

RELATÓRIO - MODIFICAÇÃO DA CONDIÇÃO DE CONTORNO DE ENTRADA: MODELOS PARCIALMENTE CATALÍTICO E NÃO CATALÍTICO PARA ESCOAMENTOS COM TAXA FINITA DE REAÇÃO

1. Condições de contorno

Em escoamentos reativos, a fração mássica das espécies envolvidas é uma das variáveis dependentes. Desta forma, necessitam-se condições de contorno para tal propriedade, tal como para as componentes da velocidade e a temperatura. No caso de uma parede, as condições de contorno para as frações mássicas merecem alguma discussão, pois elas envolvem, em geral, a interação entre os gases e a parede, sendo que esta pode ser constituída por um material que tende a catalisar as reações químicas em sua superfície. Deste modo, as paredes podem ser classificadas em três grandes grupos (ANDERSON Jr, 2006):

1. Parede com equilíbrio catalítico: é uma parede na qual as reações químicas são catalisadas a uma taxa infinita, ou seja, as frações mássicas na parede apresentam os valores correspondentes aos valores do equilíbrio químico local, dados à pressão e à temperatura na qual se encontram os gases junto à parede.
2. Parede parcialmente catalítica: é uma parede na qual as reações químicas são catalisadas a uma taxa finita.
3. Parede totalmente catalítica: é uma parede na qual todos os átomos (espécies monoatômicas) são recombinados, independentemente das frações mássicas de espécies monoatômicas que poderiam existir para as condições locais de equilíbrio químico.

No caso de uma parede totalmente catalítica, a condição de contorno é simplesmente:

$$c_A = 0 \quad (1)$$

sendo c_A as frações mássicas das espécies monoatômicas. Deve-se notar que em muitas aplicações, a temperatura da parede é suficientemente baixa para que as condições de equilíbrio químico junto à parede sejam tais que $c_A = 0$. Nesse caso, tem-se $c_A = 0$ tanto para uma parede totalmente catalítica quanto para uma parede com equilíbrio catalítico.

No caso de uma parede com equilíbrio catalítico, tem-se:

$$c_A = (c_A)_{equil} \quad (2)$$

E no caso de uma parede parcialmente catalítica, tem-se:

$$(\dot{w}_C)_i dS = -(\rho_i U_i)_{wall} dS \quad (3)$$

sendo $(\dot{w}_C)_i$ a taxa de geração da espécie i junto à parede.

Um caso limite de parede parcialmente catalítica ocorre quando não há nenhuma taxa de recombinação na parede, ou seja, $(\dot{w}_C)_i = 0$. Desse modo, tem-se

$$\left(\frac{\partial c_i}{\partial x} \right)_{wall} = 0 \quad (4)$$

que se constitui no caso da parede não catalítica.

No Relatório Técnico 3 do projeto CFD-5/UFPR, estudaram-se soluções numéricas de escoamentos unidimensionais com taxa finita de reação. Em tal relatório, contudo, foram realizadas simulações envolvendo apenas o caso de equilíbrio catalítico na entrada da tubeira. Neste relatório, duas outras condições de contorno são abordadas para a entrada da tubeira, de forma a completar o estudo anteriormente realizado: entrada parcialmente catalítica e entrada não catalítica. Para ambos os casos as simulações foram realizadas no computador CFD-11 (2 processadores Intel Xeon QC, 2,66 GHz, 16 GB RAM) do Laboratório de Experimentação Numérica 2 (LENA-2) do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Paraná.

2. Resultados obtidos

São apresentados, nas Tabelas 1 a 5, resultados para diversas propriedades do escoamento reativo com taxa finita de reação, empregando-se as três condições de contorno previamente citadas. Para todos os casos, os resultados referem-se a uma malha de 80 volumes de controle com as respectivas estimativas de erro numérico, obtidas através do estimador GCI (ROACHE, 1994). As condições de entrada na tubeira são os mesmos apresentados no Cap. 7 do Relatório Técnico 3, ou seja, temperatura de estagnação de 3420,33 K e pressão de estagnação de 2,0 MPa; o par propelente LH₂/LO₂ é injetado à razão mássica (OF) estequiométrica, ou seja, aproximadamente igual a 7,9367.

