

**SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS QUASE-UNIDIMENSIONAIS E  
REATIVOS EM BOCAIS DO TIPO CONVERGENTE-DIVERGENTE**

**Fernando Laroca**

**Carlos Henrique Marchi**

**António Fábio Carvalho da Silva**

**José Nivaldo Hinckel**

XXI CILAMCE

21<sup>th</sup> Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering

Rio de Janeiro, RJ, dezembro de 2000

CD-ROM

# **SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS QUASE-UNIDIMENSIONAIS E REATIVOS EM BOCAIS DO TIPO CONVERGENTE-DIVERGENTE**

**Fernando Laroca<sup>\*</sup>, Carlos H. Marchi<sup>\*</sup>, Antônio Fábio C. da Silva<sup>#</sup>, e José N. Hinckel<sup>+</sup>**

<sup>\*</sup>Universidade Federal do Paraná  
Centro Politécnico, s/n, Jardim das Américas  
CEP 81531-990, Curitiba, PR, Brasil  
fernando@cce.ufpr.br, marchi@cce.ufpr.br

<sup>#</sup>Universidade Federal de Santa Catarina  
Florianópolis, SC, Brasil  
fabio@sinmec.ufsc.br

<sup>+</sup>Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais  
São José dos Campos, SP, Brasil  
hinckel@dem.inpe.br

**Palavras-chave:** escoamento reativo, volumes finitos, propulsão, bocal convergente-divergente.

**Resumo.** *Neste trabalho são feitas simulações numéricas do escoamento em equilíbrio químico local no interior de um bocal convergente-divergente. O fluido é considerado uma mistura de gases termicamente perfeitos. Para representar o escoamento é utilizado um modelo matemático quase-unidimensional. A composição química da mistura de gases é determinada através do método das constantes de equilíbrio. O modelo numérico empregado é baseado no método dos volumes finitos, utiliza uma formulação adequada a qualquer regime de velocidade e funções de interpolação de segunda ordem. São obtidos resultados para escoamentos congelado e em equilíbrio químico local. Esses resultados são comparados com os obtidos através do programa NASA SP-273 para o par propelente  $H_2-F_2$ , apresentando uma boa concordância.*

## 1 INTRODUÇÃO

Bocais do tipo convergente-divergente são componentes de motores a 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 da 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.

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 propelente 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<sup>1</sup> e Huzel et al.<sup>2</sup> há explicações em detalhes do funcionamento de motores-foguetes.

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

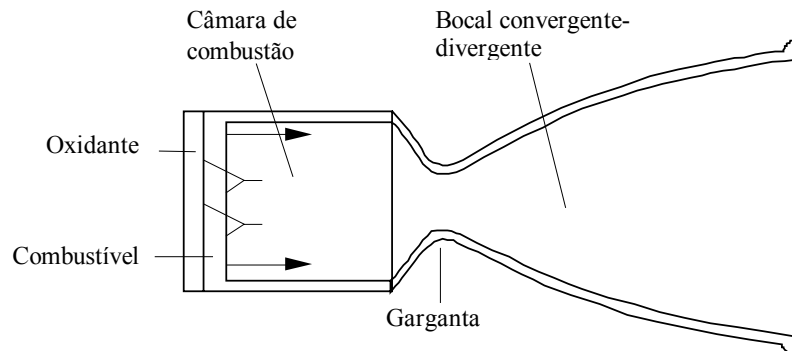


Figura 1 – Câmara de combustão e bocal convergente-divergente.

Nesse motor, os propelentes, constituído por um combustível e um oxidante, são injetados e misturados na câmara de combustão. Ainda na câmara ocorre a reação de combustão entre o par propelente, 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 químicas resultantes 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 da 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 compõe a mistura de gases, produtos da combustão, podem reagir entre si, dissociando-se e recombinao-se conforme as condições de temperatura e pressão. Se as velocidades alcançadas ao longo do escoamento forem muito altas, em comparação com as velocidades das reações químicas, o tempo de permanência dos gases no interior do bocal será pequeno e, praticamente, não haverá 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<sup>3</sup>.

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 e, 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.

Conhecer as propriedades do escoamento no interior do bocal é essencial para o seu projeto. Através dessas propriedades são determinados o fluxo de massa dos propelentes, o empuxo desenvolvido pelo motor e as temperaturas e cargas térmicas na parede<sup>4</sup>, entre outras características do motor. Assim, pode-se, por exemplo, escolher e dimensionar o sistema de refrigeração da parede do bocal, determinar o perfil ótimo do bocal<sup>5</sup>, e calcular outros parâmetros importantes do motor.

Para o projeto preliminar, uma hipótese amplamente utilizada é a de considerar o escoamento quase-unidimensional. Isso torna possível uma solução analítica das equações governantes para o caso limite de escoamento isentrópico de um fluido caloricamente perfeito e reduz muito os custos computacionais das soluções numéricas<sup>6</sup>.

O principal objetivo deste trabalho é empregar o método dos volumes finitos, como descrito por Maliska<sup>7</sup>, para resolver o modelo matemático quase-unidimensional do escoamento em equilíbrio químico local em bocais do tipo convergente-divergente.

Na próxima seção é apresentado o modelo matemático do problema, que inclui o método das constantes de equilíbrio para determinar a composição química local da mistura de gases. Na seção 3 é descrito o modelo numérico utilizado para resolver o sistema de equações diferenciais parciais. Os resultados são mostrados e discutidos na seção 4.

## 2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Nesta seção é apresentada a formulação matemática utilizada na simulação do escoamento em equilíbrio químico num bocal, composta, principalmente, pelas equações de conservação da massa, quantidade de movimento linear e energia.

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, assume-se que as paredes são adiabáticas e que não há forças viscosas, apesar de que a inclusão desses fenômenos não dificultaria a solução do problema através do método numérico empregado. 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.

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<sup>8</sup>. 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.

