MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

INPE-12251-TDI/979

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO EM UM MOTOR FOGUETE COM REAÇÃO QUÍMICA

Nícolas Moisés Cruz Salvador

Dissertação de Mestrado do Curso de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia Espaciais/Combustão e Propulsão, orientada pelos Drs. Demétrio Bastos Netto e Carlos Eduardo Seraphico de Souza Migueis, aprovada em 23 de novembro de 2000.

INPE
São José dos Campos
2005

541.126

CRUZ-SALVADOR, N. M.
Simulação numérica do escoamento em um motor foguete com reação química / N. M. Cruz-Salvador. – São José dos Campos: INPE, 2000.
105p. – (INPE-12251-TDI/979).

1.Volume finito. 2.Câmara de Combustão. 3.Tubeira divergente. 4.Diferença atrasada. 5Diferenciação numérica. 6.Gradiente de pressão. I.Título.

Aprovado pela Banca Examinadora em cumprimento a requisito exigido para a obtenção do Título de **Mestre** em **Engenharia e Tecnologia Espaciais/Combustão e Propulsão.**

Dr. João Andrade de Carvalho Júnior
Presidente/INPE-SJC/SP

Dr. Demétrio Bastos Netto
Orientador/INPE-SJC/SP

Dr. José Gobbo Ferreira
Membro da Banca/INPE-CPaulista/SP

Dr. João Luiz Filgueiras de Azevedo
Membro da Banca
Convidado/ITA-SJC/SP

Dr. Carlos Alberto Gurgel Veras
Membro da Banca
Convidado UnB-Brasília/DF

Candidato: Nicolas Moisés Cruz Salvador

São José dos Campos, 23 de novembro de 2000.

AGRADECIMENTOS

Ao Dr. Demétrio Bastos-Netto pela paciência e empenho na orientação desta dissertação e pela amizade e confiança cultivada neste período.

Ao Dr. Carlos Eduardo Seraphico de Souza Migueis pela valiosa ajuda na parte computacional do código e pela sua orientação e paciência.

Ao Mestre Marcelo Mecchi Morales pela ajuda recebida na parte reativa do trabalho e pela amizade brindada.

A meus pais pela confiança e apoio constante durante todo este longo período.

A todo pessoal do LCP pela colaboração e amizade.

RESUMO

O trabalho ora apresentado tem como objetivo simular numericamente o campo de escoamento numa câmara de combustão de motor foguete a propelente líquido, incluindo a tubeira, com métodos numéricos atuais de tal forma que os resultados possam ser tomados como padrões de partida para projetos daqueles sistemas propulsivos. Para tal emprega-se um método de volumes finitos que simula escoamentos em quaisquer regimes de velocidade. Como o escoamento aqui estudado tem regiões em regime supersônico e baixo subsônico, o código numérico inicialmente desenvolvido para escoamentos compressíveis, foi modificado para trabalhar eficientemente em uma ampla faixa de velocidades. Na comunidade de *"Computational Fluid Dynamics"* (CFD) tem-se desenvolvido códigos de natureza compressível ou incompressível sendo uma dificuldade o tratamento conjunto de ambos pois ainda hoje existem poucas referências neste campo. Aqui optou-se por partir de um código compressível já existente e usaram-se variáveis primitivas nas equações de Transporte, no caso a pressão, as componentes cartesianas de velocidade e a temperatura, ao invés de variáveis conservadas para fazer o tratamento extensivo para qualquer número de Mach. Para tal tarefa empregam-se malhas não estruturadas com refinamentos adaptativos e os termos convectivos são tratados mediante esquemas *"Upwind"* de primeira e segunda ordem ; para manter a estabilidade numérica emprega-se dissipação artificial e na cobertura temporal foram utilizados os esquemas de Runge-Kutta de 5 passos para a parte de mecânica dos fluidos e o *"Value of ordinary differential equations"* (VODE) com o Chemkin II na solução reativa do modelo químico. No decorrer do desenvolvimento do presente código que buscava a simulação do escoamento num motor foguete foram feitos testes de comprovação com vários tipos de escoamentos tanto de tipo interno como externo a diferentes velocidades, buscando estabelecer o grau de confiança deste trabalho. Essas comparações foram feitas com resultados teóricos e com outros códigos validados e já aceitos pela comunidade do CFD Para simular escoamentos internos e externos em regimen subsônico (Mach = 0.05) ao supersônico (Mach = 4) foram linearizadas as equações de Euler. Em escoamento externo foi testado um cilindro circular e também escoamento sobre uma cunha aerodinâmica, e para escoamento interno, um canal com seção decrescente e a tubeira convergente-divergente, para a validação do código. Na parte reativa empregou-se a aproximação parabólica da tubeira e no modelo da cinética química a queima de hidrogênio e oxigênio com a extinção e produção de espécies químicas. No campo de temperaturas encontrou-se uma faixa que vai de 1518 K no início da reação química até 838.4 K, este baixo valor é devido a que as condições de velocidade não foram zero na câmara.

NUMERICAL SIMULATION OF A ROCKET MOTOR WITH CHEMICAL REACTION FLOW

ABSTRACT

This work presents a numerical simulation of the flow field in a propellant rocket engine chamber and exit nozzle using techniques to allow the results to be taken as starting points for designing those propulsive systems. This was done using a finite volume method simulating the different flow regimes which usually take place in those systems. As the flow field has regions ranging from the low subsonic to the supersonic regimes, the numerical code used, initially developed for compressible flows only, was modified to work proficiently in the whole velocity range. It is well known that codes have been developed in CFD, for either compressible or incompressible flows, the joint treatment of both together being complex even today, given the small number of references available in the area. Here, an existing code for compressible flow was used; in this were introduced primitive variables in the Transport (Euler) equations, here the pressure, the Cartesian components of the velocity and the temperature instead of the conserved variables. This was done to permit the treatment at any Mach number. Unstructured meshes with adaptive refinement were employed here. The convective terms were treated with first and second order upwind methods. The numerical stability was kept with artificial dissipation and in the time coverage one used a five-stage Runge-Kutta scheme for the Fluid Mechanics and the VODE (Value of Ordinary Differential Equations) scheme along with the Chemkin II in the chemical reacting solution. During the development of this code simulating the flow in a rocket engine, comparison tests were made with several different types of internal and external flows, at different velocities, seeking to establish the confidence level of the techniques being used. These comparisons were done with existing theoretical results and with other codes already validated and well accepted by the CFD community. To simulate internal and external flows with velocity regimes in the range from low subsonic ($M_\infty = 0.05$) to supersonic ($M_\infty = 4$), linearized Euler equations were used. Among the external flows this was done with the flow around a circular cylinder and the one over an aerodynamic wedge, and for the internal flows, the flow in a channel with a downstream decreasing cross section and the converging-diverging nozzle flow were used in the code validation procedure. In the reactive it test was used the parabolic approximation of the bell shaped nozzle and the chemical kinetics model chosen was the one dealing with Hydrogen and Oxygen with the extinction and production of chemical species. The temperature field was found ranging from 1518 K on the onset of the chemical reaction down to 838.4K; this value lower was due to the non-zero velocity conditions in the chamber.

SUMÁRIO

Pàg.

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE SÍMBOLOS

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO 19

CAPÍTULO 2 - FORMULAÇÃO TEÓRICA 23

2.1 - Equações de Navier - Stokes 23
2.1.1 - Dissipação artificial 28
2.1.2 - Adimensionalização 29
2.2. - Algoritmos empregados 20
2.3 - Condições de contorno 35

CAPÍTULO 3 - VALIDAÇÃO DO CÓDIGO 37

3.1 - Cilindro circular 37
3.2 - Canal com estreitamento 40
3.3 - Cunha aerodinâmica 44
3.4 - Bocal subsônico - supersônico 52

CAPÍTULO 4 - PROCEDIMENTO PARA O PROJETO DO MOTOR 59

4.1 - Cálculos preliminares 59
4.2 - Aproximação da curvatura de uma tubeira tipo "*Bell*" 63

CAPÍTULO 5 - MODELAGEM NUMÉRICA DO MOTOR REATIVO 69

5.1 - Modelo de cinética química 70
5.2 - Modelo termodinâmico 72
5.3 - Modelo reativo no bocal convergente-divergente 73
5.4 - Considerações e resultados apresentados no cálculo do motor 81

CAPÍTULO 6 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES 95

REFERÊNCIAS BIBLIOGRAICAS 97

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTAR.....101

LISTA DE FIGURAS

Pág.

2.1 Extrapolação de matrizes empregando reconstrução linear de variáveis primitivas no esquema upwind de 2da ordem (Azevedo - Figueira et.al 1997)..... 33

3.1 Perfil de velocidades para escoamento a Mach = 0.05 sobre um cilindro circular infinito..... 38

3.2 Distribuição do coeficiente de pressão para escoamento a Mach = 0.05 sobre um cilindro circular infinito. Presente modelo vs modelo de Martins (1994)..... 39

3.3 Perfil de velocidade num canal com estreitamento na direção da saída do escoamento..... 41

3.4 Perfil de Pressão num canal com estreitamento na direção da saida do escoamento..... 42

3.5 Distribuição de pressão no escoamento interno num canal com estreitamento a juzante. Comparação do presente código com resultados teóricos de Shapiro , 1957 ……. 43

3.6 Malha não estruturada refinada na região do choque para obter uma maior aproximação da descontinuidade..... 45

3.7 Perfil de velocidades para o escoamento sobre uma cunha aerodinâmica a Mach = 2 empregando o esquema de Van Leer de primeira ordem..... 46

3.8 Perfil de velocidades para o escoamento sobre uma cunha aerodinâmica a Mach = 2 empregando o esquema de Van Leer de segunda ordem..... 47

3.9 Perfil de velocidades para o escoamento sobre uma cunha aerodinâmica a Mach = 4 empregando o esquema de Van Leer de primeira ordem..... 48

3.10 Perfil de velocidades para o escoamento sobre uma cunha aerodinâmica a M = 4 empregando o esquema de Van Leer de segunda ordem..... 49
3.11 Comparação do perfil de pressões sobre a parede entre este código e o de Martins (diferenças finitas 1994). 50
3.12 Diferença entre os métodos de Van-Leer de 1ª e 2ª ordem para uma Distribuição da pressão, p/p_∞ , em escoamento supersônico a Mach=4 51
3.13 Malha empregada na simulação numérica do bocal convergente - divergente..... 54
3.14 Perfil de velocidades para um bocal Convergente – Divergente I..... 55
3.15 Perfil de velocidades para um bocal convergente – Divergente II..... 56
3.16 Comparação do perfil de pressões sobre a parede no bocal convergente para o trabalho presente e o de Martins 1994..... 57
4.1 Relações da Razão de Contração usadas no problema de escala (Huzel- Huang, 1992)..... 61
4.2 Relações de Comprimento da Câmara (in.) vs Diâmetro da Garganta (in.) para diferentes propelentes e pressões (Huzel e Huang, 1992)..... 62
4.3 Aproximação parabólica do contorno de uma tubeira tipo "bell"..... 63
4.4 Aproximação da tubeira cônica……... 66
4.5 θ_e e θ_n Como função da Razão de expansão (Huzel- Huang, 1992)..... 67
4.6 Perfil do Motor foguete com 200 N de empuxo usado neste trabalho.... 68
5.1 Perfil de velocidades do bocal convergente - divergente reativo para o esquema de Van Leer de primeira ordem 75
5.2 Perfil de temperatura do bocal convergente - divergente reativo para o esquema de Van Leer de primeira ordem 76
5.3 Taxa de produção de H_2O num bocal convergente - divergente reativo para o esquema de Van Leer de primeira ordem..... 77
5.4 Taxa de desaparecimento de O_2 num bocal convergente divergente reativo para o esquema de Van Leer de primeira ordem..... 78
5.5 Taxa de formação e desaparecimento de H_2O e O_2 respectivamente vs. X 79

5.6 Gráfico de comparação das historias de convergências para um bocal convergente - divergente..... 80
5.7 Fronteiras empregadas na simulação do motor foguete 83
5.8 Malha empregada para a simulação do motor foguete de 200 N..... 84
5.9 Perfil de velocidades num motor de foguete com com reação química na tubeira 85
5.10 Aproximação na zona de garganta do perfil de velocidades do motor foguete com reação química na tubeira 86
5.11 Perfil de Temperaturas do motor foguete com reação química na tubeira..... 87
5.12 Perfil da taxa de Produção de H2O em termos de fração molar do motor foguete reativo 88
5.13 Perfil da taxa de Produção de O_2 em termos da fração molar do motor foguete reativo..... 89
5.14 Taxa de produção de H_2O e O_2 por seção X no motor foguete reativo.. 90
5.15 Perfil da taxa de Produção de H em termos da fração molar do motor foguete reativo..... 91
5.16 Taxa de produção de H por seção X no motor foguete reativo 92
5.17 Taxa de produção de OH e H_2 por seção X no motor foguete reativo.... 93
5.18 Taxa de produção de HO_2 por seção X no motor foguete reativo..... 94

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos latinos

A	área da secção transversal
A_j	fator pré – exponencial da lei de Arrhenius
a	velocidade sônica local
CFL	número de Courant-Friedrichs-Lewy
C_i	concentração das espécies *i*
Cp	calor específico a pressão constante
Cp_k	calor específico a pressão constante da espécie *k* por unidade de massa
E_j	energia de ativação da reação *j*
E_0	energia de ativação da mistura
e	energia total por unidade de volume
e_k	energia interna da espécie k por unidade de massa.
F	módulo do vetor de empuxo
g	energia livre de Gibbs por unidade de massa
g_k	energia livre de Gibbs da espécie k por unidade de massa.
H	elemento químico hidrogênio
h	entalpia por unidade de massa
h_k	entalpia da espécie *k* por unidade de massa
h^0_k	entalpia de formação da espécie *k* por unidade de massa
k	número de espécies
M	número de Mach
$\dot{m}$	fluxo mássico
O	elemento químico oxigênio
P	Pressão local
P_o	pressão de estagnação.
Q	vetor das variáveis conservadas
q	vetor das variáveis primitivas

R	constante específica do gás
s	entropia por unidade de massa
s_k	entropia da espécie *k* por unidade de massa
s^0_k	entropia de formação da espécie *k* por unidade de massa
T	temperatura estática
U	velocidade do projétil
u	componente cartesiana horizontal da velocidade
V	volume de controle
v	componente cartesiana vertical da velocidade
Y_k	fração mássica da espécie *k*
W_k	massa molecular da espécie *k*

Símbolos gregos

α_j	expoente da temperatura na lei de Arrhenius
ε_{ij}	tensor de taxa de deformação
γ	razão de calores específicos
κ	fator de freqüência cinética
κ_{bj}	constante de reação *j* no sentido dos reagentes
$\kappa_{eq\,j}$	constante de equilíbrio da reação *j*
κ_{fj}	constante da reação *j* no sentido dos produtos
ν'_{jk}	coeficiente estequiométrico do reagente
ν''_{jk}	coeficiente estequiométrico do produto correspondente à espécie κ e à reação *j*
ρ	massa específica
τ_{ij}	tensor de tensões viscosas
μ	coeficiente de viscosidade dinâmica
μ'	coeficiente de viscosidade volumétrica ("bulk").
Ω	vetor fonte de espécies químicas
ω_k	taxa de produção molar da espécie *k*

Símbolos Superiores

T	Transposta
Ij	espécie I na reação j.

Símbolos Inferiores

e	área no plano de saída
t	área no plano da garganta
a	pressão ambiente
c	condições da câmara do motor
c1	câmara mais cone truncado.
n	ângulo inicial da parábola.

Símbolos especiais

ΔG	energia livre de Gibbs
(¯)	referente a parâmetro com dimensão (pag. 10)

CAPITULO 1

INTRODUÇÃO

Hoje em dia, no campo da engenharia aeroespacial, a modelagem e a simulação numérica estão necessariamente presentes no desenvolvimento de projetos graças à disponibilidade dos sistemas computacionais e de seu vertiginoso avanço nos últimos tempos. Como eles são principalmente empregados nos cálculos preliminares dos projetos, tendo como a principal vantagem dessa tendência a economia em tempo e dinheiro, um número grande de códigos comerciais surgiu, capazes de solucionar problemas diversos como os de materiais, os térmicos, os fluido-dinâmicos, etc. Entretanto, os custos e as limitações de cada um deles fazem com que, para cada problema particular, seja necessário elaborar um código de acordo com as necessidades específicas do projeto. Daí a necessidade de simular numericamente o campo de escoamento na câmara de combustão de um motor foguete, incluindo a tubeira, com particularidades que definiremos claramente mais adiante. Cabe ressaltar que é conveniente, sempre que possível, considerar um duplo critério para desenvolver novos conceitos, ou seja, a comparação do fenômeno observado em laboratório com o resultado numérico pois a melhora deste último depende do nosso conhecimento do primeiro.

A busca de um método capaz de descrever um escoamento numa ampla faixa de velocidades não é nova. Existem exemplos de trabalhos como o de Chorin (1967) e o de Harlow & Amsden (1968), entre os primeiros e alguns mais recentes como o de Karki e Patankar (1989), Maliska e Silva (1989) na parte fuidodinâmica, Azevedo e Figueira da Silva (1997) usando reação química, onde a maior importância desses trabalhos foi a introdução de inovações dentro de um contexto de volumes finitos. Assim o presente trabalho que trata do desenvolvimento de um esquema numérico com reação química para uma ampla faixa de velocidades e especificamente para um motor de foguete. Para tal fim foram empregadas variáveis primitivas (pressão, componentes cartesianas da velocidade e temperatura) ao invés de variáveis conservadas e onde a pressão é escolhida como variável principal no lugar da densidade, pois a variação de pressão é

relevante em toda a faixa do número de Mach o que garante registrar também valores a baixas velocidades. Na literatura inglesa essa técnica é conhecida como "*all speed"* por ser mais eficiente numa faixa de velocidade mais abrangente, em relação a outros métodos e que serve para este caso, i.e., aquela representativa das velocidades dos gases de combustão na câmara de um motor foguete onde o escoamento atinge regiões nas quais as velocidades variam do regime supersônico ao baixo sônico, (sendo necessário caracterizar cada região do escoamento).

Uma vez estabelecida a estratégia de solução acima descrita, é importante enumerar as ferramentas que são usadas neste trabalho: a .- Malha não estruturada i.e., não obedece a nenhuma ordem estrutural; b .- Termos convectivos por métodos de segunda ordem (Van Leer), baseados no *"Monotone Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws"* (MUSCL), que tem particularidades para aplicações em cada tipo de fluxo o que permite um controle maior das aproximações, na solução compressível e na incompressível; c .- Dissipação artificial, que utiliza um operador que garante a dissipação dos termos para manter a estabilidade numérica; d .- Integração por *"time-step-splitting"*, que utiliza um esquema totalmente explícito de segunda ordem de aproximação tendo um algorítmo de solução (*"solver"*)para a parte de mecânica dos fluidos. O algorítmo de solução empregado para mecânica dos fluidos é o de Runge-Kutta de 5- estágios e para a parte química usa-se o *"Value of ordinary differential equations"* (VODE), parte do Chemkin II (Kee, 1992).

A seguir o código foi testado e validado com resultados de modelos disponíveis na literatura, como é o caso de escoamentos tipo internos e externos para regimes incompressíveis, em regimes a baixo subsônico, transônico e supersônico. Dependendo de sua concordância com os dados disponíveis pode-se então avaliar se o modelo se enquadra em parâmetros adequados de confiabilidade. Isso feito o código será aplicado ao escoamento em uma câmara de combustão de um motor foguete, incluindo a tubeira, onde também ocorrem reações químicas com as seguintes aproximações: **Na câmara de combustão.-** combustível e oxidante gasosos; sem transferência de calor para as paredes; escoamento sem turbulência. **Na tubeira:** baixos gradientes na saída; pressão ambiente na seção de saída, ou seja, expansão completa.

Essas condições são então aplicadas incrementando o termo fonte nas equações de transporte. Para tal implementou-se a parte reativa do código que emprego o solver para a parte química VODE do Chemkin II (Kee, 1992). .

O algorítmo de solução VODE utilizado pelo Chemkin desde sua primeira versão é empregado neste trabalho para controlar os principais parâmetros que produzem os valores temporais das espécies químicas que são de curta duração em comparação com os fluidodînamicos o que acarretaria um problema de *"stiffness"* se o tratamento fosse feito totalmente no esquema de Runge - Kutta.

Simulou-se então a reação do motor foguete para combustão completa de hidrogênio e oxigênio ocorrendo na câmara. O acoplamento químico na parte numérica foi bem sucedida e os valores obtidos ficaram dentro dos limites esperados, obtendo-se perfís de temperatura estática coerentes com este tipo de escoamento. Outros parâmetros também estiveram de acordo com os valores esperados (número de Mach, velocidade, pressão, etc.).

A parte reativa com uso da cinética química empregando o mecanismo proposto por Yiguang Ju e Takashi Niioka (1994) para a combustão completa de oxigênio e hidrogênio, e com as conhecidas formulas termodinâmicas para o calor especifico, a entalpia de formação, a entropia, a energia livre de formação de Gibbs, conduziram a curvas com boas tendências para as taxas de formação e desaparecimento das espécies químicas geradas pelo mecanismo químico.

Os resultados são apresentados em gráficos com suas principais características, e comparados com resultados de outros códigos disponíveis para o cálculo do equilíbrio químico (Gordon e McBride, 1971), que são práticos e muito empregados, podendo-se assim chegar a uma aproximação daquilo que acontece na prática.

CAPÍTULO 2

FORMULAÇÃO TEÓRICA

2.1 Equações de Navier - Stokes.

Como neste trabalho temos que simular escoamento em uma faixa de velocidades que vai do baixo subsônico ao supersônico partiremos inicialmente das equações padrão de Navier -Stokes (embora no presente trabalho usemos as equações de Euler) onde substituiremos densidade e energia por pressão e temperatura respectivamente com auxilio da equação de estado. Pela técnica de volumes finitos é conhecido o fato de partir da equação diferencial para se obter as equações aproximadas

$$\frac{\partial Q}{\partial t}+\frac{\partial E_e(Q)}{\partial x}+\frac{\partial F_e(Q)}{\partial y}-\frac{\partial E_{\mathrm{V}}(Q)}{\partial x}-\frac{\partial F_{\mathrm{V}}(Q)}{\partial y}=\Omega \qquad (2.1)$$

onde

$$Q = [\,\rho \quad \rho u \quad \rho \mathrm{v} \quad e\,]^{\mathbf{T}}$$

Sendo ρ a densidade, u e v as componentes cartesianas da velocidade e e a energia total por unidade de volume onde o superscripto **T** indica a matriz transposta.

A metodologia para o tratamento dos escoamentos compressíveis e incompressíveis consiste em substituir as variáveis conservadas pelas variáveis primitivas como variáveis dependentes na Equação 2.1

$$\frac{\partial Q(q)}{\partial t}+\frac{\partial E_e(q)}{\partial x}+\frac{\partial F_e(q)}{\partial y}-\frac{\partial E_{\mathrm{v}}(q)}{\partial x}-\frac{\partial F_{\mathrm{v}}(q)}{\partial y}=\Omega(q) \qquad (2.2)$$

Onde:

$$q = [p \quad u \quad \mathrm{v} \quad T]^{\mathbf{T}}$$

p é a pressão, u e v as componentes da velocidade e T é a temperatura, sendo que o superscripto **T** indica a matriz transposta. O vetor das variáveis conservadas, em termos das variáveis primitivas, é expresso como:

$$Q = \begin{Bmatrix} \frac{p}{T} \\ \frac{pu}{T} \\ \frac{p\mathrm{v}}{T} \\ p\left(\frac{1}{\gamma - 1} + \frac{u^2 + \mathrm{v}^2}{2RT}\right) \end{Bmatrix}. \tag{2.3}$$

Os vetores do fluxo convectivo são escritos agora como:

$$E = \begin{Bmatrix} \frac{pu}{T} \\ \frac{pu^2}{T} + Rp \\ \frac{pu\mathrm{v}}{T} \\ \left[\frac{\gamma p}{\gamma - 1} + \frac{p}{2RT}(u^2 + \mathrm{v}^2)\right]u \end{Bmatrix}, \qquad F = \begin{Bmatrix} \frac{p\mathrm{v}}{T} \\ \frac{pu\mathrm{v}}{T} \\ \frac{p\mathrm{v}^2}{T} + Rp \\ \left[\frac{\gamma p}{\gamma - 1} + \frac{p}{2RT}(u^2 + \mathrm{v}^2)\right]\mathrm{v} \end{Bmatrix}$$

(2.4) ,

e os vetores dos fluxos viscosos são escritos como:

$$E_v = \begin{Bmatrix} 0 \\ \tau_{xx}R \\ \tau_{xy}R \\ \left(u\tau_{xx} + v\tau_{xy} - q_x\right) \end{Bmatrix}, \qquad Fv = \begin{Bmatrix} 0 \\ \tau_{xy}R \\ \tau_{yy}R \\ \left(u\tau_{xy} + v\tau_{yy} - q_y\right) \end{Bmatrix}. \tag{2.5}$$

Nas Equações (2.4) e (2.5) as três primeiras equações foram multiplicadas por R para uma simplificação .As relações constitutivas são necessárias para o fechamento das equações. A partir da equação de estado para gases perfeitos, tem-se a relação de pressão :

$$p = \rho RT \,. \tag{2.6}$$

Neste caso R é a constante universal dos gases. As componentes do tensor de tensões são:

$$\begin{aligned} \tau_{ij} &= 2\mu\varepsilon_{ij} + (\mu' - \frac{2}{3}\mu)\varepsilon_{\alpha\alpha} - p\delta_{ij} \\ \varepsilon_{ij} &= \frac{1}{2}(\frac{\partial \mu_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}) \end{aligned} \tag{2.7}$$

o vetor termo fonte química pode ser escrita como:

$$\Omega = [0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \dot{\omega}_1 W_1 \quad \dot{\omega}_2 W_2 \quad \ldots \quad \dot{\omega}_{k-1} W_{k-1}]^T \tag{2.8}$$

onde $\dot{\omega}_k W_k$ é o produto da taxa de produção molar pela massa molecular da espécie k.
Integrando a Equação (2.2) obtemos a seguinte expressão:

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_V Q dV + \int_S (\vec{C}_e - \vec{C}_v).\vec{n}\, dS = \iint_V \Omega\, dv. \tag{2.9}$$

Onde os valores de dos termos da convecção e viscosidade são expressos da seguinte forma:

$$\vec{C}_e = E\vec{i} + F\vec{j}$$
$$\vec{C}_{\mathrm{V}} = E_{\mathrm{V}}\vec{i} + F_{\mathrm{V}}\vec{j} \qquad (2.10)$$

O algoritmo é implementado no contexto de malhas triangulares não estruturadas. Toma-se para valor do vetor das variáveis conservadas $Q_{i,}$ ou das variáveis primitivas $q_{i\ ,}$ o valor do vetor calculado no i - ésimo ponto da malha. Além disso, se a integral de volume é avaliada considerando Q_i constante através do i-ésimo volume de contrôle.

$$\iint_{\mathrm{V}_i} Q d\mathrm{v} = V_i Q_i \qquad (2.11)$$

E se, também considerássemos malha estacionária, o termo temporal da equação (2.9) ficaria:

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_{\mathrm{V}i} Q d\mathrm{v} = V_i \frac{\partial Q_i}{\partial t}\ . \qquad (2.12)$$

Como sempre, é necessário voltar para as variáveis primitivas . Assim definiremos uma nova matriz ,em termos do jacobiano das variáveis primitivas:

$$D = \frac{\partial Q}{\partial q}\ . \qquad (2.13)$$

Podemos finalmente escrever:

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_{\mathrm{V}i} Q d\mathrm{v} = \mathrm{V}_i D_i \frac{\partial q_i}{\partial t}\ . \qquad (2.14)$$

Mesmo para o caso do termo fonte empregamos o seguinte expressão:

$$\iiint_{V_i} \Omega dv = V_i \Omega_i \tag{2.15}$$

As integrais ao longo dos limites do volume de controle são avaliadas mediante a regra trapezoidal, definindo os operadores convectivos e viscosos :

$$\begin{aligned} \vec{C}_{conv(q_i)} &= \int_{S_i} (Edy - Fdx) \\ \vec{C}_{vis(q_i)} &= \int_{S_i} (E_v dy - F_v dx) \end{aligned} \tag{2.16}$$

