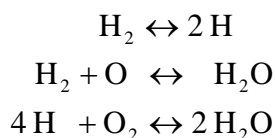


RELATÓRIO - TESTES PRELIMINARES DO MODELO REDUZIDO (modelo 13)

1. Dados gerais

Modelo 13:

- 5 espécies: H₂O, O₂, H₂, O, H.
- 3 reações químicas:



Testes efetuados no microcomputador CFD-4 (Pentium IV, 4 GB RAM, 3.400 MHz).

2. Propriedades de equilíbrio químico

Os problemas abordados para a condição de equilíbrio químico são apresentados na Tabela 1, a seguir. Nos testes, é utilizada a razão mássica estequiométrica de oxidante/combustível (OF), isto é, $OF = 7.936682739$.

Tabela 1: Condições termodinâmicas para o equilíbrio químico.

Problema	Temperatura (K)	Pressão total (bar)
E1	4000	200
E2	3000	20
E3	2000	2
E4	1500	0.2
E5	600	0.02

As Tabelas 2 a 11 apresentam os resultados para os problemas E1 a E5.

Tabela 2: Resultados globais para o problema E1.

Modelo	M (kg/kmol)	ρ (kg/m ³)	c congelado (J/kg.K)	γ congelado (adim.)	R (J/kg.K)	C (mol/cm ³)
0	18.015	10.8336	3295.5	1.1629	461.53	6.0136e-4
1	16.865	10.1421	3300.0	1.1756	493.00	6.0136e-4
2	16.196	9.7395	3288.8	1.1850	513.37	6.0136e-4
3	15.536	9.3425	3293.5	1.1940	535.19	6.0136e-4
4	15.536	9.3425	3293.5	1.1940	535.19	6.0136e-4
5	15.536	9.3425	3293.5	1.1940	535.19	6.0136e-4
7	15.536	9.3425	3293.5	1.1940	535.19	6.0136e-4
10	15.537	9.3433	3293.6	1.1940	535.14	6.0136e-4
CEA	15.516	9.3309	3290.8	---	---	---
9	15.537	9.3433	3293.6	1.1940	535.14	6.0136e-4
Teqworks	15.503	9.3230	---	---	---	---
13	16.131	9.7008	3304.6	1.1848	515.42	6.0136e-4

Tabela 3: Frações mássicas obtidas para o problema E1.

Modelo	H ₂ O	O ₂	H ₂	OH	O	H	HO ₂	H ₂ O ₂	O ₃
0	1.0000e-0	0	0	---	---	---	---	---	---
1	8.6362e-1	1.2112e-1	1.5260e-2	---	---	---	---	---	---
2	7.7532e-1	7.7639e-2	1.7462e-2	1.2958e-1	---	---	---	---	---
3	7.5268e-1	7.7291e-2	1.7347e-2	1.2886e-1	2.1134e-2	2.6914e-3	---	---	---
4	7.5268e-1	7.7291e-2	1.7347e-2	1.2886e-1	2.1134e-2	2.6914e-3	---	---	---
5	7.5268e-1	7.7291e-2	1.7347e-2	1.2886e-1	2.1134e-2	2.6914e-3	---	---	---
7	7.5268e-1	7.7291e-2	1.7347e-2	1.2886e-1	2.1134e-2	2.6914e-3	---	---	---
10	7.5214e-1	7.6915e-2	1.7376e-2	1.2865e-1	2.1082e-2	2.6935e-3	9.2804e-4	2.1200e-4	---
CEA	7.4839e-1	7.4654e-2	1.7424e-2	1.3508e-1	2.0636e-2	2.6850e-3	9.2359e-4	2.0703e-4	2.6050e-6
9	7.5214e-1	7.6915e-2	1.7376e-2	1.2865e-1	2.1082e-2	2.6935e-3	9.2804e-4	2.1200e-4	---
Tegworks	7.478e-1	7.8259e-2	1.7690e-2	1.318e-1	2.1167e-2	2.7045e-3	5.6768e-4	5.534e-13	1.3402e-6
13	8.3970e-1	1.1686e-1	1.5445e-2	---	2.5502e-2	2.4922e-3	---	---	---

Tabela 4: Resultados gerais para o problema E2.