Também é utilizada a equação de estado dos gases termicamente perfeitos, na forma 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 das espécies.

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 que relaciona a variável entalpia com a temperatura e a 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 para facilitar o controle da convergência do modelo numérico.

As condições de contorno na entrada do bocal são obtidas em função das propriedades no reservatório ou câmara de combustão. 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. 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 mais adiante.

## 2.1 Propriedades termodinâmicas

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 como uma mistura de gases termicamente perfeitos em equilíbrio químico.

Diversas funções podem ser ajustadas aos valores das propriedades termodinâmicas, em função da temperatura, fornecidas pelas tabelas JANAF<sup>9</sup>. Neste trabalho são utilizados os polinômios interpoladores do quarto grau propostos em McBride et al.<sup>10</sup>. Assim, o calor específico à pressão constante pode ser dado 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 à 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.

Para um gás termicamente perfeito tem-se,

$$dh_i = c_{pi}dT \quad (6)$$

Substituindo-se a Eq. (5) na Eq. (6) e integrando a equação resultante entre uma temperatura de referência e uma temperatura T tem-se a expressão que fornece a entalpia de uma espécie química em função de sua temperatura, dada por,

$$h_i = R_i \left( a_{i1}T + a_{i2} \frac{T^2}{2} + a_{i3} \frac{T^3}{3} + a_{i4} \frac{T^4}{4} + a_{i5} \frac{T^5}{5} + a_{i6} \right) \quad (7)$$

Os coeficientes  $a_{ij}$  ( $j=1,\dots,6$ ) que aparecem nas equações (5) e (7) dependem apenas da espécie química e são encontrados em McBride et al.<sup>10</sup>. O valor do coeficiente  $a_{i6}$  contempla a parcela devido a entalpia de formação na temperatura de referência.

Quando o fluido é uma mistura de gases sua entalpia é obtida através de<sup>11</sup>

$$h = \sum_{i=1}^{ne} c_i \cdot h_i \quad (8)$$

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-se a Eq. (7) na Eq. (8) resulta na expressão que relaciona a entalpia da mistura com a temperatura e a pressão, dada por,

$$h = \sum_{i=1}^{ne} \left[ c_i \cdot R_i \left( a_{i1}T + a_{i2} \frac{T^2}{2} + a_{i3} \frac{T^3}{3} + a_{i4} \frac{T^4}{4} + a_{i5} \frac{T^5}{5} + a_{i6} \right) \right] \quad (9)$$

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

O calor específico a pressão constante da mistura de gases pode ser obtido a partir da sua definição, como mostrado em Anderson<sup>11</sup>, resultando em,

$$c_p = \sum_{i=1}^{ne} c_i \cdot c_{pi} + \sum_{i=1}^{ne} \left( \frac{\partial c_i}{\partial T} \right)_p \cdot h_i \quad (10)$$

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

$$R = \sum_{i=1}^{ne} c_i \cdot R_i \quad (11)$$

Como esperado, pode-se observar nas Eqs. (8) a (11) 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 compõem. 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.

## 2.2 Determinação da composição química

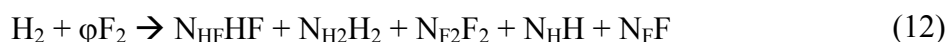
Nesta seção são utilizadas a lei de Dalton e as condições de equilíbrio químico, além do balanço no número de átomos, para compor um sistema de equações empregado para determinar a composição química de uma mistura de gases em equilíbrio químico local<sup>3</sup>. Para isso, é utilizado o método das constante de equilíbrio<sup>12</sup>.

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 definições das frações mássicas e molares podem ser vistas em Anderson<sup>11</sup>.

Um dos pontos importantes na determinação da composição química dos produtos de uma reação é saber quais espécies deverão ser consideradas. Por exemplo, à 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<sup>3</sup>.

O par propelente 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. Os produtos considerados são<sup>13</sup> HF,  $H_2$ , H,  $F_2$  e F.

Seja a reação global do par propelente  $H_2/F_2$ , 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 Eq. (12) é feito inicialmente um balanço dos números de átomos de flúor (F) e hidrogênio (H), que resulta em<sup>13</sup>

$$\frac{X_{HF} + 2X_{F_2} + X_F}{X_{HF} + 2X_{H_2} + X_H} = \phi \quad (13)$$

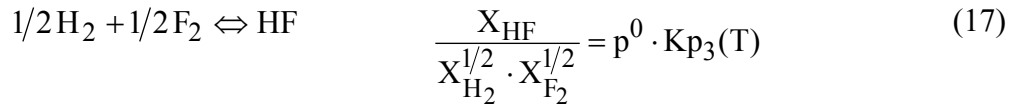
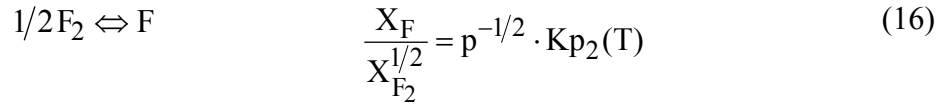
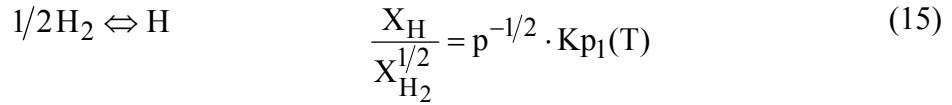
Obedecida a Eq. (13) significa que a conservação dos números de átomos de H e F é satisfeita.

Uma segunda expressão é obtida a partir da Lei de Dalton, resultando em

$$X_{HF} + X_{H_2} + X_{F_2} + X_H + X_F = 1 \quad (14)$$

E, finalmente, tem-se as equações dadas pelas condições de equilíbrio químico. Em geral, se a mistura tem “ne” espécies químicas e  $\phi$  elementos atômicos (neste caso são dois elementos, H e F), então são necessárias “ne –  $\phi$ ” equações químicas independentes, com suas respectivas constantes de equilíbrio. Neste caso, ne = 5 e  $\phi$  = 2, assim, nr = 3. As equações químicas independentes podem ser<sup>13</sup>





onde  $K_{p_j}$  é a constante de equilíbrio da equação “j”.

