



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

INPE-11599-TDI/963

**MODELO MATEMÁTICO DE CÂMARAS DE
COMBUSTÃO BIPROPELENTES**

César Addis Valverde-Salvador

Dissertação de Mestrado do Curso de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia Espaciais/Combustão e Propulsão, orientada pelo Dr. Fernando de Souza Costa, aprovada em 01 de março de 2004.

INPE
São José dos Campos
2004

541.126

VALVERDE-SALVADOR, C. A.

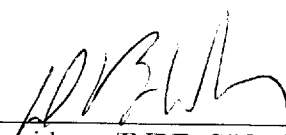
Modelo matemático de câmaras de combustão
bipropelentes / C. A. Valverde-Salvador. – São José dos
Campos: INPE, 2004.

213p. – (INPE-11599-TDI/963).


1.Câmara de combustão. 2.Hidrazina. 3.Motor de
foguetes. 4.Combustível líquido. 5.Modelo matemático.
I.Título.

Aprovado(a) pela Banca Examinadora,
em cumprimento ao requisito exigido
para a obtenção do Título de
**Engenharia e Tecnologia
Espacial/Combustão e Propulsão.**

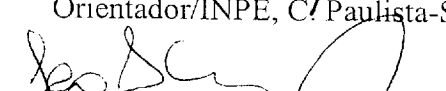
Dr. Demétrio Bastos Netto


Presidente/INPE, SJC Campos-SP

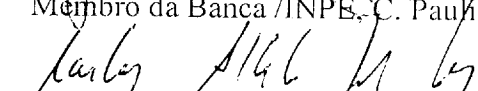
Dr. Fernando de Souza Costa


Orientador/INPE, C. Paulista-SP

Dr. João Andrade de Carvalho Júnior


Membro da Banca /INPE, C. Paulista-SP

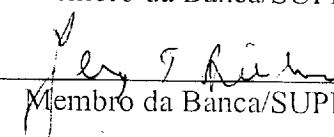
Dr. Carlos Alberto Gurgel Veras


Membro da Banca
Convidado-Universidade de Brasília

Dr. Jerônimo dos Santos Travelho

Membro da Banca/SUPLENTE

Dr. Jerzy Tadeusz Sielawa


Membro da Banca/SUPLENTE

Candidato: César Addis Valverde Salvador

Dedico este trabalho
a meus pais,
e à minha querida
Christy Angela.

AGRADECIMENTOS

Ao Dr. Fernando de Souza Costa, meu orientador, a quem tenho uma grande admiração e respeito, agradeço pela confiança, pela amizade e pela paciência (principalmente durante as correções de linguagem).

Aos meus professores do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE) e ao Governo Brasileiro através do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela bolsa de mestrado concedida.

Aos membros da banca examinadora pela predisposição em analisar este trabalho e pelas sugestões recebidas.

Aos meus colegas de trabalho agradeço pela confiança e amizade.

Ao Sr. Otávio, Maria Aparecida, Maria Ignês agradeço pela constante ajuda.

RESUMO

Desenvolveu-se um modelo matemático unidimensional de uma câmara de combustão de foguete utilizando propelentes líquidos. O processo de combustão é controlado pela vaporização das gotas, uma vez que as taxas de mistura e de reação na fase gasosa são consideradas rápidas em comparação às taxas de vaporização dos propelentes. Considerou-se uma distribuição de gotas não uniforme na entrada, pré-aquecimento das gotas, perdas de calor por convecção e por radiação do gás para as paredes e para as gotas, gotas e gás com diferentes velocidades e o efeito da deformação sobre o arrasto das gotas. Analisou-se a influência da pressão, da temperatura, da razão de equivalência, do número de parcelas de gotas na entrada e dos parâmetros de Rosin-Rammler sobre a distância de vaporização completa. Verificou-se que a troca de calor por radiação para as gotas é muito pequena comparada com a troca por convecção, enquanto as perdas de calor por radiação dos gases quentes para as paredes são significativas. A distância de vaporização e a temperatura da parede externa próxima ao injetor foram calculadas e comparadas aos dados experimentais obtidos de um propulsor de 200 N utilizando MMH e N_2O_4 . Foram analisados e comparados os desempenhos dos sistemas bipropelentes N_2H_4/N_2O_4 , MMH/ N_2O_4 e UDMH/ N_2O_4 e dos sistemas multipropelentes N_2H_4 -MMH/ N_2O_4 e N_2H_4 -UDMH/ N_2O_4 .

MATHEMATICAL MODEL OF BIROPELLANT COMBUSTION CHAMBERS

ABSTRACT

A mathematical model of the combustion chamber of a liquid propellant rocket was developed. The combustion process is assumed to be one-dimensional and controlled by the vaporization of the droplets, since the rates of mixture and reaction in the gaseous phase are fast in comparison to the vaporization rates of the propellants. It was considered a non uniform distribution of droplets at the entrance, the preheating and thermal expansion of the droplets, the heat losses by convection and radiation from the hot gases to the walls and to the droplets, the gas-droplet relative velocity and the effects of droplet deformation on drag. The effects of pressure, temperature, equivalence ratio, number of groups of drops at the entrance and of the Rosin-Rammler parameters on the distance for complete vaporization were analysed. It was found that the radiation heat losses to the droplets are not significant compared to the convection losses, while the radiation losses to the chamber walls are significant. The vaporization distance and external wall temperature close to the injector were calculated and compared to experimental data from a 200 N thruster. The performance of bipropellant systems N_2H_4/N_2O_4 , MMH/ N_2O_4 and UDMH/ N_2O_4 and multipropellant systems N_2H_4 -MMH/ N_2O_4 and N_2H_4 -UDMH/ N_2O_4 were analysed and compared.

SUMÁRIO

Pág.

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE SÍMBOLOS

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO	33
1.1 – Modelos de Escoamentos em Câmaras de Combustão	33
1.1.1 – Modelos Zero-Dimensionais	34
1.1.2 – Modelos Unidimensionais	36
1.1.3 – Modelos Bidimensionais	38
1.1.4 – Modelos Tridimensionais	40
1.2 – Propelente Líquido	43
1.2.1 – Monopropelentes	43
1.2.2 – Bipropelentes	44
1.2.3 – Hidrazina (N_2H_4)	44
1.2.4 – Monometil-hidrazina (CH_3NHNH_2)	45
1.2.5 – Dimetil-hidrazina Assimétrica [$(CH_3)_2NNH_2$]	45
1.2.6 – Tetróxido de Nitrogênio (N_2O_4)	45
1.3 – Objetivos	47
CAPÍTULO 2 – MODELO TEÓRICO	49
2.1 – Descrição e Hipóteses	49
2.2 – Forma de Obtenção das Equações do Problema	51
2.3 – Função de Distribuição de Rosin-Rammler	53
2.4 – Equações de Conservação	60
2.4.1 – Conservação da Massa	60

2.4.2 – Cálculo das Propriedades do Gás	66
2.4.3 – Teoria de Evaporação Transiente para uma Gota Esférica.....	68
2.4.4 – Composição da Fase Gasosa	75
2.4.5 – Conservação da Energia	77
2.4.6 – Determinação da Temperatura da Parede da Câmara.....	80
2.4.7 – Conservação da Quantidade de Movimento.....	84
2.4.8 – Conservação da Quantidade de Movimento das Gotas	85
2.5 – Variáveis a serem Determinadas	89
CAPÍTULO 3 – RESULTADOS E DISCUSSÕES	91
3.1 – Técnicas Numéricas.....	91
3.2 – Técnicas Computacionais	91
3.3 – Sistemas Bipropelentes Simulados.....	92
3.4 – Análise e Discussão dos Resultados Obtidos	94
3.4.1 – Câmaras de Combustão Bipropelentes.....	94
3.4.2 – Câmaras de Combustão Multipropelentes.....	148
3.4.3 – Comparação dos Resultados Numéricos com Medidas Experimentais.....	154
CAPÍTULO 4 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	161
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	165
APÊNDICE A – PROGRAMA DE EQUILÍBRIO QUÍMICO	173
APÊNDICE B – PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS	187
APÊNDICE C – PROPRIEDADES DE TRANSPORTE	195

APÊNDICE D – EMISSIVIDADE DE UMA MISTURA DE GASES	201
APÊNDICE E – PROPRIEDADES DE SATURAÇÃO	205
APÊNDICE F – PROPRIEDADES CRÍTICAS.....	213

LISTA DE FIGURAS

	<u>Pág.</u>
2.1	Esquema do processo de vaporização e queima unidimensional em uma câmara de combustão bipropelente..... 49
2.2	Elementos de volume para uma análise da conservação da massa e da energia 52
2.3	Elementos de volume de controle que descrevem a vaporização do líquido .. 53
2.4	Influência do número de parcelas de gotas sobre a função de distribuição de Rosin-Rammler com parâmetros $q = 1.5$ e $D_{32} = 25 \mu\text{m}$ constantes e para 2, 4, 6, 8, 10 e 12 parcelas de gotas diferentes 57
2.5	Influência dos parâmetros de Rosin-Rammler q e D_{32} sobre D_{max} considerando-se 8 parcelas de gotas para $q = 2$ e 3 e para $D_{32} = 25, 50$ e $75 \mu\text{m}$ 58
2.6	Representação gráfica da Tabela 2.2 59
2.7	Esquema para o balanço de energia na superfície da gota 68
2.8	Balanço de energia na parede da câmara..... 80
2.9	Fluxos de quantidade de movimento dentro da câmara de combustão. (<i>inj</i> : condições de injeção; <i>f</i> : condições ao fim da vaporização)..... 84
2.10	(a) Velocidade relativa entre uma gota e um escoamento, (b) Segunda Lei de Newton aplicada à gota..... 85
3.1	Esquema simplificado de uma câmara de combustão cilíndrica 92

- 3.2 Influência da pressão interna da câmara de combustão, P , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} , para vários números de parcelas de gotas, N . Propelentes: (a) N_2H_4 , (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 0,574$, $\Phi_P = 1,22$, $D_{32} = 50$ μ m, $q = 2,5$ 98
- 3.3 Influência da pressão interna da câmara de combustão, P , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} , para vários números de parcelas de gotas, N . Propelentes: (a) MMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 1$, $\Phi_P = 2,12$, $D_{32} = 50$ μ m, $q = 2,5$ 99
- 3.4 Influência da pressão interna da câmara de combustão, P , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} , para vários números de parcelas de gotas, N . Propelentes: (a) UDMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 1,23$, $\Phi_P = 2,6$, $D_{32} = 50$ μ m, $q = 2,5$ 100
- 3.5 Influência da pressão, P , sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} , para vários combustíveis e N_2O_4 como oxidante. $D_{32} = 50$ μ m, $q = 2,5$, $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K..... 101
- 3.6 Influência do número de parcelas de gotas, N , entrando na câmara de combustão sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} , para várias pressões da câmara. Propelentes: (a) N_2H_4 , (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 0,574$, $\Phi_P = 1,22$, $D_{32} = 50$ μ m, $q = 2,5$ 102
- 3.7 Influência do número de parcelas de gotas, N , entrando na câmara de combustão sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} , para várias pressões da câmara. Propelentes: (a) MMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 1$, $\Phi_P = 2,12$, $D_{32} = 50$ μ m, $q = 2,5$ 103
- 3.8 Influência do número de parcelas de gotas, N , entrando na câmara de combustão sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} , para

	várias pressões da câmara. Propelentes: (a) UDMH, (b) N ₂ O ₄ . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 1,23$, $\Phi_P = 2,6$, $D_{32} = 50$ μ m, $q = 2,5$	104
3.9	Influência dos parâmetros de Rosim-Rammler q e D_{32} sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) N ₂ H ₄ , (b) N ₂ O ₄	105
3.10	Influência dos parâmetros de Rosim-Rammler q e D_{32} sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) N ₂ H ₄ , (b) N ₂ O ₄ . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 0,574$, $\Phi_P = 1,22$, $P = 15$ atm, $N = 8$ parcelas	106
3.11	Influência dos parâmetros de Rosim-Rammler q e D_{32} sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) MMH, (b) N ₂ O ₄ . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 1$, $\Phi_P = 2,12$, $P = 15$ atm, $N = 8$ parcelas.	107
3.12	Influência dos parâmetros de Rosim-Rammler q e D_{32} sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) UDMH, (b) N ₂ O ₄ . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 1,23$, $\Phi_P = 2,6$, $P = 15$ atm, $N = 8$ parcelas	108
3.13	Influência do parâmetro q sobre a distância de vaporização completa, para vários combustíveis e N ₂ O ₄ como oxidante. $P = 15$ atm, $N = 8$ parcelas, $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K.....	109
3.14	Influência do diâmetro médio de Sauter, D_{32} , sobre a distância de vaporização completa, para vários combustíveis e N ₂ O ₄ como oxidante. $P = 15$ atm, $N = 8$ parcelas, $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K	109
3.15	Influência da razão de equivalência pré-misturada Φ_P sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) N ₂ H ₄ , (b) N ₂ O ₄ . $T_{g,0} =$	