Modelo	<i>M</i> (kg/kmol)	ρ (kg/m ³)	<i>c</i> congelado (J/kg.K)	γ congelado (adim.)	<i>R</i> (J/kg.K)	<i>C</i> (mol/cm ³)
0	18.015	1.4445	3155.3	1.1713	461.53	8.0181e-5
1	17.515	1.4044	3155.9	1.1770	474.70	8.0181e-5
2	17.272	1.3849	3152.6	1.1802	481.40	8.0181e-5
3	17.129	1.3734	3154.0	1.1819	485.41	8.0181e-5
4	17.129	1.3734	3154.0	1.1819	485.41	8.0181e-5
5	17.129	1.3734	3154.0	1.1819	485.41	8.0181e-5
7	17.129	1.3734	3154.0	1.1819	485.41	8.0181e-5
10	17.129	1.3734	3154.0	1.1819	485.41	8.0181e-5
CEA	17.114	1.3722	3152.9	---	---	---
9	17.129	1.3734	3154.0	1.1819	485.41	8.0181e-5
Tegworks	17.120	1.3727	---	---	---	---
13	17.369	1.3926	3157.2	1.1778	478.71	8.0181e-5

Tabela 5: Frações mássicas obtidas para problema E2.

Modelo	H ₂ O	O ₂	H ₂	OH	O	H	HO ₂	H ₂ O ₂	O ₃
0	1.0000	0	7.321e-13	---	---	---	---	---	---
1	9.4291e-1	5.0703e-2	6.3884e-3	---	---	---	---	---	---
2	9.1388e-1	3.7937e-2	7.2085e-3	4.0978e-2	---	---	---	---	---
3	9.0955e-1	3.8289e-2	7.1710e-3	4.1061e-2	3.4079e-3	5.1624e-4	---	---	---
4	9.0955e-1	3.8289e-2	7.1710e-3	4.1061e-2	3.4079e-3	5.1624e-4	---	---	---
5	9.0955e-1	3.8289e-2	7.1710e-3	4.1061e-2	3.4079e-3	5.1624e-4	---	---	---
7	9.0955e-1	3.8289e-2	7.1710e-3	4.1061e-2	3.4079e-3	5.1624e-4	---	---	---
10	9.0950e-1	3.8250e-2	7.1742e-3	4.1049e-2	3.4061e-3	5.1636e-4	8.8547e-5	1.9324e-5	---
CEA	9.0761e-1	3.7161e-2	7.2080e-3	4.4067e-2	3.3347e-3	5.1522e-4	8.8797e-5	1.8870e-5	4.7269e-8
9	9.0950e-1	3.8250e-2	7.1742e-3	4.1049e-2	3.4061e-3	5.1636e-4	8.8547e-5	1.9324e-5	---
Tegworks	9.0850e-1	3.8427e-2	7.2460e-3	4.1891e-2	3.3923e-3	5.1613e-4	5.1871e-5	3.457e-11	3.5514e-8
13	9.3858e-1	2.8519e-2	5.7096e-3	---	4.3830e-3	8.6490e-3	---	---	---

Tabela 6: Resultados gerais para o problema E3.

Modelo	M (kg/kmol)	ρ (kg/m ³)	c congelado (J/kg.K)	γ congelado (adim.)	R (J/kg.K)	C (mol/cm ³)
0	18.015	2.1667e-1	2868.6	1.1917	461.53	1.2027e-5
1	17.976	2.1620e-1	2869.0	1.1922	462.54	1.2027e-5
2	17.966	2.1608e-1	2868.9	1.1923	462.80	1.2027e-5
3	17.965	2.1606e-1	2868.9	1.1924	462.83	1.2027e-5
4	17.965	2.1606e-1	2868.9	1.1924	462.83	1.2027e-5
5	17.965	2.1606e-1	2868.9	1.1924	462.83	1.2027e-5
7	17.965	2.1606e-1	2868.9	1.1924	462.83	1.2027e-5
10	17.965	2.1606e-1	2868.9	1.1924	462.83	1.2027e-5
CEA	17.963	2.1605e-1	2873.2	---	---	---
9	17.965	2.1605e-1	2868.9	1.1924	462.83	1.2027e-5
Teqworks	17.964	2.161e-1	---	---	---	---
13	17.975	2.1619e-1	2869.0	1.1922	462.57	1.2027e-5

Tabela 7: Frações mássicas obtidas para o problema E3.