As Eqs. (13) a (17) constituem um sistema não-linear através do qual, conhecidas a pressão, a temperatura e a razão oxidante/combustível, são determinadas as cinco frações molares das espécies que compõem a mistura de gases.

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

$$c_i = X_i \frac{M_{mi}}{\sum_{i=1}^{ne} X_i \cdot M_{mi}} \quad (18)$$

onde  $M_{mi}$  é a massa molecular da espécie química “i”.

### 2.3 Resumo da formulação matemática

Nesta seção foi apresentado o modelo matemático utilizado para representar o escoamento em equilíbrio químico local no interior de um bocal convergente-divergente. Esse modelo é constituído pelas Eqs. (1) a (4) e Eq. (9).

No procedimento numérico que será empregado essas equações são resolvidas segregadamente, isto é, as equação de conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia são resolvidas, respectivamente para a pressão (p), velocidade (u) e entalpia (h). A equação de estado (Eq. 4) é resolvida para a massa específica ( $\rho$ ). Como essa equação é escrita em função da temperatura, a Eq. (9) é resolvida para essa variável e, além disso, a Eq. (11) é usada para avaliar a constante do gás. Nas Eqs. (8) a (11) aparecem explicitamente as frações mássicas que são obtidas resolvendo o sistema de equações não-lineares composto pelas Eqs. (13) a (17) junto com a Eq. (18), a partir da temperatura, pressão e razão oxidante/combustível.

## 3 MODELO NUMÉRICO

Nesta seção é descrito o modelo numérico empregado para simular o escoamento em equilíbrio químico num bocal do tipo convergente-divergente. Também são apresentadas as

condições de contorno do problema e mostrados os procedimentos numéricos para determinar a temperatura e a composição química.

### 3.1 Discretização das equações diferenciais

Para resolver o sistema de equações diferenciais, dado pelas Eqs. (1) a (3), é utilizado um procedimento numérico baseado no método dos volumes finitos<sup>7,14</sup>. O princípio básico desse método consiste em subdividir (discretizar) o domínio do problema em volumes de controle, nos quais as equações diferenciais são integradas. Neste trabalho, a integração é feita num arranjo desencontrado de variáveis<sup>14</sup>.

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<sup>15</sup>. Essa linearização consiste em avaliar o produto entre a massa específica e a velocidade através de  $\rho \cdot u = \rho^* \cdot u + \rho \cdot u^* - \rho^* \cdot u^*$ , onde o asterisco indica que a variável é estimada ou assume o valor de uma iteração anterior. Então, são utilizados o método SIMPLEC<sup>16</sup> para o acoplamento pressão-velocidade e a equação de estado (Eq. 4) 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<sup>17</sup>. Nas representações matriciais dos sistemas lineares, as matrizes dos coeficientes resultam tridiagonais e esses sistemas são resolvidos pelo algoritmo de Thomas<sup>14,18</sup> (TDMA).

O procedimento descrito nesta seção é semelhante ao mostrado em Silva<sup>15</sup> e Maliska<sup>7</sup>. A diferença é que neste trabalho a equação da energia é escrita em termos da entalpia.

### 3.2 Aplicação das condições de contorno

Já foi comentado na introdução que o escoamento é subsônico na entrada do bocal e supersônico na saída. Assim, 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<sup>19</sup>. Dessa forma, na entrada do bocal são 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 na própria solução no interior do bocal.

Neste trabalho, as condições de contorno na entrada são aplicadas considerando um escoamento adiabático e reversível, portanto isentrópico, entre a câmara de combustão e a entrada do bocal. Assim sendo, a entalpia de estagnação e a entropia na entrada do bocal são iguais às do fluido na câmara de combustão. Uma vez que a entalpia de estagnação e a entropia são conhecidas na entrada, a temperatura e a pressão estáticas são prescritas em função da velocidade, que, como já foi mencionado, será extrapolada da própria solução no interior do bocal<sup>20</sup>.

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 suas derivadas espaciais de segunda ordem nulas na saída do domínio.

### 3.3 Determinação da temperatura a partir da entalpia

A Eq. (9), que relaciona a entalpia da mistura de gases 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-Raphson. Nesse procedimento a entalpia é aproximada pela série de Taylor, entretanto, desprezando os termos a partir da segunda ordem. Essa expressão é dada por

$$h = h^* + \left( \frac{\partial h}{\partial T} \right)_p (T - T^*) \quad (19)$$

Pode-se observar que a derivada que aparece na equação acima é a definição de calor específico à pressão constante. Resolvendo a Eq. (19) para a temperatura resulta na seguinte expressão:

$$T = T^* + \frac{(h - h^*)}{c_p} \quad (20)$$

onde  $c_p$  é avaliado através da Eq. (10) 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 Eq. (20).

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 à pressão constante é reavaliado a cada iteração.

### 3.4 Procedimento numérico para 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 (13) a (17). Esse sistema é não-linear e, portanto, é resolvido numericamente através de um procedimento iterativo baseado no método de Newton-Raphson para sistemas de equações. Para tanto, as equações do sistema não-linear são aproximadas por séries de Taylor, desprezando os termos iguais ou superiores à segunda ordem, resultando num sistema linear com "ne" variáveis e equações, dado por

$$\left(\frac{\partial f_j}{\partial X_1}\right)^k \delta X_1 + \dots + \left(\frac{\partial f_j}{\partial X_{ne}}\right)^k \delta X_{ne} = f_j^k \quad (j = 1, \dots, ne) \quad (21)$$

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

$$\delta X_j = X_j^k - X_j^{k+1} \quad (22)$$

onde o sobrescrito "k+1" indica o próximo nível iterativo.