Tabela 1: Coeficiente de descarga. Malha de 80 volumes de controle.

Modelo químico	Equilíbrio Catalítico	Parcialmente Catalítica	Não Catalítica
Modelo 31	$1,008 \pm 3 \times 10^{-3}$	$0,891 \pm 5 \times 10^{-3}$	$0,891 \pm 4 \times 10^{-3}$
Modelo 32	$1,007 \pm 3 \times 10^{-3}$	$0,891 \pm 5 \times 10^{-3}$	$0,890 \pm 3 \times 10^{-3}$
Modelo 5	$1,007 \pm 3 \times 10^{-3}$	$0,890 \pm 5 \times 10^{-3}$	$0,890 \pm 3 \times 10^{-3}$
Modelo 10	$1,008 \pm 3 \times 10^{-3}$	$0,891 \pm 5 \times 10^{-3}$	$0,891 \pm 4 \times 10^{-3}$

Tabela 2: Empuxo adimensional. Malha de 80 volumes de controle.

Modelo químico	Equilíbrio Catalítico	Parcialmente Catalítica	Não Catalítica
Modelo 31	$1,012 \pm 5 \times 10^{-3}$	$1,013 \pm 5 \times 10^{-3}$	$1,013 \pm 5 \times 10^{-3}$
Modelo 32	$1,014 \pm 5 \times 10^{-3}$	$1,013 \pm 5 \times 10^{-3}$	$1,013 \pm 5 \times 10^{-3}$
Modelo 5	$1,015 \pm 5 \times 10^{-3}$	$1,013 \pm 5 \times 10^{-3}$	$1,014 \pm 5 \times 10^{-3}$
Modelo 10	$1,013 \pm 5 \times 10^{-3}$	$1,013 \pm 5 \times 10^{-3}$	$1,013 \pm 5 \times 10^{-3}$

Tabela 3: Temperatura na saída da tubeira. Malha de 80 volumes de controle.

Modelo químico	Equilíbrio Catalítico	Parcialmente Catalítica	Não Catalítica
Modelo 31	$1910 \pm 1 \times 10^1$	$2350 \pm 2 \times 10^1$	$2350 \pm 1 \times 10^1$
Modelo 32	$1980 \pm 1 \times 10^1$	$2440 \pm 1 \times 10^1$	2439 ± 8
Modelo 5	2059 ± 9	$2440 \pm 1 \times 10^1$	2438 ± 8
Modelo 10	$1910 \pm 1 \times 10^1$	$2350 \pm 2 \times 10^1$	$2350 \pm 1 \times 10^1$

Tabela 4: Velocidade axial na saída da tubeira. Malha de 80 volumes de controle.

Modelo químico	Equilíbrio Catalítico	Parcialmente Catalítica	Não Catalítica
Modelo 31	3332 ± 6	3772 ± 6	$3770 \pm 1 \times 10^1$
Modelo 32	3338 ± 6	3772 ± 5	3772 ± 2
Modelo 5	3344 ± 6	3775 ± 5	3775 ± 2
Modelo 10	3332 ± 6	3772 ± 6	3773 ± 2

Tabela 5: Fração mássica (H_2O) na saída da tubeira. Malha de 80 volumes de controle.

Modelo químico	Equilíbrio Catalítico	Parcialmente Catalítica	Não Catalítica
Modelo 31	$0,812 \pm 1 \times 10^{-3}$	$0,668 \pm 3 \times 10^{-3}$	$0,6679 \pm 5 \times 10^{-4}$
Modelo 32	$0,824 \pm 2 \times 10^{-3}$	$0,675 \pm 3 \times 10^{-3}$	$0,6747 \pm 3 \times 10^{-4}$
Modelo 5	$0,862 \pm 1 \times 10^{-3}$	$0,708 \pm 4 \times 10^{-3}$	$0,7075 \pm 8 \times 10^{-4}$
Modelo 10	$0,812 \pm 1 \times 10^{-3}$	$0,668 \pm 3 \times 10^{-3}$	$0,6679 \pm 5 \times 10^{-4}$

Observando-se as Tabelas 1 a 5, verifica-se que a condição de entrada apresenta influência sobre os resultados das variáveis de interesse estudadas, em especial ao se comparar as condições de equilíbrio catalítico e de parede parcialmente catalítica. Exceto para o empuxo adimensional, nota-se que a variação dos resultados numéricos é superior ao erro numérico estimado, de modo que se pode atribuir as diferenças entre tais resultados à condição de contorno empregada. Nota-se, contudo, que os resultados numéricos obtidos para as condições de parede parcialmente catalítica e de parede não catalítica são essencialmente os mesmos, uma vez que, tomando-se em consideração os erros numéricos estimados, não há diferença significativa entre os resultados. Outros resultados referentes às diferentes modalidades de condições de contorno são mostradas nas Figuras 1 e 2.