Modelo	H ₂ O	O ₂	H ₂	OH	O	H	HO ₂	H ₂ O ₂	O ₃
0	1.0000	0	7.321e-13	---	---	---	---	---	---
1	9.9562e-1	3.8862e-3	4.8965e-4	---	---	---	---	---	---
2	9.9449e-1	3.4021e-3	5.2287e-4	1.5898e-3	---	---	---	---	---
3	9.9445e-1	3.4121e-3	5.2211e-4	1.5910e-3	1.8564e-5	4.4299e-6	---	---	---
4	9.9445e-1	3.4121e-3	5.2211e-4	1.5910e-3	1.8564e-5	4.4299e-6	---	---	---
5	9.9445e-1	3.4121e-3	5.2211e-4	1.5910e-3	1.8564e-5	4.4299e-6	---	---	---
7	9.9445e-1	3.4121e-3	5.2211e-4	1.5910e-3	1.8564e-5	4.4299e-6	---	---	---
10	9.9445e-1	3.4118e-3	5.2213e-4	1.5909e-3	1.8563e-5	4.4300e-6	5.7565e-7	2.2098e-7	---
CEA	9.9433e-1	3.3349e-3	5.2391e-4	1.7847e-3	1.8223e-5	4.4157e-6	5.8719e-7	2.1512e-7	1.811e-11
9	9.9445e-1	3.4118e-3	5.2213e-4	1.5909e-3	1.8563e-5	4.4300e-6	5.7565e-7	2.2098e-7	---
Teqworks	9.945e-1	3.3728e-3	5.2451e-4	1.6205e-3	1.8329e-5	4.4152e-6	2.8999e-7	8.8278e-8	1.597e-11
13	9.9559e-1	3.8956e-3	4.8905e-4	---	1.9830e-5	4.2862e-6	---	---	---

Tabela 8: Resultados gerais para o problema E4.

Modelo	M (kg/kmol)	ρ (kg/m ³)	c congelado (J/kg.K)	γ congelado (adim.)	R (J/kg.K)	C (mol/cm ³)
0	18.015	2.8890e-2	2627.4	1.2131	461.53	1.6036e-6
1	18.012	2.8885e-2	2627.5	1.2131	461.60	1.6036e-6
2	18.012	2.8884e-2	2627.5	1.2131	461.61	1.6036e-6
3	18.012	2.8884e-2	2627.5	1.2131	461.61	1.6036e-6
4	18.012	2.8884e-2	2627.5	1.2131	461.61	1.6036e-6
5	18.012	2.8884e-2	2627.5	1.2131	461.61	1.6036e-6
7	18.012	2.8884e-2	2627.5	1.2131	461.61	1.6036e-6
10*	13.578	2.1774e-2	2746.4	1.2869	612.36	1.6036e-6
CEA	18.012	2.8884e-2	2626.6	---	---	---
9	18.012	2.8884e-2	2627.5	1.2131	461.61	1.6036e-6
Teqworks	18.0114	2.8884e-2	---	---	---	---
13	18.012	2.8885e-2	2627.5	1.2131	461.60	1.6036e-6

*Resultados obtidos após 50000 iterações.

Tabela 9: Frações mássicas obtidas para o problema E4.