	800 K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 0,574$, $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$	110
3.16	Influência da razão de equivalência pré-misturada Φ_P sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) MMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 1$, $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$	111
3.17	Influência da razão de equivalência pré-misturada Φ_P sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) UDMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 2,6$, $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$	112
3.18	Influência da razão de equivalência total, Φ_T , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) N_2H_4 , (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_P = 1,22$, $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$	113
3.19	Influência da razão de equivalência total, Φ_T , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) MMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_P = 2,12$, $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$	114
3.20	Influência da razão de equivalência total, Φ_T , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) UDMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_P = 2,6$, $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$	115
3.21	Influência da razão de equivalência total, Φ_T , sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} , para vários combustíveis e N_2O_4 como	

	oxidante. $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50 \mu\text{m}$, $q = 2.5$, $T_{g,0} = 800 \text{ K}$, $T_{F,l,0} = 280 \text{ K}$, $T_{Ox,l,0} = 286 \text{ K}$	116
3.22	Influência da temperatura do gás na entrada, T_{g0} , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) N_2H_4 , (b) N_2O_4 . $N =$ 8 parcelas, $D_{32} = 50 \mu\text{m}$, $q = 2.5$, $T_{F,l,0} = 280 \text{ K}$, $T_{Ox,l,0} = 286 \text{ K}$, $\Phi_P = 1,22$, $\Phi_T = 0,574$	117
3.23	Influência da temperatura do gás na entrada, T_{g0} , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) MMH, (b) N_2O_4 . $N =$ 8 parcelas, $D_{32} = 50 \mu\text{m}$, $q = 2,5$, $T_{F,l,0} = 280 \text{ K}$, $T_{Ox,l,0} = 286 \text{ K}$, $\Phi_P =$ $2,12$, $\Phi_T = 1$	118
3.24	Influência da temperatura do gás na entrada, T_{g0} , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) UDMH, (b) N_2O_4 . $N =$ 8 parcelas, $D_{32} = 50 \mu\text{m}$, $q = 2.5$, $T_{F,l,0} = 280 \text{ K}$, $T_{Ox,l,0} = 286 \text{ K}$, $\Phi_P = 2,6$, $\Phi_T = 1,23$	119
3.25	Influência da temperatura do gás na entrada, T_{g0} , sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} , para vários combustíveis e N_2O_4 como oxidante. $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50 \mu\text{m}$, $q = 2,5$, $T_{F,l,0} = 280 \text{ K}$, $T_{Ox,l,0} = 286 \text{ K}$	120
3.26	Evolução do diâmetro adimensional, D/D_0 , das gotas do combustível e do oxidante, para vários diâmetros iniciais de gotas. (a) 1 parcela, (b) 4 parcelas. Propelentes: MMH/ N_2O_4 . $P = 15 \text{ atm}$, $T_{g,0} = 800 \text{ K}$, $T_{F,l,0} = 280 \text{ K}$, $T_{Ox,l,0} = 286 \text{ K}$, $D_{32} = 50 \mu\text{m}$, $q = 2,5$	127
3.27	Varição da temperatura do gás, T_g , e da razão de equivalência, Φ_g , ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/ N_2O_4	128
3.28	Varição do coeficiente de película do gás, $\hat{h}_{pel,g}$, e da emissividade do gás, ε_g , ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/ N_2O_4	128

3.29	Evolução da temperatura do líquido, T_l , ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	129
3.30	Velocidades das gotas, v_d , e velocidade do escoamento gasoso, v_g , ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	129
3.31	Perdas de calor, por unidade de comprimento, do gás para a parede por convecção, dQ_{conv}/dx , e por radiação, dQ_{rad}/dx , ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	130
3.32	Temperaturas interna e externa da parede da câmara, T_{wi} e T_{we} , ao longo do combustor. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	130
3.33	Variação da porcentagem de perdas de calor por convecção e por radiação do gás para a parede da câmara ao longo do combustor. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	131
3.34	Variação do número de Mach, M , e do coeficiente politrópico, γ , dos produtos da combustão ao longo do combustor. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	131
3.35	Variação das frações molares, X_i , dos produtos principais da combustão, CO ₂ , CO, H ₂ O, H ₂ , O ₂ e N ₂ ao longo do combustor. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	132
3.36	Variação das frações molares, X_i , dos produtos secundários da combustão, H, OH, O, NO e N ao longo do combustor. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	132
3.37	Perdas de calor por convecção, \dot{Q}_{conv} , do gás para as gotas do combustível e do oxidante ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	133
3.38	Perdas de calor por radiação, \dot{Q}_{rad} , do gás para as gotas do combustível e do oxidante ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	133

3.39	Evolução da taxa de vaporização, \dot{m}_v , das gotas do combustível e do oxidante ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	134
3.40	Variação do número de Weber, We , das gotas de combustível e de oxidante ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	134
3.41	Variação do número de Reynolds, Re_d , para cálculo da convecção de calor sobre as gotas ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄ .	135
3.42	Variação do número de Reynolds, Re_{CD} , para cálculo do arrasto sobre as gotas de combustível e de oxidante ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	135
3.43	Variação do número de Prandtl, Pr , para as misturas dos vapores dos propelentes com os produtos da combustão, ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	136
3.44	Variação do número de Nusselt, Nu , das gotas de combustível e de oxidante, ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	136
3.45	Velocidade relativa gás-gota, v_{rel} , para o combustível e para o oxidante ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	137
3.46	Temperatura de referência, T_r , do combustível e do oxidante ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	137
3.47	Percentagens das vazões de massa das parcelas do combustível e do oxidante líquidos e do gás ao longo da câmara de combustão, para 4 parcelas de gotas. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	138
3.48	Percentagens da área do líquido e do gás ao longo da câmara de combustão e para 4 parcelas de gotas. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	138

3.49	Variação da densidade e da viscosidade do gás, ρ_g e η_g , ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	139
3.50	Variação da massa molar e do calor específico do gás, M_g e C_{pg} , ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	139
3.51	Área superficial adimensional, D^2/D_0^2 , vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	140
3.52	Diâmetro adimensional, D/D_0 , vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	140
3.53	Temperatura do líquido, T_l , vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	141
3.54	Porcentagem de massa vaporizada, % \dot{m}_v , vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: MMH/N ₂ O ₄	141
3.55	Evolução do diâmetro adimensional das gotas, D/D_0 , do combustível e do oxidante. Propelentes: (a) N ₂ H ₄ /N ₂ O ₄ , (b)UDMH/N ₂ O ₄	143
3.56	Diâmetro adimensional ao quadrado, D^2/D_0^2 , vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: (a) N ₂ H ₄ /N ₂ O ₄ , (b) UDMH/N ₂ O ₄	144
3.57	Diâmetro adimensional, D/D_0 , vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: (a) N ₂ H ₄ /N ₂ O ₄ , (b) UDMH/N ₂ O ₄	145
3.58	Temperatura do líquido, T_l , vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: (a) N ₂ H ₄ /N ₂ O ₄ , (b) UDMH/N ₂ O ₄	146

3.59	Porcentagem de massa vaporizada, % \dot{m}_v , vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: (a) N_2H_4/N_2O_4 , (b) UDMH/ N_2O_4	147
3.60	Influência da porcentagem de massa de N_2H_4 sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} , em uma câmara de combustão multipropelente, para várias pressões: (a) x_{vap} de N_2H_4 , (b) x_{vap} de MMH. Combustíveis: N_2H_4 e MMH. Oxidante: N_2O_4	150
3.61	Influência da porcentagem de massa de N_2H_4 sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} , em uma câmara de combustão multipropelente, para várias pressões: (a) x_{vap} de N_2H_4 , (b) x_{vap} de UDMH. Combustíveis: N_2H_4 e UDMH. Oxidante: N_2O_4	151
3.62	Influência da porcentagem de N_2H_4 em massa sobre a distância de vaporização completa de N_2H_4 misturado com MMH ou UDMH, x_{vap} , em uma câmara de combustão multipropelente. $P = 30$ atm.....	152
3.63	Influência da porcentagem de N_2H_4 em massa sobre a distância de vaporização completa dos combustíveis MMH e UDMH com N_2H_4 , x_{vap} , em uma câmara de combustão multipropelente. $P = 30$ atm.....	152
3.64	Influência da porcentagem em massa de N_2H_4 sobre a temperatura máxima do gás, $T_{g,max}$, em uma câmara de combustão multi-propelente, para várias pressões. Combustíveis: N_2H_4 e MMH. Oxidante: N_2O_4	153
3.65	Influência da porcentagem em massa de N_2H_4 sobre a temperatura máxima do gás, $T_{g,max}$, em uma câmara de combustão multipropelente, para várias pressões. Combustíveis: N_2H_4 e UDMH. Oxidante: N_2O_4	153
3.66	Influência da porcentagem em massa de N_2H_4 em misturas de MMH e de UDMH sobre a temperatura máxima do gás, $T_{g,max}$, em uma câmara de combustão multipropelente. $P = 30$ atm.....	154

3.67	Dimensões dos elementos injetores do motor bipropelente de 200 N. (a) Injetor central; (b) Injetor periférico.....	155
3.68	Evolução do diâmetro adimensional, D/D_0 , das gotas ao longo da câmara de combustão. Simulação do motor bipropelente de 200 N.....	158
3.69	Velocidade das gotas, v_d , e velocidade do escoamento, v_g , ao longo da câmara. Simulação do motor bipropelente de 200 N.....	158
3.70	Variação do número de Mach, M , e do coeficiente politrópico, γ , ao longo do câmara de combustão. Motor bipropelente de 200 N.....	159
3.71	Variação da temperatura do gás, T_g , e das paredes interna e externa, T_{wi} e T_{we} . Motor bipropelente de 200 N	159

LISTA DE TABELAS

	<u>Pág.</u>
1.1 Comparação dos parâmetros característicos de foguetes bipropelentes utilizando hidrazinas como combustíveis e N_2O_4 como oxidante.....	46
2.1 Cálculo do SMD de cada uma das parcelas de gotas para o caso: $D_{32} = 25$ μm e $q = 1.5$	49
2.2 Influência dos parâmetros de Rosin-Rammler q e D_{32} sobre D_{max} obtidos a partir da Figura 2.5, D_{max} em μm	59
3.1 Dados de entrada para a simulação de câmaras de combustão multipropelentes	148
3.2 Dados do Propulsor de 200 N testado no LCP/INPE	154
C.1 Parâmetros de Lennard-Jones.....	199
C.2 Métodos para a determinação de σ e ϵ/k	200
D.1 Constantes de correlação para a determinação da emissividade total do vapor da água e do dióxido de carbono	202
E.1 Propriedades de saturação do oxigênio (fase líquida)	205
E.2 Propriedades de saturação do hidrogênio (fase líquida).....	205
E.3 Propriedades de saturação do heptano (fase líquida).....	206
E.4 Constantes da equação de Antoine	212
F.1 Propriedades críticas das espécies	213

LISTA DE SÍMBOLOS

Latinos

A	- área, m^2
A, B	- constantes, adimensional
B_M	- número de transferência, adimensional
C_D	- coeficiente de arrasto da gota, adimensional
C_p	- calor específico a pressão constante, $J\ kg^{-1}\ K^{-1}$
C_v	- calor específico a volume constante, $J\ kg^{-1}\ K^{-1}$
d_L	- diâmetro do jato líquido, $J\ kg^{-1}\ K^{-1}$
D	- diâmetro da gota, m
D_c	- diâmetro da câmara de combustão, m
D_{ii}	- coeficiente de autodifusão, $m^2\ s^{-1}$
D_{32}	- diâmetro médio de Sauter, m
ΔP_L	- perdas de carga nos injetores, MPa
F	- força de arrasto, N
f	- razão de mistura, adimensional
$f(x)$	- função de peso linear ao longo da câmara, adimensional
$f(T)$	- sistema de equações não lineares
$f'(T)$	- jacobiano do sistema de equações não lineares
f_{CO_2}	- fator de correção de pressão do CO_2 , adimensional
f_{H_2O}	- fator de correção de pressão do H_2O , adimensional
h	- entalpia específica, $J\ kg^{-1}$
h_{fg}	- entalpia de vaporização, $J\ kg^{-1}$
\tilde{h}^*	- coeficiente de convecção para o aquecimento de uma gota, $W\ m^{-2}\ K^{-1}$
\hat{h}_g	- coeficiente de convecção dos gases quentes, $W\ m^{-2}\ K^{-1}$
\hat{h}_∞	- coeficiente de convecção do ambiente, $W\ m^{-2}\ K^{-1}$
k_B	- constante de Boltzmann, $J\ K^{-1}$
K_P	- constante de equilíbrio da reação
\bar{M}	- massa molar, $kg\ kmol^{-1}$
M	- número de Mach, adimensional
m_d	- massa de uma gota, kg
\dot{m}	- vazão de massa, $kg\ s^{-1}$
m_i	- massa de uma molécula da espécie i , $kg\ molécula^{-1}$
\dot{m}_v	- taxa de vaporização do líquido, $kg\ s^{-1}$
n	- número de moles, mol
\dot{N}	- número de gotas entrando no combustor por unidade de tempo, $gotas\ s^{-1}$
N	- número de Avogadro, $moléculas\ mol^{-1}$
Nu_0	- número de Nusselt para transferência de calor em uma esfera rígida

P	- pressão, Pa
P_c	- pressão crítica, Pa
P_{vs}	- pressão de vapor na superfície da gota, Pa
Pr	- número de Prandtl, adimensional
q	- parâmetro de Rosin-Rammler que indica a uniformidade das gotas, adimensional
Q	- fração de volume contendo gotas com diâmetros menores que D , adimensional
\dot{Q}_l	- calor usado para o aquecimento de uma gota, W
\dot{Q}_v	- calor usado para a vaporização de uma gota, W
$\dot{Q}_{conv,d}$	- calor transferido por convecção dos gases quentes para uma gota, W
$\dot{Q}_{conv,p}$	- calor transferido por convecção dos gases quentes para as paredes da câmara, W
\dot{Q}_{cond}''	- fluxo de calor por condução através das camadas da parede da câmara, W/m ²
$\dot{Q}_{rad,d}$	- calor transferido por radiação dos gases quentes para uma gota, W
$\dot{Q}_{rad,p}$	- calor transferido por radiação dos gases quentes para as paredes da câmara, W
Re	- número de Reynolds, adimensional
R_0	- constante universal dos gases, 8314,5 J kg ⁻¹ K ⁻¹
T	- temperatura, K
T_c	- temperatura crítica, K
T_b, T_{eb}	- temperatura de ebulição, K
T_{wi}	- temperatura interna da parede sem resfriamento, K
T_{we}	- temperatura externa da parede sem resfriamento, K
T_{wic}	- temperatura interna da parede com resfriamento, K
T_{wec}	- temperatura externa da parede com resfriamento, K
t_w	- espessura da parede da câmara, m
t_e	- tempo de evaporação das gotas, s
V_c	- volume crítico, m ³
v	- velocidade, m s ⁻¹
v_{rel}	- velocidade relativa entre o gás e as gotas, m s ⁻¹
We	- número de Weber, adimensional
x_{vap}	- distância de vaporização completa, m
X_i	- fração molar da espécie i , adimensional
Y_s	- fração de massa de vapor na superfície da gota, adimensional
Z_{rot}	- número de colisão de relaxação rotacional, adimensional

Gregos

ρ	- densidade, kg m ⁻³
ρ_i	- densidade da espécie i , kg m ⁻³
ρ_a	- densidade do ar, kg m ⁻³

Φ	- razão de equivalência, adimensional
θ	- semiângulo de saída do cone, graus
ε	- emissividade, adimensional
ε_i	- potencial de Lennard-Jones da espécie i , adimensional
σ	- constante de Stefan-Boltzmann, $5.6704 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$
σ_i	- diâmetro de colisão de Lennard-Jones da espécie i , Å°
γ	- razão de calores específicos, adimensional
λ	- condutividade, $\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$
λ_i	- condutividade da espécie i , $\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$
μ_i	- momento dipolo da espécie i , adimensional
η	- viscosidade, N s m^{-2}
η_i	- viscosidade da espécie i , N s m^{-2}
τ	- tensão superficial, N m^{-1}
Ψ	- fator de correção para o número de Nusselt, adimensional
$\Omega^{(1,1)*}$	- integral de colisão para cálculo da difusividade, adimensional
$\Omega^{(2,2)*}$	- integral de colisão para cálculo da viscosidade, adimensional

Índices Inferiores

a	- condição do gás à uma temperatura média entre o vapor de propelente e produtos da combustão
c	- câmara de combustão
d	- gota
f	- condições finais
F	- combustível
g	- gás
inj	- condições de injeção
i	- parcela i de gotas de combustível do mesmo diâmetro
j	- parcela j de gotas de oxidante do mesmo diâmetro
l, L	- líquido
Ox	- oxidante
P	- pré-misturado
p	- produtos da combustão
r	- condição de referência
S	- condições estequiométricas
s	- condições na superfície da gota
T	- total
v	- vapor
w	- parede
∞	- condições em torno à câmara
0	- condição na entrada da câmara

Índices Superiores

o - condição padrão de referência.