O termo de dissipação artificial deve ser adicionado para manter a estabilidade do esquema numérico evitando oscilações em esquemas centrados, como o de Jameson, empregado neste trabalho (Jameson e Baker, 1983). Assim a equação de governo totalmente discretizada no espaço ficaria:

$$\frac{dq_i}{dt} = -\frac{1}{V_i} D_i^{-1} [C_{conv}(q_i) - C_{vis}(q_i) - C_{art}(q_i)] + \Omega(q_i) \tag{2.17}$$

Como neste caso empregou-se a equação de Euler a Equação 2.17 se reduz a

$$\frac{dq_i}{dt} = -\frac{1}{V_i} D_i^{-1} [C_{conv_{(q_i)}} - C_{art(q_i)}] + \Omega(q_i) \tag{2.18}$$

Para a marcha no tempo usou-se o procedimento elaborado por Strang (1968), dado por:

$$q_i^{n+1} = \mathrm{L}\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \mathrm{C}(\Delta t) \mathrm{L}\left(\frac{\Delta t}{2}\right) q_i^n \tag{2.19}$$

Que separadamente integra a parte fluidodinâmica com o operador L e a parte química com o operador C em cada volume de controle. Uma detalhada discusão deste ponto pode ser encontrada no trabalho do LeVeque e Yee(1990)

Para integração das equações de fluxo utilizou-se o esquema explícito multiestágio de Runge-Kutta (time-stepping scheme) onde empregou-se a discretização da equação de

Euler e que para este problema seria de cinco estágios, em um algoritmo de 2ª ordem de aproximação.

$$
\begin{aligned}
q_i^{(0)} &= q_i^n \\
q_i^{(1)} &= q_i^{(0)} - \frac{\alpha_1 \Delta t_i}{V_i}(D_i^{(0)})^{-1}[C_{conv}(q_i^{(0)}) - C_{art}(q_i^{(0)})] \\
q_i^{(2)} &= q_i^{(0)} - \frac{\alpha_2 \Delta t_i}{V_i}(D_i^{(1)})^{-1}[C_{conv}(q_i^{(1)}) - C_{art}(q_i^{(1)})] \\
q_i^{(3)} &= q_i^{(0)} - \frac{\alpha_3 \Delta t_i}{V_i}(D_i^{(2)})^{-1}[C_{conv}(q_i^{(2)}) - C_{art}(q_i^{(1)})] \\
q_i^{(4)} &= q_i^{(0)} - \frac{\alpha_4 \Delta t_i}{V_i}(D_i^{(3)})^{-1}[C_{conv}(q_i^{(3)}) - C_{art}(q_i^{(1)})] \\
q_i^{(5)} &= q_i^{(0)} - \frac{\alpha_5 \Delta t_i}{V_i}(D_i^{(4)})^{-1}[C_{conv}(q_i^{(4)}) - C_{art}(q_i^{(1)})] \\
q_i^{(n+1)} &= q_i^{(5)}
\end{aligned}
\tag{2.20}
$$

Onde os valores de α_i (i=1,2,3,4,5) são respectivamente:

¼ , 1/6 , 3/8 , ½ ,1

2.1.1 Dissipação artificial

Como já se viu na equação linearizada de transporte temos o termo de dissipação artificial que aparece como conseqüência de uma discretização espacial; porém, é necessário o emprego de um operador misto para manter a estabilidade numérica. Ele aqui é denominado Laplaciano não dividido e bi–harmônico (sugerido por Mavriplis,1988). Esse operador é responsável também pela eliminação das oscilações que ocorrem perto das descontinuidades. Assim tomamos:

$$
C_{art}(q_i) = \sum_{k=1}^{N_i} (d_{ik}^{(2)} - d_{ik}^{(4)}) \tag{2.21}
$$

onde:

$$d_{ik}^{(2)}(q_i) = \sum_{k=1}^{N_i} \frac{\varepsilon_{ik}^{(2)}}{2}\left(\frac{V_i}{\Delta t_i} + \frac{V_k}{\Delta t_k}\right)[Q(q_k) - Q(q_i)] \tag{2.22}$$

$$d_{ik}^{(4)}(q_i) = \sum_{k=1}^{N_i} \frac{\varepsilon_{ik}^{(4)}}{2}\left(\frac{V_i}{\Delta t_i} + \frac{V_k}{\Delta t_k}\right)[\nabla^2 Q(q_k) - \nabla^2 Q(q_i)] \tag{2.23}$$

Onde:

$$\nabla^2 Q(q_i) = \sum_{k=1}^{Ni} [Q(q_k) - Q(q_i)] \tag{2.24}$$

onde $d^{(2)}_{ik}$ e $d^{(4)}_{ik}$ representam respectivamente as contribuições do operador laplaciano no k - ésimo volume de controle para o i - ésimo nó, sendo N_i o número total de faces deste volume de controle.

2.1.2 Adimensionalização

Uma adimensionalização conveniente das variáveis foi escolhida para dar maior generalidade aos resultados. Assim as variáveis adimensionais foram definidas da seguinte maneira:

Densidade adimensional

$$\rho = \frac{\bar{\rho}}{\rho_{ref}} \tag{2.25}$$

Componentes adimensionais da velocidade

$$u = \frac{\bar{u}}{u_{ref}}, \qquad \mathrm{v} = \frac{\bar{\mathrm{v}}}{u_{ref}} \tag{2.26}$$

Pressão adimensional

$$\mathrm{p} = \frac{\bar{\mathrm{p}}}{\rho_{\mathrm{ref}} \mathrm{u}_{\mathrm{ref}}^2} \tag{2.27}$$

Temperatura adimensional

$$T = \frac{\overline{T}}{T_{ref}} \tag{2.28}$$

Constante do gás adimensional

$$R = \frac{\overline{R}\,T_{ref}}{u^2_{ref}} \tag{2.29}$$

A partir deste ponto os parâmetros com barra i.e. ($^-$) se referem a quantidades com dimensões. O subscrito "ref" indica as quantidades de referência que, dependendo do caso, podem ser as quantidades do escoamento não perturbado ou de estagnação

2.2 Algoritmos empregados

Neste trabalho, escolheram-se os algoritmos de Jameson (centrado) e os de Van Leer de 1ª e 2ª ordem, que são esquemas Upwind :

Esquema de Van Leer de 1ra ordem : O operador convectivo $C(Q_i)$ se define pela técnica de separação dos vetores de fluxos (Van Leer,1982) . Assim, o operador convectivo pode ser escrito como:

$$C(Q_i) = \sum_{k=1}^{3} (E_{ik}\Delta y_{ik} - F_{ik}\Delta x_{ik}) \tag{2.30}$$

onde Δx_{ik} e Δy_{ik} são:

$$\Delta x_{ik} = (y_{k2} - y_{k1}), \qquad \Delta y_{ik} = (x_{k2} - x_{k1})$$

sendo os pontos (x_{k1},x_{k2}) e (y_{k1},y_{k2}) o vértice no qual se define a interface entre as células i e k. E os vetores de fluxo na interface podem ser escritos (Azevedo e Figueira da Silva, 1997):

$$E_{ik} = \begin{cases} E_i^+ + E_k^- & para \quad \Delta y_{ik} \geq 0 \\ E_k^+ + E_i^- & para \quad \Delta y_{ik} < 0 \end{cases}$$

$$F_{ik} = \begin{cases} F_i^+ + F_k^- & para \quad \Delta x_{ik} \leq 0 \\ F_k^+ + F_i^- & para \quad \Delta y_{ik} > 0 \end{cases} \qquad (2.31)$$

sendo $E_i^{\pm}$ e $F_i^{\pm}$ os vetores de fluxos separados em termos que contém as velocidades positivas (+) e negativas (-) de propagação características de um escoamento, calculados empregando as formulas de Anderson, Thomas e Van Leer (1986) e as propriedades conservadas do i - ésimo volume de controle. A avaliação dos fluxos separados pode ser resumida como se segue:

$$M_x \geq 1 \Rightarrow \qquad E^+ = E \qquad e \qquad E^- = 0,$$

$$M_x \leq 1 \Rightarrow \qquad E^+ = 0 \qquad e \qquad E^- = E$$

$$|M| < 1 \Rightarrow \qquad E^+ = \begin{Bmatrix} f^{\pm} \\ f^{\pm}[(\gamma - 1)u \pm 2a]/\gamma \\ f^{\pm} \mathrm{v} \\ f^{\pm}\left[\dfrac{\{(\gamma - 1)u \pm 2a\}^2}{2(\gamma^2 - 1)} + \dfrac{\mathrm{v}^2}{2}\right] \end{Bmatrix}$$

(2.32)

O número de Mach na direção x pode ser definido como a razão entre a componente cartesiana da velocidade e a velocidade do som:

$M_x = u/a$

Por outro lado a separação de fluxo de massa também é definida como

$f^{\pm} = \pm \rho a[(M_x \pm 1)/2]^2$.

Expressão similar é obtida para $f^{\pm}$ empregando $M_y = v/a$. Com esta definição de vetor de fluxo, a separação é continuamente diferenciável nos pontos sônico e de estagnação.

Esquema de Van Leer de 2ª ordem : Baseado numa extensão da aproximação de Godunov, no estágio de projeção do esquema de aproximações, na qual a solução, que é projetada em cada célula, sobre seus elementos de composição a estado constante, é modificada . Denominada MUSCL (Monotone Upstream Centered Scheme for Conservation Laws), (van Leer ,1979) emprega a aproximação por extrapolação de variáveis primitivas, onde os estados esquerdo e direito em uma interface dada são linearmente reconstruídos por extrapolação das variáveis primitivas sobre cada lado da interface conjuntamente com a ordem do processo com limitação apropriada para evitar a criação de um novo extremo. O vetor das variáveis primitivas *q* é tomado como na Equação (2.2), enquanto o operador convectivo $C(Q_i)$ é tomado como na Equação (2.30). As interfaces E_{ik}, e F_{ik} são definidas como:

$$\begin{aligned} E_{ik} &= E^{+}(Q_L) + E^{-}(Q_R), \\ F_{ik} &= F^{+}(Q_L) + F^{-}(Q_R), \end{aligned} \qquad (2.33)$$

Onde $Q_L = Q(q_L)$ e $Q_R = Q(q_R)$ são os estados esquerdo e direito na ik- gésima interface obtida pelo processo de extrapolação linear.

Entre os aspectos da implementação da grade não estruturada em tal esquema, que merecem ser considerados, temos primeiro a definição dos estados esquerdo e direito em uma dada célula da interface. As interfaces das células podem ter virtualmente qualquer orientação sendo que cada um pode decidir qual deles ver na ordem para construir os estados. Isto se faz baseado sobre a componente do vetor normal ao bordo, como se indica na Equação 2.30 para o esquema de Van Leer de 1ª ordem. O outro aspecto é associado com a decisão sobre qual segundo volume de controle será usado para o processo de reconstrução ao lado do volume imediatamente adjacente à interface considerada.

O procedimento se baseia no trabalho de Lyra (1994), mas a maior diferença em relação ao presente trabalho encontra-se na direção em que a matriz unidimensional é construída. Segundo Lyra, a matriz para extrapolação é construída ao longo da direção da borda, além de trabalhar em um elemento finito aproximado. Em nosso caso, desde o centro da célula pelo método dos volumes finitos, a extrapolação da matriz é construída na direção normal à borda. A interpretação da idéia em 1-D é uma linha normal ao bordo e passando através do centro da circunferência circunscrita. Um terceiro ponto é localizado sobre esta linha, a uma distância do centro do círculo circunscrito igual ao seu diâmetro. O código ali identifica em qual volume de controle se encontra este terceiro ponto e usa as propriedades deste triângulo para a reconstrução linear das variáveis primitivas.

Ordenando e tornando clara a nomenclatura , os dois triângulos considerados, que são adjacentes pela borda, são denotados *i* e *k.* Os outros triângulos identificados com o processo descrito são associados com *l* e *m* conforme ilustrado na Figura (2.1) .Calculando os fluxos $E^{\pm}$, o estado esquerdo Q_L é definido usando as propriedades dos triângulos *i*, e *l*, e o estado direito Q_R os dos triângulos *k* e *m* se $\Delta y_{ik} \geq 0$, no caso em que $\Delta y_{ik} < 0$, ocorre o inverso.

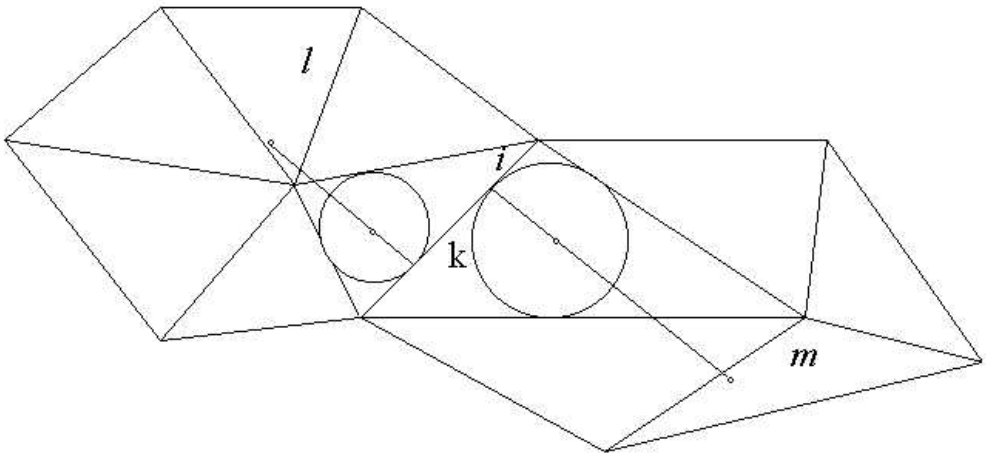


Fig. 2.1 - Extrapolação de matrizes empregando reconstrução linear de variáveis primitivas no esquema upwind de 2ª ordem.
FONTE: Azevedo e Figueira da Silva, (1997, p. 7).

Similarmente os fluxos $F^{\pm}$ usam os dados dos triângulos *i* e *l* para definir o estado esquerdo e os dados dos triângulos *k* e *m* para definir o estado direito se $\Delta x_{ik} \leq 0$ e inversamente, se $\Delta x_{ik} > 0$.

Com o procedimento já descrito, os estados variáveis são representados como elementos de composição linear dentro de cada célula ao invés de constantes. Mas, deve-se considerar uma segunda ordem no esquema de vetor de fluxo separado com o MUSCL aproximado. Nesse caso é possível a obtenção de oscilações na solução, para evitá-las, usam-se correções não lineares, chamadas limites. Por outro lado empregou-se uma função limitadora que emprega um minmod (modo mínimo) (Azevedo e Figueira da Silva, 1997) que calcula os raios de variações consecutivas. Esta função é definida da seguinte forma:

$$r^{-} = (\xi,\eta,\zeta,\omega) = \frac{\zeta - \xi}{\xi - \eta},$$
$$r^{+} = (\xi,\eta,\zeta,\omega) = \frac{\zeta - \xi}{\omega - \zeta}, \tag{2.34}$$

Os limitadores podem ser denotados por ϕ^{-} e ϕ^{+}, que podem ser escritos no caso minmod como:

$$\phi^{\pm} = \phi(r^{\pm}) = \begin{Bmatrix} \min(r^{\pm},1) & \text{se } r^{\pm} > 0 \\ 0 & \text{senão} \end{Bmatrix} \tag{2.35}$$

Com a definição prévia os estados esquerdo e direito da interface podem ser escritos assim:

Para o fluxo $E^{\pm}$,

$$\Delta y_{ik} \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{Bmatrix} q_L = F^{-}(q_i, q_l, q_k, q_m) \\ q_R = F^{+}(q_k, q_m, q_i, q_l) \end{Bmatrix}$$
$$\Delta y_{ik} < 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{Bmatrix} q_L = F^{-}(q_k, q_m, q_i, q_l) \\ q_R = F^{+}(q_i, q_l, q_k, q_m) \end{Bmatrix} \tag{2.36}$$

Para o fluxo $F^{\pm}$,

$$\Delta x_{ik} \le 0 \qquad \Rightarrow \qquad \left\{ \begin{matrix} q_L = F^-(q_i, q_l, q_k, q_m) \\ q_R = F^+(q_k, q_m, q_i, q_l) \end{matrix} \right\}$$

$$\Delta x_{ik} > 0 \qquad \Rightarrow \qquad \left\{ \begin{matrix} q_L = F^-(q_k, q_m, q_i, q_l) \\ q_R = F^+(q_i, q_l, q_k, q_m) \end{matrix} \right\}$$

As funções F^- e F^+ reconstroem respectivamente os estados q_L e q_R e são dadas por:

$$\begin{aligned} F^- &= (\xi, \eta, \zeta, \omega) = \xi + \frac{\phi^-}{2}(\xi - \eta), \\ F^+ &= (\xi, \eta, \zeta, \omega) = \zeta + \frac{\phi^+}{2}(\omega - \zeta), \end{aligned} \tag{2.37}$$

onde ϕ^- e ϕ^+ são os limitadores já definidos

2.3 Condições de contorno:

As condições de contorno são essenciais para o bom desempenho do método numérico, porém o tratamento deve ser feito com muito cuidado. Uma aplicação imprópria nas fronteiras do domínio pode conduzir a soluções errôneas ou produzir instabilidade computacional (Pulliam e Steger , 1980); (Azevedo,1990). Por isso, elas devem ser consistentes com as características físicas do problema .

Em nosso caso, as condições de contorno foram implementadas empregando a técnica de volumes fantasmas (Ghost), que são volumes de controle fictícios que servem para fixar as condições de fronteira.

- Parede sólida: Na fronteira da parede sólida considerou-se o fluxo como sendo unicamente tangente à ela. Isso se consegue fazendo com que a componente da velocidade normal á parede no volume de controle fantasma tenha a mesma magnitude, porém com sinal oposto, fazendo com que a resultante das velocidades seja nula. Já na componente tangencial o critério é que ela tenha a mesma direção e o mesmo sentido. Os gradientes de pressão e temperatura são considerados nulos na parede.
- Entrada e saída: As condições na fronteira de saída do escoamento foram calculadas com o uso das relações características unidimensionais.

Para o caso das condições de entrada para escoamento subsônico as componentes cartesianas da velocidade tem que ser extrapoladas no caso de superfície livre, já para o caso de canais ou tubeiras as quantidades são conhecidas e fixadas.

- Fronteiras de simetria: Nas condições simétricas espera-se que o escoamento tenha um eixo de simetria empregando-se as condições de simetria nas variáveis apropriadas. Como no caso da parede sólida a componente da velocidade normal à linha de simetria assume a mesma magnitude mas com sinal negativo anulando esta componente. Já a componente tangencial se toma do mesmo sentido e direção.
- Fronteiras externas: Consideramos aqui os valores das propriedades não perturbadas como fixas nas regiões afastadas daquela de nosso interesse e que serão nossa fronteira externa. Para análise e construção de condições de contorno mais aproximadas da realidade física, deve-se levar em consideração a correta propagação das ondas através das fronteiras externas. Uma boa comunicação entre as fronteiras e o interior deve ser estabelecida, garantindo-se assim a influência das condições do infinito sobre o domínio computacional. Para que isso aconteça implementaram-se invariantes de Riemann, o que constitui um tipo de tratamento empregado em simulação subsônica para escoamento unidimensional normal à fronteira (Garabedian, 1964), (Jameson e Baker,1983; Long et al., 1991). Esses invariantes são:

$$R_\infty = \vec{q}_\infty \cdot \vec{n} - \frac{2}{\gamma - 1} a_\infty$$
$$R_e = \vec{q}_e \cdot \vec{n} + \frac{2}{\gamma - 1} a_e \qquad (2.38)$$

Onde $\vec{q}, a, \vec{n}$ representam respectivamente o vetor velocidade, a velocidade do som e o vetor unitário normal à fronteira. Os subscritos "∞", e "e" indicam os valores no escoamento livre e os valores nos pontos adjacentes à fronteira (extrapolados).

CAPÍTULO 3

VALIDAÇÃO DO CÓDIGO

Neste capítulo de validação pretende-se comparar a virtude do código para diferentes tipos de escoamentos, tomando-se como referências resultados teóricos e de outros códigos já aceitos na comunidade do Computational Fluid Dynamics (CFD), estabelecendo seus limites e confiabilidade.

Foi implementado um método que permite simular escoamentos internos e externos em regimes de velocidade que variam do baixo subsônico ($M_\infty = 0.05$) ao supersônico ($M_\infty = 4$) ou seja do regime incompressível ao compressível, empregando as equações de Euler linearizadas. Todas as simulações foram feitas com gás ideal como fluido de trabalho.

Os casos a seguir serão comparados com resultados analíticos e numéricos já validados.

3.1 Cilindro Circular

Escolhido por se tratar de um exemplo clássico, ele dá uma idéia do comportamento do campo de escoamento e permite esclarecer discrepâncias com o método analítico. Assim tomou-se o caso de um escoamento em regime de baixa velocidade, (M=0.05).

(go,ac,jo)Para as condições de fronteira considerou-se o cilindro e a região abaixo do plano de simetria como de paredes rígidas e o resto como fronteiras externas onde aplicaram-se os invariantes de Riemann. Na Figura 3.1 pode-se notar o aparecimento do ponto de estagnação na região esquerda do cilindro o que é esperado nestes tipos de escoamentos a baixas velocidades

Comparando-se os resultados mostrados na Figura 3.2, vemos que o escoamento a baixa velocidade sobre um cilindro é descrito de modo satisfatório no presente modelo. As diferenças (ac)em relação ao trabalho de Martins (1994) podem ser devidas à pouca estabilidade do método nesta faixa de velocidades e também por ter Martins empregado uma metodologia mais apropriada para registrar o aparecimento de oscilações de pressão chamadas na literatura de "desacoplamento pressão - velocidade" (Chen e Pletcher ,1991) .

Condições de entrada :

Nº de Iterações 0-10000 Nº de Courant -Friedrichs-Lewi = 0.002

Nº de Mach na entrada = 0.05 Relação de Pressões : 1

Esquema empregado: Jameson

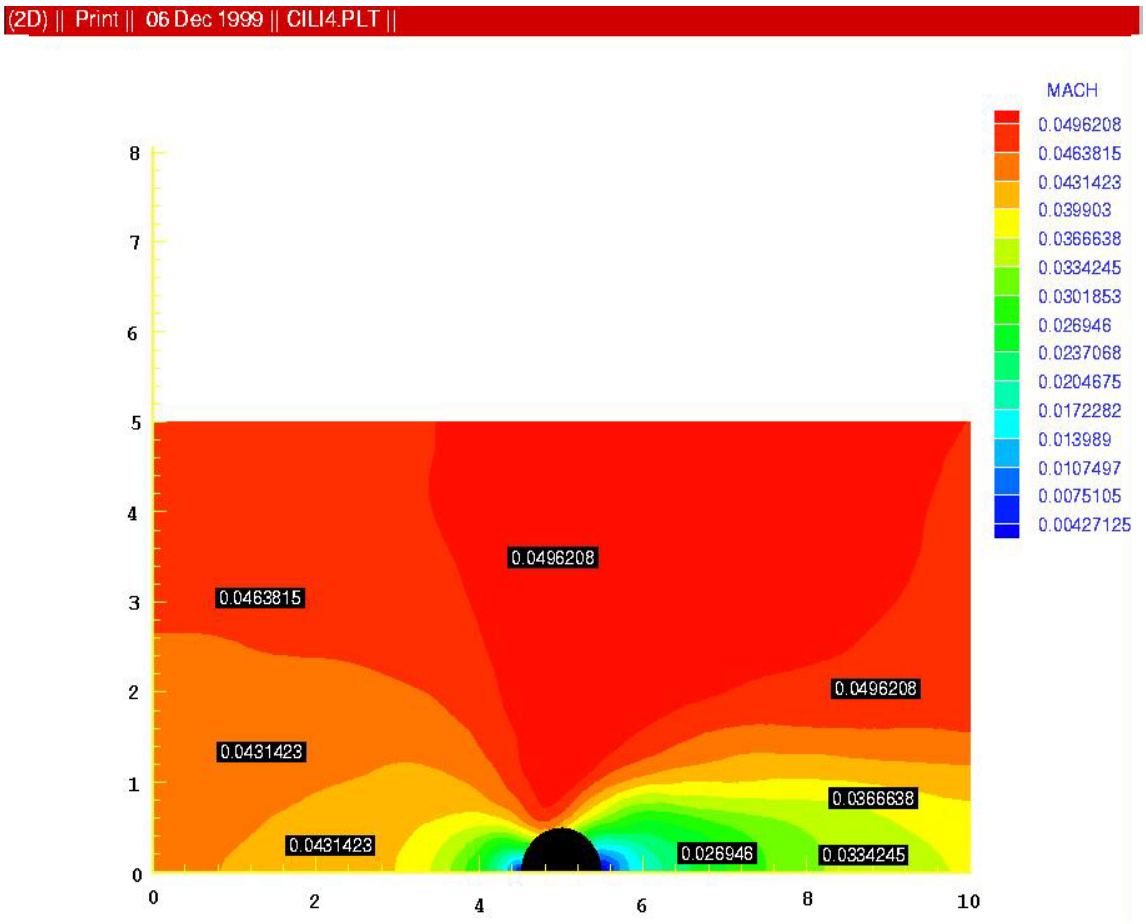


Fig. 3.1 - Perfil de velocidades para escoamento a Mach = 0.05 sobre um cilindro circular infinito.

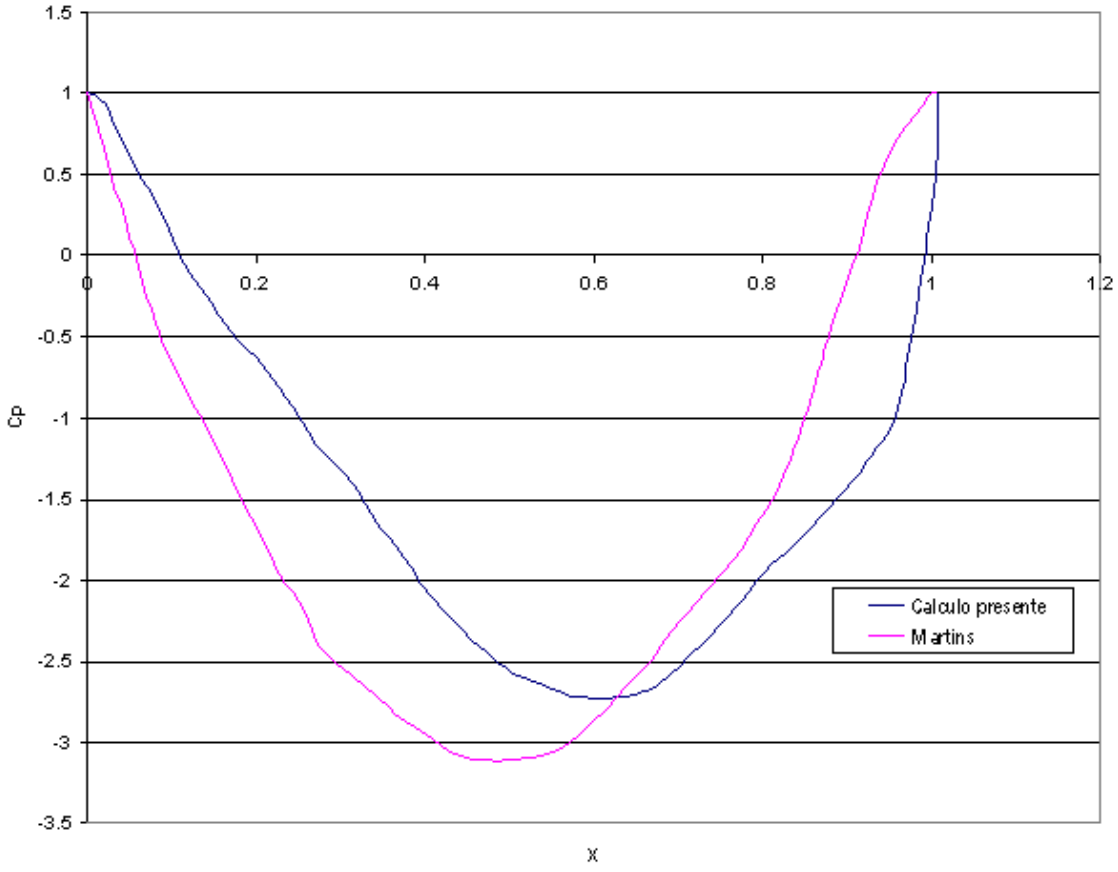


Fig. 3.2 - Distribuição do coeficiente de pressão para escoamento a Mach = 0.05 sobre um cilindro circular infinito.
FONTE: Martins, (1994).