Com as frações molares estimadas ou da última iteração, o sistema linear dado pela Eq. (21) é resolvido através do método de Gauss para  $\delta X_j$ . As estimativas para as frações molares do próximo nível iterativo ( $X_j^{k+1}$ ) são obtidas através da Eq. (22). Repete-se o ciclo até que um critério de convergência seja satisfeito.

### 3.5 Algoritmo de solução

Para fazer as simulações foi elaborado um programa computacional na linguagem Fortran. O algoritmo de solução implementado nesse programa, em linhas gerais, é:

1. São especificadas as condições de pressão, temperatura e razão oxidante/combustível dos propelentes injetados na câmara de combustão;
2. As condições na câmara de combustão são determinadas considerando as condições de equilíbrio químico;
3. São estimadas as condições iniciais de pressão, entalpia, temperatura, velocidade, massa específica e composição química ao longo do bocal;
4. Os campos de pressão, entalpia, temperatura, velocidade, massa específica e composição química são estimados para o instante  $t + \Delta t$ ;
5. Calculam-se os coeficientes do sistema de equações algébricas lineares originados da discretização da equação de conservação da quantidade de movimento linear e obtém-se o campo de velocidade;
6. Calculam-se os coeficientes do sistema de equações algébricas lineares originados da discretização da equação de conservação da massa e obtém-se o campo de pressão;
7. Os coeficientes do sistema de equações algébricas lineares originados da discretização da equação de conservação da energia são calculados e obtém-se o campo de entalpia;
8. É determinado o campo de temperatura (T) que origina o campo de entalpia obtido no item anterior;

9. A partir dos campos disponíveis de temperatura e pressão, além da razão oxidante/combustível, é obtido o campo de composição química;
10. O campo de massa específica é determinado com a equação de estado;
11. Retorna-se ao item 4 até que as condições de regime permanente, obedecido determinado critério, sejam alcançadas.

Para os resultados apresentados na próxima seção os tempos de computação, utilizando um Pentium II 300 MHz com 64 Mbytes de RAM, foram de cerca de 3 minutos para o caso do escoamento congelado e 27 minutos para o escoamento em equilíbrio químico. Deve-se ressaltar no entanto que não houve a preocupação em otimizar o algoritmo para minimizar os tempos de computação.

#### 4 RESULTADOS E ANÁLISES

Nesta seção são apresentados os resultados das simulações realizadas para os escoamentos congelado e em equilíbrio químico local. São mostrados parâmetros globais de desempenho do motor e os gráficos de algumas propriedades ao longo do bocal.

Os resultados obtidos neste trabalho são comparados com os obtidos através do programa apresentado em Gordon et al<sup>21</sup>. Esse programa, denominado NASA SP-273, é uma referência bem conhecida e amplamente utilizada para comparações em trabalhos que envolvem equilíbrio químico.

##### 4.1 Geometria e condições do problema

A geometria do bocal utilizado nas simulações foi retirada de Barros et al<sup>22</sup>. 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, finalmente, o ângulo do divergente cônico é de 15°. A razão entre a área na saída do bocal e a área da garganta é igual a 64,5. A figura 2 mostra a geometria do bocal.

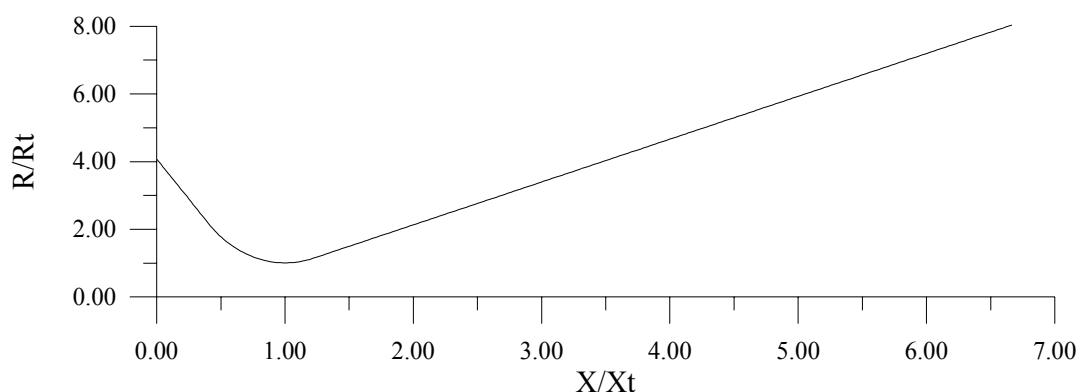


Figura 2 – Geometria do bocal.

As condições iniciais são as mesmas que as dos trabalhos de Barros et al.<sup>22</sup> e Zucrow et al.<sup>13</sup>. Os propelentes H<sub>2</sub> e F<sub>2</sub> são injetados na câmara de combustão a uma temperatura de 298,15 K, com uma razão mássica de mistura oxidante/combustível igual a 12, e a uma pressão de 689,5 kPa. A razão mássica 12 corresponde a uma razão molar oxidante/combustível de 0,6367. 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 determinadas considerando que a mistura de gases é homogênea e que a reação é adiabática e completa. Considera-se, também, que a velocidade dos gases é tão pequena que sua energia cinética pode ser desprezada.

Na tabela 1 é feita uma comparação entre algumas propriedades na câmara de combustão, obtidas no presente trabalho, e o programa NASA SP-273<sup>21</sup>, para as condições descritas acima. Também há uma coluna referente a alguns resultados retirados de Zucrow et al.<sup>13</sup>. Nessa tabela,  $u_{\text{som}}$  é a velocidade do som na câmara.

Tabela 1. Condições na câmara de combustão.