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

CFD	- Dinâmica de fluidos computacional
EDO	- Equação diferencial ordinária
LHF	- Escoamento localmente homogêneo
LRE	- Motor de foguete líquido
MMH	- Mono metil hidrazina
NIST	- Instituto Nacional de Tecnologia e Padrões dos EUA.
NTO	- Tetróxido de nitrogênio.
PSR	- Reator perfeitamente misturado
SF	- Escoamento separado
SMD	- Diâmetro médio de Sauter
UDMH	- Dimetil-hidrazina assimétrica.
UDMH	- Dimetil-hidrazina simétrica.
VC	- Volume de controle

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1. Modelos de Escoamentos em Câmaras de Combustão

Modelos matemáticos da combustão de nuvens de gotas, ou “sprays”, são importantes para o projeto e o desenvolvimento de câmaras de combustão de foguetes. O uso destes modelos pode reduzir o número de testes em protótipos, permite executar melhorias no projeto ou modificar as condições de operação de câmaras de combustão a um custo menor e em menor tempo do que utilizando métodos empíricos ou de tentativa e erro.

Existem diversos modelos na literatura sobre a queima de sprays. Eles podem ser classificados em modelos de escoamento localmente homogêneo (LHF), em modelos de escoamento separado (SF) ou em modelos baseados em correlações experimentais (Kuo, 1986).

Modelos baseados em correlações experimentais são os mais simples de usar, mas requerem um número grande de experimentos em um dado combustor e somente podem ser usados em combustores do mesmo tipo.

Modelos LHF consideram o spray equivalente a um escoamento de fase simples em que as fases líquida e gasosa estão em equilíbrio dinâmico e termodinâmico, com a mesma velocidade e temperatura em cada ponto do escoamento. A hipótese básica é que as variações das propriedades do escoamento sejam bem mais lentas do que o transporte de massa, de energia e de quantidade de movimento entre as fases. Os modelos LHF são úteis para sprays com gotas muito pequenas, escoamentos com bolhas e sprays em condições supercríticas. As distribuições iniciais de velocidade e de tamanho de gotas não são necessárias e, portanto, pouca informação é requerida a respeito do injetor. Outra vantagem dos modelos LHF é que os cálculos não são tão complexos nem demandam tanto tempo quanto os modelos SF. Os modelos de escoamento unifásicos existentes podem ser utilizados com poucas modificações para modelar escoamentos LHF. Menos constantes empíricas são necessárias nos modelos LHF do que nos modelos SF.

Nos modelos SF os processos de transporte nas fases líquida e gasosa e os transportes de massa, de quantidade de movimento e de energia entre as fases são levados em consideração. A prática comum é utilizar expressões empíricas para o arrasto e a transferência de calor e massa das gotas, uma vez que o modelamento detalhado do escoamento ao redor de cada gota requer um tempo de computação bastante grande.

Os modelos matemáticos de sprays podem também ser classificados em termos do número de dimensões espaciais utilizadas. Eles podem ser classificados como zero-dimensionais, unidimensionais, bidimensionais ou tridimensionais. Cada um deles pode também ser classificado como estacionário (regime permanente) ou transiente se houver variações do escoamento com o tempo. A seguir é feita uma descrição de alguns modelos de escoamento reativo em câmaras de combustão.

1.1.1. Modelos Zero-Dimensionais

Nestes modelos as propriedades da mistura reativa dentro da câmara de combustão independem das coordenadas espaciais, ou seja, a zona de reação é tratada como uma unidade simples onde as propriedades do escoamento como a velocidade, a temperatura e a composição dos produtos são consideradas uniformes. Não são considerados os detalhes da evaporação e da queima das gotas.

Os modelos zero-dimensionais incluem modelos de equilíbrio químico e modelos de reatores bem misturados (PSR). Os modelos de equilíbrio químico pressupõem uma câmara de comprimento infinito de modo a se atingir o equilíbrio termodinâmico ao final do processo. Nos modelos PSR a composição e a temperatura dos produtos da combustão dependem do tempo de residência ou do volume da câmara, não se atingindo, assim, o equilíbrio químico. Os modelos zero-dimensionais geram um conjunto de equações algébricas não lineares que podem ser resolvidas por métodos iterativos.

Os primeiros modelos zero-dimensionais de câmaras de combustão baseados no conceito de PSR foram desenvolvidos por Bragg (1953), Avery e Hart (1953) e por Vulis (1961).

Longwell et al. (1956) projetaram e construíram um combustor esférico para simular um PSR, em que os reagentes eram pré-misturados e injetados na câmara de combustão a velocidades altas o suficiente para agitar e distribuir uniformemente os produtos da combustão dentro da câmara.

Odgers et al. (1959, 1962, 1965, 1972) fizeram experimentos com um modelo similar ao de Longwell utilizando vários combustíveis e para um amplo intervalo de condições de operação, visando obter expressões empíricas para determinar a eficiência e as condições de estabilidade de combustão.

Miraglia (1994) utilizou um modelo zero-dimensional transiente usando equilíbrio químico para projetar sistemas propulsivos monopropelentes e bipropelentes líquidos.

Lieuwen e Zinn (1998) estudaram instabilidades em câmaras de combustão através de PSR's transientes. Khaleghi e Hosseini (2001) estudaram câmaras de combustão de motores diesel usando PSR's e compararam os resultados teóricos a simulações de códigos CFD tridimensionais e a resultados experimentais.

Barbosa e Santana-Jr (2001) apresentaram um modelo matemático zero-dimensional transiente com equilíbrio químico para simular o comportamento de um foguete bipropelente durante o acionamento e o desligamento do motor. Eles analisaram a influência do atraso de ignição, do volume da câmara de combustão, do diâmetro e do comprimento dos injetores sobre as instabilidades de baixa frequência da câmara de combustão.

Existem vários programas comerciais para o projeto de câmaras de combustão considerando-se equilíbrio químico ou adotando-se modelos PSR. O programa CEC (Chemical Equilibrium Code), descrito no relatório NASA SP-273 e elaborado por Gordon e McBride (1971), permite o cálculo da temperatura e da composição nas condições de equilíbrio isobárico em uma câmara de combustão de foguete. Este programa ainda é bastante utilizado no projeto preliminar do desempenho de foguetes. O programa AURORA da coleção CHEMKIN (Kee et al., 2002) possibilita o cálculo das propriedades de um PSR em regime permanente ou transiente, considerando

propriedades de misturas multicomponentes e dependentes da temperatura com mecanismos químicos detalhados.

1.1.2. Modelos Unidimensionais

Nos modelos unidimensionais as propriedades do escoamento dependem apenas de uma coordenada espacial. Estes modelos são os mais utilizados por sua simplicidade e reduzido tempo de computação, embora possam envolver inúmeros detalhes do processo de vaporização e da queima das gotas.

Spalding (1959) desenvolveu um modelo teórico unidimensional considerando queima de gotas de mesmo tamanho, reação instantânea do gás evaporado e densidade do gás constante. Foram obtidos os perfis de velocidade das gotas, da velocidade do gás e do diâmetro da gota em função do arrasto sobre as gotas e da velocidade de injeção das mesmas.

Priem e Heidmann (1960) desenvolveram um modelo calculando a eficiência de combustão de vários propelentes para um processo de combustão controlado pela vaporização das gotas. O escoamento na câmara de combustão foi considerado unidimensional e a temperatura do gás constante, com gotas de mesmo tamanho. Levou-se em conta o aquecimento das gotas e o arrasto sobre elas, porém foi desconsiderada a combustão ao redor de cada gota e admitiu-se que as gotas evaporassem nos produtos gasosos a alta temperatura.

Hersch (1965) desenvolveu um modelo baseado na hipótese de que o desempenho da combustão em câmaras de foguete está limitado somente pela difusão turbulenta da fase gasosa, ou seja, pelo processo de mistura de oxidante e vapor de combustível. O modelo mostra como a razão de mistura, o comprimento da câmara, o espaçamento dos furos dos injetores e a intensidade turbulenta afetam o desempenho da combustão.

Hottel et al. (1967) idealizaram um modelo em que a combustão na câmara é rápida o suficiente para que a temperatura dos gases de exaustão seja aproximadamente igual à

temperatura de chama adiabática. Admitiram que o fluxo radiativo na direção do escoamento era desprezível em comparação ao fluxo radiativo na direção normal.

Dickinson e Marshall (1968) usaram um modelo unidimensional para determinar o efeito da distribuição do tamanho de gotas em um spray. Admitiram que os efeitos da força de arrasto e a evaporação das gotas sobre a velocidade do gás é desprezível e a temperatura da gota foi considerada constante.

Heywood et al. (1971) modelaram zonas secundárias de combustores de turbinas a gás admitindo mistura instantânea com o ar secundário e fizeram previsões da quantidade de NO_x formado da mesma ordem que a obtida experimentalmente em turbinas a gás para aviões.

Bracco (1973) desenvolveu um modelo unidimensional transiente para o processo de evaporação das gotas usando em conjunto a equação do spray e a equação da energia da fase gasosa admitindo pressão constante na câmara. Em sua análise é considerada a transferência de calor por convecção do gás para as gotas, porém o efeito do aquecimento das gotas é desprezado.

Essenhigh (1974) apresentou um modelo teórico unidimensional o qual foi aplicado na análise de uma chama adiabática usando uma sequência de reatores PSR. A chama era dividida em várias células onde cada uma delas definia um PSR. Essenhigh obteve equações algébricas não lineares cujas soluções mostram os perfis de concentrações e de temperatura dos produtos da combustão em função do tempo e da distância.

Kollrack e Aceto (1974) estudaram os efeitos da recirculação e da adição de ar secundário em um combustor sobre a formação de NO_x (óxidos de nitrogênio) em uma câmara de combustão.

Law (1975) usou um modelo unidimensional, baseado nas idéias de Dickinson e Marshall, onde admitiu que a velocidade e a temperatura do gás variassem devido ao processo de evaporação das gotas.

Mellor (1975) desenvolveu um modelo considerando evaporação das gotas, calculando o tempo de residência das mesmas dentro do combustor assim como o tempo de ignição do propelente e o tempo para a formação de NO_x .

Em outros modelos unidimensionais foram considerados aspectos como a quebra de gotas, propriedades variáveis e combustão (Burstein et al., 1962; Lambiris et al., 1963), com a inclusão de modelos aproximados para a zona de injeção, onde a hipótese unidimensional não é tão adequada.

Priem e Heidmann (1960), e Dipprey (1972), aplicaram modelos unidimensionais de vaporização controlada em propulsores de foguete líquido, e Turns e Faeth (1985), usaram este modelo aproximado para a combustão de carvão em um combustor.

Williams (1985) apresentou um modelo simplificado para a queima de sprays calculando a eficiência de combustão a partir da distribuição inicial de gotas.

Avampato e Saltiel (1995) desenvolveram um modelo matemático unidimensional baseado nas características de projeto de um motor de foguete a propelente líquido com empuxo de 20000 lb usando hidrogênio como combustível, analisando o transiente de acionamento do motor e a troca de calor regenerativa nas paredes da câmara.

Krioukov et al. (2003) analisaram o processo de vaporização das gotas, velocidade das gotas e a temperatura do gás ao longo de uma tubeira, admitindo escoamento unidimensional bifásico, gotas esféricas e uma distribuição discreta de gotas representada por grupos de gotas, cada grupo contendo gotas do mesmo tamanho, e gotas com temperatura uniforme e constante. Eles consideraram a divisão e a coagulação de partículas devido as colisões, diferença de temperatura na fase gasosa e na fase líquida (cada grupo de partículas tem uma temperatura específica), diferença nas velocidades da fase gasosa e da fase líquida e perdas do impulso específico.

1.1.3. Modelos Bidimensionais

Os modelos bidimensionais são utilizados para simular escoamentos com simetria axial em câmaras de combustão cilíndricas. As variáveis espaciais são a posição radial e a

posição ao longo do escoamento. Estes modelos têm sido bastante utilizados em projetos de combustores para turbinas a gás.

Spalding e Patankar (1970) desenvolveram um modelo considerando escoamento reativo turbulento com transferência de calor por convecção e por radiação para as paredes do combustor.

Spalding (1974) desenvolveu um modelo axissimétrico para combustores de turbinas onde combustível gasoso era injetado na câmara de combustão e misturado com ar secundário formando uma camada de gás frio na parede. O modelo levava em consideração recirculação e turbulência, flutuações da concentração de combustível, radiação, cinética química e formação de NO_x , apresentando boa concordância com resultados experimentais.

Liang et al. (1985) desenvolveram um modelo do escoamento axissimétrico transiente reativo em uma câmara de combustão bipropelente, baseando-se em um modelo existente para simulação de motores de combustão interna. Eles consideraram um escoamento com uma fase gasosa formada pelos produtos da combustão, uma fase líquida incompressível e uma fase contendo gotas. As fases contínuas foram tratadas pelo método euleriano ICE (Implicit Continuous Eulerian) e pelo método de descrição da superfície livre VOF (Fractional Volume of Fluid) e as gotas foram tratadas por um método lagrangiano. Modelos semiempíricos foram usados para descrever o acoplamento entre as fases e para a reação química na fase gasosa turbulenta.