Modelo	H ₂ O	O ₂	H ₂	OH	O	H	HO ₂	H ₂ O ₂	O ₃
0	1.0000	0	6.543e-12	---	---	---	---	---	---
1	9.9967e-1	2.9390e-4	3.7031e-5	---	---	---	---	---	---
2	9.9963e-1	2.7606e-4	3.8207e-5	5.7785e-5	---	---	---	---	---
3	9.9963e-1	2.7620e-4	3.8197e-5	5.7793e-5	1.0109e-7	4.0960e-8	---	---	---
4	9.9963e-1	2.7620e-4	3.8197e-5	5.7791e-5	1.0108e-7	4.0960e-8	---	---	---
5	9.9963e-1	2.7620e-4	3.8197e-5	5.7793e-5	1.0109e-7	4.0960e-8	---	---	---
7	9.9963e-1	2.7620e-4	3.8197e-5	5.7793e-5	1.0108e-7	4.0960e-8	---	---	---
10*	3.4626e-1	5.8037e-1	7.3144e-2	6.4542e-6	3.561e-10	1.7283e-6	2.2551e-4	2.127e-11	---
CEA	9.9962e-1	2.7164e-4	3.8212e-5	6.7722e-5	9.9587e-8	4.0746e-8	3.4962e-9	2.1875e-9	7.135e-15
9	9.9963e-1	2.7620e-4	3.8198e-5	5.7793e-5	1.0109e-7	4.0961e-8	3.3742e-9	2.2622e-9	---
Teqworks	9.994e-1	1.3920e-4	3.5863e-4	6.1144e-5	1.0695e-7	7.4591e-7	7.311e-10	1.0710e-9	2.049e-15
13	9.9967e-1	2.9368e-4	3.6976e-5	---	1.0443e-7	4.0330e-8	---	---	---

*Resultados obtidos após 50000 iterações.

Tabela 10: Resultados gerais para o problema E5.

Modelo	<i>M</i> (kg/kmol)	ρ (kg/m ³)	<i>c</i> congelado (J/kg.K)	γ congelado (adim.)	<i>R</i> (J/kg.K)	<i>C</i> (mol/cm ³)
0	18.015	7.2224e-3	2016.1	1.2969	461.53	4.0091e-7
1	18.015	7.2224e-3	2016.1	1.2969	461.53	4.0091e-7
2	18.015	7.2224e-3	2016.1	1.2969	461.53	4.0091e-7
3	18.015	7.2224e-3	2016.1	1.2969	461.53	4.0091e-7
4	18.015	7.2224e-3	2016.1	1.2969	461.53	4.0091e-7
5	18.015	7.2224e-3	2016.1	1.2969	461.53	4.0091e-7
7	18.015	7.2224e-3	2016.1	1.2969	461.53	4.0091e-7
10*	---	---	---	---	---	---
CEA	18.015	7.2224e-3	2016.3	---	---	---
9	18.015	7.2224e-3	2016.1	1.2969	461.53	4.0091e-7
Teqworks	18.014	7.2222e-3	---	---	---	---
13	18.015	7.2224e-3	2016.1	1.2969	461.53	4.0091e-7

* O modelo apresentou divergência.

Tabela 11: Frações mássicas obtidas para o problema E5.

Modelo	H ₂ O	O ₂	H ₂	OH	O	H	HO ₂	H ₂ O ₂	O ₃
0	1.0000	0	7.321e-13	---	---	---	---	---	---
1	1.0000	1.115e-13	7.462e-13	---	---	---	---	---	---
2	1.0000	1.120e-15	7.395e-13	1.219e-13	---	---	---	---	---
3	1.0000	2.219e-31	7.618e-13	5.724e-13	1.775e-30	4.240e-15	---	---	---
4	1.0000	1.495e-13	7.150e-13	1.186e-13	2.545e-17	4.302e-14	---	---	---
5	1.0000	1.409e-19	8.085e-13	1.288e-12	2.981e-19	4.308e-20	---	---	---
7	1.0000	1.184e-18	8.085e-13	1.288e-12	7.336e-26	6.186e-20	---	---	---
10*	---	---	---	---	---	---	---	---	---
CEA	1.0000	1.563e-12	1.977e-13	4.497e-15	1.585e-24	2.431e-23	1.567e-22	1.480e-19	3.468e-35
9	1.0000	8.007e-13	8.590e-13	4.231e-13	3.214e-20	1.948e-20	1.531e-15	1.230e-14	---
Teqworks	1.0000	1.951e-27	5.5890e-6	5.983e-19	5.598e-32	1.292e-19	1.466e-34	4.693e-27	< 1.0e-36
13	1.0000	1.297e-49	6.863e-13	---	4.630e-25	4.576e-14	---	---	---

* O modelo apresentou divergência.

