7} \right) \quad (A1-1)$$

onde o subscrito "i" indica a espécie química.

Os coeficientes  $a_{ij}$  ( $j = 1, \dots, 7$ ), tabelados a seguir, são válidos nas temperaturas entre 300 e 5000 K para as espécies HF, H e F, e entre 200 e 6000 K para as espécies  $H_2$  e  $F_2$ . Nessas tabelas também são apresentadas a massa molecular ( $M_{mi}$ ) e a entalpia de formação a 298,15K ( $h_i^f$ ).

**Tabela 1.1** – Coeficientes dos polinômios interpoladores das espécies HF, H<sub>2</sub> e H.

Símbolo	HF	H <sub>2</sub>	H
M <sub>mi</sub> (kmol/kg)	20.00634E+00	2.01588E+00	1.00794E+00
h <sub>j</sub> <sup>f</sup> / R <sub>i</sub>	-3.27803794E+04	0.00000000E+00	2.62190349E+04
T > 1000 K			
a <sub>i1</sub>	2.99191100E+00	2.93286579E+00	2.50000286E+00
a <sub>i2</sub>	7.14894750E-04	8.26607967E-04	-5.65334214E-09
a <sub>i3</sub>	-6.86309730E-08	-1.46402335E-07	3.63251723E-12
a <sub>i4</sub>	-1.16171300E-11	1.54100359E-11	-9.19949720E-16
a <sub>i5</sub>	1.94123750E-15	-6.88804432E-16	7.95260746E-20
a <sub>i6</sub>	-3.36213640E+04	-8.13065597E+02	2.54736589E+04
a <sub>i7</sub>	3.82549503E+00	-1.02432887E+00	-4.46698494E-01
T ≤ 1000 K			
a <sub>i1</sub>	3.43799860E+00	2.34433112E+00	2.50000000E+00
a <sub>i2</sub>	5.35715980E-04	7.98052075E-03	0.00000000E+00
a <sub>i3</sub>	-1.52296550E-06	-1.94781510E-05	0.00000000E+00
a <sub>i4</sub>	1.75644910E-09	2.01572094E-08	0.00000000E+00
a <sub>i5</sub>	-5.78699400E-13	-7.37611761E-12	0.00000000E+00
a <sub>i6</sub>	-3.38189720E+04	-9.17935173E+02	2.54736599E+04
a <sub>i7</sub>	1.20618153E+00	6.83010238E-01	-4.46682853E-01



**Tabela 1.2** – Coeficientes dos polinômios interpoladores das espécies  $F_2$  e  $F$ .

Símbolo	$F_2$	$F$
$M_{mi}$ (kmol/kg)	37.99681E+00	18.99785E+00
$h_i^f / R_i$	0.00000000E+00	9.54836785E+03
T > 1000 K		
$a_{i1}$	3.86166219E+00	2.667749541E+00
$a_{i2}$	7.88367679E-04	-1.66693548E-04
$a_{i3}$	-1.81982940E-07	6.42448457E-08
$a_{i4}$	-9.17436560E-12	-1.08588758E-11
$a_{i5}$	2.65193472E-15	6.70845755E-16
$a_{i6}$	-1.23238655E+03	8.78895350E+03
$a_{i7}$	2.04119869E+00	4.00729173E+00
T ≤ 1000 K		
$a_{i1}$	3.20832415E+00	2.41951429E+00
$a_{i2}$	1.25919179E-03	2.94132793E-03
$a_{i3}$	3.89747979E-06	-8.92799246E-06
$a_{i4}$	-7.22184984E-09	9.92060935E-09
$a_{i5}$	3.31837862E-12	-3.79860044E-12
$a_{i6}$	-1.03425794E+03	8.75732351E+03
$a_{i7}$	5.61903603E+00	4.74771017E+00

## APÊNDICE 2 - CONSTANTES DE EQUILÍBRIO

---

Será descrito aqui como se obter as constantes de equilíbrio a partir das propriedades termodinâmicas da mistura de gases. Por conveniência, algumas equações da dissertação são aqui reescritas.

A expressão genérica de um conjunto de reações químicas é dada por



onde  $A_i$  é o símbolo da espécie química  $i$  e  $\nu_{ij}$  é o coeficiente estequiométrico da espécie química  $i$  na reação  $j$ , sendo  $\nu_{ij}$  positivo para produto (lado direito da reação) e negativo para reagente (lado esquerdo da reação), “nr” é o número de reações e “ne” é o número de espécies químicas.