Raju e Sirignano (1988) desenvolveram um modelo matemático bidimensional transiente para projetar combustores de turbinas a gás. Eles consideraram em seu modelo sprays polidispersos e multicomponentes, evaporação do combustível, quebra de gotas, colisões entre gotas, mistura turbulenta, cinética química dos gases e mecânica de fluidos multidimensional. Também levaram em conta o aquecimento das gotas e o aumento da difusão de massa devido à convecção.

Einecke et al. (1998) apresentaram um modelo axissimétrico e transiente para o cálculo da distribuição de temperaturas em uma câmara de combustão com ignição por centelha

e compararam os resultados numéricos com medidas experimentais utilizando a técnica de fluorescência induzida a laser.

Wadel (1998) apresentou um modelo axissimétrico de uma câmara de combustão com refrigeração regenerativa na parede externa. Para isto projetou sete modelos diferentes de câmaras com canais de esfriamento usando vários formatos para a área interna de cada canal. Seus resultados mostram que até o 20 % do calor emitido pelos gases quentes pode ser absorvido diminuindo a temperatura da parede e reduzindo os riscos de explosão nos lançamentos.

Krioukov e Iskhakova (2003) desenvolveram um modelo bidimensional para o escoamento bifásico em uma tubeira, admitindo escoamento congelado. As perdas de calor para a parede da tubeira foram desprezadas e foram consideradas gotas de mesmo tamanho injetadas com a mesma velocidade do gás.

1.1.4. Modelos Tridimensionais

Modelos tridimensionais permitem uma descrição mais detalhada do escoamento dentro da câmara do que os outros modelos e possibilitariam, a princípio, uma melhor predição do desempenho de uma câmara de combustão. No entanto o modelamento de cada fenômeno envolvido, como injeção, quebra dos jatos líquidos, vaporização das gotas, mistura turbulenta e combustão inclui aproximações que somadas podem conduzir a erros maiores do que os ocorridos nos modelos mais simples. Os modelos tridimensionais requerem também um tempo computacional maior para as simulações que os modelos mais simples. Existem vários modelos tridimensionais disponíveis, inclusive códigos comerciais, que podem fornecer dados qualitativos sobre a distribuição de concentração das espécies, de temperaturas e sobre as velocidades do gás em qualquer posição da câmara de combustão.

Spalding et al. (1976) desenvolveram um modelo tridimensional usando o método de diferenças finitas para calcular o escoamento local, transferência de calor e o processo de combustão onde são consideradas a recirculação e a turbulência.

Rizk e Mongia (1986) desenvolveram uma metodologia de projeto de combustores de turbinas a gás considerando os efeitos da turbulência, os processos de vaporização e de combustão de gotas, a reação química da fase gasosa, as colisões entre as gotas e a parede da câmara e a quebra de gotas. Dados experimentais da distribuição de tamanho de gotas em um spray foram adotados para representar a injeção de propelente na entrada.

Talpallikar et al. (1991) usaram o código computacional tridimensional REFLEQS para simular a câmara de combustão de turbinas a gás aeronáuticas, tendo como finalidade principal o estudo de emissões de NO_x . Os resultados numéricos mostraram boa concordância com vários resultados experimentais.

Reitz e Rutland (1993) apresentaram um modelo tridimensional de uma câmara de combustão de motor diesel baseado no código computacional KIVA. Este código foi modificado incluindo novos sub-modelos projetados considerando-se a transferência de calor pelas paredes da câmara, regimes do escoamento laminar e turbulento, mecanismos de Zeldovich para a formação de NO_x , quebra de gotas e forças de arrasto sobre as gotas devido as forças aerodinâmicas. Foram feitos testes para diversas geometrias da câmara de combustão e os resultados numéricos foram comparados a resultados experimentais.

Schley et al. (1996) fizeram uma revisão de esquemas numéricos para a simulação de câmaras de combustão, considerando aspectos de injeção, atomização, mistura turbulenta e de combustão. Analisaram modelos de câmaras de combustão usando propelentes criogênicos. Eles concluíram que o modelamento dos fenômenos que controlam a combustão ainda não asseguram resultados confiáveis quantitativamente. Eles afirmaram também que o desenvolvimento de um único código simulando todos os fenômenos em uma câmara, desde a injeção dos propelentes até a transferência de calor para as paredes na câmara e na tubeira, deveria levar ainda muitos anos para a obtenção de resultados quantitativos mais precisos.

Yang e Chen (1997) investigaram numericamente as emissões de NO_x e a transferência de calor em combustores de turbinas a gás utilizando uma versão modificada do código computacional KIVA-II.

Bazdidi-Tehrani e Jahromi (2001) fizeram um modelo numérico tridimensional para uma câmara de combustão de turbina a gás utilizando o código FLUENT. Os resultados numéricos foram comparados a medidas experimentais, apresentando boa concordância.

Steffen et al. (2002) desenvolveram um modelo numérico tridimensional de uma câmara de combustão para foguetes considerando escoamento multifásico turbulento, subsônico ou supersônico.

Edward et al. (2003) desenvolveram um algoritmo CFD tridimensional para simular um motor de foguete de ciclo combinado. O modelo utiliza as equações de Navier-Stokes para escoamentos turbulentos reativos e transientes. Determinaram as temperaturas dentro da câmara de combustão, a temperatura de ignição e a temperatura das paredes da tubeira.

Rashidi e Noori (2003) analisaram a transferência de calor local em uma câmara de combustão com ignição por centelha utilizando um modelo tridimensional transiente. A câmara foi simulada com o código computacional KIVA-3V, para diversas condições de pressão e de temperatura da câmara. Eles determinaram as zonas onde a transferência de calor foi máxima.

Foram mencionados acima vários códigos comerciais para simulações tridimensionais de câmaras de combustão.

O programa KIVA 3V (2003) é um código 3D de computador que simula processos reativos bidimensionais e tridimensionais com escoamentos em regimes permanente e transiente, escoamentos multifásicos e multicomponentes. O código simula desde velocidades subsônicas a velocidades supersônicas e desde escoamentos laminares a turbulentos. Podem ser escolhidas um número arbitrário de espécies e reações químicas. Um método estocástico para a distribuição de partículas é usado para calcular a

evaporação do líquido incluindo efeitos de colisões e quebra de gotas devido às forças aerodinâmicas.

O programa FLUENT é um código de computador CFD que permite simular escoamentos multifásicos reativos em câmaras de combustão. Ele possibilita modelar diversas geometrias, escoamentos compressíveis ou incompressíveis, escoamentos subsônicos, transônicos ou supersônicos, escoamentos em regime permanente ou transiente, transferência de calor por convecção e por radiação entre as gotas e o gás, vaporização das gotas, reações químicas e outros fenômenos complexos.

1.2. Propelente Líquido

O termo propelente líquido é usado comumente para definir os combustíveis líquidos (hidrogênio, hidrazinas, gasolinas, etc.) e os oxidantes líquidos (oxigênio, tetróxido de dinitrogênio, ácido nítrico, etc). A ejeção do propelente (ou dos produtos da reação combustível-oxidante) a altas velocidades pela tubeira fornece o empuxo do foguete. A seleção dos propelentes é o primeiro e mais importante passo no projeto de um motor foguete. Vários fatores influenciam na seleção do tipo de propelente, entre elas estão: desempenho, segurança no armazenamento e no manuseio, disponibilidade e preço. Os sistemas de propulsão a propelente líquido podem ser classificados em monopropelentes e bipropelentes.

1.2.1. Monopropelentes

Os monopropelentes líquidos são substâncias que se decompõem quando aquecidas, pressurizadas ou bombeadas através de um catalisador, gerando grande quantidade de gases à altas temperaturas.

Entre as principais vantagens deste tipo de motores estão a simplicidade do sistema de armazenamento e de alimentação do propelente e baixo custo em relação aos bipropelentes, mas a sua capacidade de operação está limitada por apresentar baixo empuxo, restringindo seu uso a motores de foguete auxiliares para controle de atitude e correção de órbita, e aos sistemas geradores de gás, como os comumente usados em turbo-bombas.

1.2.2. Bipropelentes

Sistemas bipropelentes líquidos são os mais comumente utilizados em foguetes lançadores por fornecerem empuxos elevados e maior segurança e controle do empuxo que os propelentes sólidos. Dois propelentes diferentes, um oxidante e um combustível, são armazenados em reservatórios separados e posteriormente misturados dentro da câmara de combustão. Alguns pares de propelentes reagem espontaneamente por contato após a mistura, sendo por isso chamados de pares hipergólicos, enquanto outros bipropelentes requerem a utilização de dispositivos de ignição, como ignitores pirotécnicos e ignitores por centelha elétrica. Exemplos de oxidantes usados em foguetes são O_2 , N_2O_4 , F_2 , HNO_3 e H_2O_2 . Exemplos de combustíveis são N_2H_4 (hidrazina), UDMH (dimetil-hidrazina-assimétrica), MMH (monometil-hidrazina) e JP-4 (querosene). A seguir são descritas as características principais dos propelentes que serão utilizados nas simulações numéricas feitas neste trabalho.

1.2.3. Hidrazina (N_2H_4)

As propriedades físicas e termoquímicas da hidrazina são similares às do MMH e do UDMH. A hidrazina é tóxica, incolor e apresenta ponto de congelamento (274.3 K) maior que o MMH e o UDMH. A temperatura de explosão da hidrazina é 369 K. É solúvel em água (formando hidratos de hidrazina), em álcool e em outros compostos líquidos orgânicos. A hidrazina apresenta ignição espontânea ao misturar-se com ácido nítrico ou tetróxido de nitrogênio. Na fase gasosa pode formar misturas explosivas com o ar ambiente. O calor de formação da hidrazina é positivo e, portanto, na maioria dos casos proporciona melhor desempenho do propulsor que outros combustíveis. Também pode ser utilizado como monopropelente para aplicações em geradores de gás ou em motores de controle de atitude. A hidrazina pode se decompor ao entrar em contato com materiais sólidos tais como o aço, o níquel e o cobalto (na maioria dos casos a decomposição é violenta), devendo-se por isto evitar armazená-la em tanques com estes materiais.

1.2.4. Monometil-hidrazina (CH_3NHNH_2)

A monometil-hidrazina (MMH) é bastante utilizada em motores pequenos para controle de atitude, geralmente com o N_2O_4 como oxidante. Possui uma melhor resistência ao choque e apresenta melhores propriedades de transferência de calor e um intervalo mais amplo de temperatura na fase líquida que a hidrazina pura (N_2H_4). Da mesma forma que a hidrazina, os vapores de MMH podem entrar em ignição em contato com o ar ambiente. Os materiais compatíveis com a hidrazina são também compatíveis com o MMH. Este fornece um impulso específico de 1 a 2% mais baixo do que o N_2H_4 , usando-se o N_2O_4 como oxidante. O MMH e o UDMH são solúveis em muitos hidrocarbonos, ao contrário da hidrazina. Todas as hidrazinas são tóxicas, mas o MMH é ainda mais tóxico quando é inalado. O MMH quando adicionado em quantidades relativamente pequenas da ordem de 3 a 15 % em massa para a N_2H_4 pode diminuir os efeitos de decomposição da hidrazina e por conseguinte os perigos de explosão. A temperatura de decomposição do MMH é de 491 K.

1.2.5. Dimetil-Hidrazina Assimétrica [$(\text{CH}_3)_2\text{NNH}_2$]

A dimetil-hidrazina assimétrica (UDMH) é bastante utilizada por ser mais estável do que o N_2H_4 e o MMH, particularmente em altas temperaturas. Seu ponto de congelamento é 215,9 K. Em comparação com as outras hidrazinas o UDMH fornece um impulso específico menor. Em propulsores de foguete é comumente utilizado misturado com a hidrazina com uma proporção de 30 a 50 % em massa de UDMH, formando as chamadas aerozinas.

1.2.6. Tetróxido de Nitrogênio (N_2O_4)

Este propelente é um dos oxidantes mais utilizados nos motores de foguete para satélites e manobras orbitais. Apresenta uma cor marrom-amarelada e possui densidade relativa 1,44. É medianamente corrosivo quando está puro e forma ácidos fortes quando é misturado com água. É hipergólico com muitos combustíveis e pode causar ignição espontânea quando entra em contato com o papel, o couro ou a madeira. É

extremamente tóxico quando inalado na fase gasosa. O ponto de ebulição do N_2O_4 pode ser diminuído adicionando-se pequenas quantidades de óxido nítrico (NO_2) ou NO .

A tabela apresentada a seguir mostra alguns dados comparativos do desempenho de hidrazinas para foguetes. As razões de misturas mostradas fornecem as maiores temperaturas de combustão.

TABELA 1.1 – Comparação dos parâmetros característicos de foguetes bipropelentes utilizando hidrazinas como combustíveis e N_2O_4 como oxidante.

Combustível	Oxidante (N_2O_4)		
	I_{sp} (s)	T_c (K)	$f_{o/c}$
N_2H_4	283	3091	1.10
MMH	277	3255	1.75
UDMH	274	3333	2.25
Aerozina-50	278	3230	1.62

FONTE: Schmidt (1984, p. 807).

1.3. Objetivos

O presente trabalho tem por objetivos:

- Desenvolver um modelo matemático unidimensional de uma câmara de combustão multipropelente considerando o processo de combustão na câmara controlado pela taxa de vaporização das gotas.
- Analisar os efeitos das distribuições de tamanho de gotas, razões de equivalência pré-misturada e total, pressões de operação e temperaturas de injeção, sobre sistemas multipropelentes.
- Determinar o número de parcelas de gotas adequado para representar as funções de distribuição de tamanho de gotas dos propelentes.
- Analisar e comparar o desempenho dos sistemas bipropelentes N_2H_4/N_2O_4 , MMH/ N_2O_4 e UDMH/ N_2O_4 e dos sistemas multipropelentes N_2H_4 -MMH/ N_2O_4 e N_2H_4 -UDMH/ N_2O_4 .

CAPÍTULO 2

MODELO TEÓRICO

2.1. Descrição e Hipóteses

Um esquema do processo de combustão em uma câmara de foguete bipropelente com área transversal constante é apresentado na Figura 2.1. Admite-se que o processo de combustão seja unidimensional e controlado pela vaporização das gotas, ou seja, considera-se que as taxas de mistura e de reação na fase gasosa sejam elevadas em comparação às taxas de vaporização dos propelentes.