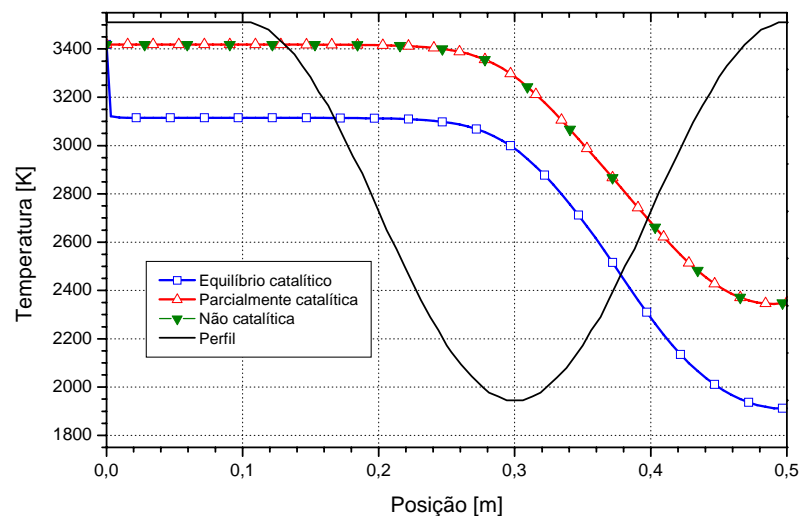


Figura 1: Perfil de temperaturas ao longo da tubeira. Malha de 80 volumes. Modelo químico 31.

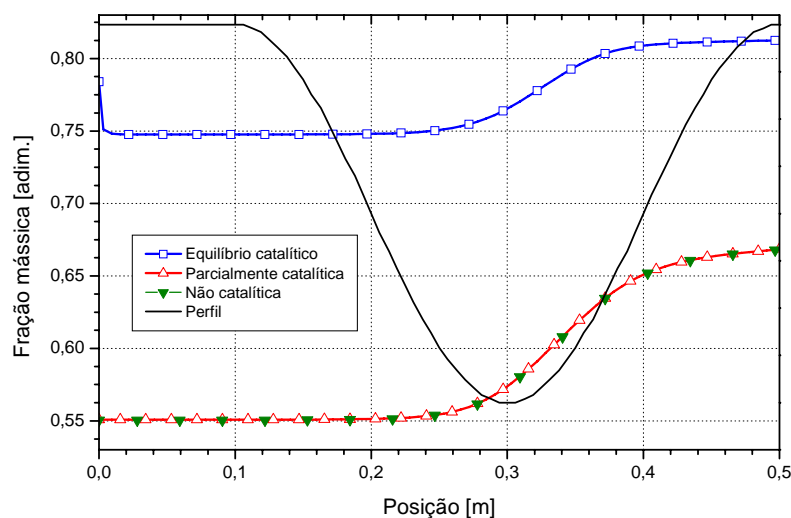


Figura 2: Fração mássica de H₂O ao longo da tubeira. Malha de 80 volumes. Modelo químico 31.

As Figuras 1 e 2 apresentam os perfis de temperatura e de fração mássica de H₂O ao longo da tubeira para as três condições de contorno empregadas. Conforme já observado nas Tabelas 1 a 5, os resultados para as condições de parede parcialmente catalítica e não catalítica são praticamente os mesmos. Com relação à condição de parede com equilíbrio catalítico, os resultados dos modelos anteriores diferem consideravelmente: observa-se que não ocorrem as discontinuidades de propriedades na região de entrada da tubeira. Tais discontinuidades se devem ao fato de que, na condição de parede com equilíbrio catalítico, na região de entrada é considerada a composição de equilíbrio químico local; na região vizinha, entretanto, ocorrem as reações de dissociação, que resultam em taxas de geração de espécies bastante negativas para o H₂O, através de reações endotérmicas. Desta forma, há uma diminuição considerável tanto em relação à temperatura quanto em relação à fração mássica de H₂O, conforme observado nas Figuras 1 e 2. Com relação aos outros dois modelos, nota-se, no entanto, que a variação de propriedades se faz de modo mais suave, uma vez que não é mantida a condição de equilíbrio químico local para a entrada da tubeira.