Propriedade	Presente trabalho	NASA SP-273 <sup>21</sup>	Zucrow et al. <sup>13</sup>
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)	$< 10^{-5}$	$< 10^{-5}$	$< 10^{-5}$
X <sub>H</sub> (adim)	0,2351	0,2346	0,2347
X <sub>F</sub> (adim)	0,04290	0,04317	0,04314
c <sub>p</sub> (kJ/kg.K)	10,8609	10,8634	–
R (kJ/kg.K)	603,03	602,96	–
$u_{\text{som}}$ (m/s)	1701,89	1702,03	–

Pode-se observar na tabela 1 que as condições na câmara de combustão foram corretamente determinadas, apresentando uma boa concordância com os valores obtidos pelo programa de referência. As diferenças, que são pequenas, podem ser, principalmente, devido ao fato 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<sup>-5</sup>. Além disso, no programa citado, os coeficientes dos polinômios utilizados para avaliar as propriedades termodinâmicas, como os das Eqs. (7) e (9), não são exatamente os mesmos que os usados neste trabalho.

#### 4.2 escoamento de um fluido 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. Para esse caso os calores específicos são constantes e uma solução analítica é bem conhecida<sup>23</sup>. A solução numérica obtida com 200 volumes de controle apresentou um erro de 0,02% no fluxo de massa em relação à solução analítica. Utilizando 400 volumes o erro foi de apenas 0,003%. Nos gráficos das variáveis pressão, temperatura, massa específica e velocidade não é possível distinguir as curvas referentes às soluções numéricas e analíticas. Esses gráficos não são aqui mostrados.

Esses resultados demonstram que o processo de solução, as condições de contorno, e a discretização foram adequadamente implementados para o escoamento isentrópico de um fluido caloricamente perfeito, dentro dos erros mencionados.

### 4.3 Escoamentos congelado e em equilíbrio químico

Os resultados apresentados a seguir foram obtidos com uma malha de 400 volumes de controle. Na região da garganta, com  $X/X_t$  variando de 0,40 a 1,22, a malha é igualmente espaçada com 281 volumes. Nas partes convergente e divergente os comprimentos dos volumes aumentam no sentido da garganta para os contornos, segundo progressões geométricas de razão em torno de 1,06 .

No escoamento congelado a composição química é mantida constante e igual à da câmara de combustão. Entretanto, o fluido é tratado como uma mistura de gases termicamente perfeitos, ou seja, o calor específico à pressão constante é função somente da temperatura (Eq. 5) mas o fluido obedece a equação de estado dos gases perfeitos (Eq. 4).

No escoamento em equilíbrio químico as frações molares, obviamente, variam ao longo do bocal e, portanto, o calor específico passa a depender da temperatura e da composição química da mistura de gases, como já mencionado.

Nas figuras que se seguem são utilizadas as condições na câmara de combustão descritas na seção 4.1 e resumidas na tabela 1.

As figuras 3 a 6 a seguir apresentam os gráficos das variáveis temperatura, pressão, velocidade e número de Mach para os escoamentos congelado e em equilíbrio químico local. Os resultados obtidos neste trabalho ficaram muito próximos aos dos obtidos com o programa NASA SP-273. Nas curvas para o escoamento congelado praticamente não se verificam diferenças. Entretanto, nas curvas referentes ao escoamento em equilíbrio químico observa-se uma diferença pequena entre os resultados aqui obtidos e os do programa citado. As discrepâncias encontradas podem ser creditadas aos erros de discretização<sup>24</sup> inerentes ao método empregado para a solução do sistema de equações diferenciais parciais. Na referência utilizada<sup>21</sup>, como o escoamento em equilíbrio químico simulado é adiabático e isentrópico, as variáveis do problema são obtidas diretamente dos balanços de entropia e da entalpia de estagnação, não sendo afetadas por erros de discretização, portanto. Outro provável motivo para essas pequenas discrepâncias, já comentado na seção 4.1, é a maneira distinta de determinar a composição química da mistura de gases.

Nas figuras 3, 4 e 5 pode-se observar que os valores de temperatura, pressão e velocidade na saída do bocal são mais elevados no caso do escoamento em equilíbrio químico do que no caso do congelado.

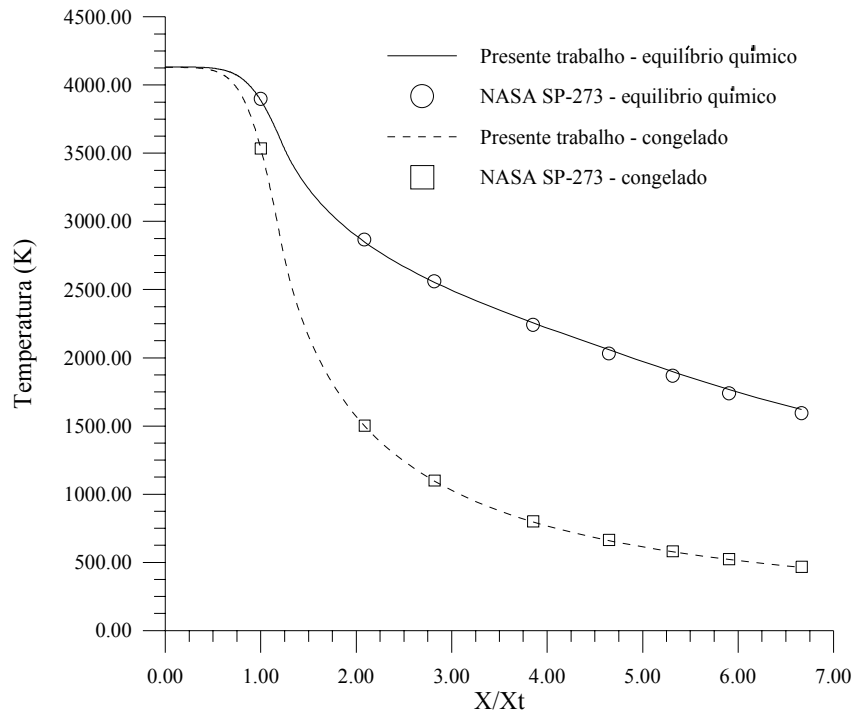


Figura 3 – Temperatura ao longo do bocal.