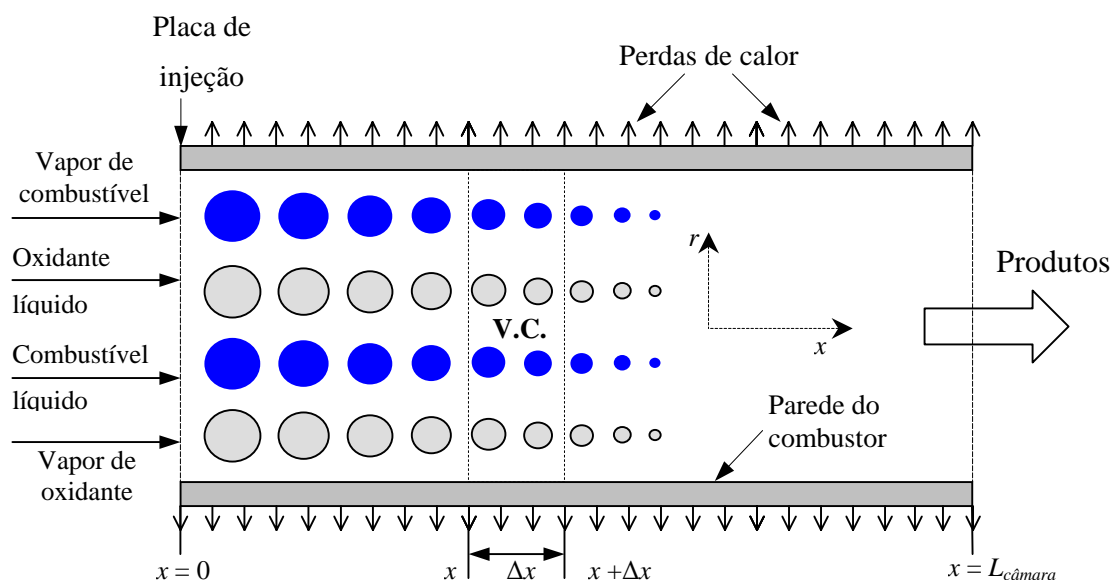


FIGURA 2.1 – Esquema do processo de vaporização e queima unidimensional em uma câmara de combustão bipropelente.

O combustível e o oxidante são injetados na câmara de combustão através de uma placa de injeção na forma de jatos líquidos. Estes se transformam imediatamente em gotas com uma distribuição de diâmetros conhecidos. As gotas formadas entram em contato com os produtos quentes da combustão, transformam-se em vapor e se misturam, modificando a razão de equivalência local. A mistura formada queima instantaneamente alterando a temperatura e a composição dos produtos da combustão. Considera-se que

parcelas conhecidas do combustível e do oxidante sejam injetadas na forma gasosa na seção de entrada, de modo que haja um fluxo de gás junto à placa de injeção, o que seria correspondente à recirculação de gases na câmara.

A pressão é admitida como uniforme, porém a temperatura dos gases varia ao longo da câmara, dependendo da razão de equivalência da mistura gasosa. A composição dos gases é calculada em cada seção para um processo de equilíbrio a pressão e a temperatura constantes, considerando-se as perdas de calor por convecção e por radiação através das paredes da câmara, bem como a troca de calor entre as gotas e a mistura gasosa, também por convecção e radiação.

O modelo teórico considera uma distribuição não uniforme de gotas entrando no combustor com tamanhos diferentes, empregando-se a função de distribuição de Rosim e Rammler (1933), onde os parâmetros da função são obtidos experimentalmente e variam para cada tipo de injetor. O modelo leva em conta uma análise do processo de vaporização transiente da gota seguindo a metodologia usada por Chin e Lefebvre (1985) em que a vaporização das gotas durante o pré-aquecimento pode ser significativa dependendo principalmente da pressão e da temperatura do gás. Considera-se também a expansão das gotas durante a fase de aquecimento até atingirem a temperatura de bulbo úmido.

Os gases e as gotas apresentam velocidades diferentes inicialmente, porém à medida em que ocorre a vaporização das gotas a velocidade relativa tende para zero. Considera-se no modelo o efeito da deformação das gotas sobre o coeficiente de arrasto das mesmas. Todavia não são consideradas a força de Basset, decorrente de efeitos transientes no escoamento ao redor da gota, nem a força de massa virtual, decorrente do deslocamento do fluido adjacente à gota. Também não foram considerados os efeitos da quebra e da colisão de gotas.

Resumindo, as seguintes hipóteses são adotadas:

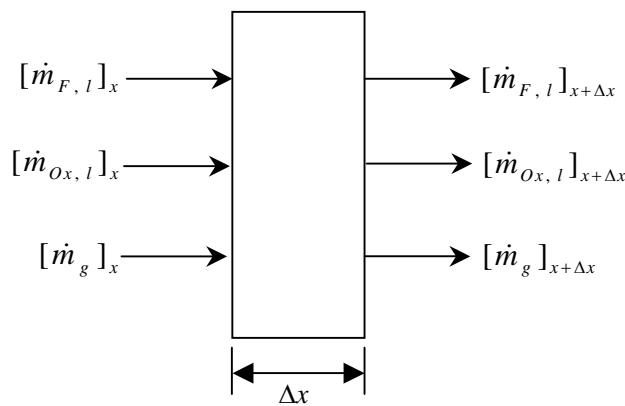
- 1) Processo em regime permanente em uma câmara de área transversal constante.
- 2) O sistema compreende uma fase gasosa consistindo de produtos da combustão e uma fase líquida consistindo de gotas de combustível e de oxidante.
- 3) As propriedades da fase líquida e da fase gasosa dependem unicamente da coordenada x na direção do escoamento, ou seja, o fluxo é unidimensional.
- 4) Escoamento isobárico, sem efeitos do atrito.
- 5) Os diâmetros das gotas na injeção seguem uma função de distribuição dada.
- 6) Os vapores de combustível e de oxidante se misturam e queimam instantaneamente, de acordo com a razão de equivalência local.
- 7) As gotas apresentam vaporização transiente e se dilatam termicamente.
- 8) As propriedades da fase gasosa em cada seção são determinadas considerando que ela seja constituída unicamente de produtos da combustão em equilíbrio a pressão e a temperatura constantes.
- 9) Não há condução de calor axial nas paredes.
- 10) Não ocorre quebra nem colisão de gotas e as forças de Basset e de massa virtual são desprezadas.
- 11) A deformação das gotas é considerada no cálculo do arrasto.
- 12) A razão da mistura inicial do gás e do líquido, as velocidades de injeção e as vazões mássicas dos propelentes são dadas.

2.2. Forma de Obtenção das Equações do Problema

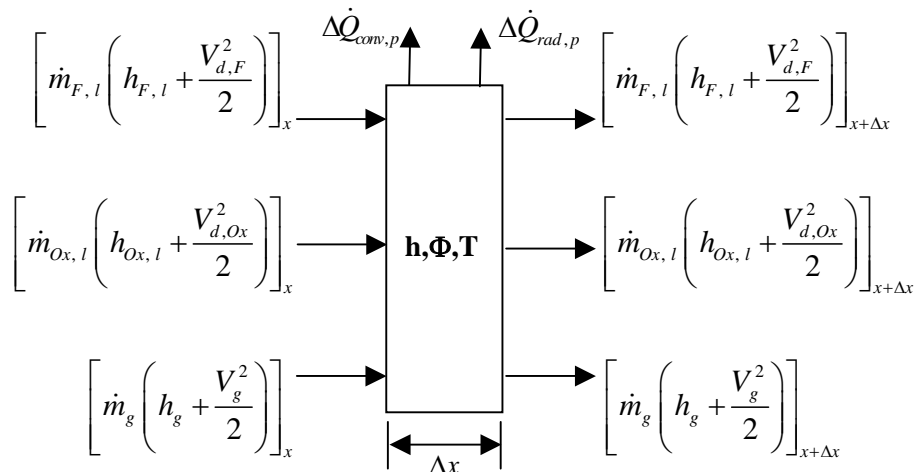
As equações do problema são obtidas considerando-se elementos de volume de espessura Δx ao longo do combustor, conforme indica a Figura 2.2 a seguir. São feitos

balanços de massa e de energia nestes elementos de volume, fornecendo um sistema de equações diferenciais ordinárias que pode ser integrado numericamente, conhecidas as condições iniciais. Será mostrado posteriormente utilizando-se a conservação da quantidade de movimento que, em geral, as variações de pressão em uma câmara de área constante sem atrito são muito pequenas e podem assim ser desprezadas.

As taxas de vaporização por unidade de comprimento de combustível e de oxidante nos elementos de volume de espessura Δx são indicadas na Figura 2.3 a seguir.



(a) conservação da massa



(b) conservação da energia

FIGURA 2.2 – Elementos de volume para uma análise da conservação de massa e de energia.

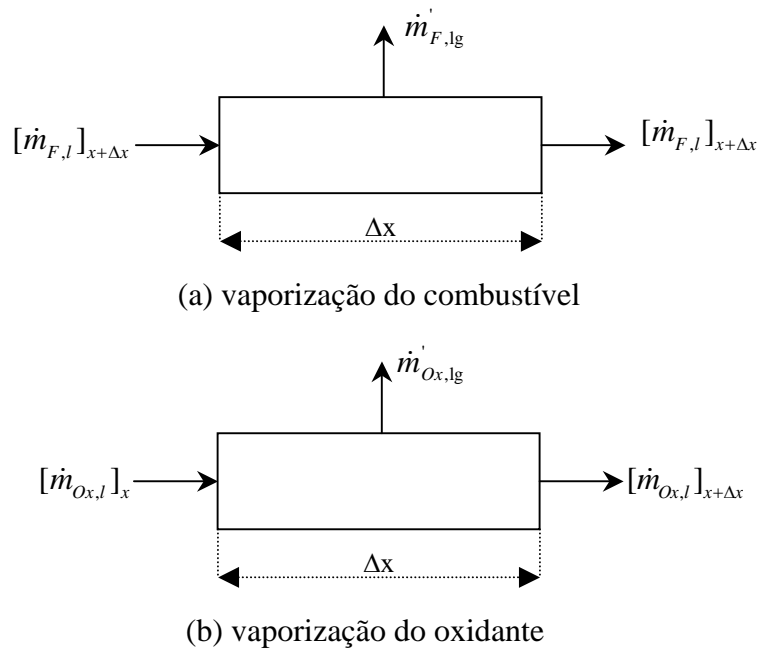


FIGURA 2.3 – Elementos de volume de controle que descrevem a vaporização do líquido.

2.3. Função de Distribuição de Rosin-Rammler

Existem várias relações empíricas para caracterizar a distribuição do tamanho de gotas em uma nuvem de gotas ou “spray”. No presente trabalho é empregada a função de distribuição de Rosin e Rammler (1933), a mais comumente usada devido à sua simplicidade (Lefebvre, 1989), com dois únicos parâmetros a serem determinados. Ela permite extrapolação de dados experimentais para gotas de diâmetros muito pequenos, difíceis de serem medidas. A função de Rosin-Rammler é expressa em termos da fração de volume cumulativo:

$$Q = 1 - \exp \left[- \left(\frac{D}{X} \right)^q \right] \quad (2.1)$$

onde Q é a fração de volume do spray contendo gotas de diâmetros menores que D , e q e X são constantes. O parâmetro q mede a uniformidade do tamanho das gotas no spray, quanto maior é o valor de q , mais uniforme é o spray, de modo que se q for infinito as

gotas do spray serão todas do mesmo tamanho. Segundo Lefebvre (1989), na maioria dos sprays o valor de q varia entre 1,5 e 4. A constante X representa um diâmetro característico do spray cuja escolha depende do tipo de problema considerado. Lefebvre (1989) indica que o parâmetro X para aplicações de combustão é relacionado à constante q pela relação :

$$X = D_{32} \left[\Gamma \left(1 - \frac{1}{q} \right) \right] \quad (2.2)$$

onde D_{32} é o Diâmetro Médio de Sauter (SMD) e Γ é a função gama. O SMD (D_{32}) é definido por:

$$SMD = D_{32} = \frac{\sum N_k D_k^3}{\sum N_k D_k^2}$$

onde N_k é o número de gotas tendo diâmetro D_k , dentro do spray. O SMD é um diâmetro médio das gotas, proporcional à razão entre o volume total e a superfície total das gotas do spray e o seu valor depende do tipo de injetor, das propriedades do líquido e das condições de saída do spray.

Substituindo a equação (2.2) na equação (2.1) obtém-se:

$$Q = 1 - \exp \left[-\Gamma \left(1 - \frac{1}{q} \right)^{-q} \left(\frac{D}{D_{32}} \right)^q \right] \quad (2.3)$$

Esta expressão será usada para obter a distribuição de tamanho de gotas em um spray, para constantes q e D_{32} especificadas como condição inicial. Será verificada a influência das constantes q e D_{32} sobre parâmetros importantes do processo de vaporização e queima.

No modelo é considerado um número finito de parcelas de gotas. Cada parcela inclui gotas dentro de uma faixa de diâmetros entrando na câmara de combustão. As faixas de diâmetros têm igual largura, por exemplo: 0-60, 60-120, 120-180, 180-240 μm . A fim

de simplificar o problema cada parcela de gotas será caracterizada pelo SMD representativo da faixa de diâmetros de gotas dentro da parcela. O SMD de cada parcela é calculado dividindo-se a parcela em quatro parcelas menores de igual largura. O procedimento detalhado para a obtenção do SMD de cada parcela de gotas é mostrado na tabela 2.1.

O diâmetro máximo, D_{\max} , para cada distribuição de Rosin-Rammler foi definido como o diâmetro acima do qual a percentagem de volume do propelente é menor que 0.1 % e, portanto, considera-se que não existam gotas com diâmetros maiores que D_{\max} .

A Tabela 2.1 mostra o processo para o cálculo do SMD de cada parcela de gotas para o caso $D_{32} = 25 \mu\text{m}$ e $q = 1,5$. A tabela é um caso particular da Figura 2.4 para 4 parcelas de gotas onde o D_{\max} obtido é de 240 μm . Como mencionado anteriormente o spray foi dividido em 4 parcelas de gotas de tamanhos diferentes compreendidos na faixa de 0 a 240 μm . A largura da faixa de diâmetros de cada parcela, W , é a mesma e obtida a partir da relação $W = D_{\max}/N$, onde N é o número de parcelas.