A condição de equilíbrio requer que as frações molares das espécies químicas que compõem a mistura de gases satisfaçam simultaneamente as “nr” condições de equilíbrio, dadas pela equação (22),

$$\prod_{i=1}^{ne} X_i^{\nu_{ij}} = \left( \frac{p}{p_{ref}} \right)^{-\Delta \nu_j} \cdot K_{p_j}(T) \quad (j=1, \dots, nr) \quad (22)$$

onde  $X_i$  é a fração molar da espécie  $i$ ,  $K_{p_j}(T)$  é a constante de equilíbrio da reação  $j$  (para cada reação essa constante depende somente da temperatura),  $p_{ref}$  é a pressão de referência de 1 atm (101,3 kPa), e  $\Delta \nu_j$  é a variação do número de moles da reação  $j$ , dada por

$$\Delta v_j = \sum_{i=1}^{ne} v_{ij} \quad (j=1, \dots, nr) \quad (23)$$

A constante de equilíbrio ( $Kp_j$ ) é calculada através de (Kuo, 1986)

$$Kp_j(T) = \exp\left(-\frac{\Delta \bar{G}_j^\circ}{R_u T}\right) \quad (A2-1)$$

onde  $\Delta \bar{G}_j^\circ$  é a variação da energia livre de Gibbs na pressão de 1 atm, e a barra sobre o símbolo indica que a propriedade termodinâmica é dada em base molar. Essa variação é obtida através de

$$\Delta \bar{G}_j^\circ = \sum_{i=1}^{ne} v_{ij} \cdot \bar{G}_i^\circ \quad (A2-2)$$

sendo

$$\bar{G}_i^\circ = \bar{h}_i - T \cdot \bar{s}_i^\circ \quad (A2-3)$$

A entropia de estado padrão ( $\bar{s}_i^\circ$ ), isto é, a entropia na pressão de 1 atm, é definida através por

$$\bar{s}_i^\circ = \int_{T_{ref}}^T \frac{\bar{c}_{pi}}{T} dT + \bar{s}_{i,ref} \quad (A2-4)$$

Neste trabalho a entropia de estado padrão e a entalpia de cada espécie química são calculadas através das equações (A1-1) e (11), então, a energia livre de Gibbs é obtida com a equação (A2-3), e as equações (A2-1) e (A2-2) são empregadas para determinar as constantes de equilíbrio.

### APÊNDICE 3 - VELOCIDADE DO SOM EM SISTEMAS REATIVOS

---

Neste apêndice será apresentada a expressão utilizada para determinar a velocidade do som num sistema reativo. Essa expressão é particularizada para o caso dos gases perfeitos.

A definição da velocidade do som é expressa por

$$a^2 = \left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s \quad (\text{A3-1})$$

A partir das relações termodinâmicas apresentadas nas tabelas de Bridgman pode-se deduzir a seguinte expressão

$$a^2 = \left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s = - \frac{p}{\rho} \frac{c_p}{c_v \left( \frac{\partial \ln v}{\partial \ln p} \right)_T} \quad (\text{A3-2})$$

onde  $v$  é o volume específico ( $v=1/\rho$ ).

Sendo  $\gamma_f$  a razão dos calores específicos ( $\gamma_f=c_p/c_v$ ), para um gás ou uma mistura de gases que obedecem a equação de estado dos gases perfeitos, a velocidade do som pode ser dada por

$$a = \sqrt{\frac{\gamma_f}{-\left( \frac{\partial \ln v}{\partial \ln p} \right)_T} RT} \quad (\text{A3-3})$$

Se a mistura de gases estiver congelada, isto é, tem sua composição fixa,

$$\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln p}\right)_T = -1 \quad (\text{A3-4})$$

resultando na conhecida expressão para determinar a velocidade dos som,

$$a = \sqrt{\gamma_f RT} \quad (\text{A3-5})$$

Definindo-se o expoente isentrópico ( $\gamma_e$ ) através de (Zucrow e Hoffman, 1977)

$$\gamma_e = \frac{\gamma_f}{-\left(\frac{\partial \ln v}{\partial \ln p}\right)_T} \quad (\text{A3-6})$$

a expressão para se determinar a velocidade do som de gases reativos pode ser escrita como a equação (A3-5), substituindo-se  $\gamma_f$  por  $\gamma_e$ ,

$$a = \sqrt{\gamma_e RT} \quad (\text{A3-7})$$

Observa-se que o expoente isentrópico, definido pela equação (A3-6), somente coincide com a razão de calores específicos quando não há variação da composição química.

Deve-se tomar um cuidado no cálculo do calor específico a volume constante, pois a relação ( $c_p - c_v = R$ ) só vale se a mistura de gases estiver “congelada”. Se for uma mistura de gases reativos pode-se, a partir da primeira lei da termodinâmica, deduzir uma expressão mais geral para  $c_p - c_v$ . Essa expressão é dada por (Anderson, 1989),

$$c_p - c_v = \left[ \left(\frac{\partial e}{\partial v}\right)_T + p \right] \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p \quad (\text{A3-8})$$

onde “e” é a energia interna.