3.2 Canal com Estreitamento

Esta geometria representa um primeiro passo para a simulação do perfil de uma tubeira, pois aqui teremos velocidade transônica na saída do canal. Note-se que desta feita, o escoamento é interno.

As condições de contorno para esta simulação são: parede rígida na parte inferior com uma inclinação de 10.2º e parede rígida na parte superior, entrada subsônica. Se as condições de entrada forem tais que na saída o escoamento seja sônico, então o escoamento mostrado aproxima-se muito do desejado, inclusive pelo fato de apresentar uma zona de entrada paralela, i.e., não convergente e o escoamento apresentando uma queda de velocidade e pressão como visto nos Gráficos 3.3 e 3.4.

Condições de entrada :

Nº de Iterações 0-10000 Nº de Courant -Friedrichs-Lewy = 0.15

Nº de Mach na entrada = 0.652814 Relação de Pressões : 0.07223511919

Esquema empregado: Van Leer de 1ª Ordem

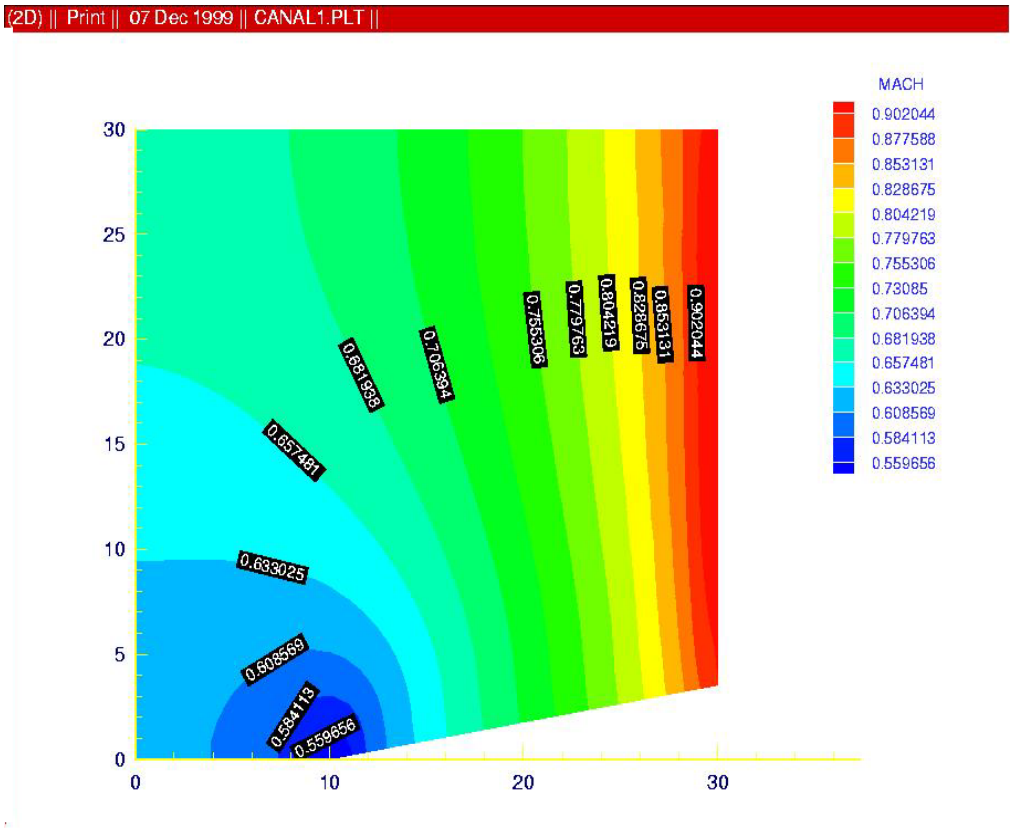


Fig. 3.3 - Perfil de velocidade num canal com estreitamento na direção da saída do escoamento.

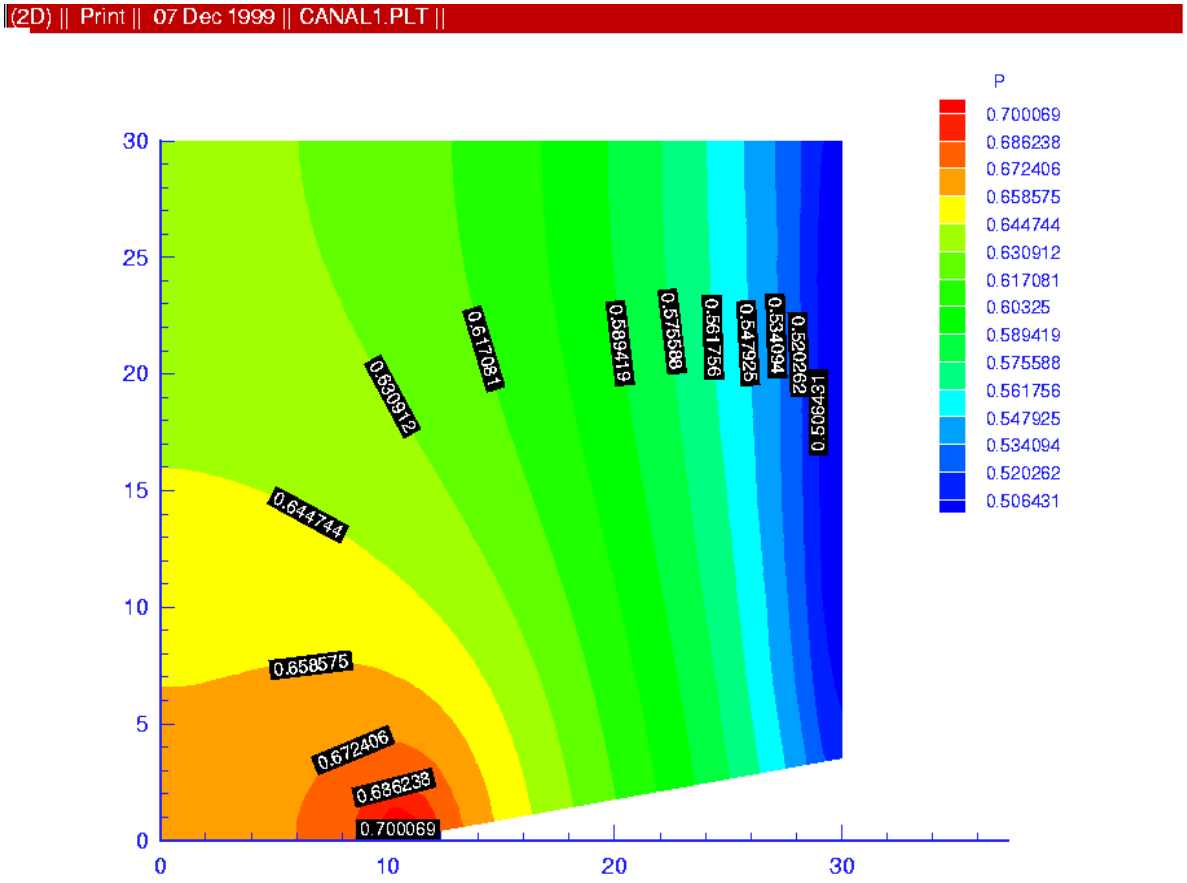


Fig. 3.4 - Perfil de Pressão num canal com estreitamento na direção da saida do escoamento.

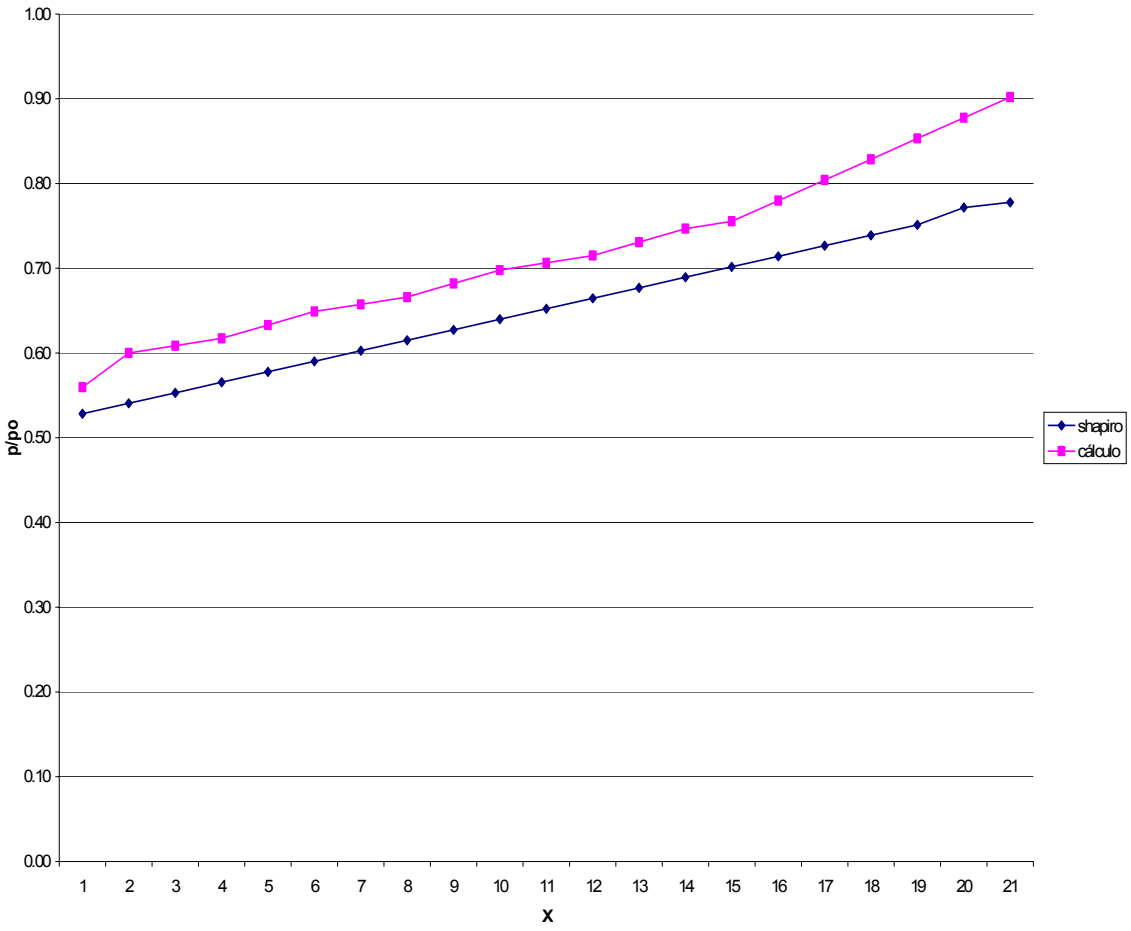


Fig. 3.5 - Distribuição de pressão no escoamento interno num canal com estreitamento a juzante. Comparação do presente código com resultados teóricos de Shapiro , (1957)

Observando os resultados do presente modelo com aqueles obtidos por Shapiro (1957) no caso de condições isentrópicas, vê-se que ele é satisfatório também para o escoamento num canal com estreitamento a jusante.

3.3 Cunha Aerodinâmica

Para obtermos uma aproximação do que ocorre num escoamento totalmente supersônico, simulamos uma cunha aerodinâmica em escoamento aberto com inclinação de 10.2º, com escoamentos a montante com números de Mach 2 e 4, respectivamente. Em ambos os casos, como esperado, capturamos a onda de choque, com inclinação de 39.29º para Mach 2 e de 23.25º para Mach 4 em relação à seção horizontal da cunha . Em ambos casos a malha utilizada e os dados de entrada foram os mesmos.

Nas condições de contorno empregou-se parede rígida na zona inferior e superfície livre nas demais fronteiras. Na condição de contorno das superfícies livre usou-se o método das características com o critério de invariantes de Riemann em uma malha de 2054 volumes refletindo uma boa aproximação na zona do choque para a descontinuidade como mostra a Figura 2.6.

Foram utilizados os métodos de Van Leer de primeira ordem, Gráficos 3.7 e 3.9 e de segunda ordem Gráficos de 3.8 e 3.10. Como se pode ver a descontinuidade apresenta-se sem nenhuma alteração tanto no esquema de 1ª como no de 2ª ordem o que demonstra que os esquemas empregados foram bem sucedidos. Para determinar qual era a diferença na aproximação analisaram-se os resultados de cada um deles. O método mais preciso foi o de Van Leer de 2ª ordem, (jo,ac,go,gu)pois lá pode-se apreciar uma região menor representando a descontinuidade em comparação ao esquema de 1ª ordem. No caso do escoamento a Mach = 4 ele atinge uma região mais refinada e consegue melhorar a descontinuidade representando a onda de choque com uma região mais estreita no esquema de 2ª.ordem Na Figura 3.11 comparamos os resultados do código empregando o método de Van Leer de 1ª. Ordem num escoamento a Mach 4 com aqueles do código de Martins, já validado, observando-se a boa performance em relação a solução analítica. A melhor aproximação pode ser explicada pelo fato de que a solução empregada nesta parte, não possui esquemas de grande difusão numérica como o de Martins (1994). Porém por não ter sido usado dissipadores artificiais, vê-se que a metodologia de volumes finitos atinge melhor a solução, o que demonstra uma maneira apropriada de desenvolver o problema . Na Figura 3.12 compara-se os resultados do código para a pressão usando ambos os métodos de Van

Leer (i.e., o de 1ª. e o de 2ª. Ordem) com o analítico, para um escoamento a Mach 2, Observou-se uma melhor aproximação à solução analítica no esquema de Van Leer de 2ª Ordem. Assim estabeleceu-se o potencial do código para sistemas neste regime de velocidade.

Indiscutivelmente foi necessário um bom refinamento da malha na zona onde está contida a onda, pois do contrário a mesma não se aproximaria de uma descontinuidade. O sistema não estruturado deu esta possibilidade propiciando também uma maior aproximação na solução numérica.

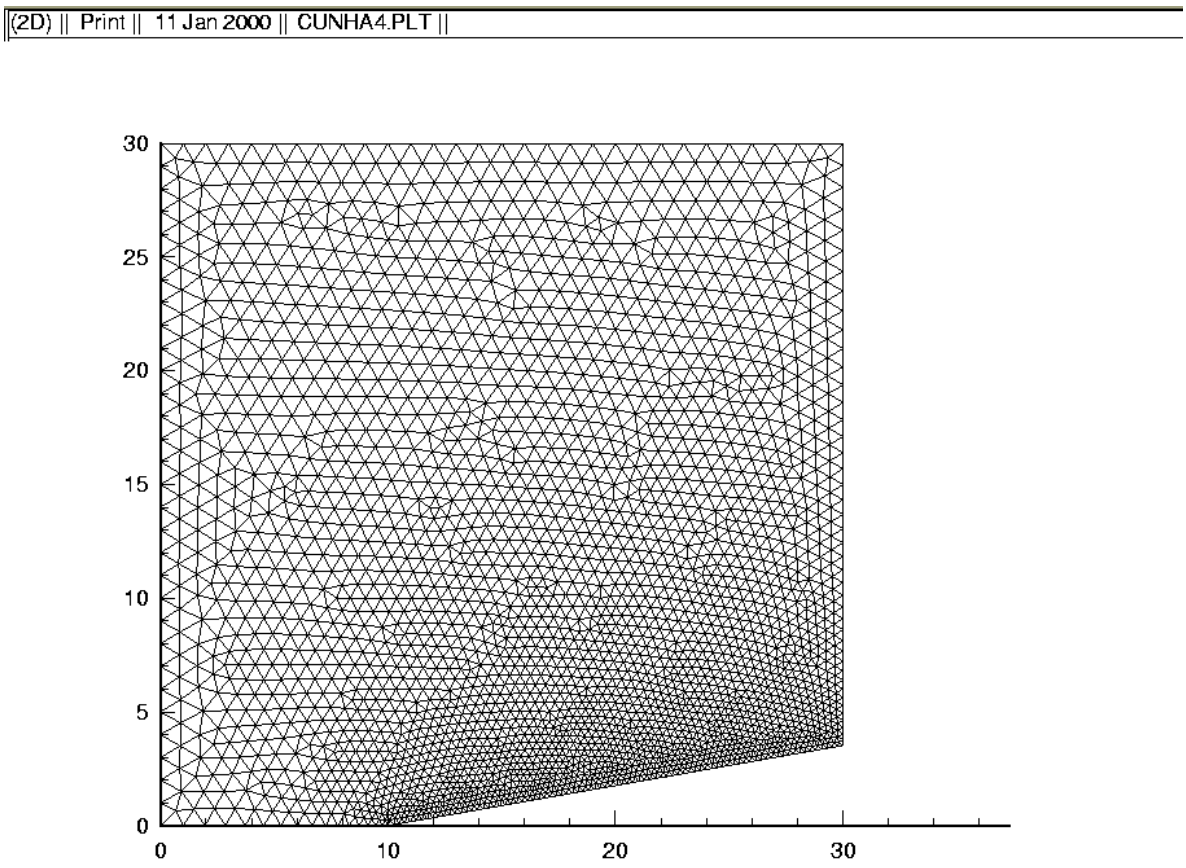


Fig. 3.6 - Malha não estruturada refinada na região do choque para obter uma melhor aproximação da descontinuidade.

Condições de entrada

Nº de Iterações 0-15000 Nº de Courant -Friedrichs-Lewy = 0.002

Nº de Mach na entrada = 2 Relação de Pressões : 1.0

Esquema empregado: Van Leer de 1ª ordem

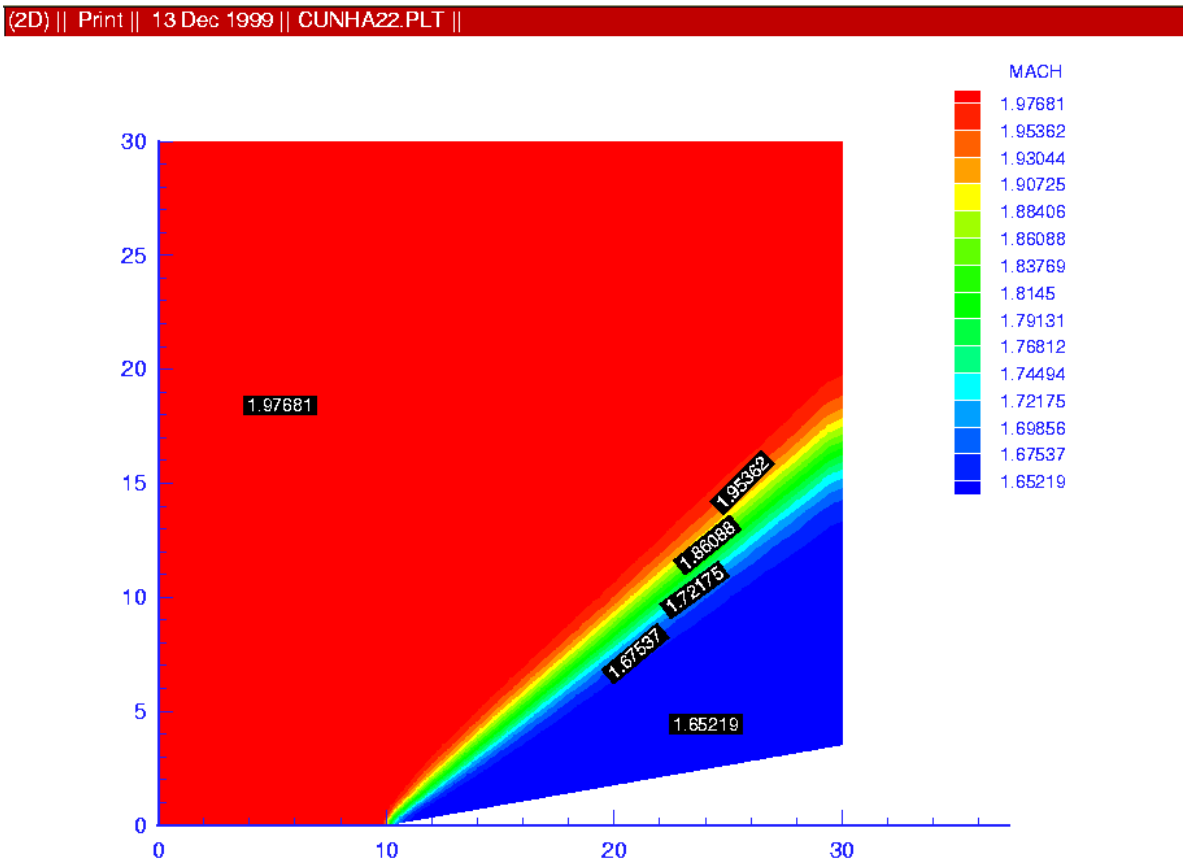


Fig. 3.7- Perfil de velocidades para uma cunha aerodinâmica Mach = 2 empregando o esquema de Van Leer de primeira ordem.

Condições de entrada :

Nº de Iterações 0-10000 Nº de Courant -Friedrichs-Lewy = 0.002

Nº de Mach na entrada = 2 Relação de Pressões : 1.0

Esquema empregado: Van Leer de 2ª ordem

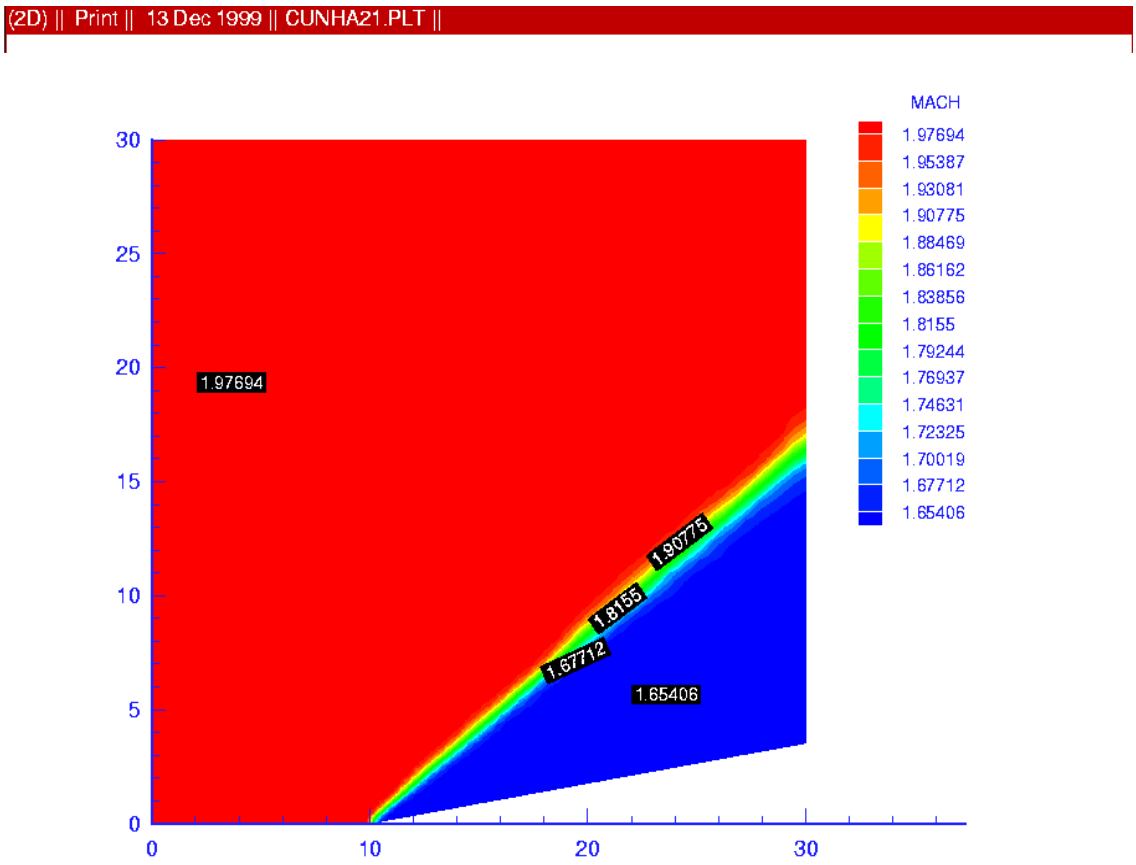


Fig. 3.8 – Perfil de velocidades numa cunha aerodinâmica Mach = 2 empregando o esquema de Van Leer de segunda ordem.

Condições de entrada :

Nº de Iterações 0-10000 Nº de Courant -Friedrichs-Lewy = 0.002

Nº de Mach na entrada = 4 Relação de Pressões : 1.0

Esquema empregado: Van Leer de 1ª ordem

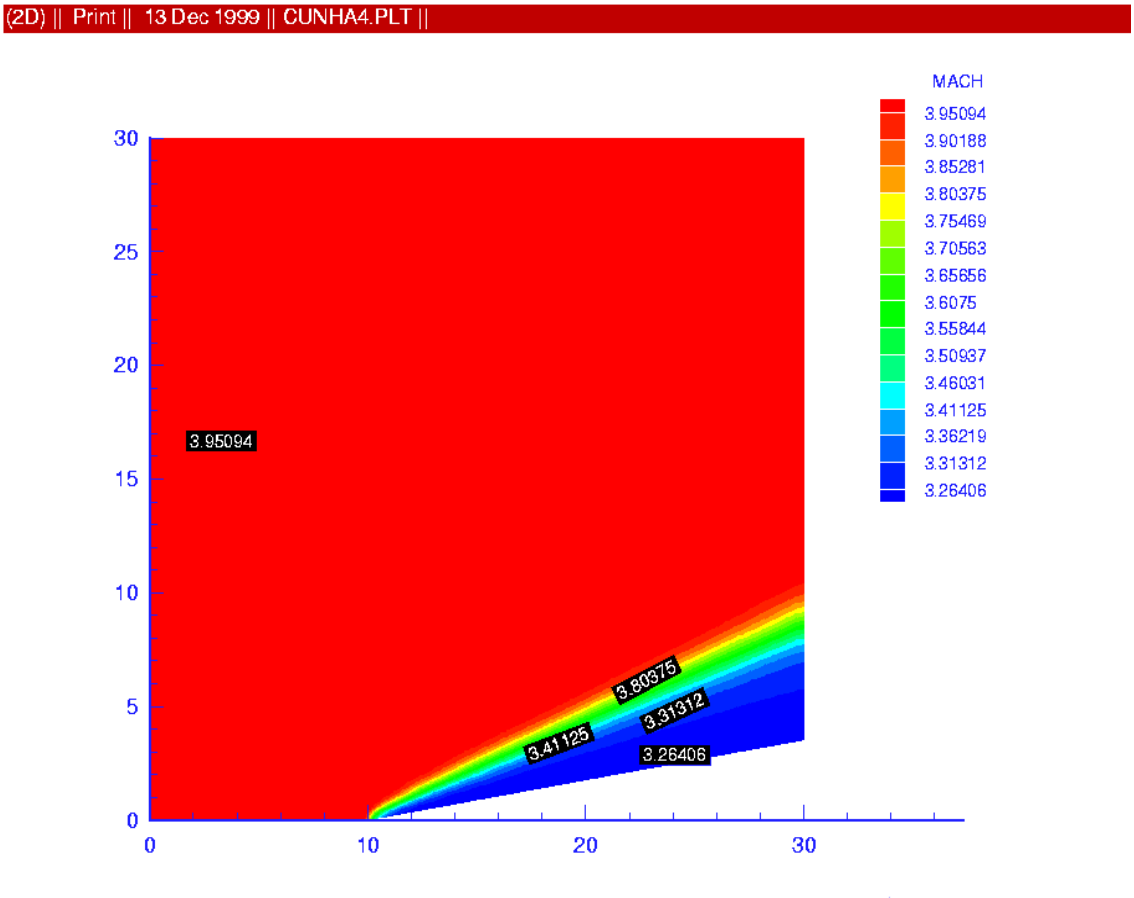


Fig. 3.9 - Perfil de velocidades para o escoamento sobre uma cunha aerodinâmica Mach = 4 empregando o esquema de Van Leer de primeira ordem.