Comparando-se os resultados obtidos para o modelo 13 aos demais modelos implementados no código Gibbs, observa-se que os resultados obtidos para o mesmo situam-se entre os modelos 1 e 2 (3 e 4 espécies), apesar de o modelo 13 apresentar 5 espécies. Tal comportamento é possivelmente atribuível ao fato de que o modelo 13 não considera a

hidroxila (OH), que apresenta fração mássica considerável, especialmente em condições de temperatura e pressões mais elevadas (como nos problemas E1 e E2).

Desta forma, através destes testes preliminares, não se recomenda o emprego deste modelo reduzido, uma vez que outros modelos, como o modelo 2 (com 4 espécies) apresentam resultados mais acurados.

3. Temperatura de combustão

Outra forma de comparar a acurácia do modelo 13 em relação aos demais modelos implementados no código Gibbs e, também, em relação a outras fontes, é comparar as temperaturas de combustão alcançadas em diversos problemas. Dezesete problemas diferentes foram analisados, conforme a Tabela 12.

Tabela 12: Definição dos problemas usados nas comparações.

Problema	razão em massa oxidante/combustível (OF)	Pressão total (bar)
C1	7.936682739	200
C2	2	200
C3	4	200
C4	6	200
C5	10	200
C6	12	200
C7	14	200
C8	16	200
C9	6.000	202.41
C10	8	5.1676
C11	16	5.1676
C12	4.13	68.948
C13	4.83	68.948
C14	3.40	68.948
C15	4.02	68.948
C16	4.00	68.948
C17	7.936682739	20

As Tabelas 13 a 15, apresentadas na seqüência, contêm os resultados das simulações empregando-se o modelo 13, bem como duas soluções de referência (uma correspondendo sempre ao código CEA e a segunda, obtida através do código Teqworks ou resultados da literatura). No caso dos problemas C1 (Tabela 13) e C17 (Tabela 15), diferentes modelos químicos do código Gibbs foram utilizados, para posterior comparação de seus resultados.

Conforme já observado nos estudos de equilíbrio químico, o modelo 13 apresenta resultados menos acurados que o modelo 2, embora aquele leve em consideração 5 espécies e este, apenas 4. Observa-se, contudo, que dentre as espécies consideradas pelo modelo 2 está a hidroxila (OH), cuja fração mássica é significativa em problemas envolvendo altas temperaturas, enquanto o modelo 13 não a considera. Este é o motivo principal para que tal modelo apresente acurácia menor que um modelo com menor número de espécies. Observa-se, através das Tabelas 13 a 15, que a temperatura de combustão é superestimada em todos os casos nos quais o modelo 13 é empregado. Desaconselha-se, assim, sua utilização em outros estudos, envolvendo escoamentos reativos.

Tabela 13: Resultados para a temperatura de combustão [K] do problema C1.

Problema	Modelo Gibbs	CEA	Gibbs	Erro (%) Gibbs	Outra fonte	Erro (%) outra fonte
C1	0	3737.73	4674.85	-25	[Tw] 3748.86	-0.30
C1	1	3737.73	4060.30	-8.6	[Tw] 3748.86	-0.30
C1	2	3737.73	3838.08	-2.7	[Tw] 3748.86	-0.30
C1	3	3737.73	3742.51	-0.13	[Tw] 3748.86	-0.30
C1	4	3737.73	3742.51	-0.13	[Tw] 3748.86	-0.30
C1	5	3737.73	3742.51	-0.13	[Tw] 3748.86	-0.30
C1	7	3737.73	3742.51	-0.13	[Tw] 3748.86	-0.30
C1	10	3737.73	3741.97	-0.11	[Tw] 3748.86	-0.30
C1	9	3737.73	3741.97	-0.11	[Tw] 3748.86	-0.30
C1	13	3737.73	3983.56	-6.6	[Tw] 3748.86	-0.30

Tabela 14: Resultados para a temperatura de combustão [K] dos problemas C2 a C16.