Apesar de os resultados numéricos serem praticamente os mesmos para as condições de parede parcialmente catalítica e parede não catalítica, nem todos os parâmetros empregados nas simulações são os mesmos, conforme pode ser visto na Tabela 6. O maior diferencial entre os modelos está no número de iterações necessárias, em especial para os modelos químicos 31 e 32. Como a condição de parede não catalítica necessitou um total de iterações muito superior ao da parede parcialmente catalítica, o tempo de CPU demandado foi bastante afetado, conforme pode ser observado na Tabela 7. Tomando-se, como exemplo, o modelo 31, nota-se que o passo de tempo empregado em ambos os casos é o mesmo (1×10^{-8}); o número de iterações, contudo, é muito maior no caso da parede não catalítica que no caso da parede parcialmente catalítica (1×10^8 no primeiro caso contra 2×10^7 no segundo), resultando em um tempo de CPU bastante diferente (4,376 horas contra 52,92 minutos). Nos casos em que foram empregados a mesma quantidade de iterações, entretanto, os tempos de CPU foram bastante semelhantes, como ocorrido para os modelos químicos 5 e 10. Comparando-se, ainda, os modelos com parede com equilíbrio catalítico e com parede parcialmente catalítica, nota-se que no primeiro caso conseguiu-se empregar passos de tempo de maior magnitude, o que representa um menor número de iterações necessárias e, possivelmente, um menor tempo de CPU.

Tabela 6: Comparação entre as diversas condições de contorno - passo de tempo e número de iterações empregadas. Malha de 80 volumes de controle.

Modelo químico	Equilíbrio catalítico		Parcialmente catalítica		Não catalítica	
	Passo de tempo	Iterações	Passo de tempo	Iterações	Passo de tempo	Iterações
Modelo 31	4×10^{-8}	$5,00 \times 10^6$	1×10^{-8}	$2,00 \times 10^7$	1×10^{-8}	$1,00 \times 10^8$
Modelo 32	3×10^{-8}	$8,00 \times 10^6$	1×10^{-8}	$3,00 \times 10^7$	1×10^{-8}	$5,00 \times 10^8$
Modelo 5	9×10^{-10}	$2,00 \times 10^8$	3×10^{-10}	$7,50 \times 10^8$	3×10^{-10}	$7,50 \times 10^8$
Modelo 10	2×10^{-10}	$1,20 \times 10^9$	1×10^{-10}	$1,50 \times 10^9$	1×10^{-10}	$1,50 \times 10^9$

Tabela 7: Tempo de CPU demandado para simulações com condições de entrada de parede parcialmente catalítica e parede não catalítica. Malha de 80 volumes de controle.

Modelo químico	Parcialmente catalítica	Não catalítica
Modelo 31	52,92 min	4,376 h
Modelo 32	1,338 h	22,05 h
Modelo 5	1,628 dia	1,627 dia
Modelo 10	3,462 dias	3,440 dias

Com o intuito de melhorar a convergência dos modelos químicos para as novas condições de contorno estudadas, foi modificada a estimativa inicial para o campo de temperaturas ao longo do escoamento. Para tanto, ao invés de estabelecê-lo como sendo igual à distribuição obtida com a solução do escoamento monoespécie isentrópico (solução analítica), empregou-se uma distribuição de temperaturas alternativa, na qual a temperatura inicial da região à montante da garganta da tubeira foi igualada à temperatura da garganta (sendo esta calculada para o caso de escoamento isentrópico). Alguns resultados obtidos são apresentados na Tabela 8.

Tabela 8: Comparação entre estimativas iniciais para o perfil de temperaturas, executando-se o mesmo número de iterações da Tabela 6. Malha de 80 volumes de controle. Parede parcialmente catalítica.