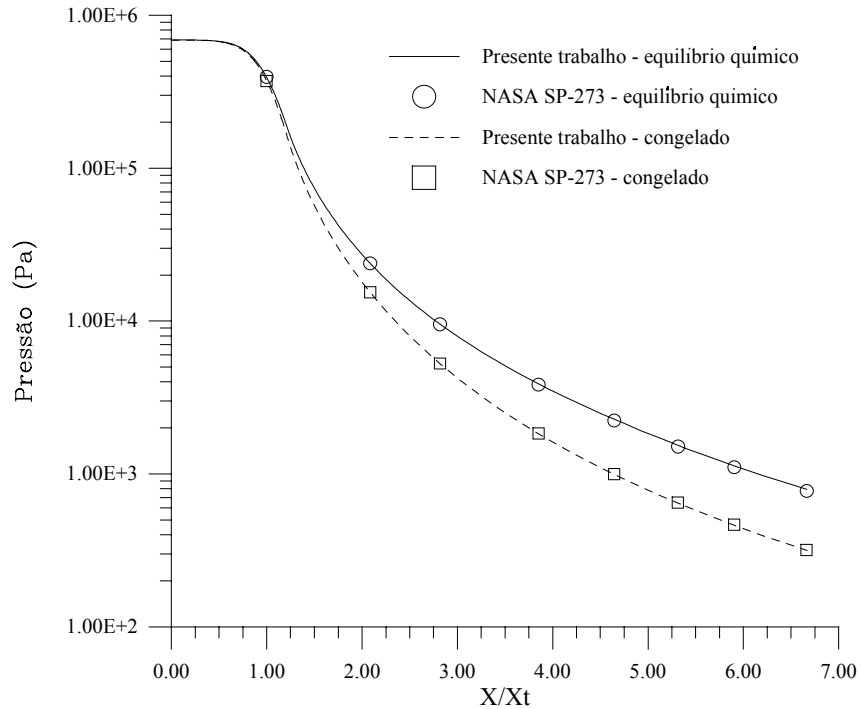


Figura 4 – Pressão ao longo do bocal.



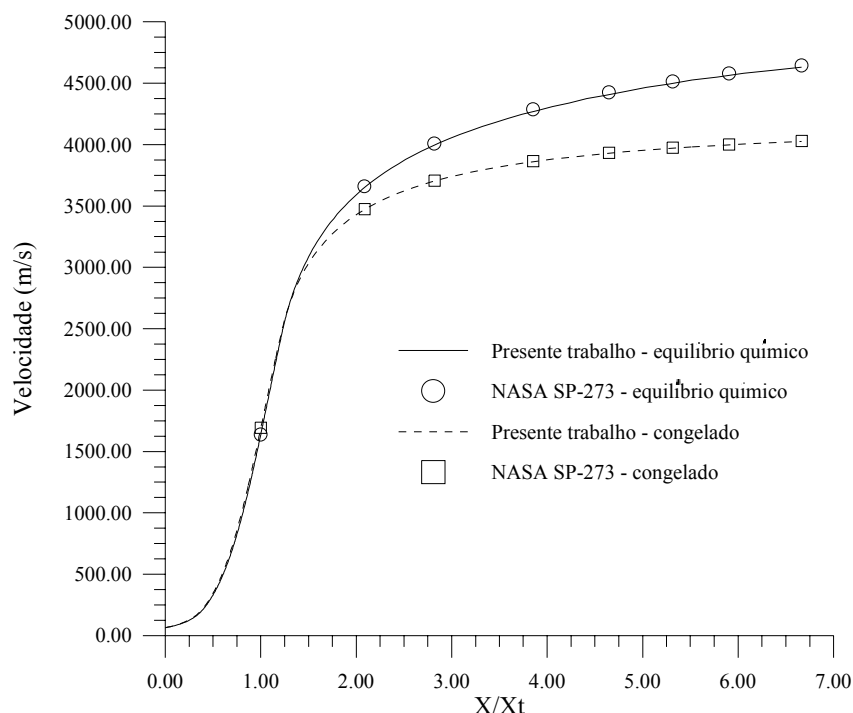


Figura 5 – Velocidade ao longo do bocal.

Na figura 6 são mostrados os perfis do número de Mach para os escoamentos congelado e em equilíbrio químico. Também foi incluída a curva do número de Mach obtido por Barros et al.<sup>22</sup> para o escoamento em desequilíbrio químico. Essa curva foi acrescentada para ilustrar o fato de que os escoamentos em equilíbrio químico, que possuem taxa de reação infinita, e os escoamentos congelados, que possuem taxa de reação nula, são casos limites dos escoamentos em desequilíbrio químico (taxa finita de reação).

As frações molares das espécies químicas que compõem a mistura de gases podem ser vistas nas figuras 7 e 8. Não foi traçada a curva da fração molar do  $F_2$  porque no problema simulado seu valor sempre ficou abaixo de  $10^{-5}$ . Nos resultados disponíveis na literatura<sup>13,21,22</sup> isso também foi verificado.

Nos gráficos das frações molares, da mesma maneira que nos outros gráficos, verifica-se uma boa concordância entre os resultados aqui obtidos para escoamentos em equilíbrio químico e os encontrados com o programa NASA SP-273<sup>21</sup>. Uma vez que existem pequenas discrepâncias nos resultados para a temperatura e pressão, é de se esperar que isso também seja observado nos gráficos para a composição química, como pode ser visto, na figura 8.