Condições de entrada :

Nº de Iterações 0-10000 Nº de Courant -Friedrichs-Lewy = 0.002

Nº de Mach na entrada = 4 Relação de Pressões : 1.0

Esquema empregado: Van Leer de 2ª ordem

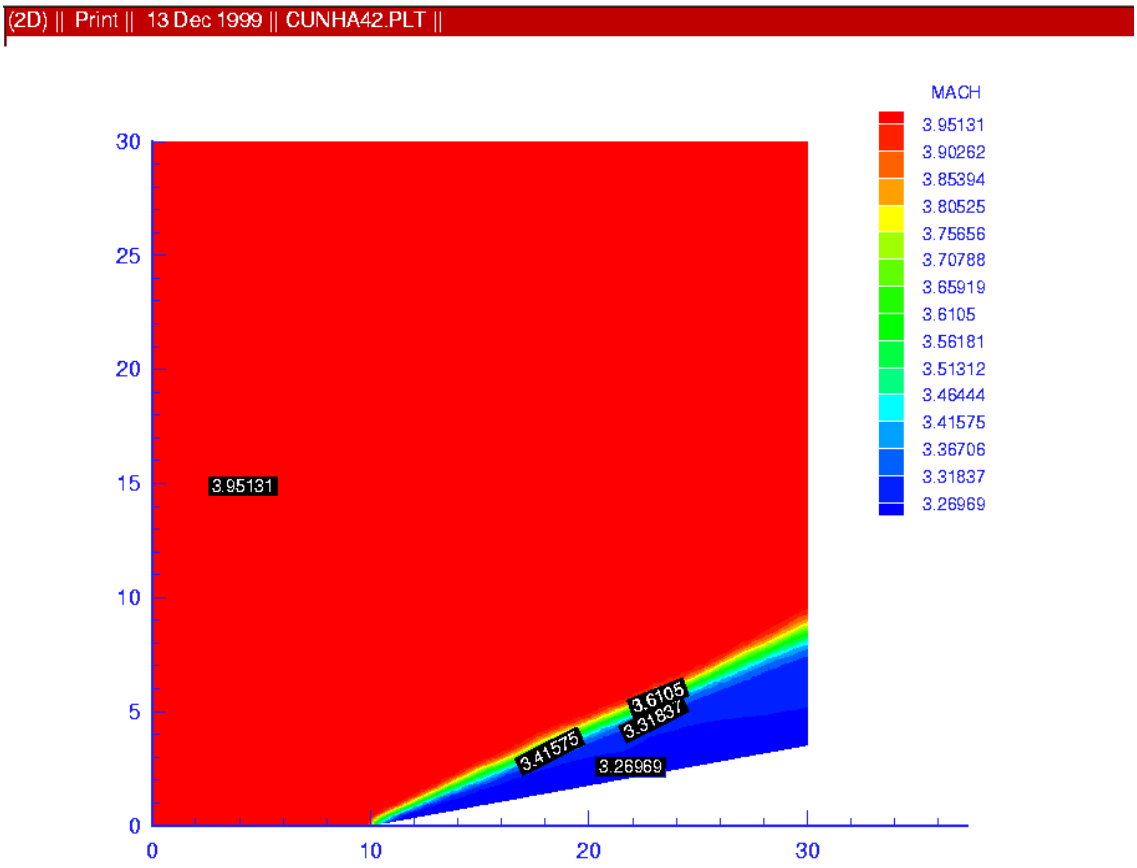


Fig. 3.10 - Perfil de velocidades para o escoamento sobre uma cunha aerodinâmica a M = 4 empregando o esquema de Van Leer de segunda ordem.

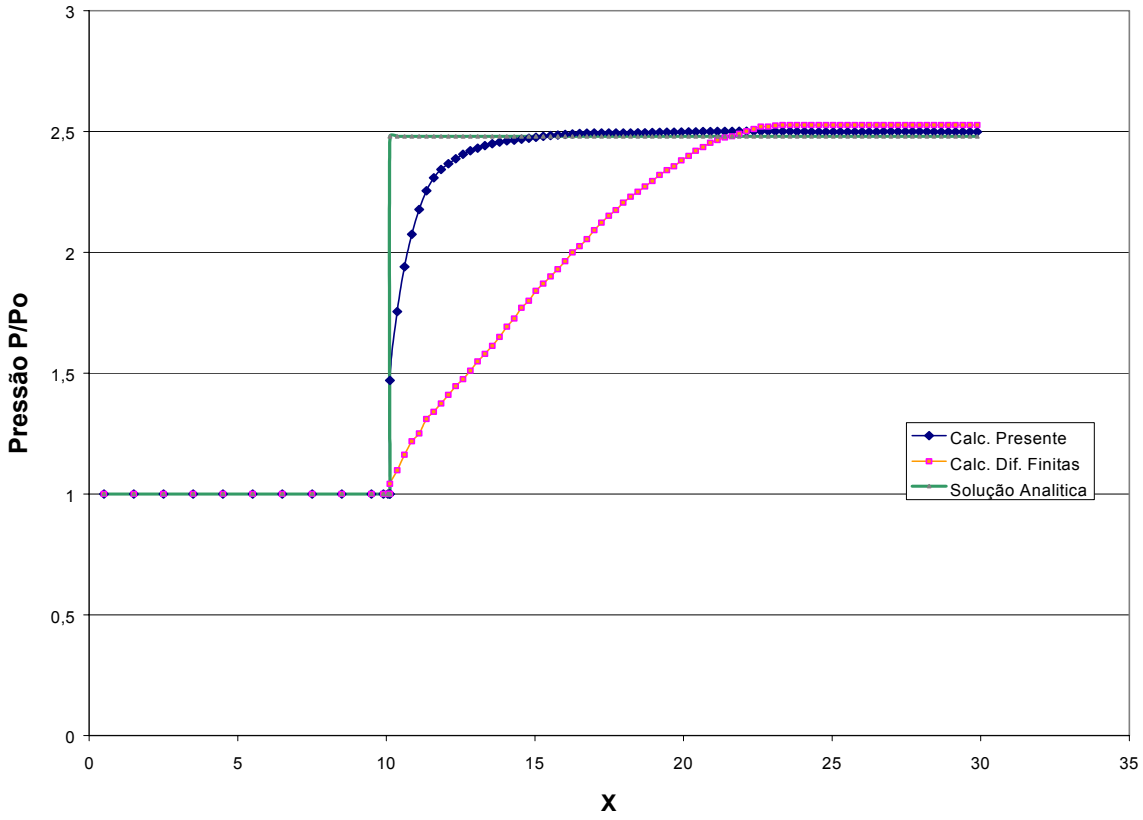


Fig. 3.11 - Comparação do perfil de pressões sobre a parede entre este código e o de Martins (diferenças finitas 1994), para Mach=4.

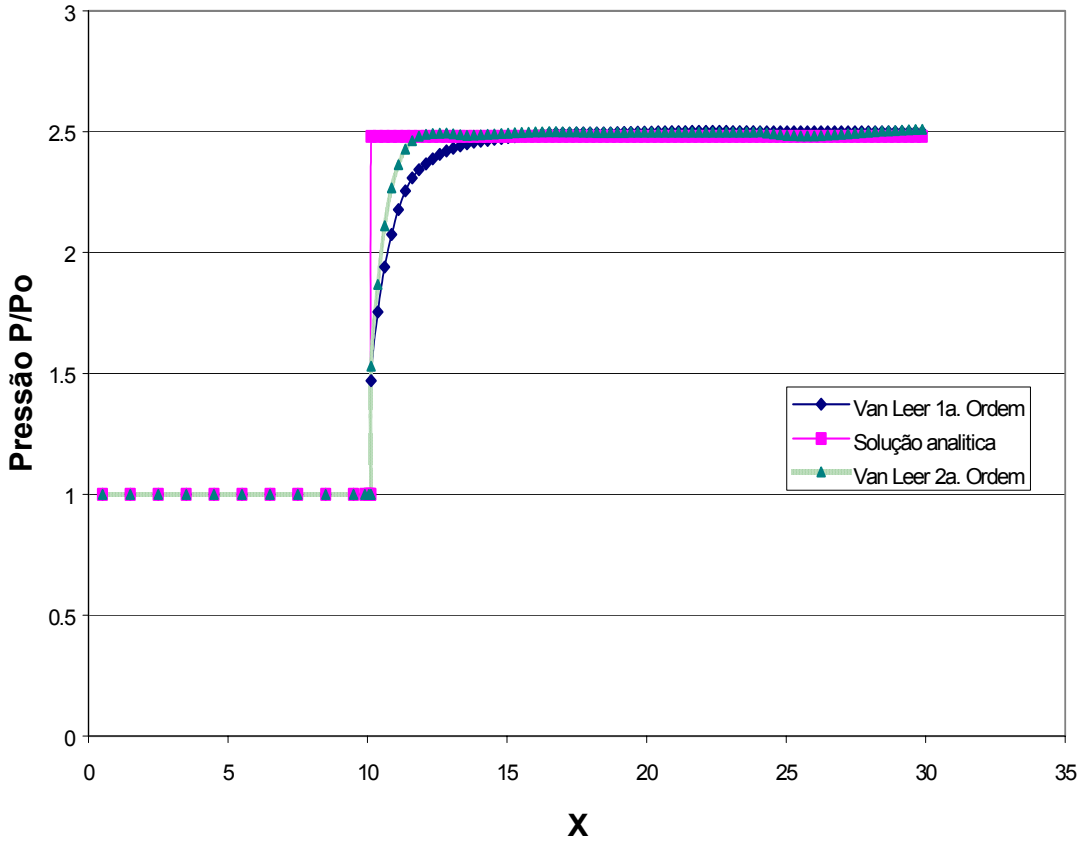


Fig. 3.12 - Diferença entre os métodos de Van-Leer de 1ª e 2ª ordem para uma distribuição da pressão, p/p_∞ , em escoamento supersônico. M = 4.0

3.4. Bocal Subsônico-Supersônico

Este dispositivo se aproxima muito da tubeira do propulsor que se pretende simular, que é do tipo De Laval, obtendo-se assim uma boa aproximação do comportamento do escoamento. O emprego deste tipo de bocal se deve à sua versatilidade em problemas desta natureza, e por que é fácil comparar resultados com os principais trabalhos publicados a respeito. A malha empregada nesta parte consta de 2936 volumes. Usou-se refinamento na zona da garganta como pode-se ver na Figura 3.13 Nas condições de fronteira usou-se parede rígida na parte superior e linha de simetria na parte inferior com as condições de entrada subsônicas e as de saída supersônicas. Neste modelo, o que mais ressalta é a configuração do número de Mach na vizinhança da garganta, muito próxima da realidade (Figuras 3.14 e 3.15). Além disso, a transição da configuração para a região divergente é bem sucedida, obtendo-se, como esperado, o escoamento supersônico na saída. A solução de maior precisão é a de 2ª ordem pois ela aproxima-se mais do valor sônico na região da garganta do que a solução de 1ª ordem, embora apresentando uma queda em relação ao número de Mach.

As condições de entrada para este escoamento totalmente interno são adimensionalisadas, usam-se como referência o valor da razão de áreas (A_i /A_t) i.e., entre a área da garganta, A_t , e a área de entrada (i = 1) ou a área de saída (i = 3) , que nos conduz à obtenção do valor do número de Mach pela relação:

$$\frac{A}{A_t} = \frac{1}{M}\left[\left(\frac{2}{\gamma+1}\right)\left(1+\frac{\gamma-1}{2}M^2\right)\right]^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}}$$

Com o valor do número de Mach = 0.23236 calculamos o valor da pressão local

$$\frac{p_0}{p} = \left[1+\frac{\gamma-1}{2}M^2\right]^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}$$

Onde γ é a razão dos calores específicos, aqui igual a 1.4

A seguir calculam-se as pressões na entrada e na saída do bocal com seus respectivos números de Mach, tendo como valores conhecidos as áreas daquelas seções. Assim para a saída o número de Mach calculado foi de 1.3494. :

$p_{entrada} = 0.96310$ atm.

$p_{saida} = 0.337296$ atm.

Daí,

$p_{saida} / p_{entrada} = 0.35022$

Na solução numérica pode-se apreciar como o modelo reflete a transição da velocidade que vai do subsônico ao supersônico sugerindo que o código é capaz de simular os regimes de velocidade na faixa proposta.

Quanto às comparações pode-se reforçar o critério de validade, comparando-se os resultados dos valores obtidos nas seções do bocal com aqueles esperados ou achados na literatura, embora o valor mais importante seja aquele mostrado na Figura 3.16. Nesta comparação mostra-se que a curva de pressões na parede se aproxima dos resultados obtidos por Martins (1994) que por sua vez foi comparado com o de Beam e Warming (1978) embora o método usado leve à divergência em alguns pontos, principalmente na região da garganta onde se apresentam as maiores diferenças o que é explicado pela diferente metodologia empregada na obtenção da solução numérica .

A presente técnica permite apreciar melhor a oscilação da pressão logo após a garganta devido ao choque oblíquo fraco (Back e Cuffel 1966). Esta oscilação é um efeito local, causado pelo súbito encontro do escoamento, com a parede convergente. Não há choque forte no escoamento, mas somente um choque obliquo fraco, que começa na interseção da garganta com a seção reta divergente. Quando o escoamento atinge a linha da parede da seção divergente ocorre uma recompressão local que só pode vir acompanhada por uma onda de choque quando o escoamento passa a ser supersônico.

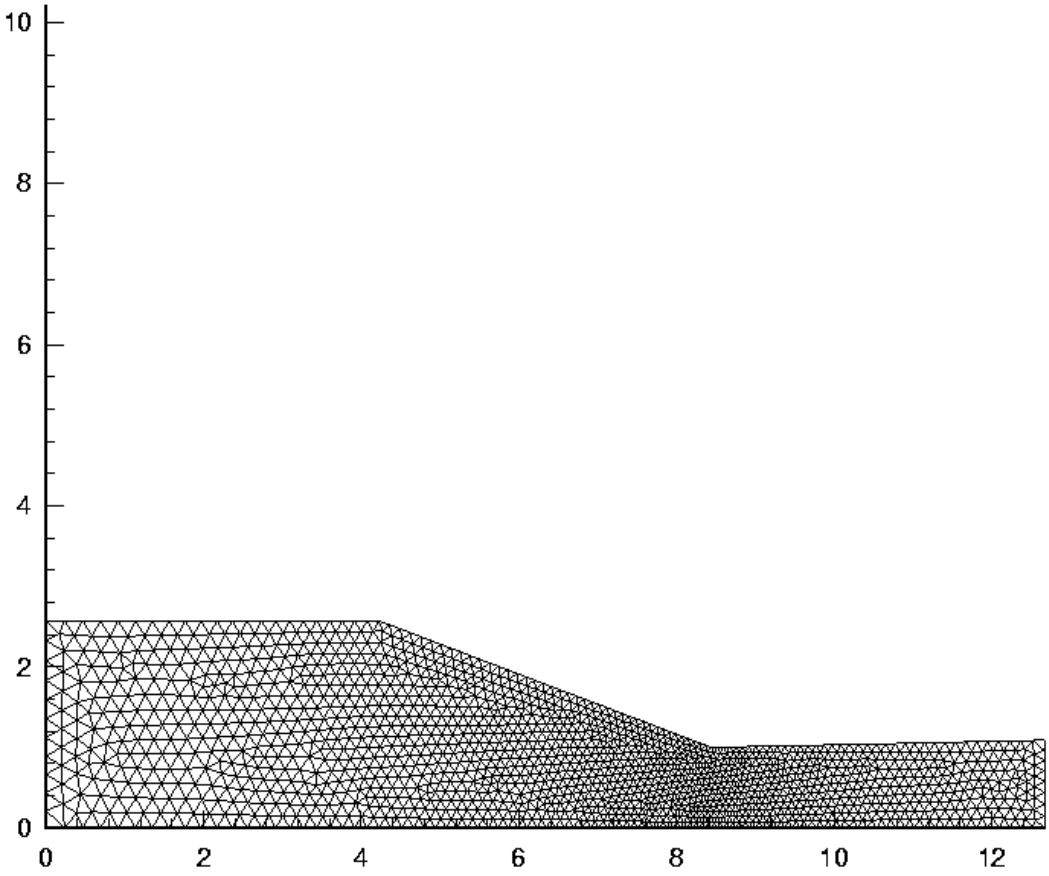


Fig. 3.13 - Malha empregada na simulação numérica do bocal convergente divergente

Condições de entrada :

Nº de Iterações 0-10000 Nº de Courant -Friedrichs-Lewy = 0.002

Nº de Mach na entrada = 0.23236 Relação de Pressões : 0.35022

Esquema de Van Leer de 1ª ordem

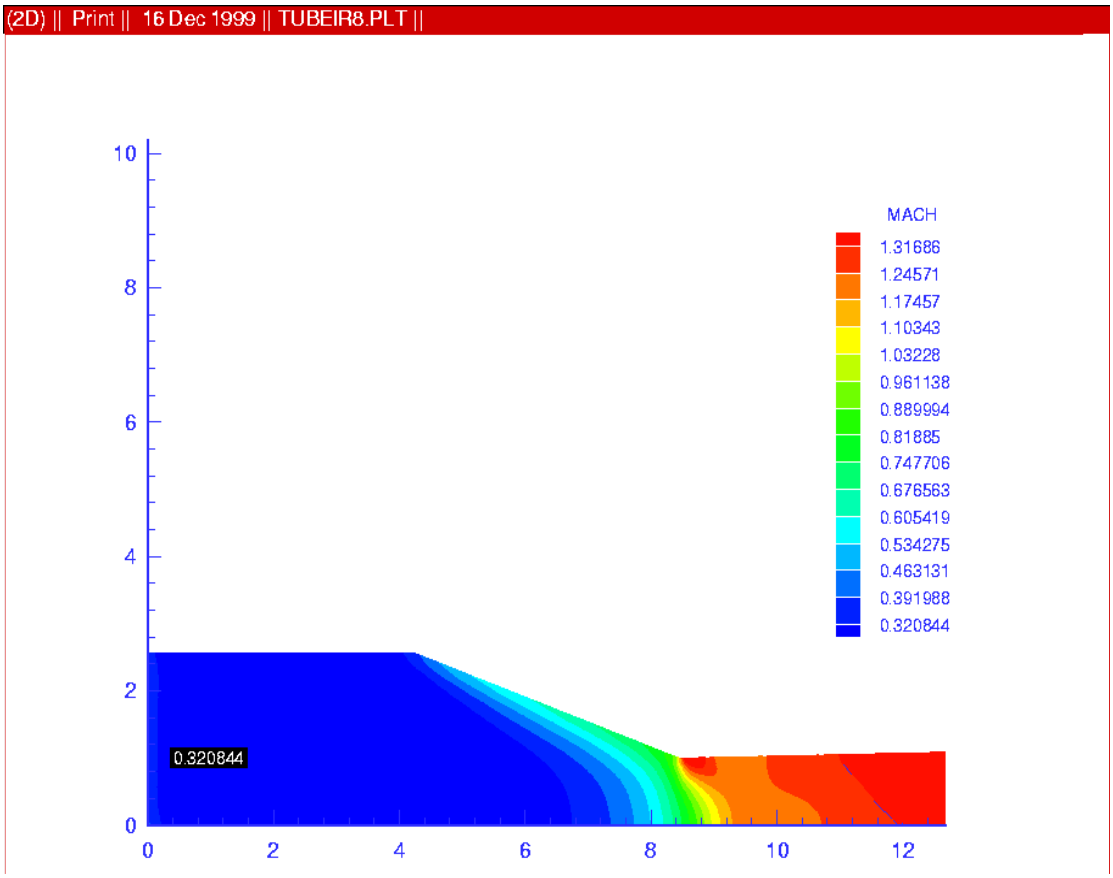


Fig. 3.14 - Perfil de velocidades para um bocal Convergente – Divergente I

Condições de entrada :

Nº de Iterações 0-10000 Nº de Courant -Friedrichs-Lewy = 0.002

Nº de Mach na entrada = 0.232356 Relação de Pressões : 0.35022

Esquema de Van Leer de 2ª ordem

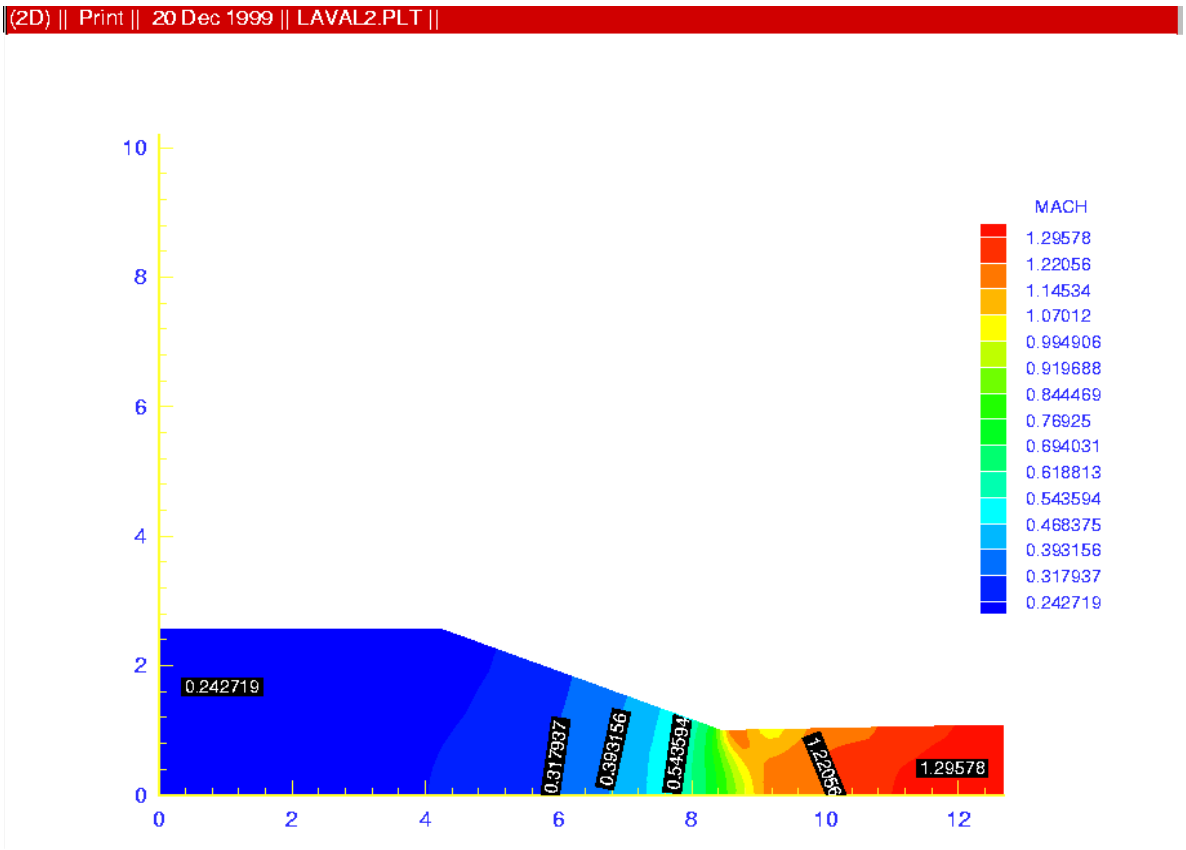


Fig. 3.15 - Perfil de velocidades para um bocal convergente - divergente II.

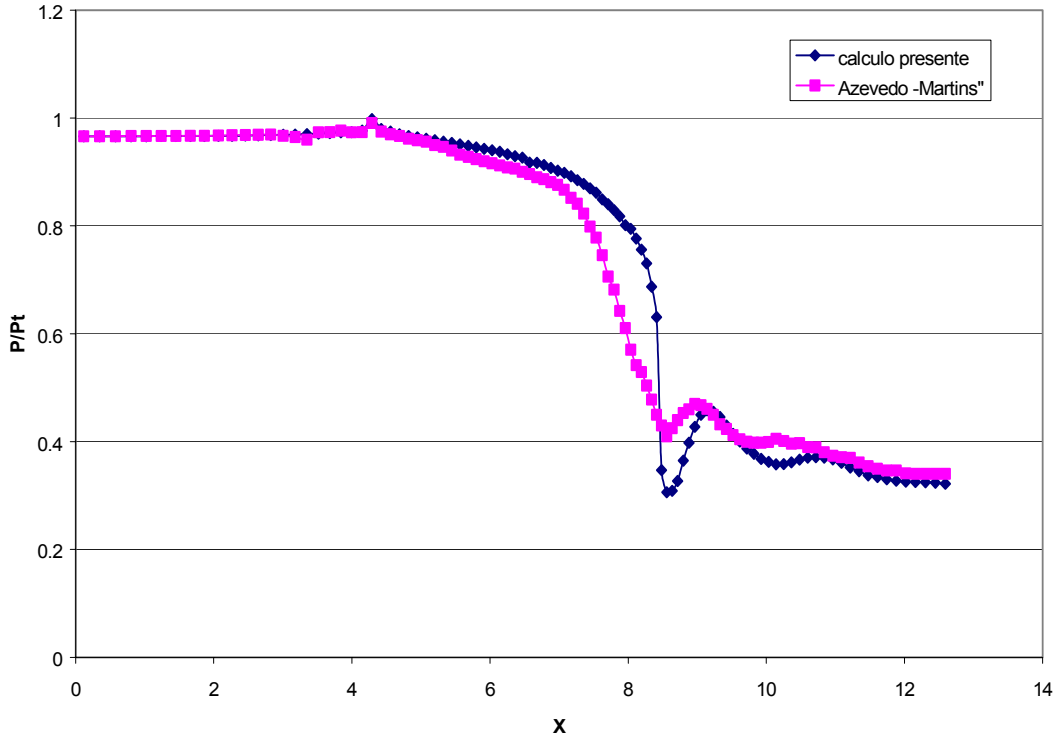


Fig. 3.16 - Comparação do perfil de pressões sobre a parede no bocal convergente para o trabalho presente e o de Martins(1994) para o esquema de van Leer de primeira ordem.

CAPÍTULO 4

PROCEDIMENTO PARA O PROJETO DE MOTOR FOGUETE

Tendo em vista o fato de o coeficiente de empuxo ser um parâmetro de fácil determinação com o emprego de códigos computacionais tais como o NASA SP-273 (Gordon, McBride,1971) ele é tomado como ponto de partida no presente trabalho.

4.1 Cálculos preliminares

Da definição de coeficiente de empuxo C_f:

$$C_f = \frac{F}{A_t p_c} \tag{4.1}$$

Onde:

F = empuxo

A_t = Área da garganta da tubeira

P_c = Pressão na câmara do motor

Que, para qualquer altitude, pode ser escrita como:

$$C_f = \sqrt{\frac{2\gamma^2}{\gamma-1}\left[\frac{2}{\gamma+1}\right]^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}}\left[1-\left(\frac{p_e}{p_c}\right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}\right]} + \varepsilon\left[\frac{p_e - p_a}{p_c}\right]$$

(4.2)

Onde:

γ : Razão dos calores específicos

C_f : Coeficiente de empuxo

ε : Razão de expansão área no plano de saída/ área da garganta, i.e., $\varepsilon = A_e/A_t$.

A_e : área no plano de saída

A_t : área da garganta

p_e : Pressão no plano de saída da tubeira

p_a :Pressão ambiente.