A Tabela 2.2 apresenta valores para os diâmetros máximos em função dos parâmetros da distribuição de Rosin-Rammler, para $D_{32} = 25, 50$ e $75 \mu\text{m}$ e $q = 1.5, 2.0, 2.5$ e 3.0 .

A Figura 2.4 mostra a influência do número de parcelas de gotas sobre a função de distribuição de Rosin-Rammler para o caso $D_{32} = 25 \mu\text{m}$ e $q = 1,5$. Observa-se que quando o número de parcelas aumenta a percentagem de volume correspondente para cada parcela tende a ser mais uniforme e o intervalo entre cada SMD diminui. Um aumento no número de parcelas para representar a distribuição de um spray pode produzir resultados mais precisos, porém o tempo de cálculo requerido é também maior. Resultados obtidos posteriormente como aqueles das Figuras 3.5, 3.6 e 3.7 mostram que um número de 8 parcelas é adequado para representar satisfatoriamente a função de distribuição do tamanho de gotas.

A Figura 2.5 mostra a influência dos parâmetros de Rosin-Rammler q e D_{32} sobre D_{\max} considerando-se oito parcelas de gotas para $q = 2$ e 3 e para $D_{32} = 25, 50$ e $75 \mu\text{m}$. Mantendo-se D_{32} constante nota-se que um aumento de q diminui o D_{\max} devido a que o spray fica mais uniforme e todas as gotas tendem a ser do mesmo tamanho

aproximando-se a D_{32} como mencionado anteriormente. No entanto considerando q como constante um aumento do D_{32} produz um aumento do D_{\max} devido a probabilidade de encontrar no spray gotas maiores pela relação dada na equação 2.3.

A Figura 2.6 mostra a influência dos parâmetros de Rosin-Rammler q e D_{32} sobre D_{\max} para $q = 1,5, 2,0, 2,5$ e $3,0$ e $D_{32} = 25, 50$ e $75 \mu\text{m}$. Esta figura é uma representação gráfica da Tabela 2.2.

TABELA 2.1 - Cálculo do SMD de cada uma das parcelas de gotas para o caso: $D_{32} = 25 \mu\text{m}$ e $q = 1.5$.

$\Delta D_i (\mu\text{m})$	$\Delta D_k (\mu\text{m})$	$D_m (\mu\text{m})$	ΔQ_k^*	$\Delta Q_k D_m^2$	$\Delta Q_k D_m^3$	SMD _i (μm) ($\sum \Delta Q_k D_m^3 / \sum \Delta Q_k D_m^2$)
0-60	0-15	7.5	0.1006	5.66	42.43	44.05 \cong 44
	15-30	22.5	0.1585	80.22	1804.97	
	30-45	37.5	0.1645	231.27	8672.62	
	45-60	52.5	0.1482	408.53	21447.88	
	Σ		0.5718	725.7	32057.7	
60-120	60-75	67.5	0.1226	558.41	37692.93	90.68 \cong 91
	75-90	82.5	0.0951	647.48	53416.73	
	90-105	97.5	0.0702	667.05	65037.73	
	105-120	112.5	0.0496	627.31	70572.43	
	Σ		0.3375	2500.25	226719.5	
120-180	120-135	127.5	0.0337	547.87	69853.44	145.49 \cong 145
	135-150	142.5	0.0221	449.64	64074.01	
	150-165	157.5	0.0141	349.73	55082.68	
	165-180	172.5	0.0087	259.44	44753.41	
	Σ		0.0786	1606.68	233763.5	
180-240	180-195	187.5	0.0052	184.46	34586.39	202.68 \cong 203
	195-210	202.5	0.0031	126.19	25553.40	
	210-225	217.5	0.0018	83.32	18122.72	
	225-240	232.5	0.0010	53.24	12378.75	
	Σ		0.0111	447.21	90641.26	

* ΔQ_k é obtido da distribuição de Rosin-Rammler:

$$\Delta Q_k = Q_k - Q_{k-1} = -(D_k/D_{32})^q + (D_{k-1}/D_{32})^q$$

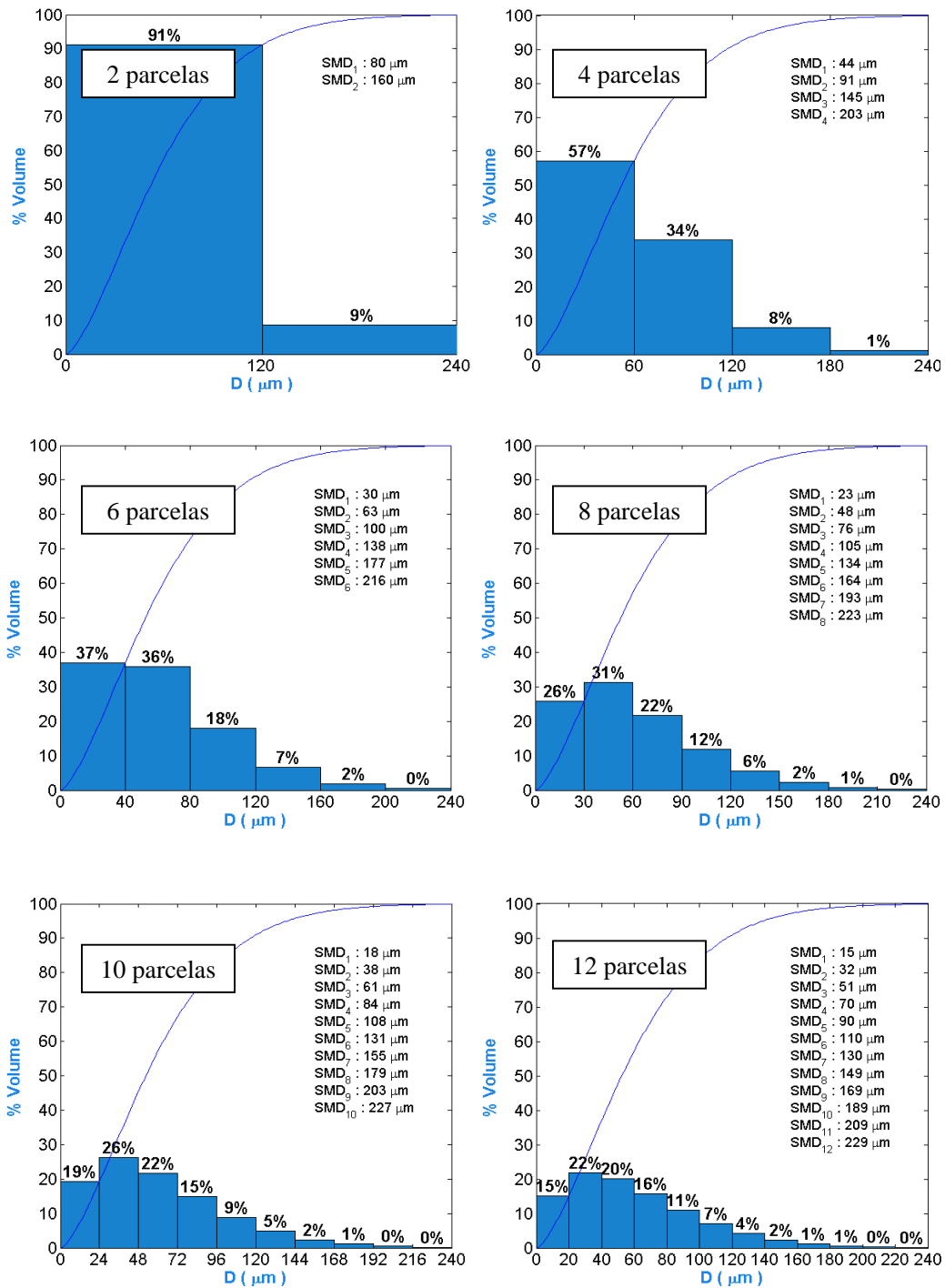


FIGURA 2.4 – Influência do número de parcelas de gotas sobre a função de distribuição de Rosin-Rammler com parâmetros $q = 1.5$ e $D_{32} = 25 \mu\text{m}$ constantes e para 2, 4, 6, 8, 10 e 12 parcelas de gotas diferentes.

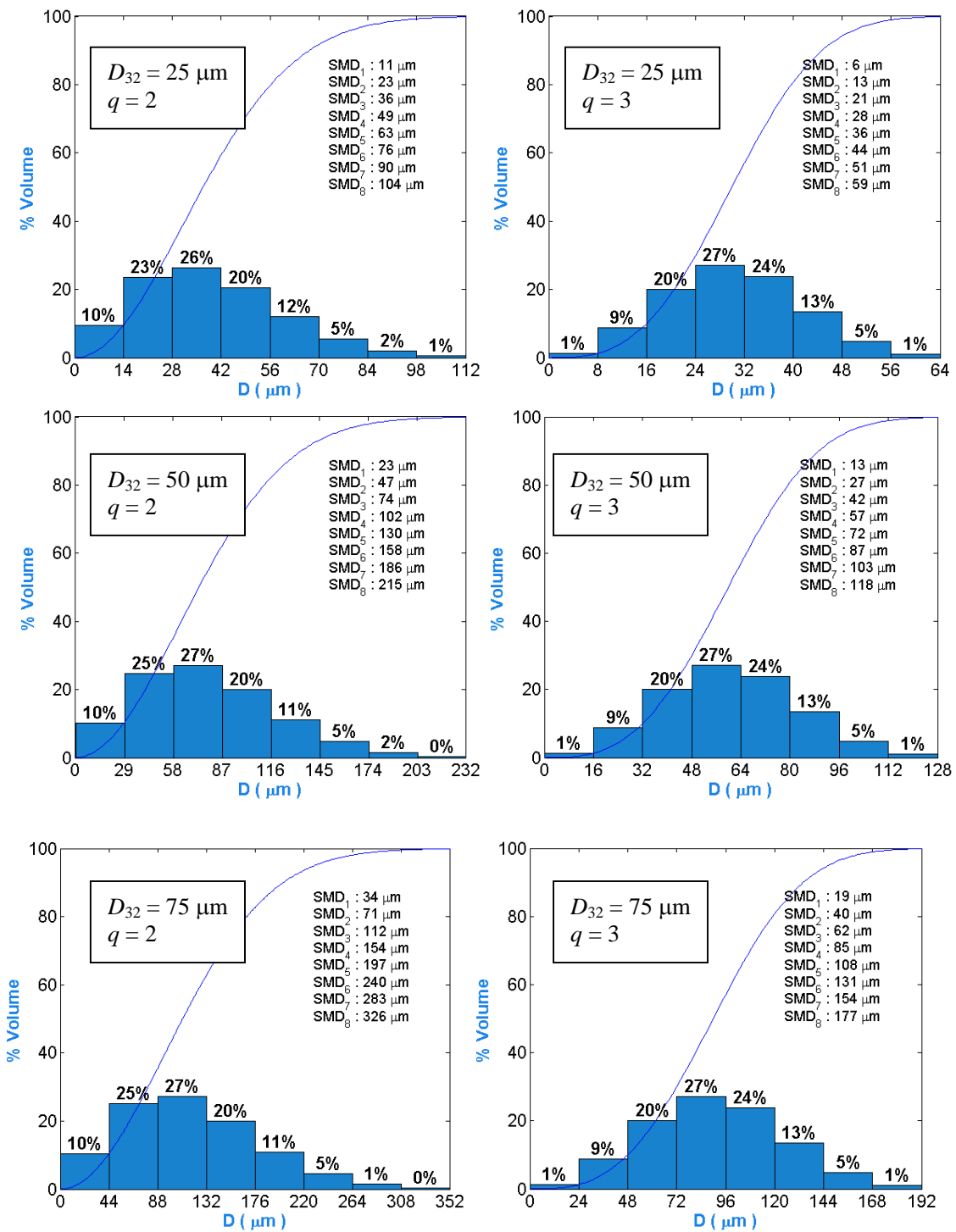


FIGURA 2.5 – Influência dos parâmetros de Rosin-Rammler q e D_{32} sobre D_{max} considerando-se 8 parcelas de gotas para $q = 2$ e 3 e para $D_{32} = 25, 50$ e $75 \mu\text{m}$.

TABELA 2.2 – Influência dos parâmetros de Rosin-Rammler q e D_{32} sobre D_{max} obtidos a partir da Figura 2.5, D_{max} em μm .

D_{32} (μm) \backslash q	1.5	2.0	2.5	3.0
25	240	112	80	64
50	488	232	160	128
75	600	352	240	192

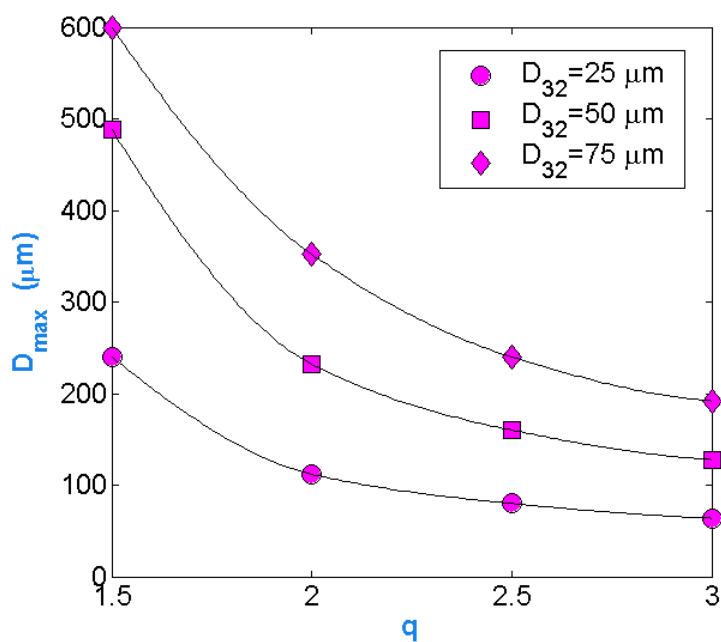


FIGURA 2.6 – Representação gráfica da Tabela 2.2.