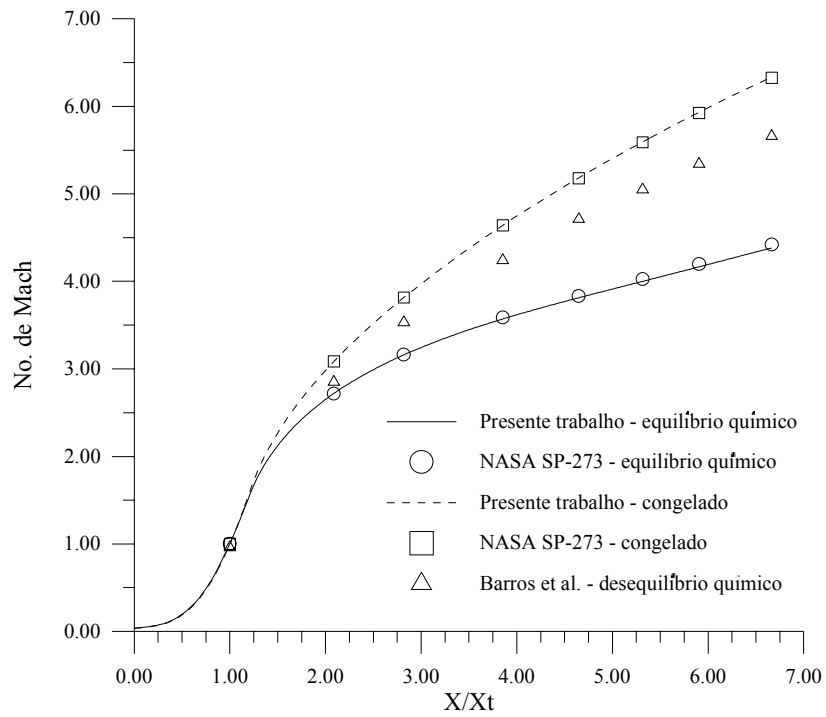


Figura 6 – Número de Mach.

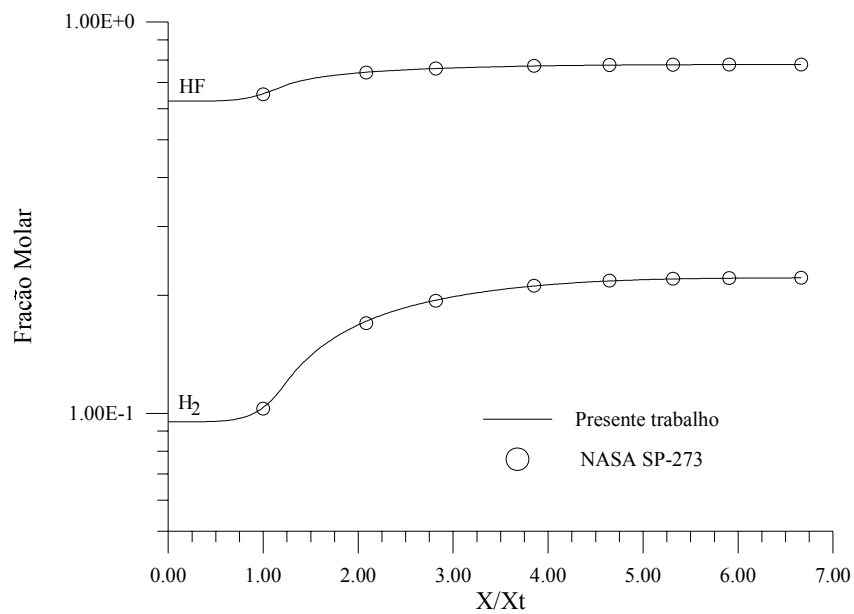


Figura 7 – Frações molares das espécies HF e H<sub>2</sub>.

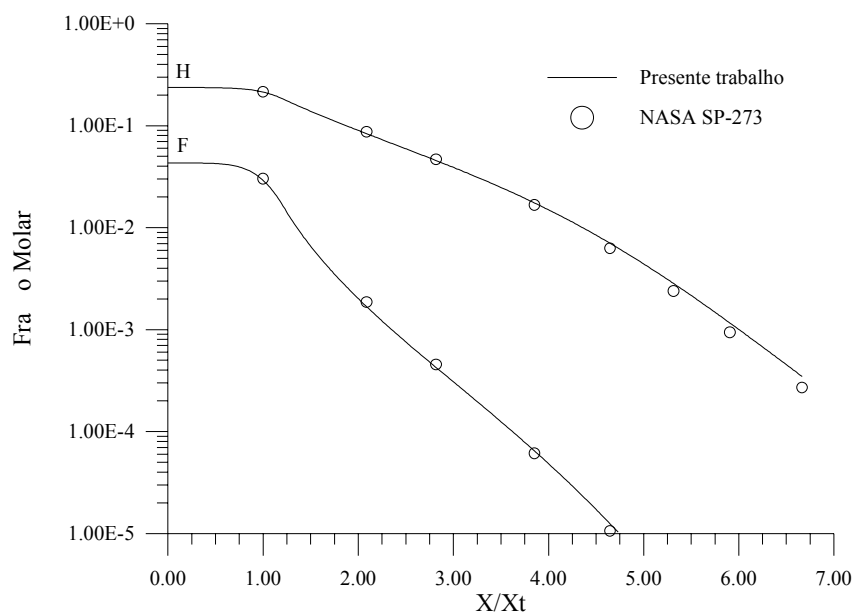


Figura 8 –Frações molares das espécies H e F.

Por último, na tabela 2 são apresentados alguns parâmetros 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,  $I_{s_{vac}}$  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 em Huzel et al<sup>2</sup>.

Tabela 2. Parâmetros globais do motor-foguete.