Tomando-se

p_c = 25 atm.

$$\varepsilon = \frac{A_e}{A_t} = 50$$

então

p_e = 0.032834 atm. (NASA SP-273)

e

γ = 1.2911 (NASA SP-273)

Com os dados podemos calcular o C_f da Equação 4.2 obtendo-se

$$C_f = 1.8077$$

E da Equação 4.1

$$C_f = \frac{F}{A_t \times P_c}$$

Para um empuxo de 200 N queremos uma seção de garganta tal que (Equação 4.2)

$$A_t = \frac{F}{C_f \times P_c} = \frac{200N}{1.8077 \times 25atm. \times 101325 \frac{N}{m^2 atm.}} = 4.3676x10^{-5} m^2$$

Para uma tubeira de seção circular,

$$D_t = \sqrt{\frac{4A_t}{\pi}} = 7.4572x10^{-3}$$

$$R_t = 3.7286x10^{-3} m = 3.7286mm.$$

A razão de contração , ε_c é determinada a partir de sua definição,

$$\varepsilon_c = \frac{A_c}{A_t}$$

Onde:

A_c: Área da câmara

A_t: Área da garganta

Obtém-se a partir do Gráfico 4.1

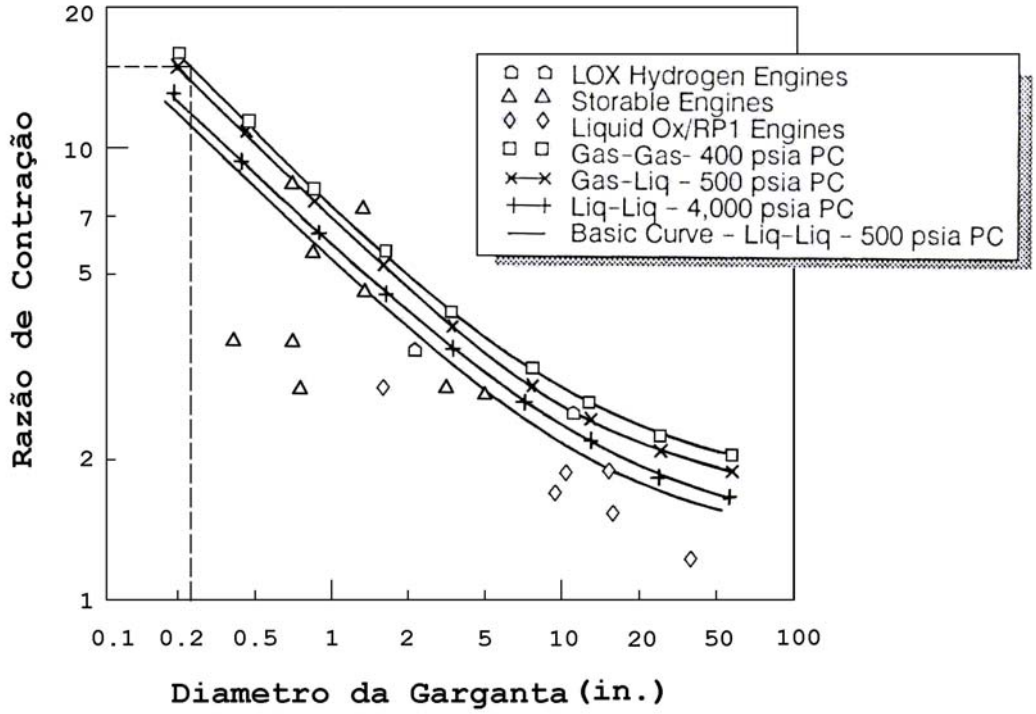


Fig. 4.1 - Relações da Razão de Contração usadas no problema de escala FONTE: Huzel e Huang (1992).

Na Fig.4.1 vê-se que com um diâmetro da garganta D_t = 7.4572 mm. ≅ 0.29 in. e com um combustível liquido - gasoso a 25 atm. = 368 psia. tem-se ε_c = 17 na curva de 400 psia (27.21 atm)
Usando o Gráfico (4.2) e tomando 368.5 psia para pressão na câmara, obtém-se o comprimento da câmara, L_c

$$Lc = 2.1 \times 25.4 = 53.34 \text{ mm.}$$

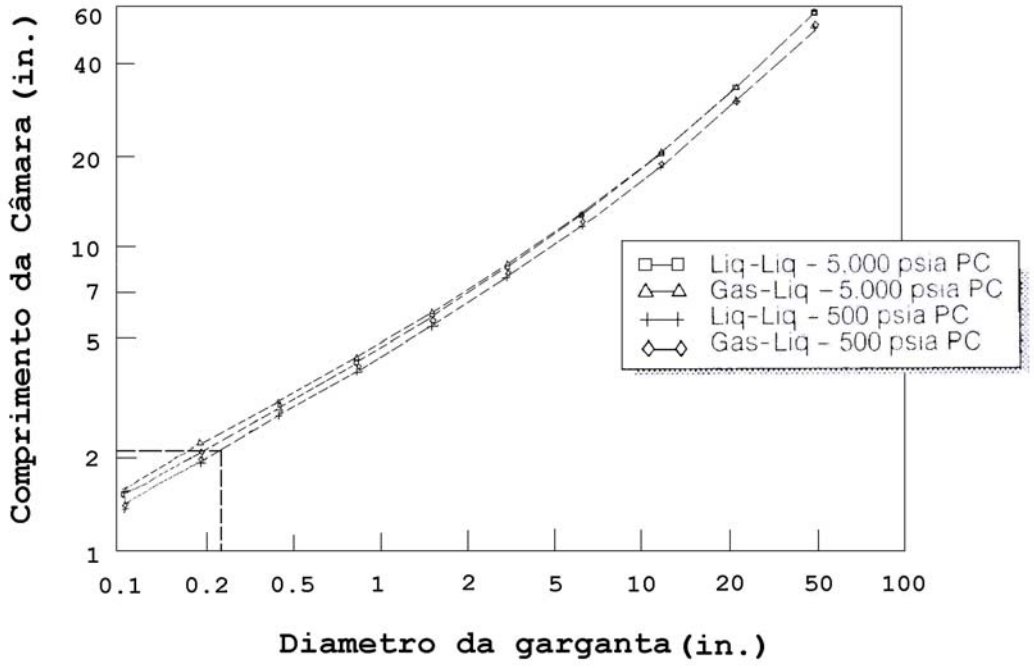


Fig. 4.2 - Relações de Comprimento da Câmara (in.) vs Diâmetro da Garganta (in.) para diferentes propelentes e pressões.
FONTE: Huzel e Huang (1992).

Cálculo da área de saída :

$$\varepsilon = \frac{A_e}{A_t} = 50 \qquad (4.3)$$

A_e = 50 x 4.3676x10^{-5} = 2.1836x10^{-3} m

Diâmetro e raio de saída:

$$D_e = \sqrt{\frac{4Ae}{\pi}} = 52.73\text{x}10^{-3} \text{ m.}$$

$$R_e = 26.365 \text{ mm.}$$

4.2 Aproximação da Curvatura de uma Tubeira tipo "Bell"

Um conveniente projeto para um ótimo empuxo é a aproximação parabólica sugerida por G.V.R.Rao (Huzel e Huang, 1992). Este projeto é mostrado na Figura 4.3. Nela, os contornos que chegam nà garganta é formado por arcos circulares de raios R_t concordantes sobre a mesma, indo até o ponto N. A curva seguinte, indo até a saída E, é uma parábola.

Os dados requeridos para o projeto são o diâmetro da garganta, o comprimento axial da tubeira, da garganta até o plano de saída L_n, a razão de áreas de expansão ε, angulo inicial da parábola θ_n e o ângulo de saída θ_e.

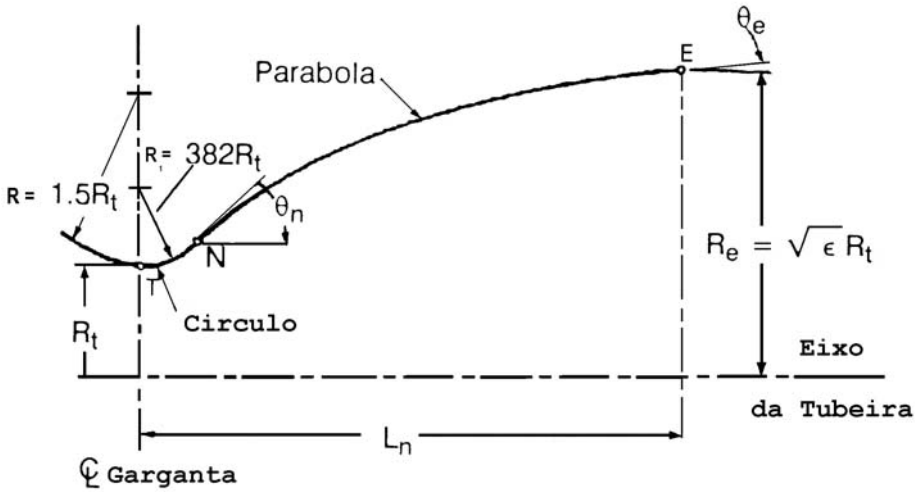


Fig. 4.3 - Aproximação parabólica do contorno de uma tubeira tipo "bell".

Usando-se a Fig.4.3 obtém-se:

R = 1.5 R_t = 1.5 x 3.7286 mm. = 5.5929 mm. (Huzel e Huang 1992, p82)

R = 0.382 R_t = 1.4243mm.

Tomando-se α = 20º (Figura 4.4) na parte convergente e ε_c = 17 e o diâmetro e raio da câmara ficam:

$$D_c = \sqrt{\varepsilon_c}\,\mathrm{x}\,D_t = \sqrt{17}\,\mathrm{x}\,7.4572 = 30.7468\ m.$$

R_c = 15.3734 mm.

Considerando-se a parte convergente da tubeira como um cone truncado então o comprimento desse cone será:

$$L_{cone} = \frac{R_t(\sqrt{\varepsilon_c} - 1) + R(\sec\alpha - 1)}{tg\alpha} \qquad (4.4)$$

$$L_{cone} = \frac{3.7286(\sqrt{17} - 1) + 5.9293(\sec 20° - 1)}{tg\,20°}$$

$$L_{cone} = 33.03935mm.$$

O volume do cone truncado é dado por :

$$V_{cone} = \frac{\pi}{3}33.03935\left[15.3734^2 + 3.7286^2 + 3.7286\mathrm{x}15.3734\right]$$

V_{cone}= 10641.3623 mm^3

Por outro lado o volume da câmara mais o do cone truncado é:

$$V_{c1} = A_t\left[L_c\varepsilon_c + \frac{1}{3}\sqrt{\frac{A_t}{\pi}}ctg20°(\varepsilon_c^{1/3} - 1)\right] \quad (4.5)$$

$$V_{c1} = 4.3676x10^{-5}\left[53.34x10^{-3}x17 + \frac{1}{3}\sqrt{\frac{4.3676x10^{-5}}{\pi}}ctg20°(17^{1/3} - 1)\right]$$

V_{c1} = 39838.8685 mm^3

Obtendo-se o volume da câmara da diferença de V_{c1} e V_{cone}

V_c= (39838.8685-10641.3623) mm^3=29197.5062 mm^3

Finalmente o comprimento da câmara é :

L_c = 39.3238 mm.

Sendo que distância entre o plano da placa de injetores e a garganta é como mostrada na Figura 4.4:

$L_r = L_{cone} + L_c$ = 72.36318

O comprimento da tubeira L_n pode ser encontrado a partir da Figura 4.3 e das recomendações de Huzel- Huang (1992) que tomam 80% do comprimento da tubeira cônica de 15º de angulo médio:

$$L_n = 0.8\left[\frac{R_t(\sqrt{\varepsilon} - 1) + R(\sec 15° - 1)}{tg15°}\right] \quad (4.6)$$

L_n = 67.73 mm.

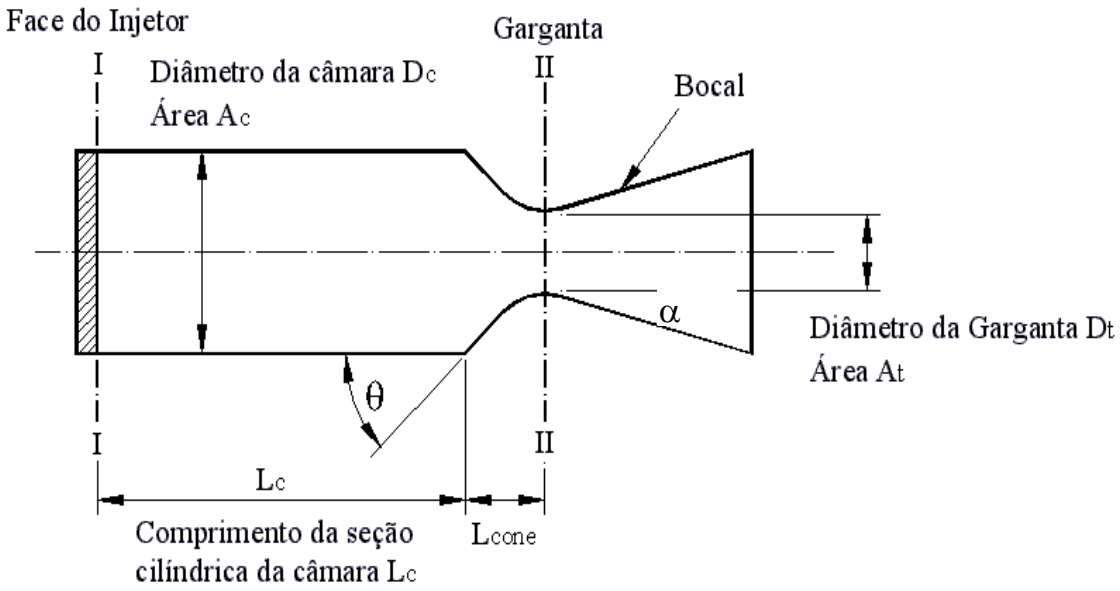


Fig. 4.4 - Aproximação da tubeira cônica.
FONTE: Huzel e Huang (1992).

Para a determinação dos contornos parabólicos da parede os ângulos θ_n e θ_e (Figura 4.3) podem ser determinados do Gráfico 3.5 com E_t e E_a, valores que serão determinados mais adiante.

Por definição L_n é 80% do comprimento da tubeira cônica. Usando-se a Figura 4.5 para $\varepsilon = 50$, determinam-se então os ângulos θ_n e θ_e.

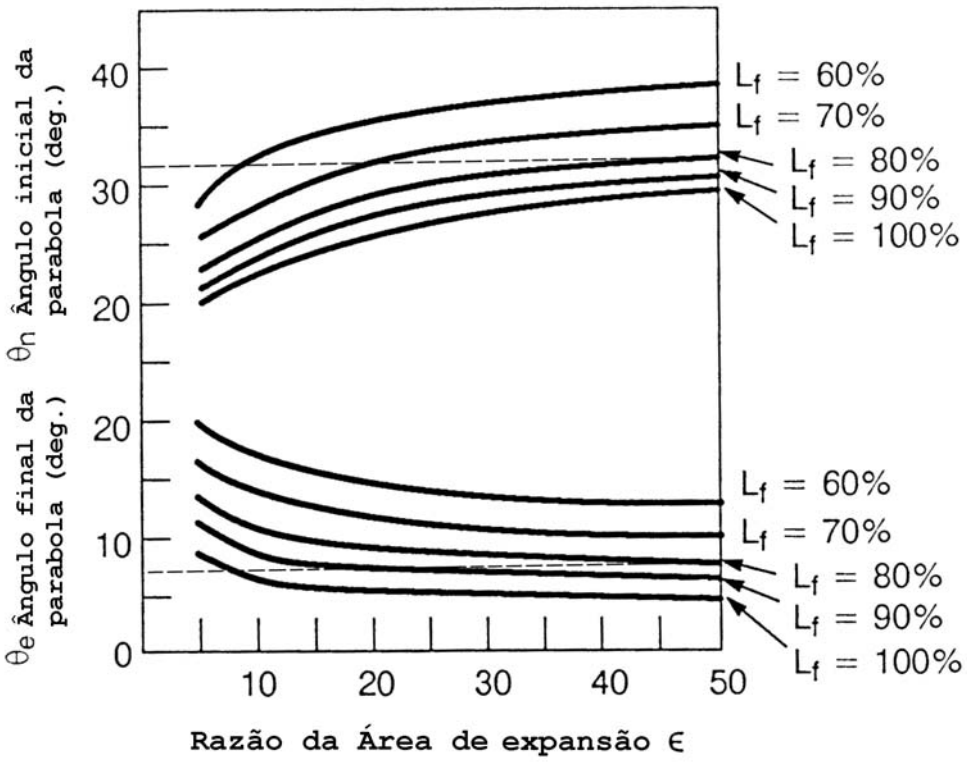


Fig. 4.5 - θ_e e θ_n Como função da Razão de expansão.
FONTE: Huzel e Huang, (1992).

Da Figura 4. 4, $\theta_n = 32^\circ$ e $\theta_e = 7.2^\circ$:

Então obtém-se

$$N_t = 0.382\ R_t\ \text{sen}\ \theta_n \qquad (4.7)$$

$N_t = 0.382 \times 3.7286 \times \text{sen}32^\circ = 0.7547$ mm.

$$N_a = R_t + 0.382\ R_t\ (1-\cos\theta_n) \qquad (4.8)$$

$N_a = 3.7286 + 0.382 \times 3.7286 (1-\cos 32^o) = 3.945$ mm.

$E_t = L_n = 67.73$ mm.

$E_a = R_e = 26.365$ mm.

Com θ_n e θ_e é possível escrever a equação da parábola da tubeira :

$$Y = -6.2787x10^{-3} X^2 + 0.6248X$$

Esta relação fornece então o gráfico da tubeira que será usada neste trabalho

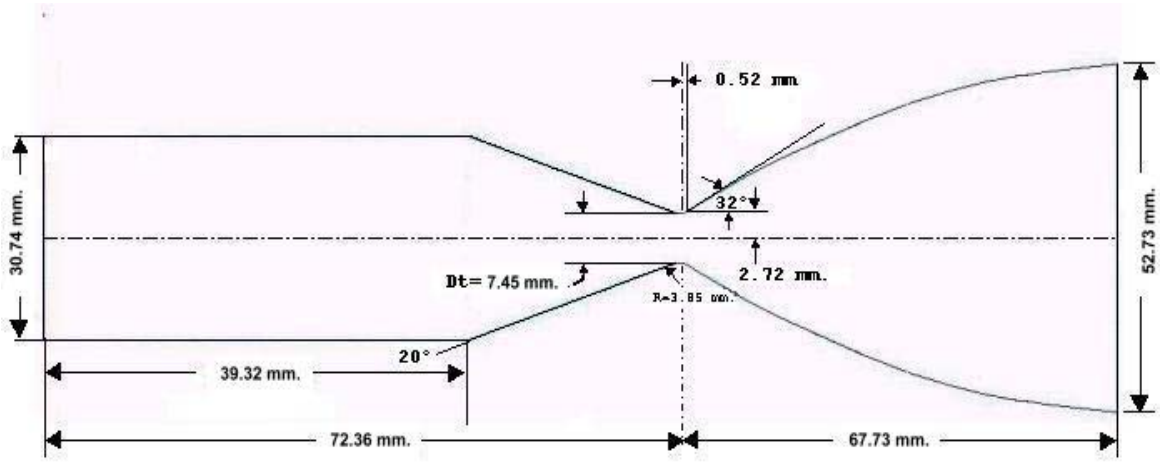


Fig. 4.6 - Perfil do Motor foguete com 200 N de empuxo usado neste trabalho.

CAPITULO 5

MODELAGEM NUMÉRICA DO MOTOR FOGUETE REATIVO

Uma vez constatado o bom desempenho numérico do código ao nível de gás inerte nos escoamentos do bocal subsônico - supersônico deve-se verificar o acoplamento do código ao integrador químico. Para tal se empregou a rotina computacional conhecida como VODE especialmente desenvolvida para a integração das equações das espécies químicas.

$$\frac{dq_i}{dt} = \dot{\Omega}(q_i) \tag{5.1}$$

onde:

$\dot{\Omega}$ corresponde ao número de espécies químicas presentes na reação

O procedimento é simples pois, como se pode ver a Equação 5.1 pode ser integrada separadamente do conjunto apresentado na Equação 2.18 e o caso tratado como o de uma equação diferencial ordinária. Implementando a seguir o procedimento de separação multi - passos vê-se que de 2.1 e 2.11 que o caso se reduz a um problema de explosão térmica a densidade constante para cada célula computacional (Burne e Dean, 1993). Para a solução o VODE emprega uma variável multi-passo , a variavel de ordem um, um esquema de diferenciação atrasada, junto ao método de Newton modificado cuja matriz Jacobiana é avaliada numericamente. Como este último dispositivo é de grande valor estratégico para o emprego do "solver" rígido da nossa equação diferencial pois esta não tem limite de estabilidade sobre a decisão do passo de tempo a conseqüência é que só na parte Fluidodinâmica é obrigatória procura de Δt.

Para a parte de taxas de reação química e de cálculo termodinâmico foram empregadas rotinas do CHEMKIM II.

5.1 Modelo de Cinética Química

Na parte da cinética química para a simulação das espécies químicas utilizamos o mecanismo que envolve as espécies químicas hidrogênio e oxigênio para reação completa extraída da tabela de Jiguang Ju e Takashi Niioka , 1994 e empregada na modelagem de ignição da mistura de hidrogênio - ar que se mostra:

TABELA 5.1 MECANISMO PARA A COMBUSTÃO COMPLETA DO HIDROGÊNIO AR

j	Reação	A_j	α_j	E_j (Kcal/mol)
1	O2+H=>OH+O	2.20E14	0.00	16790.86
2	OH+O=>O2+H	1.72E13	0.00	840.73
3	H2+O=>OH+H	5.06E4	2.67	6281.64
4	OH+H=>H2+O	2.22E4	2.67	4368.49
5	H2+OH=>H2O+H	1.00E8	1.60	3296.07
6	H2O+H=>H2+OH	4.31E8	1.60	18262.15
7	OH+OH=>H2O+O	1.5OE9	1.14	100.31
8	H2O+O=>OH+OH	1.47E10	1.14	16979.55
9	H+H+M=>H2+M	1.80E18	-1.00	0.00
10	H2+M=>H+H+M	7.26E18	-1.00	104332.00
11	H+OH+M=>H2O+M	2.20E22	-2.00	0.00
12	H2O+M=>H+OH+M	3.83E23	-2.00	119184.10
13	O+O+M=>O2+M	2.90E17	-1.00	0.00
14	O2+M=>O+O+M	6.55E18	-1.00	118228.71
15	H+O2+M=>HO2+M	2.30E18	-0.80	0.00
16	HO2+M=>H+O2+M	3.19E18	-0.80	46574.94
17	H2O+H=>OH+OH	1.50E14	0.00	1003.15
18	OH+OH=>HO2+H	1.50E13	0.00	40603.80
19	HO2+OH=>H2O+O2	6.00E13	0.00	0.00
20	H2O+O2=>HO2+OH	7.52E14	0.00	72630.64
21	HO2+HO2=>H2O2+O2	2.00E12	0.00	0.00

(continua)

TABELA 5.1: (Conclusão)

22	OH+OH+M=>H2O2+M	3.25E22	-2.00	0.00
23	H202+M=>OH+OH+M	1.69E24	-2.00	48316.13
24	H2O2+H=>H2+HO2	1.70E12	0.00	3749.88
25	H2+H02=>H2O2+H	1.32E12	0.00	19965.13
26	H2O2+OH=>H2O+HO2	5.40E12	0.00	1003.15
27	H2O+HO2=>H2O2+OH	1.80E13	0.00	32184.48
28	H2+O2=>HO2+H	7.27E13	0.00	58400.21
29	HO2+H=>H2+O2	2.50E13	0.00	692.65
30	HO2+H=>H2O+O	3.00E13	0.00	1719.69
31	H2O+O=>HO2+H	2.95E13	0.00	58400.21
32	HO2+O=>OH+O2	1.80E13	0.00	-406.04
33	OH+O2=>HO2+O	2.30E13	0.00	55342.98

A constante de reação no sentido dos produtos sendo dada por:

$$\mathrm{k_{f_j}} = \mathrm{A_j T^{\alpha_j}} \exp\left(\frac{-\mathrm{E_j}}{\overline{\mathrm{R}}\mathrm{T}}\right) \tag{5.2}$$

Sendo $\overline{R}$ a constante universal dos gases. Assim, a constante de reação *j* no sentido dos reagentes pode ser calculada por:

$$k_{b_j} = \frac{k_{f_j}}{k_{eq_j}} \tag{5.3}$$

onde k_{eq_j} é a constante de equilíbrio da reação *j*.

Conforme a lei de ação de massas (Williams, 1988), a taxa de variação da concentração C_k da espécie *k* na reação *j* é dada por:

$$\left(\omega_k\right)_j = \left(\nu''_{jk} - \nu'_{jk}\right)\left(k_{f_j}\prod_{m=1}^{K} C_{'m}^{\nu'_{jm}} - k_{b_j}\prod_{m=1}^{K} C_{'m}^{\nu''_{jm}}\right) \tag{5.4}$$

sendo que $\nu'_{jk,}$ ν''_{jk} são, respectivamente os coeficientes estequiométricos do produto e do reagente correspondentes à *k*- ésima espécie e à *j*- ésima reação, e K sendo o número de espécies na reação.

Assim para obter a taxa líquida da variação da concentração da espécie *k* na reação *j* é calculada a partir da contribuição de cada uma das *J* reações:

$$\omega_k = \sum_{j=1}^{J} (\omega_k)_j \tag{5.5}$$

5.2 Modelo Termodinâmico

Neste trabalho o modelo termodinâmico é realizado com calor especifico a pressão constante para a k- ésima espécie, dado por :

$$\frac{c_{pk}}{R} = A_k + B_k T + C_k T^2 + D_k T^3 + E_k T^4 \tag{5.6}$$

A entalpia de formação da k- ésima espécie :

$$\frac{h_k^0}{RT} = A_k + \frac{B_k}{2} T + \frac{C_k}{3} T^2 + \frac{D_k}{4} T^3 + \frac{E_k}{5} T^4 + \frac{F_k}{T} \tag{5.7}$$

A entropia da k- ésima espécie é dada por :

$$\frac{s^o}{R} = A_k \ln T + B_k T + \frac{C_k}{2} T^2 + \frac{D_k}{3} T^3 + \frac{E_k}{4} T^4 + G_k \tag{5.8}$$

A energia livre de formação de Gibbs da k- ésima espécie:

$$\frac{g_k^0}{RT} = A_k (1 - \ln T) - \frac{B_k}{2} T - \frac{B_k}{6} T^2 - \frac{D_k}{12} T^3 - \frac{E_k}{20} T^4 + \frac{F_k}{T} - G_k \tag{5.9}$$

Os coeficientes A_k, B_k, C_k, D_k, E_k, F_k, e G_k encontram-se tabelados na literatura (Gordon e McBride 1971). A energia livre de Gibbs da reação *j* é calculada por:

$$\Delta G_j = \sum_{k=1}^{k} (\nu''_{jk} g_k - \nu'_{jk} g_k) \tag{5.10}$$

E a constante de equilíbrio da reação *j* é dada por:

$$k_{eq_j} = \left(\frac{1}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^{K}(\nu''_{jk}-\nu'_{jk})} \exp\left(\frac{-\Delta G_j}{RT}\right) \tag{5.11}$$

5.3 Modelo Reativo no Bocal convergente-divergente

Tomou-se como parte da simulação a relação estequiométrica da queima de Hidrogênio e Oxigênio, ou seja:

$2H_2+O_2$ => Produtos.

Para tal simulou-se primeiramente o bocal convergente - divergente com escoamento interno pois ele se aproxima mais de nosso motor e serviria de referência com os valores obtidos da simulação em gás ideal. A simulação apresentou valores esperados confirmando o acoplamento reativo do código .

Nota-se que o processo teve um bom comportamento e os parâmetros mantiveram-se dentro das faixas esperadas. Assim pode-se ver a configuração do número de Mach, Figura 5.1, concorda com os resultados obtidos para o mesmo caso com gás ideal, 1.1727 para o caso reativo e 1.316 para o caso de gás ideal, Figura 3.14. A temperatura estática cujo máximo para o bocal ficou no entorno dos 1494 K, (Figura 5.2), valor que logo cai para 1280 K, é o valor esperado numa tubeira com as características dadas, pois aqui o escoamento é diferente de zero na entrada do bocal.

Os resultados são apresentados em gráficos com os principais parâmetros e comparados com resultados de outros códigos disponíveis (Gordon e McBride, 1971) que são muito empregados e práticos, dando-se uma aproximação do que pode acontecer na prática. .

Na simulação obtiveram-se taxas de produção/desaparecimento dos diversos produtos, dentre eles os mais importantes foram os do O_2 e H_2O. Eles permitem observar a presença de combustão, pois o desaparecimento de um leva ao aparecimento da outra . Esses valores são apresentados nas Figuras 5.3, 5.4. Na Figura 5.5 vê-se como eles variam ao longo da tubeira, aprecia-se como ocorre rapidamente a troca nos sentidos das curvas logo após ocorrida a combustão. Além disso, o processo de convergência teve uma curva com boa tendência como mostra o Gráfico 5.6, pois ela aponta a estabilidade logo após 600 iterações.