Problema	CEA	Gibbs (mod. 9)	Erro (%) Gibbs (mod. 9)	Gibbs (mod. 13)	Erro (%) Gibbs (mod. 13)	Outra fonte	Erro (%) outra fonte
C2	1797.78	1796.65	0.063	2067.40	-15.0	[Tw] 1798.71	-0.052
C3	2974.69	2976.10	-0.047	3208.91	-7.87	[Tw] 2986.92	-0.41
C4	3595.43	3599.98	-0.13	3862.27	-7.42	[Tw] 3610.55	-0.42
C5	3644.31	3649.47	-0.14	3918.00	-7.51	[Tw] 3658.22	-0.38
C6	3507.10	3513.33	-0.17	3810.02	-8.64	[Tw] 3523.28	-0.46
C7	3368.28	3374.95	-0.20	3688.90	-9.52	[Tw] 3385.28	-0.50
C8	3234.72	3241.35	-0.20	3563.97	-10.2	[Tw] 3251.62	-0.52
C9	3596.61	3601.17	-0.13	3863.74	-7.40	[Wang] 3639.0	-1.2
C10	3237.61	3240.86	-0.10	3385.99	-7.60	[Kim] 3300	-1.9
C11	2964.90	2970.91	-0.20	3186.87	-7.49	[Kim] 3073	-3.6
C12	2998.45	3000.31	-0.062	3222.44	-7.47	[Huzel] 3013	-0.49
C13	3235.70	3238.85	-0.097	3469.01	-7.21	[Huzel] 3251	-0.47
C14	2668.70	2669.55	-0.032	2900.94	-8.70	[Sutton] 2959	-11
C15	2954.33	2956.01	-0.057	3178.25	-7.58	[Sutton] 2999	-1.5
C16	2946.10	2947.75	-0.056	3170.06	-7.60	[Sarner] 2977	-1.0

Tabela 15: Resultados para a temperatura de combustão [K] do problema C17.

Problema	Modelo Gibbs	CEA	Gibbs	Erro (%) Gibbs	Outra fonte	Erro (%) outra fonte
C17	0	3420.33	4674.85	-37	[Tw] 3426.92	-0.19
C17	1	3420.33	3786.55	-11	[Tw] 3426.92	-0.19
C17	2	3420.33	3561.60	-4.1	[Tw] 3426.92	-0.19
C17	3	3420.33	3424.19	-0.11	[Tw] 3426.92	-0.19
C17	4	3420.33	3424.19	-0.11	[Tw] 3426.92	-0.19
C17	5	3420.33	3424.19	-0.11	[Tw] 3426.92	-0.19
C17	7	3420.33	3424.19	-0.11	[Tw] 3426.92	-0.19
C17	10	3420.33	3424.04	-0.11	[Tw] 3426.92	-0.19
C17	9	3420.33	3424.04	-0.11	[Tw] 3426.92	-0.19
C17	13	3420.33	3601.82	-5.3	[Tw] 3426.92	-0.19

4. Conclusões

- Observa-se que as temperaturas da mistura de gases é superestimada, em virtude da não presença da hidroxila (OH), cuja formação é feita através de reações endotérmicas.
- De um modo geral, o modelo 13 apresenta resultados menos acurados que os do modelo 2 (com 4 espécies, mas que considera a hidroxila) e mais acurados que modelo 1 (com 3 espécies), tanto em relação à temperatura de combustão quanto em relação a propriedades termofísicas da mistura de gases.
- A não inclusão do radical hidroxila (OH) entre as espécies químicas presentes no modelo de reações químicas torna o modelo 13 não adequado para estudos mais aprofundados de escoamentos reativos.