	$\dot{m}$ (kg/s)	$F_{vac}$ (N)	$I_{s_{vac}}$ (s)	$c^*$ (m/s)	$C_f$
Presente trabalho (congelado)	0,14923	611,03	417,4	2341,1	1,7489
NASA SP-273 <sup>21</sup> (congelado)	0,14924	611,03	417,4	2341,3	1,7487
Presente trabalho (equilíbrio)	0,14235	685,10	490,7	2455,0	1,9610
NASA SP-273 <sup>21</sup> (equilíbrio)	0,14187	684,22	492,1	2462,5	1,9584

Novamente, fazendo as comparações com os parâmetros obtidos através do NASA SP-273<sup>21</sup>, observa-se que para o escoamento congelado as diferenças são bem menores que as observadas para o escoamento em equilíbrio químico local.

O fluxo de massa dos propelentes é um pouco maior no caso do escoamento congelado. Isso se deve à temperatura mais alta dos gases no escoamento em equilíbrio químico, o que diminui sua massa específica. Por outro lado, como a velocidade na saída do bocal é significativamente maior no escoamento em equilíbrio químico, o empuxo desenvolvido pelo motor e, conseqüentemente, os demais parâmetros, são mais elevados nesse caso.

## 5 CONCLUSÃO

Neste trabalho 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 é constituído por equações de conservação e constitutivas, além do método das constantes de equilíbrio para determinar a composição química. O modelo numérico é baseado no método dos volumes finitos, utiliza uma formulação adequada a qualquer regime de velocidade e funções de interpolação de segunda ordem.

O objetivo do trabalho, utilizar o método dos volumes finitos<sup>7, 14</sup> para simular escoamentos em equilíbrio químico local, foi alcançado com êxito. Os resultados aqui obtidos compararam muito bem com os do programa NASA SP-273, que foi utilizado como referência.

Apesar deste trabalho apresentar apenas resultados para escoamentos unidimensionais, pode-se estender a metodologia empregada para os casos bi ou tridimensional e, ainda, incluir efeitos viscosos, transferência de calor na parede do bocal e, também, simular escoamentos em desequilíbrio químico.

## AGRADECIMENTOS

Os dois primeiros autores agradecem a UFPR, CAPES e CNPq pelo financiamento deste trabalho.

## REFERÊNCIAS

- [1] G. P. Sutton, *Rocket Propulsion Elements*, 6<sup>th</sup> ed., Wiley, (1992).
- [2] D. K. Huzel & D. H. Huang, *Modern Engineering for Design of Liquid-Propellant Rocket Engines*, AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 147, (1992).
- [3] J. D. Anderson Jr., *Modern Compressible Flow*, 2<sup>nd</sup> ed., McGraw-Hill, (1990)
- [4] R. L. Rubin & J. N. Hinckel, "Regenerative Cooling for Liquid Propellant Rocket Thrust Chambers", *Proceedings of 12<sup>th</sup> Brazilian Congress of Mechanical Engineering*, Brasília, DF, Brazil, (1993).
- [5] P. Paglione e R. M. Girardi, "Análise Teórica e Experimental para Bocais de Tração Máxima", *Anais do VII Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas*, Águas de Lindóia, pp. 45-48, (1988)
- [6] M. Habiballah, L. Vingert, V. Duthoit, P. Vuillermoz, "Research as a Key in the Design Methodology of Liquid-Propellant Combustion Devices", *Journal of Propulsion and Power*, **14**(5):782-788, (1998).
- [7] C. R. Maliska, *Transferência de Calor e Mecânica do Fluidos Computacional*, LTC Editora SA, (1995).
- [8] J. D. Anderson Jr., *Computacional Fluid Dynamics - The Basics With Applications*, McGraw-Hill, (1995).
- [9] M. W. Chase Jr., "JANAF Thermochemical Tables", 3<sup>rd</sup> ed., Pts. 1 & 2, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, **14**(1), (1985).

- [10] B. J. McBride, S. Gordon, M. A. Reno, *Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species*, NASA Technical Memorandum 4513, Cleveland, Ohio, USA, (1993).
- [11] J. D. Anderson Jr., *Aerodynamics and High Temperature Gas Dynamics*, McGraw-Hill, (1989).
- [12] K. K. Kuo, *Principles of Combustion*, 2<sup>nd</sup> ed., John Wiley, (1986).
- [13] M. J. Zucrow & J. D. Hoffman, *Gas Dynamics- Multidimensional Flow*, Vol II, John Wiley and Sons, (1977).
- [14] S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corporation, (1980).
- [15] A. F. C. Silva e C. R. Maliska, “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, pp. 11-14 (1988).
- [16] J. P. Van Doornaal & G. D. Raithby, “Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Flow”, *Numerical Heat Transfer*, 7, pp. 146-163, (1984).
- [17] Z. Lilek, S. Muzaferija, and M. Peric, “Efficiency and Accuracy Aspects of a Full-Multigrid Simple Algorithm for Three-Dimensional Flows”, *Numerical Heat Transfer, Part B*, **31**, pp. 23-42, (1997).
- [18] L. H. Thomas, *Elliptic Problems in Linear Difference Equations Over a Network*, Watson Sci. Comput. Lab. Report, Columbia University, New York (1949).
- [19] J. L. F. Azevedo, “Euler Solutions of Transonic Nozzle Flows”, *Anais do III Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas*, Itapema, pp. 243-248 (1990).
- [20] F. Laroca, C. H. Marchi, A. F. Carvalho da Silva, “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, pp. 1031-1036 (1998).
- [21] S. Gordon & B. J. McBride, “Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks, and Chapman-Jouguet Detonations”, NASA SP-273, (1971).
- [22] J. E. M. Barros, G. F. Alvim Filho e P. Paglione, “Estudo de Escoamento Reativo em Desequilíbrio Químico Através de Bocais Convergente-Divergente”, *Anais do III Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas*, Itapema, pp. 771-776 (1990).
- [23] J. E. A. John, *Gas Dynamics*, 2<sup>nd</sup> ed., Allyn & Bacon, (1984).
- [24] J. H. Ferziger and M. Peric, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, 2<sup>nd</sup> ed., Springer, (1999).