2.4. Equações de Conservação

2.4.1. Conservação da Massa

A Figura 2.2a mostra as vazões de massa da fase líquida e da fase gasosa que entram e saem de um elemento de volume ou volume de controle (VC). O balanço dessas vazões fornece:

$$\frac{d\dot{m}_g}{dx} + \frac{d\dot{m}_{F,l}}{dx} + \frac{d\dot{m}_{Ox,l}}{dx} = 0 \quad (2.4)$$

onde os sub-índices “*F*” e “*Ox*” designam o combustível e o oxidante, respectivamente, e os sub-índices “*g*” e “*l*” designam as fases presentes no combustor, gás e líquido, respectivamente. Assim, na expressão (2.4) $\dot{m}_{F,l}$ e $\dot{m}_{Ox,l}$ representam as vazões de massa totais através do volume de controle de combustível e oxidante líquidos, respectivamente, e \dot{m}_g é a vazão total de gás através do volume de controle. O termo de vazão de massa total é usado porque o modelo considera o líquido injetado em parcelas de gotas com tamanhos diferentes seguindo a distribuição de gotas de Rosin-Rammler. Assim, pode-se então escrever a derivada da vazão de massa total de cada um dos propelentes como uma função das vazões parciais formadas por cada parcela de gotas:

$$\frac{d\dot{m}_{F,l}}{dx} = \sum_{i=1}^I \frac{d\dot{m}_{F,l,i}}{dx} \quad (2.5.a)$$

$$\frac{d\dot{m}_{Ox,l}}{dx} = \sum_{j=1}^J \frac{d\dot{m}_{Ox,l,j}}{dx} \quad (2.5.b)$$

onde os sub-índices “*i*” e “*j*” designam a cada parcela em particular do combustível e oxidante, respectivamente, e “*I*” e “*J*” indicam o número total de parcelas presentes para cada propelente. É importante ressaltar que a vazão de massa total de cada um dos propelentes será dividida em vazões parciais em quantidade igual ao número de parcelas escolhidas para a análise. Para isto é utilizada a função de distribuição de Rosin-Rammler dada pela equação (2.3). As vazões parciais de cada um dos propelentes são

calculadas multiplicando-se a percentagem ΔQ_k do volume das gotas dentro de uma parcela de gotas $k = i$ ou j pela vazão total (ΔQ_k é definido na Tabela 2.1). No caso de mais de dois propelentes líquidos entrando no combustor, por exemplo, no caso de mais de um combustível, a equação (2.5.a) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\frac{d\dot{m}_{F,l}}{dx} = \sum_{i=1}^I \frac{d\dot{m}_{F1,l,i}}{dx} + \frac{d\dot{m}_{F2,l,i}}{dx} + \dots \quad (2.6)$$

Um combustível bastante utilizado em foguetes e que pode ser simulado usando este modelo é a Aerozina-50 ou Ae-50 constituída de 50% de N_2H_4 e 50% UDMH em massa (na prática forma-se uma mistura, no entanto, pode-se considerá-los separadamente para cálculo através do presente modelo).

A equação (2.4) também pode ser integrada ao longo de x para se obter uma expressão para a massa do gás em qualquer posição axial $\dot{m}_{g,x}$:

$$\dot{m}_{g,x} = \dot{m}_{g,0} + \dot{m}_{F,l,0} + \dot{m}_{Ox,l,0} - (\dot{m}_{F,l,x} + \dot{m}_{Ox,l,x}) \quad (2.7.a)$$

onde o sub-índices “0” e “x” indicam condições na entrada do combustor e em uma posição axial qualquer, respectivamente.

Da mesma forma, podemos escrever a equação (2.7.a) como:

$$\dot{m}_g = \dot{m}_{g,0} + \underbrace{(\dot{m}_{F,l,0} - \dot{m}_{F,l,x})}_{\substack{\text{vazão de combustível} \\ \text{vaporizado 0-x}}} + \underbrace{(\dot{m}_{Ox,l,0} - \dot{m}_{Ox,l,x})}_{\substack{\text{vazão de oxidante} \\ \text{vaporizado 0-x}}} \quad (2.7.b)$$

A equação (2.7.b) mostra que os propelentes líquidos vaporizados até uma dada posição da câmara transformam-se em produtos da combustão, aumentando a massa do gás \dot{m}_g .

As vazões de massa formadas por cada parcela de gotas de combustível e oxidante líquido na entrada são expressas como:

$$\dot{m}_{F,l,i,0} = \rho_{F,l,i,0} A_{F,l,i,0} v_{d,F,i,0} \quad , \quad i = 1, \dots, I \quad (2.8.a)$$

$$\dot{m}_{Ox,l,j,0} = \rho_{Ox,l,j,0} A_{Ox,l,j,0} v_{d,Ox,j,0} , \quad j = 1, \dots, J \quad (2.8.b)$$

onde $\rho_{F,l,i,0}$ e $\rho_{Ox,l,j,0}$ são as densidades do combustível e do oxidante líquidos, $v_{d,F,i,0}$ e $v_{d,Ox,j,0}$ são as velocidades das gotas de combustível e oxidante, e $A_{F,l,i,0}$ e $A_{Ox,l,j,0}$ são as áreas parciais de injeção ($x=0$) correspondentes a cada parcela do combustível e oxidante líquidos, respectivamente. A área parcial de cada parcela de gotas, $k = i$ ou j , é calculada multiplicando-se a sua percentagem de volume, ΔQ_k , pela área total.

A temperatura do líquido na entrada foi especificada para cada propelente e depende da temperatura do tanque dos propelentes e portanto é a mesma para cada parcela de gotas. A densidade do líquido é um parâmetro conhecido que depende unicamente da temperatura do líquido na entrada. O Apêndice E apresenta uma tabela de propriedades termodinâmicas e de saturação para vários combustíveis e oxidantes.

A área total de injeção para cada propelente (área de saída do líquido pelo injetor) é também um parâmetro conhecido e depende do tipo de injetor a ser usado. Este valor pode ser calculado usando o diâmetro do canal de saída do spray. Em geral os injetores têm mais de um canal de saída e, portanto, a área total seria a soma das áreas individuais de cada canal.

A vazão de massa total de líquido para cada propelente é um valor conhecido, especificado em função do nível de empuxo do propulsor e das condições de funcionamento desejadas. Admitindo-se que as velocidades de entrada de todas as parcelas de gotas de combustível e de oxidante sejam as mesmas, pode-se calcular essas velocidades de entrada a partir das vazões mássicas totais dos propelentes líquidos na entrada:

$$v_{d,F,0} = \frac{\dot{m}_{F,l,0}}{\rho_{F,l,0} A_{F,l,0}} \quad (2.9.a)$$

$$v_{d,Ox,0} = \frac{\dot{m}_{Ox,l,0}}{\rho_{Ox,l,0} A_{Ox,l,0}} \quad (2.9.b)$$

A vazão mássica total de cada propelente líquido na entrada é dada pela soma das vazões mássicas parciais:

$$\dot{m}_{F,l,0} = \sum_{i=1}^I \dot{m}_{F,l,i,0} \quad (2.10.a)$$

$$\dot{m}_{Ox,l,0} = \sum_{j=1}^J \dot{m}_{Ox,l,j,0} \quad (2.10.b)$$

As vazões mássicas parciais para cada propelente são calculadas das porcentagens de volume de cada parcela a partir da função de distribuição de Rosim-Rammler dada, multiplicadas pela vazão mássica total. Da mesma maneira, as áreas de propelente líquido na entrada ocupadas por cada parcela são calculadas multiplicando-se as porcentagens de volume de cada parcela pela área total de injeção.

A razão de equivalência pré-misturada e a razão de equivalência total são expressas como:

$$\Phi_P = \frac{f_P}{f_S} = \frac{\frac{\dot{m}_{F,g,0}}{\dot{m}_{Ox,g,0}}}{f_S} \quad (2.11.a)$$

$$\Phi_T = \frac{f_T}{f_S} = \frac{\frac{\dot{m}_{F,g,0} + \dot{m}_{F,l,0}}{\dot{m}_{Ox,g,0} + \dot{m}_{Ox,l,0}}}{f_S} \quad (2.11.b)$$

onde Φ_P e Φ_T são as razões de equivalência pré-misturada e total respectivamente, e f_P , f_T e f_S são as razões de mistura parcial (pré-misturada), total e estequiométrica respectivamente. A razão de mistura parcial f_P é a razão entre a vazão de massa de combustível e a vazão de massa de oxidante na fase gasosa entrando no combustor (correspondente a um dado nível de recirculação na câmara). A razão de mistura total f_T é razão entre a quantidade total de combustível líquido e gasoso e a quantidade total de oxidante líquido e gasoso que entram na câmara de combustão.

As gotas ao saírem do injetor encontram um ambiente a altas temperaturas que propicia o pré-aquecimento e mantêm a vaporização das mesmas.

A vazão total de massa gasosa na entrada, $\dot{m}_{g,0}$, é definida como:

$$\dot{m}_{g,0} = \dot{m}_{F,g,0} + \dot{m}_{Ox,g,0} \quad (2.12)$$

onde $\dot{m}_{F,g,0}$ e $\dot{m}_{Ox,g,0}$ são as vazões mássicas de combustível e de oxidante gasosos na entrada do combustor, respectivamente. Nesta análise de macro-escala, isto é, da mistura gasosa longe das gotas, considera-se que o vapor de combustível e oxidante reajam instantaneamente formando os produtos.

A vazão de massa de líquido para qualquer propelente pode ser relacionada ao número de gotas entrando na câmara por unidade de tempo \dot{N} e à massa de uma gota individual:

$$\dot{m}_l = \dot{N}m_d = \dot{N}\rho_l \frac{\pi D^3}{6} \quad (2.13)$$

onde m_d e D é a massa e o diâmetro de uma gota respectivamente.

Na entrada a equação (2.13) é definida como:

$$\dot{m}_{l,0} = \dot{N}\rho_{l,0} \frac{\pi D_0^3}{6} \quad (2.14)$$

e a equação (2.14) pode ser usada para obter uma expressão analítica para \dot{N} :

$$\dot{N} = \frac{6\dot{m}_{l,0}}{\pi\rho_{l,0}D_0^3} \quad (2.15)$$

Considerando que a densidade do líquido é variável com a temperatura, podemos escrever a vazão do líquido em qualquer posição axial substituindo (2.15) em (2.13):

$$\dot{m}_l = \dot{m}_{l,0} \frac{\rho_l}{\rho_{l,0}} \left(\frac{D}{D_0} \right)^3 \quad (2.16)$$

Derivando a equação (2.16) em relação a x e considerando o efeito de expansão da gota obtém-se:

$$\frac{d\dot{m}_l}{dx} = \frac{3\dot{m}_l}{D} \frac{dD}{dx} + \frac{\dot{m}_l}{\rho_l} \frac{d\rho_l}{dT_l} \frac{dT_l}{dx} \quad (2.17.a)$$

Deve-se notar que as gotas, ao entrarem na câmara, podem se expandir devido à dilatação térmica. Na equação (2.17a) o primeiro termo da direita é positivo durante a expansão da gota e o segundo termo é negativo, visto que a densidade do líquido diminui com a temperatura. Quando a gota atinge uma temperatura de equilíbrio, admitindo a temperatura interna da gota uniforme, o segundo termo da direita se anula.

A derivada do diâmetro da gota ao longo da câmara (dD/dx) pode ser obtida a partir da teoria de evaporação transiente para uma gota esférica. Neste trabalho foi empregada a teoria apresentada por Chin e Lefebvre (1985).

A partir da equação (2.17) podemos escrever as seguintes equações para as derivadas das vazões mássicas do combustível e do oxidante, respectivamente:

$$\frac{d\dot{m}_{F,l,i}}{dx} = \frac{3\dot{m}_{F,l,i}}{D_{F,i}} \frac{dD_{F,i}}{dx} + \frac{\dot{m}_{F,l,i}}{\rho_{F,l,i}} \frac{d\rho_{F,l,i}}{dT_{F,l,i}} \frac{dT_{F,l,i}}{dx} \quad (2.18.a)$$

$$\frac{d\dot{m}_{Ox,l,j}}{dx} = \frac{3\dot{m}_{Ox,l,j}}{D_{Ox,j}} \frac{dD_{Ox,j}}{dx} + \frac{\dot{m}_{Ox,l,j}}{\rho_{Ox,l,j}} \frac{d\rho_{Ox,l,j}}{dT_{Ox,l,j}} \frac{dT_{Ox,l,j}}{dx} \quad (2.18.b)$$

2.4.2. Cálculo das Propriedades do Gás

A densidade de um gás perfeito é relacionada à sua temperatura através de:

$$\rho_g = \frac{P_g \bar{M}_g}{R_0 T_g} \quad (2.19)$$

onde,

P_g = pressão do gás,

\bar{M}_g = massa molar do gás,

R_0 = constante universal dos gases (8,3145 kJ/kmol.K).

Derivando a equação (2.19) e reordenando, obtemos:

$$\frac{d\rho_g}{dx} = \rho_g \left(\frac{1}{\bar{M}_g} \frac{d\bar{M}_g}{dT_g} - \frac{1}{T_g} \right) \frac{dT_g}{dx} \quad (2.20)$$

A área da fase líquida em cada seção do combustor é calculada por:

$$A_l = \frac{\dot{m}_l}{\rho_l v_d} \quad (2.21)$$

Derivando a equação (2.21) e reordenando obtemos:

$$\frac{dA_l}{dx} = A_l \left(\frac{1}{\dot{m}_l} \frac{d\dot{m}_l}{dx} - \frac{1}{v_d} \frac{dv_d}{dx} - \frac{1}{\rho_l} \frac{d\rho_l}{dT_l} \frac{dT_l}{dx} \right) \quad (2.22)$$

A área total ocupada por cada propelente líquido é obtida da soma das áreas de cada parcela de gotas:

$$A_{F,l} = \sum_{i=1}^I A_{F,l,i} \quad (2.23.a)$$

$$A_{Ox,l} = \sum_{j=1}^J A_{Ox,l,j} \quad (2.23.b)$$

Conseqüentemente, as derivadas das áreas de líquido ficam:

$$\frac{dA_{F,l}}{dx} = \sum_{i=1}^I \frac{dA_{F,l,i}}{dx} \quad (2.24.a)$$

$$\frac{dA_{Ox,l}}{dx} = \sum_{j=1}^J \frac{dA_{Ox,l,j}}{dx} \quad (2.24.b)$$

A área ocupada pela mistura de gases ao longo do combustor é dada por

$$A_g = A_c - (A_{F,l} + A_{Ox,l}) \quad (2.25)$$

onde A_c é a área da seção transversal interna da câmara de combustão.