Condições de entrada:

N^0 de Iterações 5.200. CFL= 0.5

N^0 de Mach na entrada : 0.232356 Relação de pressão 0.35022

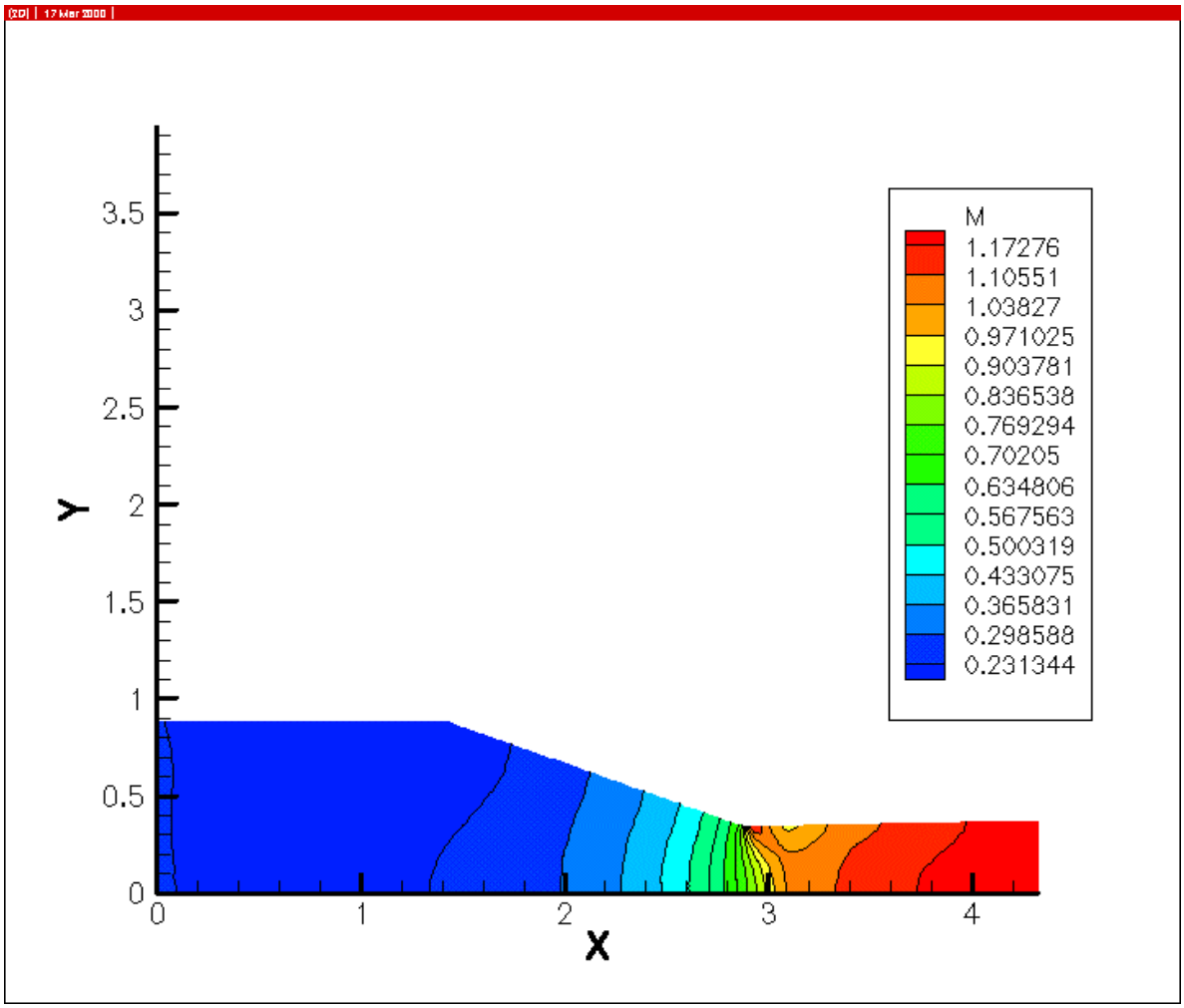


Fig. 5.1 - Perfil de velocidades do bocal convergente - divergente reativo para o esquema de Van Leer de primeira ordem .

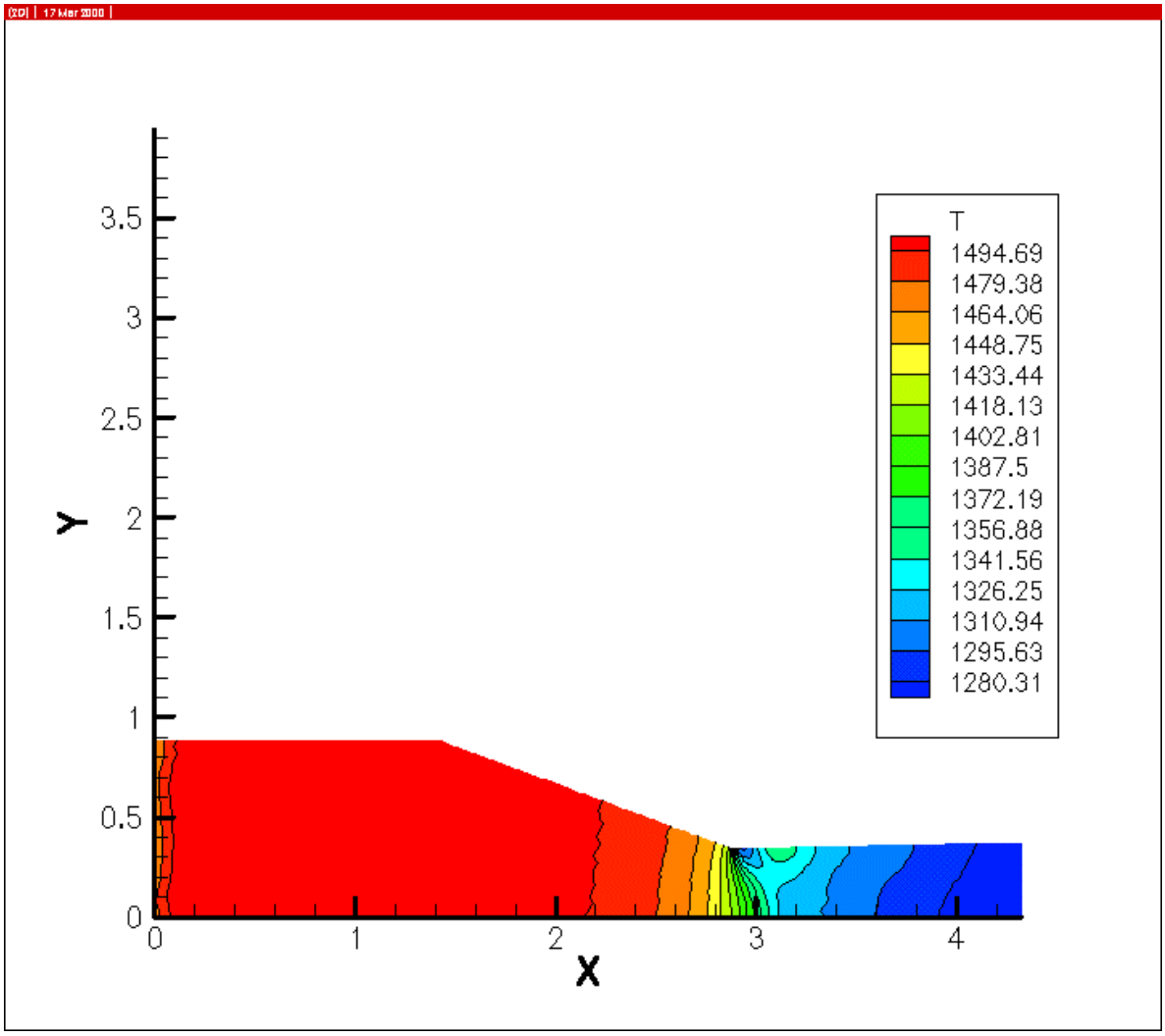


Fig. 5.2- Perfil de temperatura do bocal convergente divergente reativo para o esquema de Van Leer de primeira ordem .

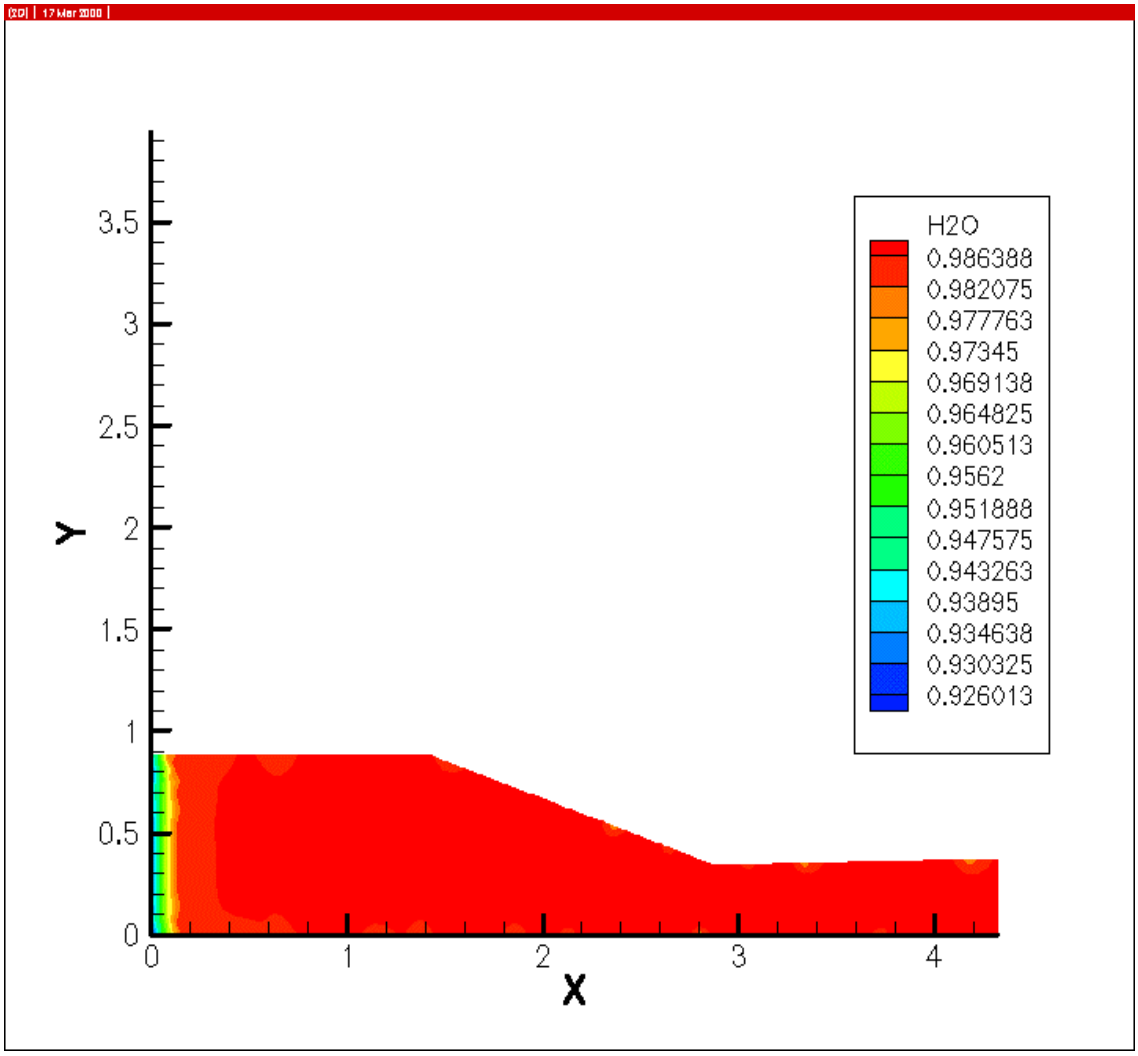


Fig. 5.3 - Taxa de produção de H_2O num bocal convergente divergente reativo para o esquema de Van Leer de primeira ordem.

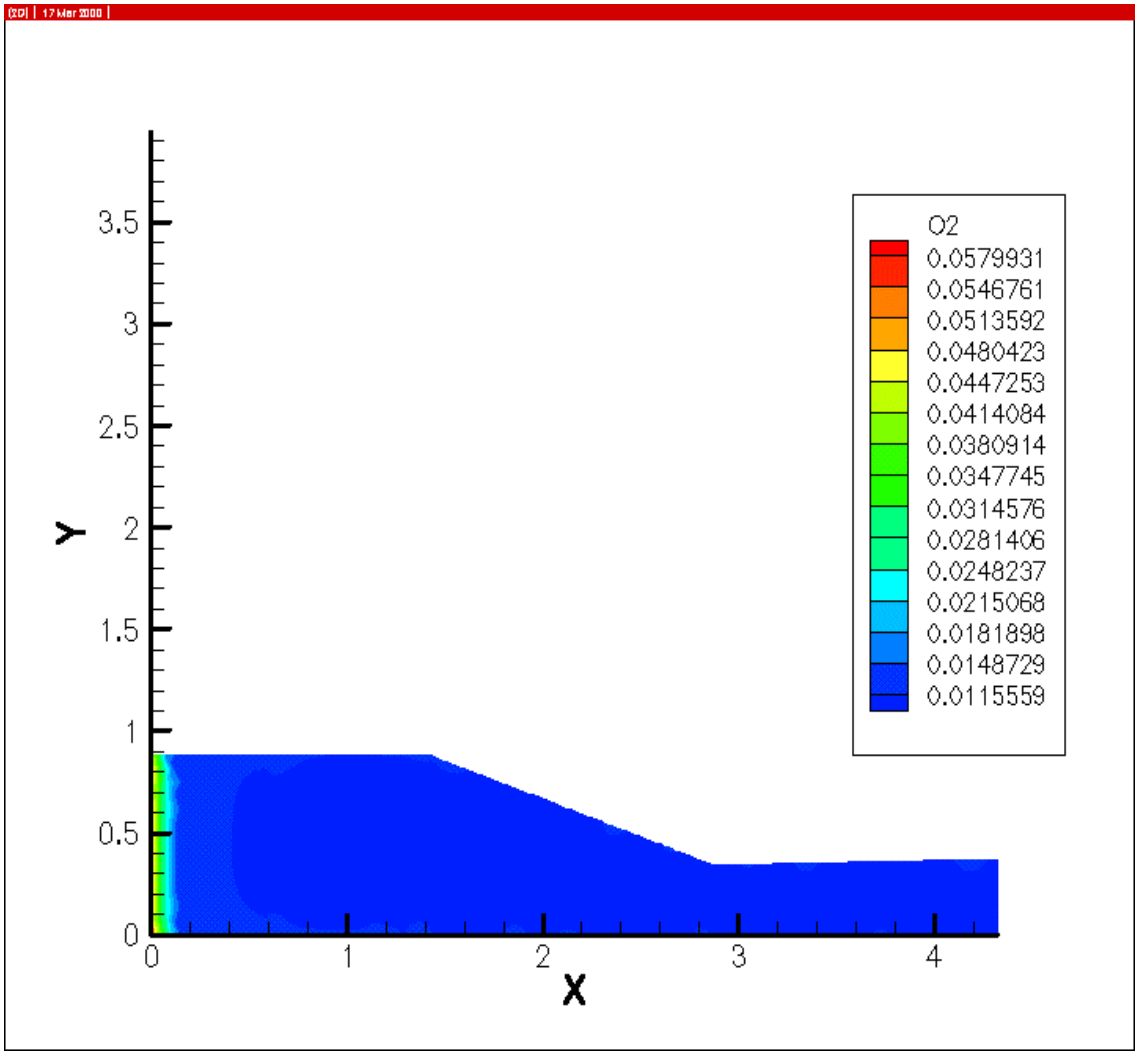


Fig. 5.4 -Taxa de desaparecimento de O_2 num bocal convergente divergente reativo para o esquema de Van Leer de primeira ordem

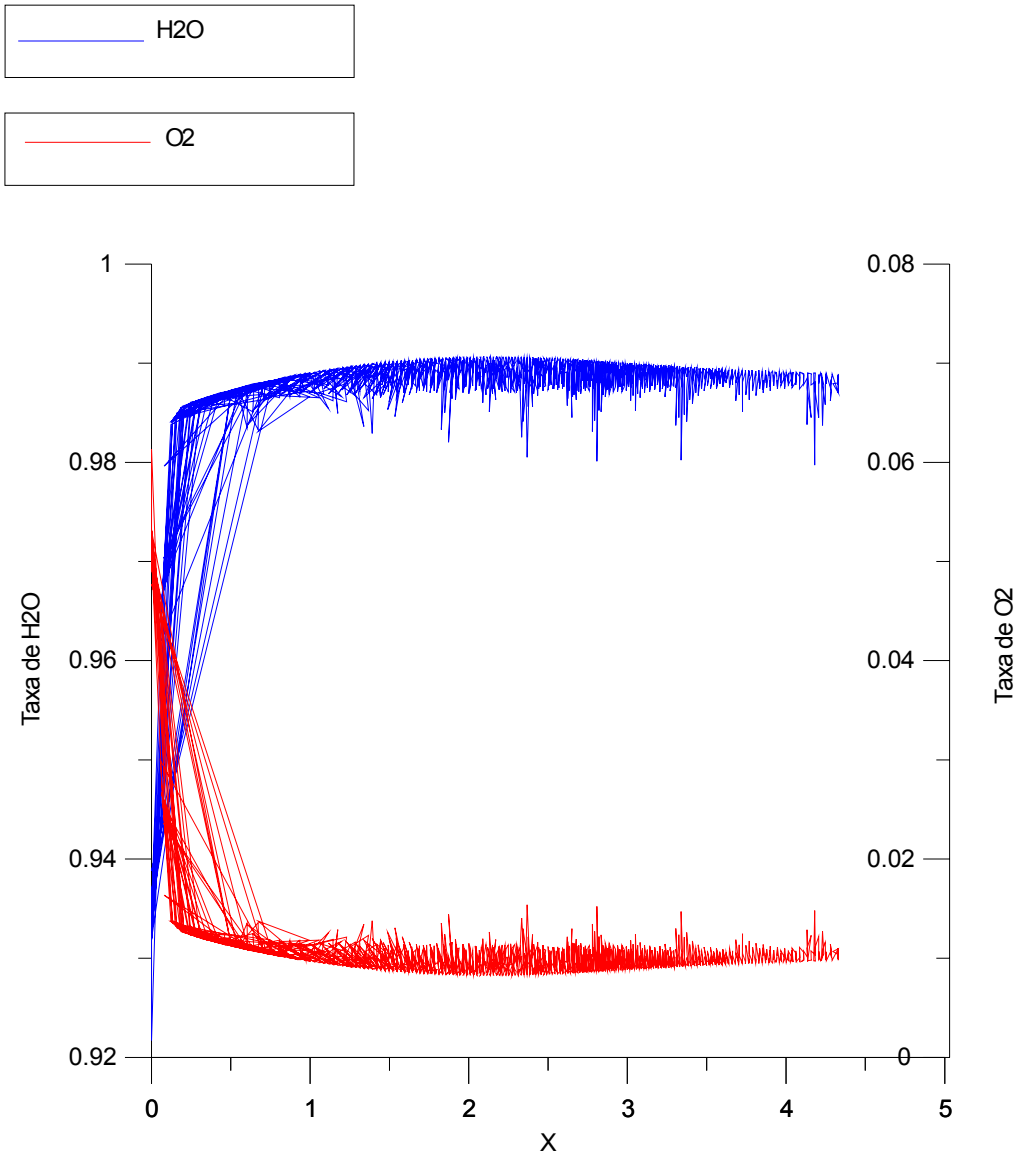


Fig. 5.5 -Taxa de formação e desaparecimento de H_2O e O_2 respectivamente vs. X.

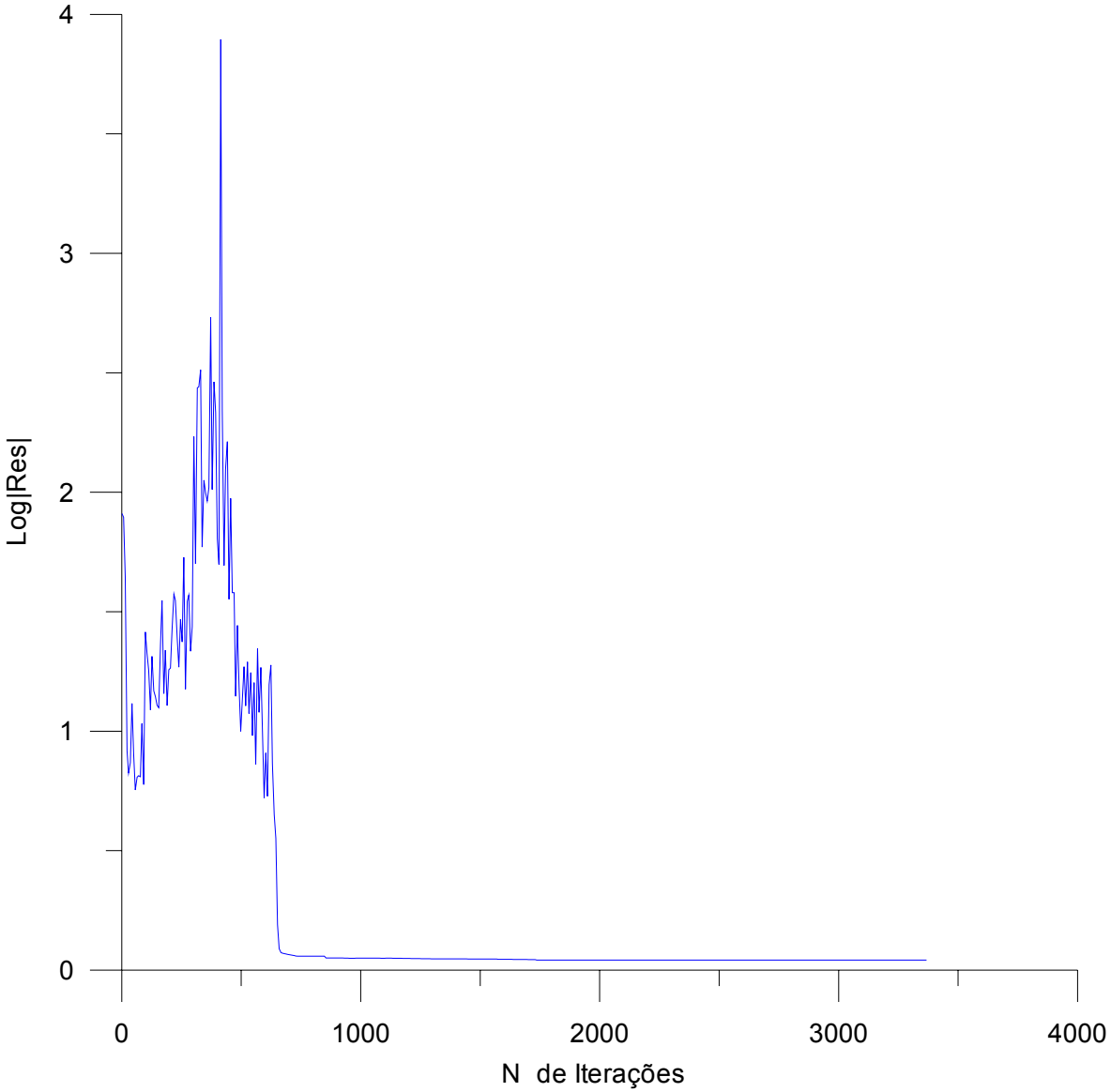


Fig. 5.6 - Gráfico de comparação das histórias de convergências para um bocal convergente - divergente vs. X.

5.4 Considerações e resultados apresentados no cálculo do motor

- O cálculo do motor apresentou certa dificuldade na preparação da malha pois esta tinha que representar as dimensões obtidas no projeto, ou seja, uma geometria deveras complicada. Entretanto após vários testes empregando refinamento na zona da garganta e a sua jusante, obteve-se solução desejada que registra um escoamento de acordo com aquele esperado. A zona da placa da injeção foi a mais difícil pois esta tinha que varrer uma área desde o centro da tubeira até os 6.5 mm de raio conforme especificado para este tipo de tubeiras (Huang e Huzel, 1992). O tipos de fronteiras empregados neste motor são apresentados na Figura 5.7. Empregou-se então uma malha de 1452 nós e um número de volumes de 2637 como sugerido na Figura 5.8. Segundo o mesmo procedimento nos cálculos do bocal convergente - divergente (Capitulo.4), obteve-se um numero de Mach de entrada igual a 0.1211356 e uma razão de pressões de 0.0120323, obtendo-se um perfil de velocidades que varia de 0.3513 na câmara até 3.389 na saída (Figura 5.9). Além disso pode-se observar que o número de Mach fica em torno de Um na zona da garganta o que sugere o desempenho aceitável do projeto (Figura 5.10). A Figura 5.11 que exibe o perfil de temperaturas estáticas ao longo da tubeira para aquelas condições, mostra que ela vai desde 1518 K no início da reação e cai até 838.4 K na saída, mostrando um perfil de acordo com o esperado nos processo isentrópicos, embora obviamente por efeitos do processo reativo ela mantenha um valor maior na saída do que aquele que ocorre naqueles processos. Como a temperatura adiabática de chama esperada para este tipo de motor é cerca de 3030 K, segundo os cálculos usando o software NASA-273 (Gordon e McBride, 1971), para nosso caso a diferença está explicada com a velocidade inicial do escoamento que aqui não é zero:

  Como é sabido :

$$cpT_0 = cpT + \frac{\mathrm{v}^2}{2} \tag{5.12}$$

como a velocidade na placa de injeção é diferente de zero, aqui 178.1 m/s, a temperatura estática é de 1763 K, valor bastante coerente comparado com aquele aqui obtido (15% de afastamento).

- Quanto à parte computacional, devido à geometria e ao número de passos empregados para simular o mecanismo químico, ele se apresento o bastante lenta sendo que, para 20.000 iterações, empregaram-se 161 horas. A máquina usada tinha um processador Pentium II de 300Mhz com 120 Megabytes de memória RAM.
- A parte química mostrou uma reação intensa nos primeiros milímetros da câmara para então se manter estável ao longo da tubeira, sendo que, como sugerido na Figura 5.12, a formação de água é a mais importante pois como esperado ela contem a maior taxa de formação entre os produtos. As outras espécies mantém as tendências esperadas. O oxigênio, como mostrado na Figura 5.13 mostrou uma variação na taxa de produção/desaparecimento variando de 0.036 à 0.009 sendo o produto residual de maior presença até a saída da tubeira. Pode-se ver que ele consegue permanecer mais concentrado logo na saída da placa de injeção. A seguir na Figura 5.14 temos as curvas do H_2O e O_2 que obviamente mostram sentidos diferentes, sendo que a água formada vem do desaparecimento do O_2. A variação da taxa do Hidrogênio H cai para menos de 0.0002 logo após de ocorrida a reação mas certamente ela desaparece, sendo que seu valor residual fica em torno do $5.57038x10\text{-}^{5}$, (Figuras 5.15 e 5.16).

  Por outro lado o H_2 se mantém um pouco acima de 0.001 e que indica uma boa presença da substância nos resíduos (Figura 5.17). Finalmente vê-se que os comportamentos do OH e do HO_2 (Figuras 5.17, 5.18) são pouco relevantes pois suas taxas variam de 0.006 a valores numa faixa da ordem de 10^{-4} na parte estável dentro da tubeira.

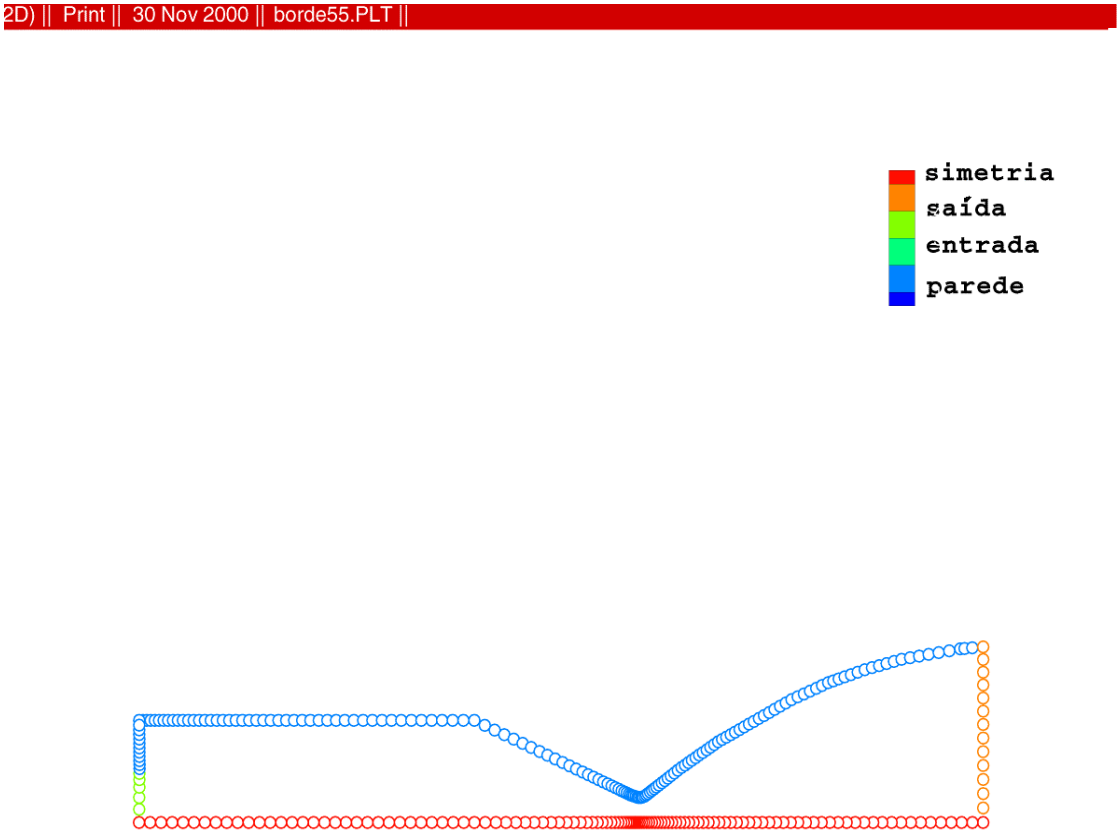


Fig. 5.7 - Fronteiras empregadas para a simulação do motor foguete.