Para uma mistura de gases reativos que obedece a equação de estado dos gases perfeitos, a expressão acima resulta em

$$c_p - c_v = R + \frac{R}{p} \left( \frac{\partial e}{\partial v} \right)_T \quad (\text{A3-9})$$

Lembrando que para gases reativos a derivada  $(\partial e / \partial v)_T$  não é nula porque a energia interna, da mesma maneira que a entalpia, varia em função da pressão e da temperatura. Utilizando as relações termodinâmicas apresentadas nas tabelas de Bridgman chega-se a

$$c_p - c_v = R \frac{\left( \frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p^2}{-\left( \frac{\partial \ln v}{\partial \ln p} \right)_T} \quad (\text{A3-10})$$

Neste trabalho a velocidade do som é calculada através da equação (A3-6) e o expoente isentrópico com equação (A3-7). Para determinar a razão entre os calores específicos, o calor específico a pressão constante é obtido através da equação (17) e o calor específico a volume constante da equação (A3-10).

As derivadas que aparecem nas equações (A3-7), (A3-10) e (17) são obtidas com as seguintes expressões:

$$\left( \frac{\partial \ln v}{\partial \ln p} \right)_T = -1 - \frac{p}{M_m} \sum_{i=1}^{ne} \left[ \left( \frac{\partial X_i}{\partial p} \right)_T M_{mi} \right] \quad (\text{A3-11})$$

$$\left( \frac{\partial \ln v}{\partial \ln T} \right)_p = 1 - \frac{T}{M_m} \sum_{i=1}^{ne} \left[ \left( \frac{\partial X_i}{\partial T} \right)_p M_{mi} \right] \quad (\text{A3-12})$$

$$\left( \frac{\partial c_i}{\partial T} \right)_p = \left( \frac{\partial X_i}{\partial T} \right)_p \frac{M_{mi}}{M_m} - \frac{c_i}{M_m} \sum_{j=1}^{ne} \left[ \left( \frac{\partial X_j}{\partial T} \right)_p M_{mj} \right] \quad (\text{A3-13})$$

onde as derivadas  $(\partial X_i / \partial T)_p$  e  $(\partial X_i / \partial p)_T$  são determinadas através das soluções dos sistemas lineares resultantes das derivadas das equações (31) a (35) em relação à temperatura (com pressão constante) e em relação à pressão (com temperatura constante), respectivamente.

## APÊNDICE 4 - PERFORMANCE DE MOTORES-FOGUETES

---

Neste apêndice são definidos alguns parâmetros globais utilizados para verificar o desempenho teórico de motores-foguetes. Essas expressões aqui apresentadas foram retiradas de Huzel e Huang (1992) e Sutton (1992)

O empuxo desenvolvido por um motor-foguete é determinado através de

$$F = \dot{m}_s u_s + A_s (p_s - p_a) \quad (\text{A4-1})$$

onde o subscrito “s” indica seção de saída do bocal,  $\dot{m}_s$  é o fluxo de massa dos propelentes, “u” é a velocidade, A é a área da seção transversal, p é a pressão e  $p_a$  é a pressão ambiente.

No vácuo a pressão ambiente é nula e, assim, o empuxo no vácuo é dado por

$$F_{\text{vac}} = \dot{m}_s u_s + A_s p_s \quad (\text{A4-2})$$

O impulso específico é um dos parâmetros de performance mais utilizados para motores-foguetes. Esse parâmetro pode ser definido através de

$$I_s = \frac{F}{\dot{m} \cdot g} \quad (\text{A4-3})$$

onde “g” é a aceleração da gravidade ( $g = 9,81 \text{ m/s}^2$ )



Num sistema com velocidade sônica na garganta, a velocidade característica ( $c^*$ ) indica o fluxo de massa dos propelentes necessário para manter a pressão de estagnação requerida na câmara de combustão. Esse parâmetro pode ser dado pela seguinte expressão

$$c^* = \frac{p_c A_t}{\dot{m}} \quad (A4-4)$$

onde  $p_c$  é a pressão de estagnação na câmara de combustão.

O coeficiente de empuxo ( $C_f$ ) reflete as propriedades de expansão dos gases e a qualidade do projeto de um bocal. Em outras palavras,  $C_f$  mede o aumento da força causado pela expansão dos gases ao longo do bocal, comparada com a força que seria gerada se a pressão da câmara atuasse somente sobre a área da garganta. A expressão para determinação do coeficiente de empuxo é dada por,

$$C_f = \frac{F}{p_c A_t} \quad (A4-5)$$

Combinando-se as expressões (A4-3), (A4-4) e (A4-5) resulta na relação

$$I_s = \frac{c^* C_f}{g} \quad (A4-6)$$

Os parâmetros aqui mostrados são geralmente apresentados em trabalhos para verificar e comparar a performance de motores-foguetes.