Modelo químico	Estimativa inicial para o campo de temperaturas			
	Escoamento Isentrópico		Estimativa inicial modificada	
	Iterações necessárias à convergência	Algarismos significativos	Iterações necessárias à convergência	Algarismos significativos
Modelo 31	$1,92 \times 10^7$	9	$1,42 \times 10^7$	7
Modelo 32	$2,42 \times 10^7$	10	$1,74 \times 10^7$	8
Modelo 5	$6,60 \times 10^8$	10	$6,94 \times 10^8$	9
Modelo 10	$1,32 \times 10^9$	8	$1,43 \times 10^9$	7

Pode-se notar, a partir dos dados mostrados na Tabela 8 que a modificação proposta não apresentou bons resultados: houve uma redução do número de algarismos significativos, sem uma tendência clara à diminuição do número de iterações necessárias à convergência dos modelos. Com relação aos resultados numéricos para as variáveis de interesse, apesar de não

ter sido feita uma análise completa envolvendo as estimativas de erro, observou-se que os resultados são idênticos àqueles obtidos quando a solução isentrópica era empregada como solução inicial para o campo de temperaturas. Como o número máximo de iterações empregado foi o mesmo nas situações de estimativa inicial isentrópica e modificada, é possível comparar os tempos de CPU. Nota-se, contudo, que à exceção do modelo 32 tais tempos são similares, conforme pode ser notado na Tabela 9. Deste modo, não se mostra muito atraente modificar a estimativa inicial para o campo de temperaturas.

Tabela 9: Tempo de CPU demandado para simulações com estimativas iniciais diferentes. Malha de 80 volumes de controle. Parede parcialmente catalítica.

Modelo químico	Estimativa inicial para o campo de temperaturas	
	Escoamento isentrópico	Estimativa inicial modificada
Modelo 31	52,92 min	52,72 min
Modelo 32	1,338 h	53,25 min
Modelo 5	1,628 dia	1,625 dia
Modelo 10	3,462 dias	3,463 dias

3. Conclusões

- Foram apresentadas soluções numéricas para duas novas condições de contorno de entrada na tubeira: parede parcialmente catalítica e parede não catalítica. Para todos os resultados, foram feitas estimativas de erro baseadas no estimador GCI. Verificou-se que as diferenças entre os resultados numéricos da condição de contorno original (parede com equilíbrio catalítico) em relação às novas condições de contorno são significativas. Entre as novas condições de contorno, no entanto, as soluções numéricas obtidas, com suas respectivas faixas de erro numérico estimadas, mostram-se sobrepostas, de modo que não se pode afirmar que os resultados sejam diferentes.
- Para as novas condições de contorno empregadas, não foi verificado a descontinuidade no perfil de propriedades como a temperatura ou frações mássicas, como era observado no caso da condição de parede com equilíbrio catalítico. Isto se deve ao fato de que para as novas condições empregadas, não é necessário que se tenha equilíbrio químico local junto à parede, sem qualquer reação de dissociação.
- Mesmo que os resultados numéricos das condições de parede parcialmente catalítica e parede não catalítica sejam os mesmos, nota-se que a primeira necessita, em geral, de um menor número de iterações para se obter a convergência. Mesmo quando o número de iterações realizado é o mesmo, a parede parcialmente catalítica ainda apresenta como vantagem o fato de a solução numérica possuir um maior número de algarismos significativos em relação à parede não catalítica.
- Embora o número de iterações seja menor no caso da condição de parede parcialmente catalítica em relação à parede não catalítica, para ambas as condições de contorno o número de iterações necessário para a convergência é superior ao da parede com equilíbrio catalítico. Modificar a estimativa inicial para a distribuição de temperaturas ao longo da tubeira, contudo, não apresentou bons resultados em relação à estimativa inicial anterior, baseada na solução analítica do escoamento unidimensional monoespécie isentrópico.

4. Referências Bibliográficas

ANDERSON Jr., J. D. **Hypersonic and High-Temperature Gas Dynamics**, 2ed., Reston (Virginia): AIAA Education Series, 2006.

ROACHE, P. J. Perspective: A method for uniform reporting of grid refinement studies. **Journal of Fluids Engineering**, v. 116, pp. 405 - 413, 1994.