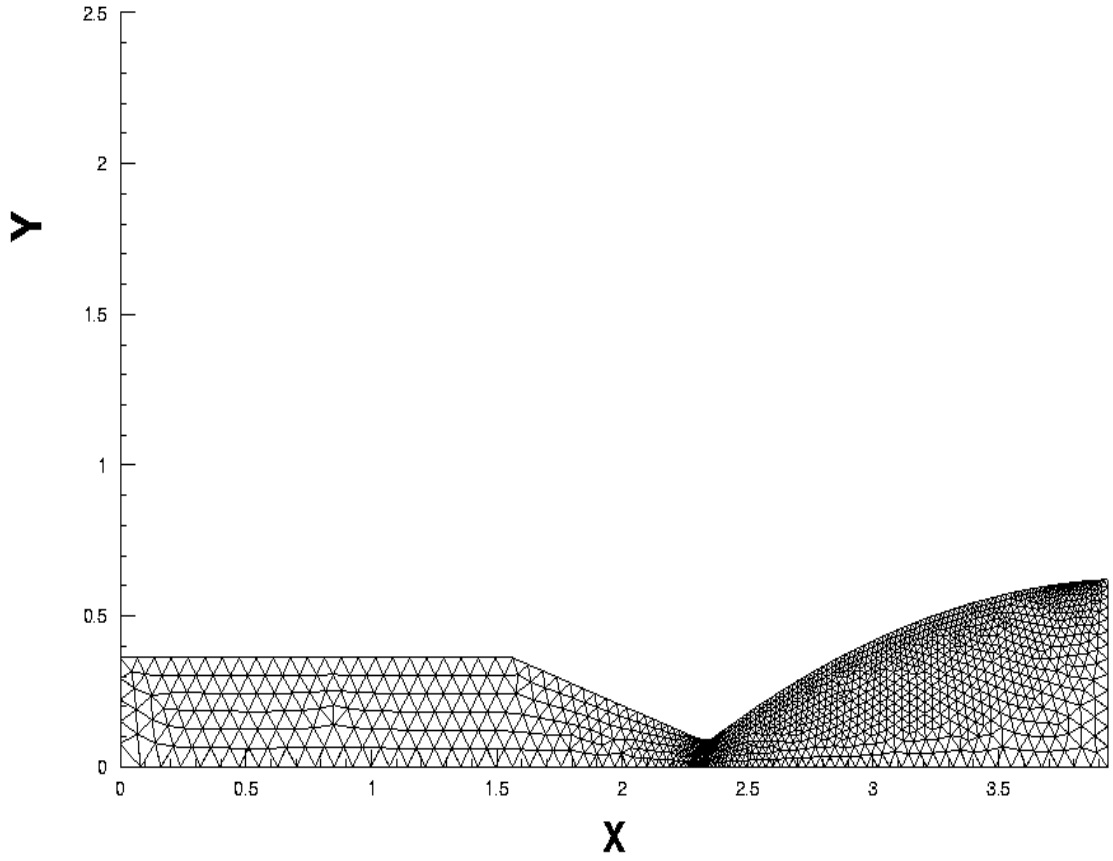


Fig. 5.8 - Malha empregada para a simulação do motor foguete de 200 N.

Condições de entrada:

N^0 de Iterações 120.000. CFL= 0.5

N^0 de Mach na entrada =0.1211356 Relação de pressão = 0.0120323

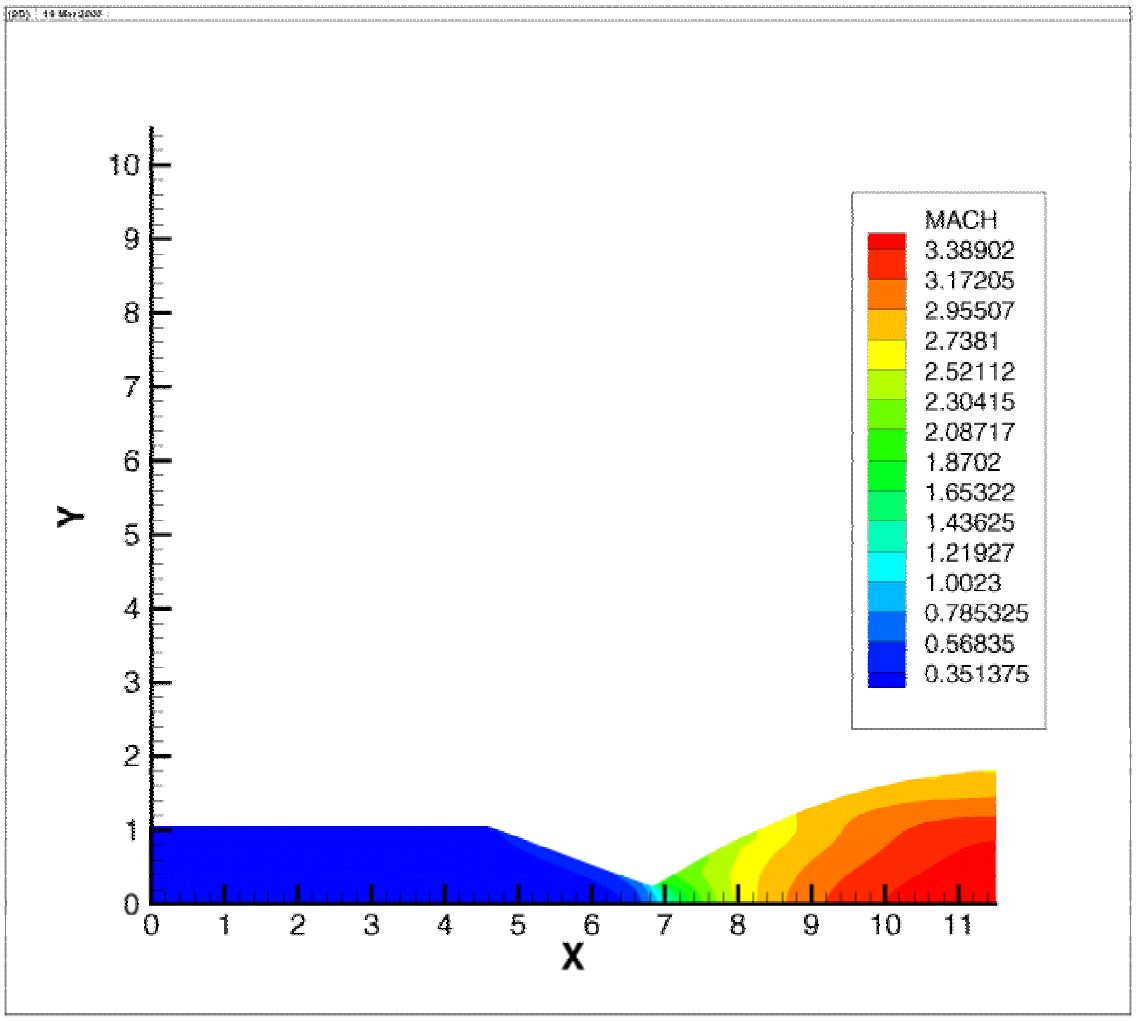


Fig. 5.9 - Perfil de velocidades num motor de foguete com com reação química na tubeira .

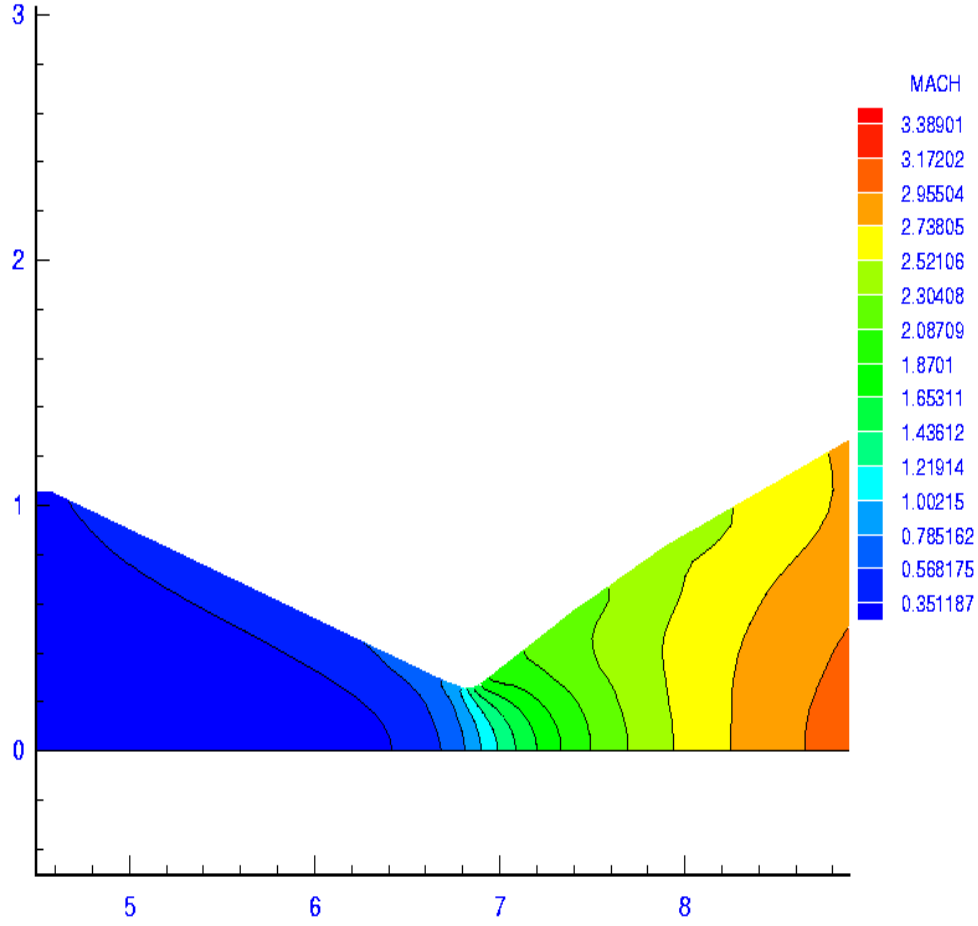


Fig. 5.10 - Aproximação na zona de garganta do perfil de velocidades do motor foguete com reação química na tubeira .

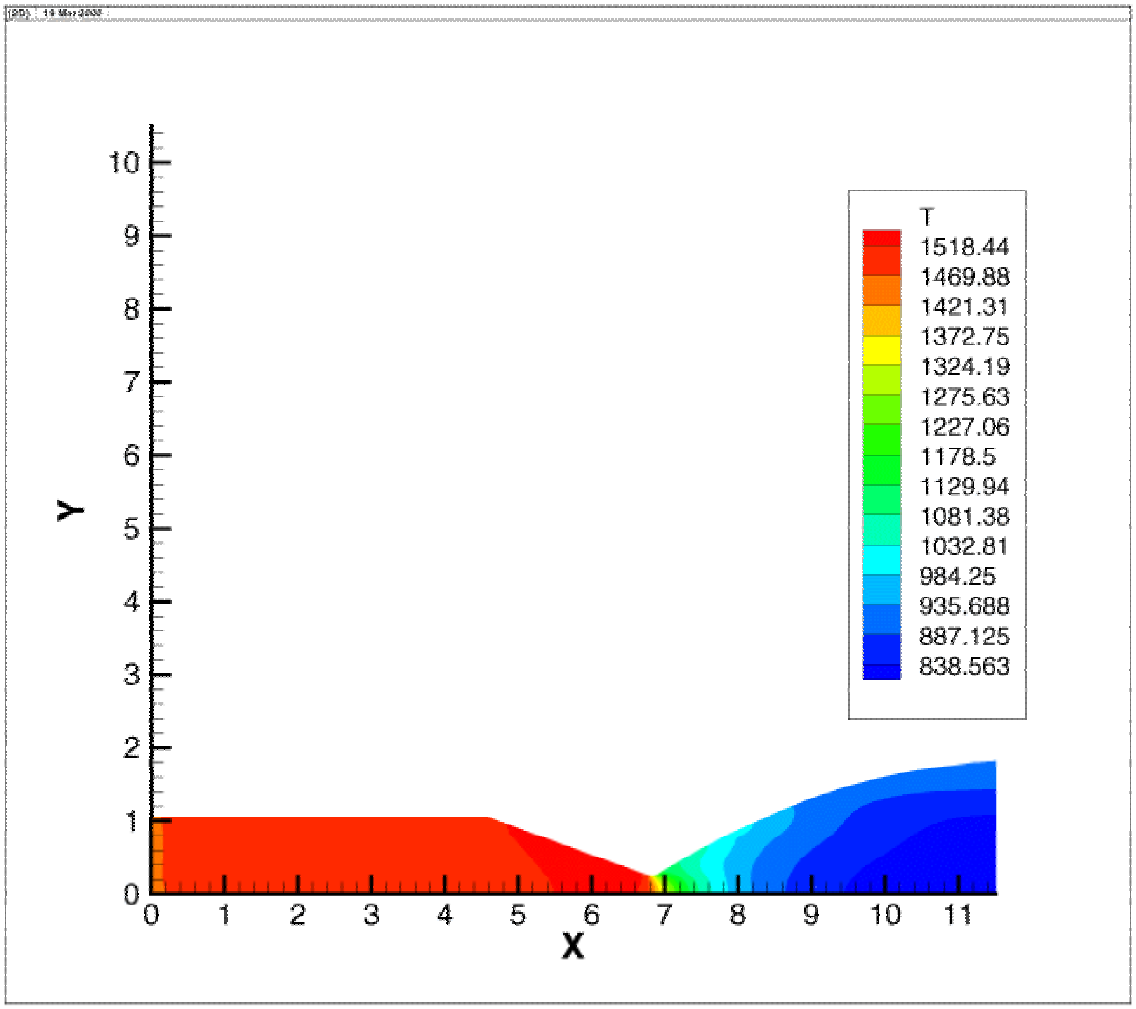


Fig. 5.11 - Perfil de Temperaturas do motor foguete com reação química na tubeira.

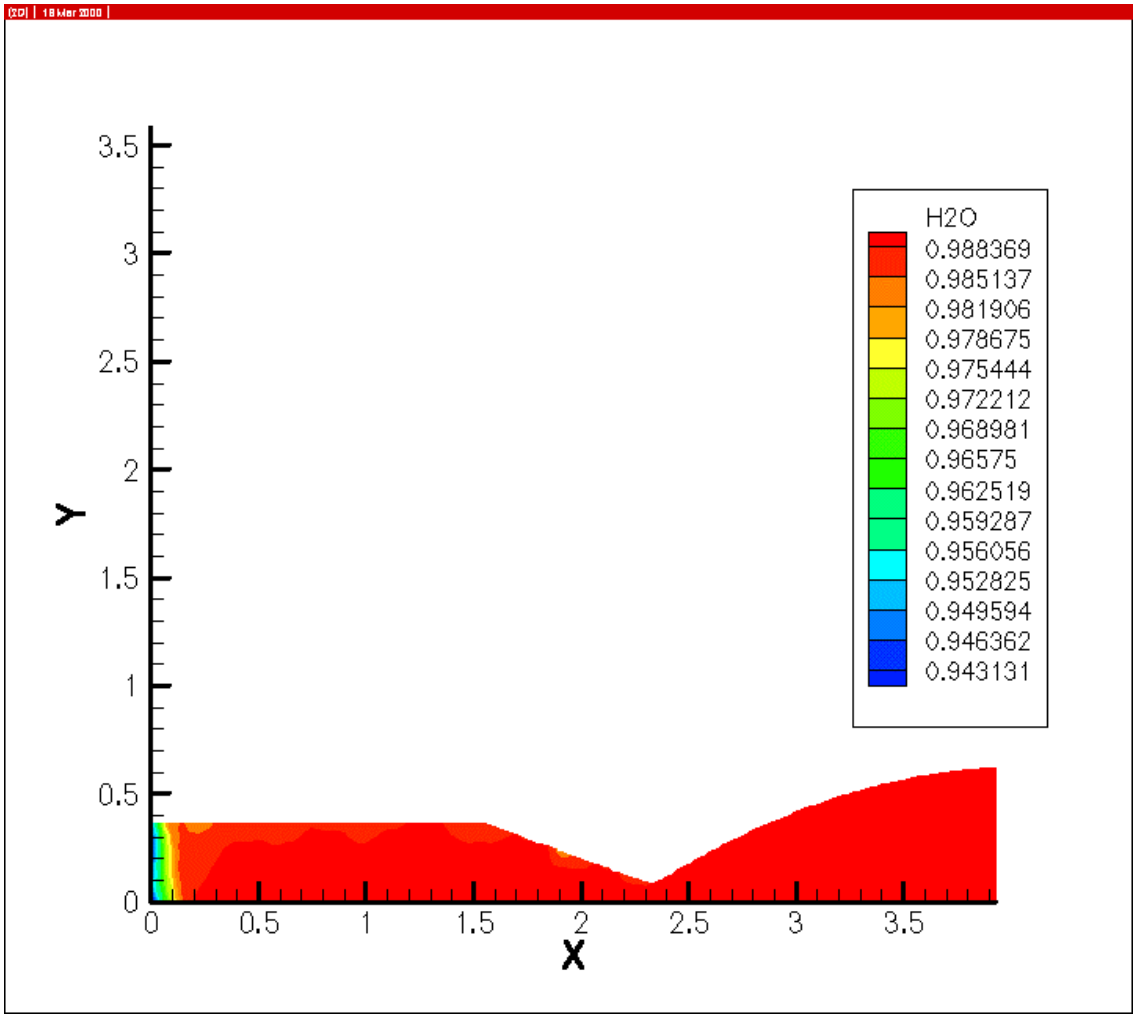


Fig. 5.12 - Perfil da taxa de Produção de H_2O em termos de fração molar do motor foguete reativo.

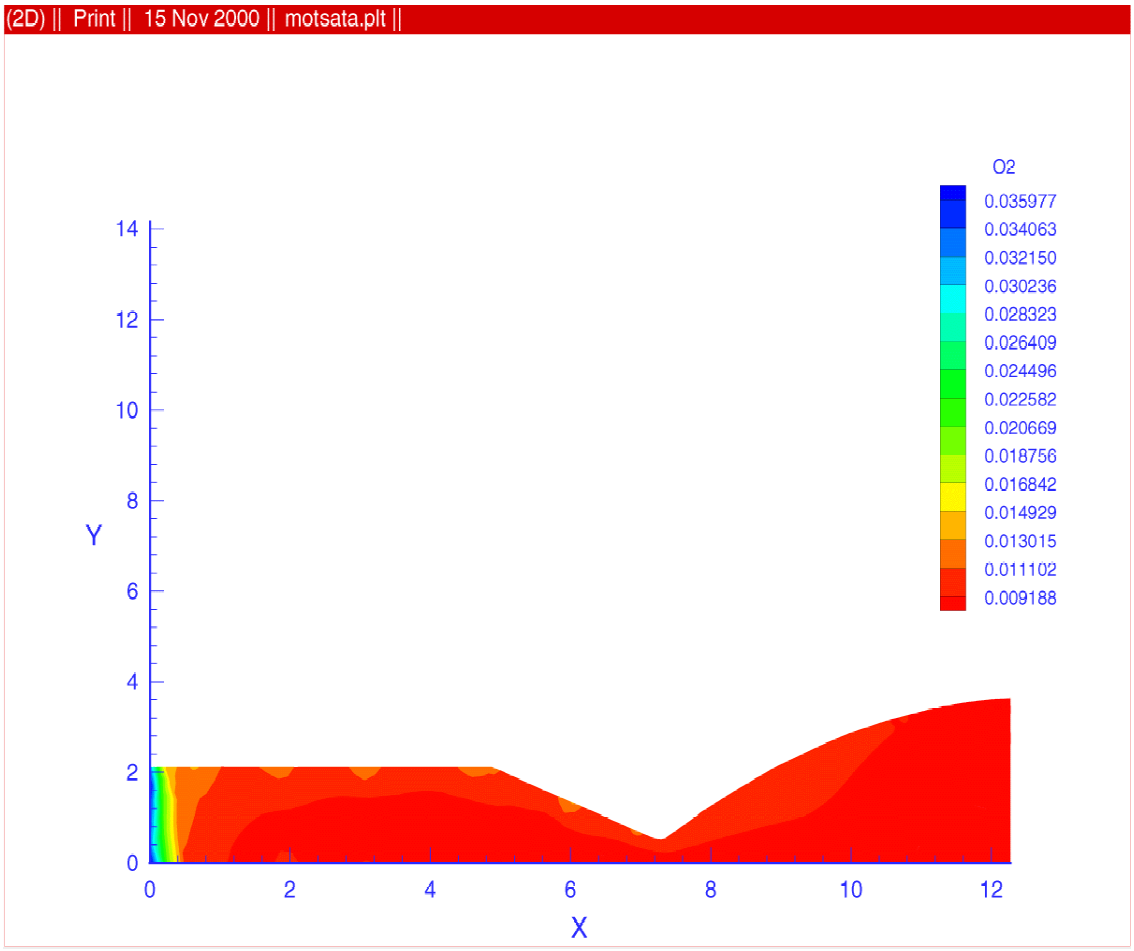


Fig. 5.13 - Perfil da taxa de Produção de O_2 em termos da fração molar do motor foguete reativo.

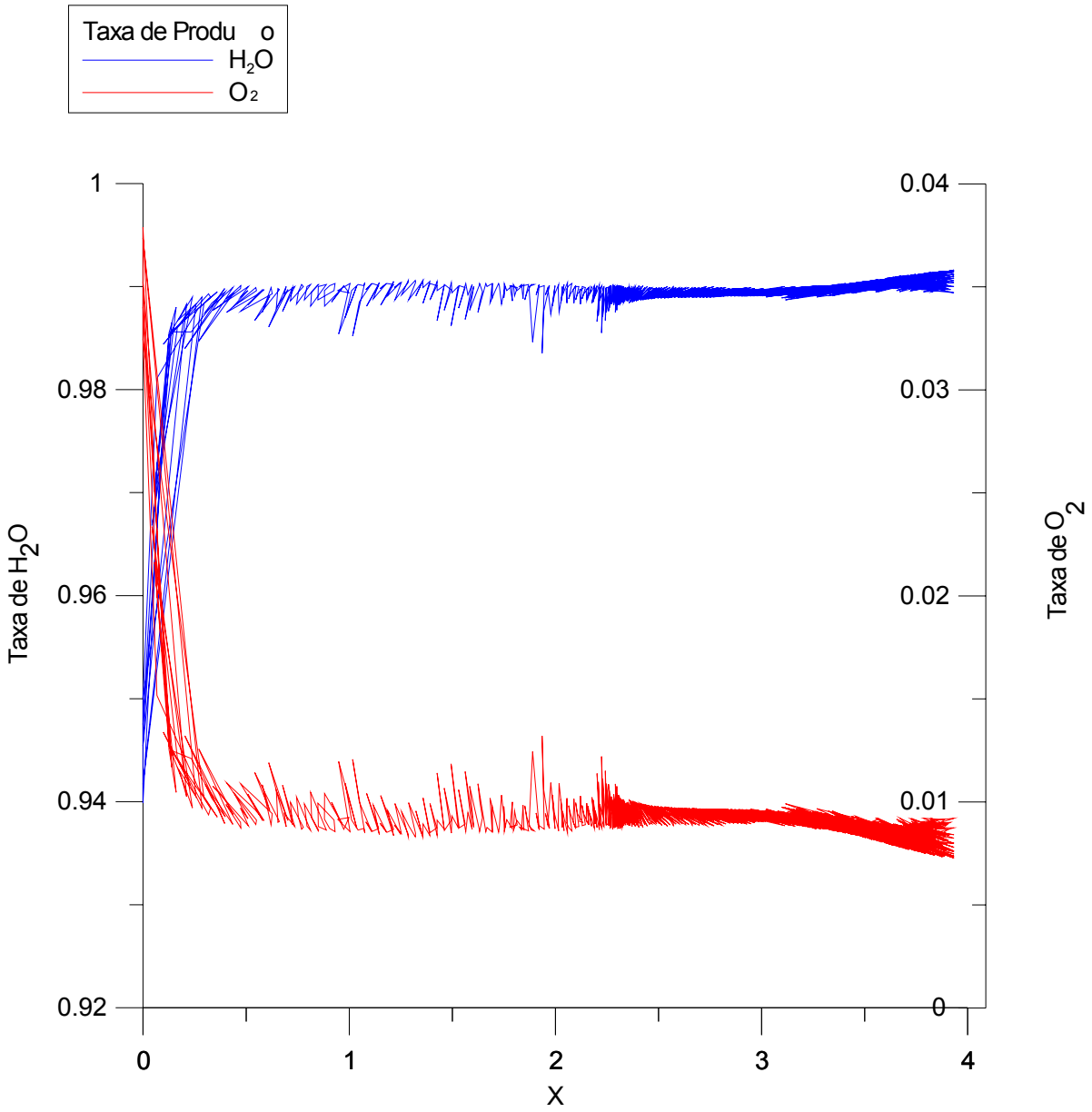


Fig. 5.14 - Taxa de produção de H_2O e O_2 por seção X no motor foguete reativo.

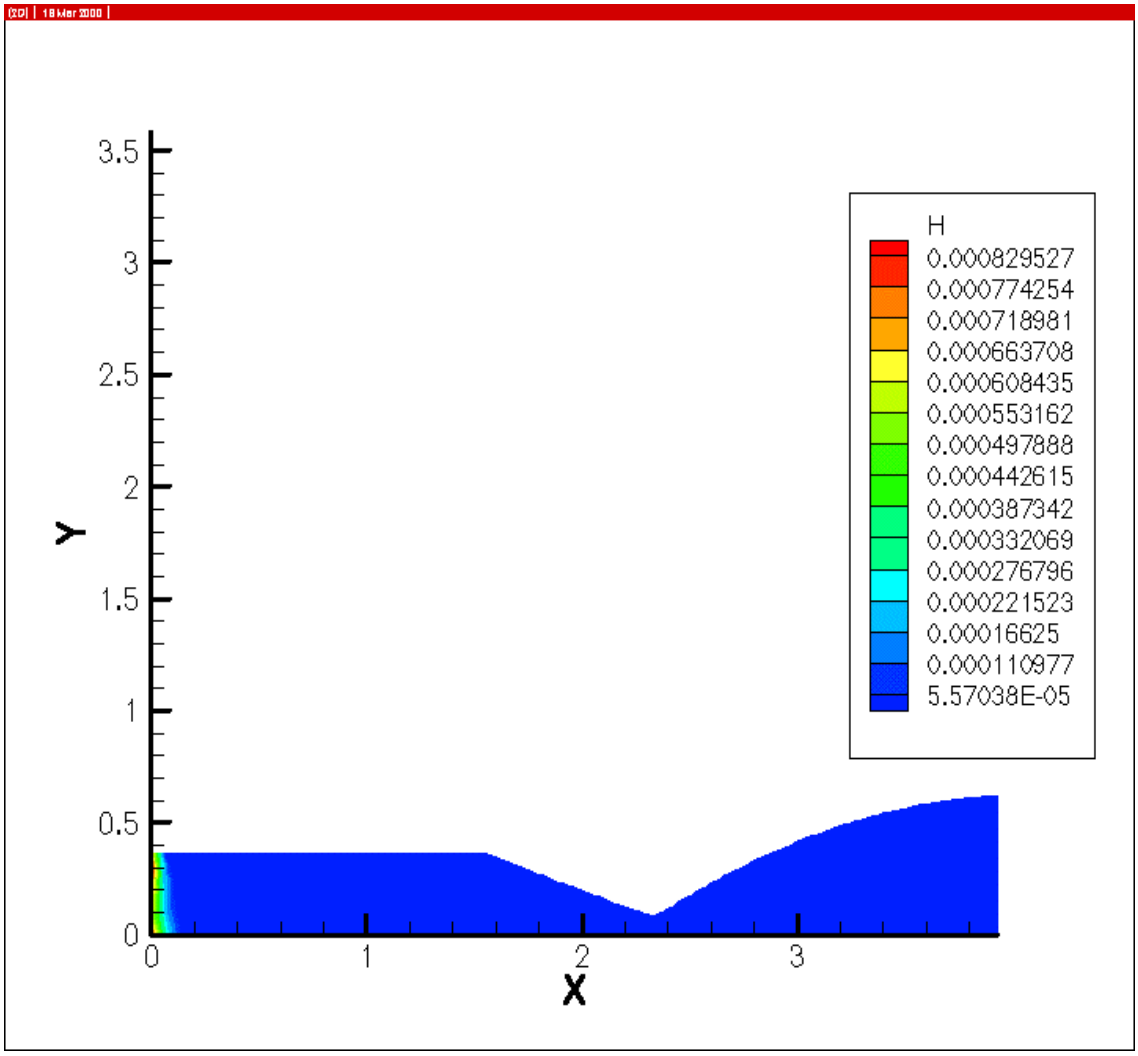


Fig. 5.15 - Perfil da taxa de Produção de H em termos da fração molar do motor foguete reativo.

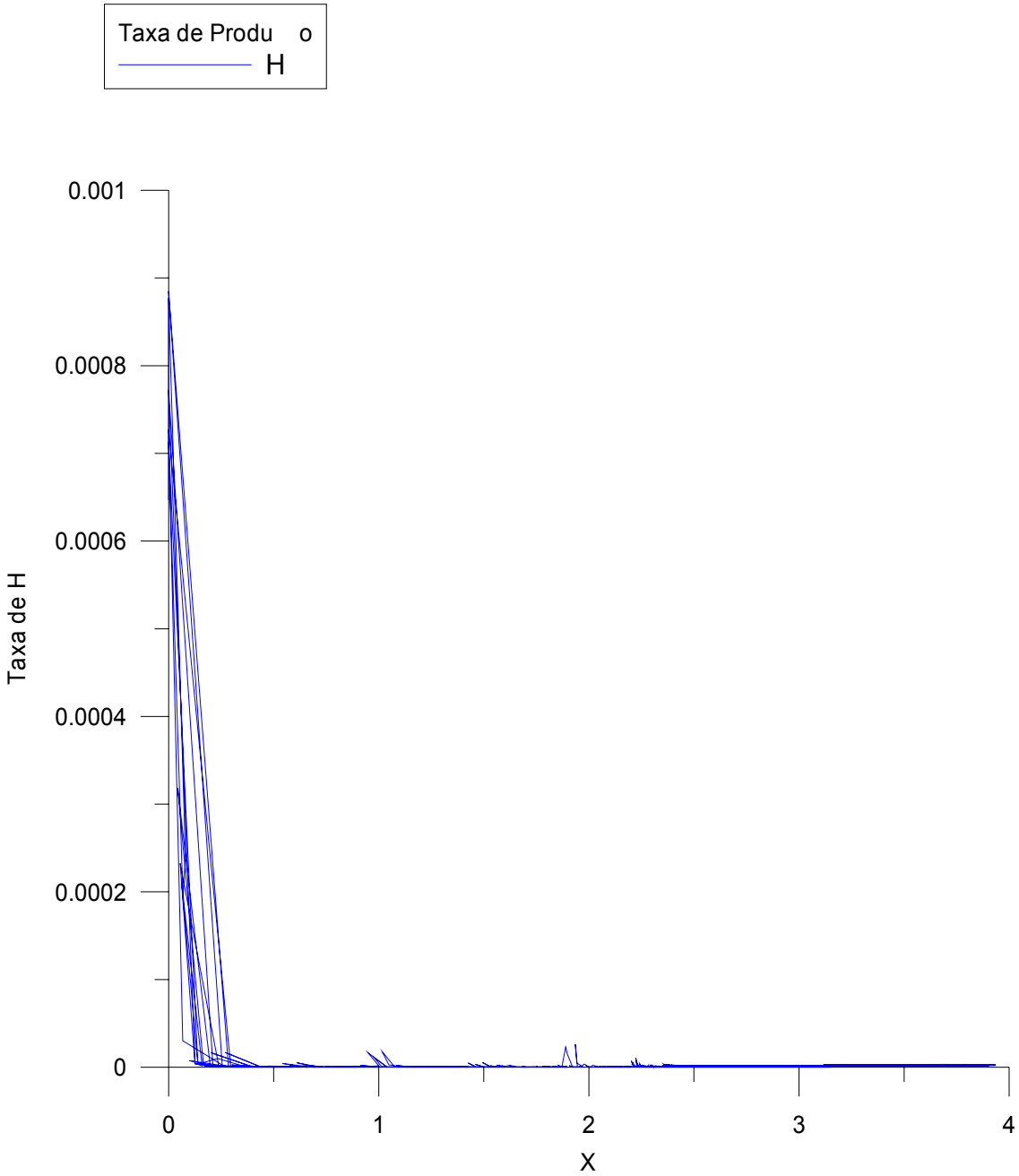


Fig. 5.16 - Taxa de produção de H por seção X no motor foguete reativo.

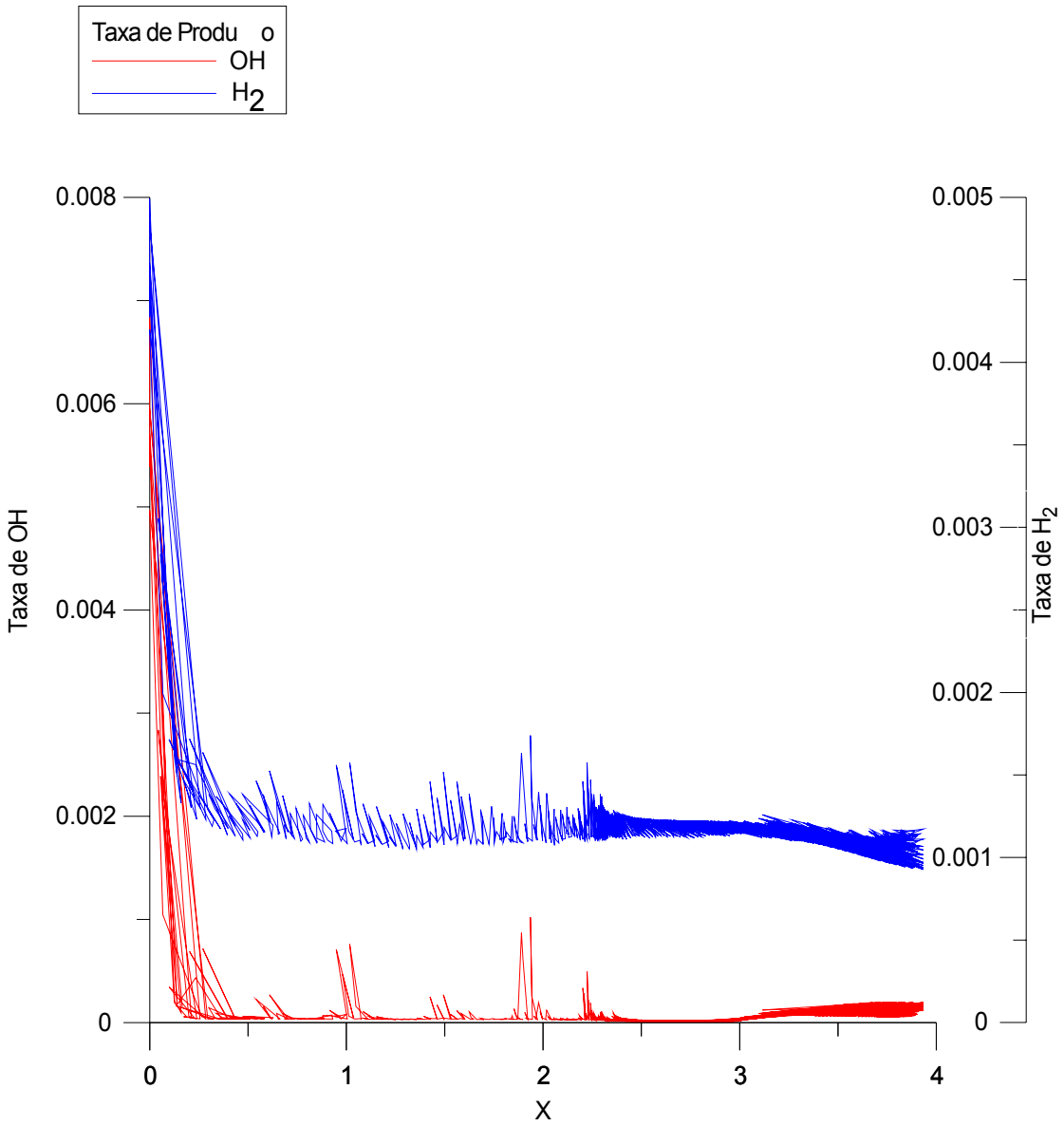


Fig. 5.17 - Taxa de produção de OH e H_2 por seção X no motor foguete reativo.

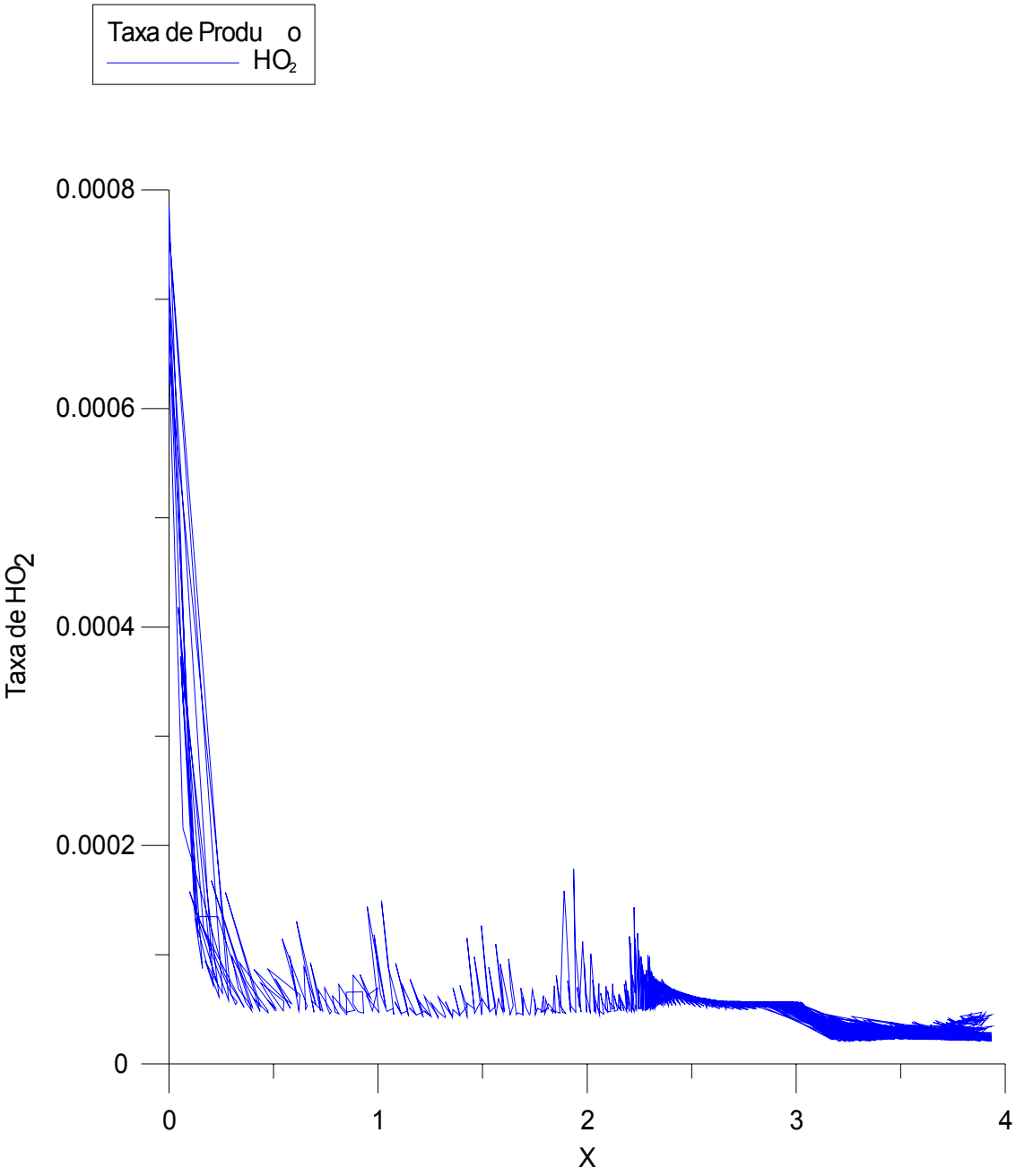


Fig. 5.18 - Taxa de produção de HO_2 por seção X no motor foguete reativo.

CAPITULO 6

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Foi feita a simulação do escoamento bidimensional de um motor foguete que consiste numa câmara e tubeira empregando as equações de transporte que incluem a conservação de massa, quantidade de movimento, energia, a equação de estado e o termo fonte com produção de espécies químicas. Empregando-se para tal uma malha triangular não estruturada e refinada (Azevedo et.al 1998) nos lugares que continham maiores variações de gradiente, e o método upwind de 1^a e 2^a ordem de van Leer como esquema numérico(van Leer B., 1979,1982). Os resultados obtidos dão uma aproximação geral do que acontece no processo de combustão e também oferecem uma visão geral para a parte fluidodinâmica. Obviamente os efeitos viscosos se incluídos causarão outros tipos de fenômenos físicos que irão modificar os resultados aqui obtidos. Uma tentativa de inclusão das equações de Navier – Stokes com a parte reativa não permitiram a obtenção de resultados numéricos consistentes. Cabe então, num próximo passo, descobrir-se as razões do problema e naturalmente, resolvê-lo.

As comparações obtidas tiveram uma concordância com os valores previstos tanto na parte química como na fluidodinâmica certamente devido ao fato de que o sistemas padrões empregados utilizam métodos de menor aproximação que o utilizado aqui (NASA SP-273). Fato é que o código aqui apresentado pode ser utilizado dentro de um projeto maior como ponto de partida, embora seja mister atentar para o fato de que, para poupar tempo, se faz necessário dispor de um processador mais eficaz que aquele empregado neste trabalho.

Entre os acertos do código podemos falar nas relações basicamente fluidodinamicas como o número de Mach, pressão, temperatura e as componentes da velocidade, que atingem os valores previstos nas relações analíticas das condições isentrópicas. Por outro lado, na temperatura adiabática de chama, o valor previsto variou em relação ao esperado devendo-se entretanto ter em conta que o escoamento aqui considerado já tinha certa velocidade não nula no plano da placa de injeção. Esta temperatura estática cai ao longo do comprimento da tubeira como esperado. O comportamento da velocidade entre a placa de injeção e a saída da tubeira deve ser analisado com cuidado.

Observe-se, que mesmo sem considerar os efeitos dos parâmetros de transporte (viscosidade e condutividade térmica), os valores da temperatura adiabática de chama obtidas neste modelo foram um pouco menores que aqueles obtidos com o programa NASA SP-273, concebido para o cálculo de composições em equilíbrio. Isto não infere erro no trabalho ora realizado, apenas que as considerações aqui feitas quanto à geometria e os mecanismos considerados levaram a aquela diferença. Testes de bancada revelariam a qualidade das aproximações feitas.

Um dos resultados que permite modificar o projeto do motor é a rápida ocorrência da reação na câmara deixando-se um espaço livre considerável logo após da ignição. Como naquele lugar possivelmente se consegue estabilizar o escoamento e que nesta região de baixa velocidade o mesmo ainda não é turbulento, uma recomendação seria secionar a câmara reduzindo seu comprimento, para ver o que ocorre com o processo. Isto seria uma maneira de otimizar o projeto, o que entretanto não faz parte deste trabalho.

O acoplamento químico foi bem sucedido garantindo uma boa distribuição das curvas de aparecimento/desaparecimento das espécies químicas.

Como em toda simulação numérica sempre se quer obter uma maior aproximação da realidade sugere-se empregar o modelo turbulento incluindo viscosidade, porém não em sistema bidimensional mas no axissimétrico ou no tridimensional.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Anderson, W. K.; J. L. Thomas; B. Van Leer; A comparison of finite volume flux vector splittings for Euler equations. **American Institute of Aeronautics and Astronautics AIAA Journal** , v. 24, n. 1, p. 1453– 1460, Sept.1986.

Azevedo, J. L. F.; Euler solution of transonic nozzle flows, In: Encontro Nacional de Ciências Térmicas, 3., Itapema, 1990. **Anais.** Sao Carlos: 1990. v.1, p 243- 248.

Azevedo, J. L. F.; L.F. Figueira da Silva; Development of an unstructured grid solver for reactive compressible flow aplications. **AIAA Journal** v. 33 p. 3239, 1997. AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit , Seattle, WA, July 1997.

Back, L. H.; R. F. Cuffel; Detection of oblique shock in conical nozzle with a circular – arc troath. **AIAA Journal**, v. 4, n 12, p. 2219– 2221 Dec. 1996.

Beam, R. M.; R. F. Warming; And implicit factored scheme for compressible Navier-Stokes equations. **AIAA Journal**, v. 16, n. 4, p. 393- 402 April 1978.

Brown, W. K.; F. J. Douglas; J. R. Mcdonough; D. J. Ziobro; **NASTRAN General purpose interface requirements document (IRD)**, Hampton,VA, Aug 01, 1978 (Report NASA-CR-3038 CSC/TR-78/6006).

Byrne, G.D.; A. M. Dean; The numerical solution of some kinetics models with VODE and CHEMKIN – II. **Computers Chemical**, v. 17, n.3, p. 297– 302, 1993.

Chen K. H.; R.H. Pletcher; Primitive variable, strongly implicit calculation procedure for viscous flow at all speed. **AIAA Journal** v. 29, n.8, p 1241-1249 August 1991.

Gordon, S.; B. J. McBride; **Computer program for calculations of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected**

shocks and Chapman – Jouguet detonations. Washington: NASA SP – 273, 1971.

Huzel, Dieter K.; David H. Huang; Design of liquid-propellant rocket engines, progress in astronautics and aeronautics, A. Richard Seebass, Editor. **AIAA Journal** v.147, p. 76– 84 1992.

Jameson A.; T**.** J. Baker; **Solution of the Euler equations for complex configurations**. American Institute of Aeronautics and Astronautics. Paper, n. 83, p. 1926 July 1983.

Ju Jiguang ; Niioka Takashi; Reduced kinetics mechanism of ignition for non premixed Hydrogen/Air in a supersonic mixing layer. **Combustion and Flame**, v. 99 n. 2, p. . 240– 246 Nov. 1994.

Kee, R. J.; F. M. Rupley; J. Miller; **CHEMKIN-II :** a fortran chemical kinetics package for the analisys of gas phase chemical kinetics. Sandia National Laboratories. Apr. 1992, (SAND89-8009B/UC-706).

LeVeque, R. J.; H. C. Yee; A sudy of nmerical mthods for hperbolic cnservation laws with stiff source terms. **Journal of Computational Physics**, v. 86, n. 1, p. 187-210 Jan. 1990.

Long, L. N.; M. M. S. Khan; H. T Sharp; Massively parallel three – dimensional Euler / Navier – Stokes method. **AIAA Journal**, v. 29, n 5, p 657– 666 May 1991.

Lyra, P. M. R.; **Unstructured grid adaptative algorithms for fluid dynamics and heat conductions**, (Ph. D. Thesis), Department of Civil Engineering, University of Wales Swansea , Swansea , Wales , U.K. Oct. 1994.

Maliska, C. R.; A. F. C. Silva; A boundary - fitted finite volume method for the solution of compressible and / or incompressible fluid flows using both velocity and density corrections, in: Internacional Conference on Finite Element in Flow Problemas, 7, Alabama-USA. **Proceedings...** Alabama: p. 405-412.

Martins, R. J.; **Um método de diferenças finitas para simulação de escoamentos em Qualquer Regime de Velocidade**, São José dos Campos. Dissertação (Tese de Mestrado), Instituto Tecnológico de Aeronáutica, Mar. 1994.

Mavriplis, D. J.; Multigrid solution of the two-dimensional Euler equarions on unestructured triangular meshes. **AIAA Journal**, v. 26, n 7, p. 824– 831 July 1988.

Pulliam, T. H.; J. L. Steger; Implicit finite – difference simulations of three – dimensional compressible flows. **AIAA Journal**, v. 18, n. 2, p. 159– 167 1980.

Shapiro Ascher H.; **The dynamics and thermodynamics of compressible fluid flow** Chap. 4, The Ronald Press Co., New York, 1957.

Steger, J. L.; R. F. Warming; Flux vector splitting of the inviscid gas dynamic equations with applications to finite difference methods. **Journal of Computational Physics**, v. 40, p. 263– 293 April 1981.

Strang, G.; On the construction and comparison of difference schemes, SIAM. **Journal of Numerical Analisis**., v. 5, p.506 1968.

Van Leer, B.; Towards the ultimate conservative difference schemes V. A second – order sequel to Godonov's method**. Journal of Computational Physics**, v. 32, n.1, p. 101– 136 July 1979.

Van Leer, B.; Flux – vector splitting for the Euler equations. In: International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, 8., June 1982, Berlin. **Proceedings…**Berlin: v. 170, p 507– 512. Lecture Notes in Physics.

Van Leer,B; W. K Anderson; A comparison of finite volume flux vector splittings for Euler equations. **AIAA Journal**, v. 24, p. 1453– 1460 Sept. 1986.

Williams, F. A.; **Combustion theory.**, 2. ed. Menlo Park, CA: Addison– Wesley Publishing Company, 1988. Chapter 11.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

Anderson. D. A.; Tannehill. J. C.; Pletcher. R. H. **Computational fluid mechanics and heat transfer**, hemisphere Publishing Corporation New York 1984.

Anderson. K. W.;. Thomas. J. L; Van Leer. B. Comparison of finite volume flux vector splittings for the Euler equations. **AIAA Journal** v. 24 n. 9 September 1986.

Azevedo. J. L. Introdução à mecânica dos fluidos computacional. In: Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, 16**.,** Uberlândia 1993. Notas para Minicurso.

Azevedo, J. L.; Ramos, F. Jr. N. G. C. ; Ortega. M. A. Two-dimensional and axisymmetric nozzle flow computational using the Euler equations**. Journal of the Brazil Soc. Mechanical Sciences**, v. 17, n. 2,p. 147-170 1995.

Barros, J. E. M. **Estudo de escoamento reativo em desequilibrío químico através de bocais convergente-divergente**. San Carlos: ENCIT – Itapema, 3. dez. 1990.

Darbandi M.; Schneider, G.E. Momentum variable procedure for solving compressible and incompressible flows. **AIAA Journal**, v. 35, n. 12, p. 1801-1805 Dec. 1997.

Drikakis D.; Tsangaris, S. On the solution of the compressible Navier-Stokes equations using improved flux vector splitting methods. **Applied Mathematics Modelling,** n. 17, p. 282 – 297, June 1993.

Haidinger F.A.; Gorgen, J.; Haeseler, D. Numerical prediction of flow separation for advanced nozzle concepts. In: AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, 34., Cleveland, OH, July 13 - 15, 1998. **Proceedings.** Cleveland, OH: AIAA Paper 98- 3368, July 1998.

Harten, A. High resolutions schemes for hyperbolic conservation laws. **Journal of Computational Physics**, v. 49, p. 357-393 1983.

Hirsch, C. **Numerical computation of internal and external flows**. Baffins Lane England: John Wiley & Sons, 1995.

Jameson, A.; Mavriplis D. Finite volume solution of the two-dimensional Euler equations on regular triangular mesh. **AIAA Journal** v. 24 n. 4, p 611-618, Apr. 1986.

Jameson, A.; Baker, T.J. Solution of the Euler equations for complex configurations. In: Computational Fluid Dynamics Conference, 6, Denver, Massachusetts , 1983. **Proceedings**. Denver , Massachusetts: AIAA, July 1983, n.83, p. 1926. AIAA paper

Johnson, C.; Baker, A. Rocket propulsion analysis codes on the internet**. AIAA Paper** n. 98, p. 3374, Carson City NV, USA, July 1998.

Knab, O.; Prelick, D.; Estublier, D. Flow field prediction whithin liquid cooled combustion chambers of storable bi-propellant rocket engines. **AIAA Paper,** n.98, 3370p.

Karimian, S. M. H.; Schneider; G. E. Pressure-based control-volume finite element method for flow at all speeds. **AIAA Journal** v. 33 n.9 Sep. 1995.

Liepmann H. W.; Roshko, A. **Elements of gasdynamics.** New York: John Wiley, 1957.

Lomax, H. Somes prospects for the future of computational fluid dynamics**. AIAA paper** n.81, p. 994 1-12 June 1981.

MacCormack R.W. Current status of numerical solutions of Navier-Stokes equations. **AIAA paper**, Aerospace Sciences Meeting,23, Reno NV, USA, n. 85. p. 32 1985.

Maliska, C. R. **Mecânica dos fluidos computacional.** Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora RJ, 1995.

Martins J. R.; Azevedo, J. L. A finite difference method for flow simulation at all speeds**.** In: Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, 12. dez. 1993, Brasília. **Anais...** Brasília: Associação Brasileira de Ciências Mecânicas/ UnB-Departamento de Engenharia Mecânica, 1993.

Mavriplis D. J; Jameson, A. Multigrid solution of the Navier Stokes equations on triangular meshes**. AIAA Journal,** v. 28 n.8, Aug. 1990

Mavriplis, D. J. Accuratde multigrid -solution of the Euler equations on unstructured and adaptaive meshes. **AIAA Journal,** v.28, n.2, Febr.. 1990.

Mavriplis, D. J. Adaptative mesh generation for viscous flow using delaunay triangulation. **Journal of Computational Physics** v.90, p. 271,1990.

Mavriplis, D. J. Three-dimensional multigrid Reynolds-averanged Navier-Stokes solver for unstructured meshes**. AIAA Journal,** v. 33, n. 3, p. 445-453, Mar. 1995.

Moon, Y. J. Grid size dependence on convergence for computation of the Navier-Stokes equations. **AIAA Journal Technical Notes,** v. 24, n. 19, p.1705, Oct. 1986.

Moschetta, J.M.;. Pullin, D.I. A robust low diffusive kinetic scheme for the Navier-Stokes/Euler equations**. Journal of Computational Physics**, n.133, p.193 1997.

Patankar, S.V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. New York: Hemisphere Publishing , 1980.

Pulliam, T. H. Artificial dissipation models for the Euler equations. **in:** Aerospace Sciences Meeting,23, **AIAA paper** n. 85, p. 0438, Nevada, Dec. 1986.

Richtmyer, R.D.; Morton; K. W. **Difference methods for initial-value problems**. 2. ed. New York: John Wiley, 1967.

Rose, M. E. Compact finite difference schemes for the Euler and Navier –Stokes equations**. Journal of Computational Physics**, v. 49, p 420, 1983.

Shi Jin . Runge-Kutta Methods for hyperbolic conservation laws with stiff relaxation terms**. Journal of Computational Physics**, v. 122, p. 51 1995.

Steger, J. L. Implicit finite difference simulation of flow about arbitrary geomtries with applications to airfoils. **AIAA paper** , v.77, p. 677, July 1977.

Thompson. P.A. **Compressible-fluid dynamics**. New York: McGraw-Hill, 1972.

Venkatakrishnan V. Perspective on unstructured grid flow solvers. **AIAA Journal**, v. 34, n. 3, p. 533-547, Mar. 1996.

Yang. B.; Pope, S. B. An investigation of the accuracy of manifold methods and splitting schemes in the computational implementation of combustion chemistry, **Combustion and Flame,** n. 112, p. 16 1998.

Zucrow, M. J.; Hoffman. J. D. **Gas Dynamics**. New York: John Wiley & Sons, v.2, 1977.