Pode-se observar da equação (2.25) que à medida que ocorre a evaporação dos propelentes a área ocupada pelo líquido diminui e a área de passagem do gás aumenta.

Derivando a expressão (2.25), obtemos:

$$\frac{dA_g}{dx} = - \left(\frac{dA_{F,l}}{dx} + \frac{dA_{Ox,l}}{dx} \right) \quad (2.26)$$

A velocidade da fase gasosa ao longo do combustor é dada por:

$$v_g = \frac{\dot{m}_g}{\rho_g A_g} \quad (2.27)$$

Derivando a equação (2.27) e reordenando, resulta:

$$\frac{dv_g}{dx} = v_g \left[\frac{1}{\dot{m}_g} \frac{d\dot{m}_g}{dx} - \frac{1}{A_g} \frac{dA_g}{dx} \right] - \frac{v_g}{\rho_g} \frac{d\rho_g}{dx} \quad (2.28)$$

Substituindo a equação (2.20) em (2.28) e simplificando obtemos:

$$\frac{dv_g}{dx} = v_g \left[\frac{1}{\dot{m}_g} \frac{d\dot{m}_g}{dx} - \frac{1}{A_g} \frac{dA_g}{dx} \right] - v_g \left(\frac{1}{\bar{M}_g} \frac{d\bar{M}_g}{dT_g} - \frac{1}{T_g} \right) \frac{dT_g}{dx} \quad (2.29)$$

As equações (2.22), (2.28) e (2.29) serão usadas na equação da energia que será derivada posteriormente.

2.4.3. Teoria de Evaporação Transiente para uma Gota Esférica

A Figura 2.7 a seguir apresenta um esquema do balanço de energia na superfície da gota, considerando a transferência de calor por convecção e por radiação dos gases quentes até a gota, onde uma primeira parte deste calor é usada para aquecer a gota desde uma temperatura inicial T_0 (entrada do líquido) até, eventualmente, atingir a temperatura de equilíbrio T_{eq} (próxima à temperatura de ebulição) na pressão da câmara, e uma segunda parte de energia é usada para a vaporização da gota. Borman e Ragland (1998) mostraram que ocorre vaporização significativa durante o pré-aquecimento da gota.

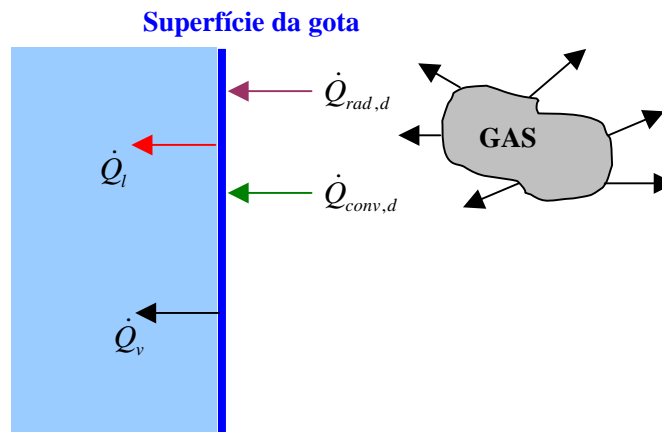


FIGURA 2.7 – Esquema para o balanço de energia na superfície da gota.

A equação resultante do análise da Figura 2.7 é representada como:

$$\dot{Q}_{rad,d} + \dot{Q}_{conv,d} = \dot{Q}_l + \dot{Q}_v \quad (2.30)$$

onde $\dot{Q}_{rad,d}$ é o calor por unidade de tempo transferido por radiação dos gases quentes para a gota, $\dot{Q}_{conv,d}$ é o calor por unidade de tempo transferido por convecção dos gases quentes para a gota, \dot{Q}_l é o calor por unidade de tempo usado para o aquecimento da gota e \dot{Q}_v é o calor por unidade de tempo usado para a vaporização da gota.

O calor transferido por radiação para a gota é dado por:

$$\dot{Q}_{rad,d} = \varepsilon_g \sigma A_d (T_g^4 - T_l^4) \quad (2.31)$$

onde ε_g é a emissividade do gás, σ é a constante de Stefan-Boltzmann (5.6704×10^{-8} W/m²K⁴), A_d é a área superficial de uma gota, T_g é a temperatura do gás e T_l é a temperatura do líquido (temperatura da superfície da gota).

O calor transmitido por convecção para a gota é dado por:

$$\dot{Q}_{conv,d} = \tilde{h}^* A_d (T_g - T_l) \quad (2.32)$$

onde \tilde{h}^* é o coeficiente de convecção para o aquecimento da gota.

O calor usado para aquecer a gota é expresso como:

$$\dot{Q}_l = m_d C_{pl} \frac{dT_l}{dt} \quad (2.33)$$

onde m_d é a massa de uma gota e C_{pl} é o calor específico do líquido $C_{pl} = f(T_l)$.

Finalmente, o calor usado para a vaporização da gota é expresso como:

$$\dot{Q}_v = \dot{m}_v h_{fg} \quad (2.34)$$

onde \dot{m}_v é a taxa de vaporização do líquido e h_{fg} é a entalpia de vaporização.

Usando a equação (2.30), pode-se obter a derivada da temperatura do líquido em função do tempo:

$$\frac{dT_l}{dt} = \frac{\dot{Q}_{rad,d} + \dot{Q}_{conv,d} - \dot{Q}_v}{m_d C_{pl}} \quad (2.35.a)$$

ou, em função de x :

$$\frac{dT_l}{dx} = \frac{\dot{Q}_{rad,d} + \dot{Q}_{conv,d} - \dot{Q}_v}{m_d v_d C_{pl}} \quad (2.35.b)$$

onde v_d é a velocidade da gota.

O calor de vaporização da gota \dot{Q}_v é função da taxa de vaporização \dot{m}_v , conforme a equação (2.34). A taxa de vaporização (Williams, 1985) com efeitos de convecção forçada e da vaporização é calculada da expressão:

$$\dot{m}_v = \frac{\pi D \lambda_{g,r} Nu_o}{C_{pg,r}} \ln(1 + B_M) \quad (2.36)$$

onde $\lambda_{g,r}$ e $C_{pg,r}$ são a condutividade térmica e o calor específico da mistura de vapor dos propelentes com os produtos da combustão, calculados a uma temperatura média de referência T_r , Nu_o é o número de Nusselt para a convecção de calor ao redor de uma esfera rígida e B_M é o número de transferência baseado na difusão de vapor que pode ser obtido da seguinte equação (Lefebvre, 1989):

$$B_M = \frac{Y_s}{1 - Y_s} \quad (2.37)$$

onde Y_s é a fração de massa do vapor de propelente na superfície da gota (Lefebvre, 1989), dada por:

$$Y_s = \left[1 + \left(\frac{P_g}{P_{vs}} - 1 \right) \frac{\bar{M}_{g,r}}{\bar{M}_v} \right]^{-1} \quad (2.38)$$

onde P_{vs} é a pressão de vapor de cada propelente na superfície da gota, $\bar{M}_{g,r}$ é a massa molar do gás (produtos da combustão) calculada à temperatura de referência e \bar{M}_v é a massa molar do propelente. Valores para a pressão de vapor e para a massa molar de cada propelente são dados nos Apêndices E e G, respectivamente.

O número de Nusselt é um parâmetro adimensional definido como a razão entre o fluxo de calor por convecção e o fluxo de calor por condução na superfície da gota, dado por:

$$Nu_o = \frac{hD}{\lambda} = f(\text{Re}, \text{Pr})$$

Faeth (1977) fornece uma expressão para avaliar o número de Nusselt:

$$Nu_o = 2 + \frac{0.555 \text{Re}_d^{1/2} \text{Pr}_g^{1/3}}{\left[1 + 1.232 / (\text{Re}_d \text{Pr}_g^{4/3})\right]^{1/2}} \quad (2.39)$$

válida para $\text{Re}_d \leq 1800$.

O número de Reynolds Re_d do escoamento ao redor da gota é um parâmetro adimensional definido como a razão entre as forças de inércia e as forças viscosas no escoamento, sendo expresso como:

$$\text{Re} = \frac{\rho_{g,r} D v_{rel}}{\eta_{g,r}} \quad (2.40)$$

onde $\rho_{g,r}$ e $\eta_{g,r}$ são a densidade e o coeficiente de viscosidade dinâmica da mistura de propelentes e produtos da combustão, respectivamente, na temperatura de referência T_r e v_{rel} é a velocidade relativa entre o gás e as gotas.

O número de Prandtl Pr_g é um parâmetro adimensional definido como a razão entre as difusividades viscosas e térmicas que caracterizam um regime de convecção, expresso como:

$$\text{Pr} = \frac{C_{pg,r} \eta_{g,r}}{\lambda_{g,r}} \quad (2.41)$$

A área e a massa de uma gota individual são definidas como:

$$A_d = \pi D^2 \quad (2.42)$$

$$m_d = \rho_l \frac{\pi D^3}{6} \quad (2.43)$$

onde ρ_l é a densidade do líquido.

Para o cálculo do calor transferido por convecção do gás até a gota, $\dot{Q}_{conv,d}$, considera-se que a camada limite ao redor da gota tenha a mesma espessura de uma camada limite estacionária ao redor da gota (Zhou, 1993). Desta forma o coeficiente de convecção \tilde{h}^* pode ser determinado por:

$$Nu = \frac{\tilde{h}^* D}{\lambda_{g,r}} = Nu_o \Psi$$

onde Ψ representa o efeito da vaporização sobre a convecção ao redor de uma esfera rígida (Zhou, 1993), dado por:

$$\Psi = \frac{\ln(1 + B_M)}{B_M}$$

Portanto:

$$\tilde{h}^* = \frac{\lambda_{g,r}}{D} Nu_o \Psi \quad (2.44)$$

As propriedades da mistura de produtos da combustão com vapor de propelentes na micro-escala (análise da gota) são calculadas na temperatura média de referência T_r . De

acordo com Hubbard et al. (1975) melhores resultados são obtidos empregando-se a regra de Sparrow e Gregg (1958) dada por:

$$T_r = T_s + \frac{T_g - T_s}{3} \quad (2.45.a)$$

$$Y_r = \frac{2}{3} Y_s \quad (2.45.b)$$

onde os sub-índices “s” e “r” indicam condições na superfície da gota e de referência, respectivamente. No caso de duas espécies líquidas (combustível e oxidante) deve-se encontrar as propriedades médias de cada propelente no meio da mistura de produtos da combustão. Deste modo, podemos definir a equação (2.45.b) para qualquer propelente como:

$$Y_{p,r} = \frac{2}{3} Y_{p,s} \quad (2.45.c)$$

e portanto,

$$Y_{a,r} = 1 - Y_{p,r} = 1 - \frac{2}{3} Y_{p,s} \quad (2.45.d)$$

onde o sub-índice “a” representa as condições da mistura dos produtos da combustão e o subíndice “p” representa as condições do vapor de um propelente (combustível ou oxidante).

As propriedades da mistura de vapor de propelente com produtos da combustão na temperatura de referência são calculados das seguintes equações:

$$C_{pg,r} = Y_{a,r} C_{pv,a,r} + Y_{p,r} C_{pv,p,r} \quad (2.46.a)$$

$$\lambda_{g,r} = Y_{a,r} \lambda_{a,r} + Y_{p,r} \lambda_{p,r} \quad (2.46.b)$$

$$\eta_{g,r} = Y_{a,r} \eta_a + Y_{p,r} \eta_{p,r} \quad (2.46.c)$$

$$\rho_{g,r} = \left(\frac{Y_{a,r}}{\rho_{a,r}} + \frac{Y_{p,r}}{\rho_{p,r}} \right)^{-1} \quad (2.46.d)$$

A taxa de consumo de massa de uma gota é obtida diferenciando a equação (2.43) em relação ao tempo:

$$\dot{m}_d = \frac{dm_d}{dt} = -\dot{m}_v = \frac{\pi}{2} \rho_l D^2 \frac{dD}{dt} + \frac{\pi}{6} D^3 \frac{d\rho_l}{dT_l} \frac{dT_l}{dt}$$

onde o segundo termo da equação representa o efeito da expansão térmica durante o aquecimento transiente. Reordenando-se a expressão anterior, obtém-se:

$$\frac{dD}{dt} = - \left(\frac{2\dot{m}_v}{\pi\rho_l D^2} + \frac{D}{3\rho_l} \frac{d\rho_l}{dT_l} \frac{dT_l}{dt} \right) \quad (2.47.a)$$

ou em função de x ,

$$\frac{dD}{dx} = - \left(\frac{2\dot{m}_v}{\pi\rho_l v_d D^2} + \frac{D}{3\rho_l} \frac{d\rho_l}{dT_l} \frac{dT_l}{dx} \right) \quad (2.47.b)$$

O primeiro termo da equação (2.47.b) representa a diminuição do diâmetro da gota devido à vaporização, e o segundo termo representa o aumento do diâmetro devido a expansão do líquido. Deve-se notar que o primeiro termo é sempre negativo (indica diminuição) e o segundo termo é sempre positivo (o que indica aumento) podendo, portanto, a gota aumentar de tamanho por expansão durante o período transiente. Quando a temperatura do líquido atingir uma temperatura de equilíbrio próxima a T_{boil} , o segundo termo desaparece ($T_l = cte$) e não há mais expansão da gota.

As propriedades de líquido saturado para vários combustíveis e oxidantes podem ser encontrados no Apêndice E. A derivada da densidade do líquido em função da temperatura foi obtida empregando-se o método da diferença central a partir das tabelas do Apêndice E. Para alguns propelentes, as propriedades termodinâmicas e de

transporte da fase líquida são apresentadas em forma de equações que foram obtidas de diversas fontes.

Com estas equações pode-se determinar a história de cada grupo de gotas “*i*” e “*j*” para cada propelente ao longo da câmara de combustão e a sua influência sobre a temperatura do gás, a razão de equivalência, a velocidade do gás e outros parâmetros importantes.

2.4.4. Composição da Fase Gasosa

Conforme mencionado anteriormente, o combustível e o oxidante misturam-se e reagem rapidamente em cada seção da câmara. A razão de equivalência local depende da quantidade total de propelentes vaporizados e pré-misturados, assim como da temperatura e da pressão em cada seção da câmara.

Da Figura 2.3-a, tem-se:

$$\dot{m}'_{F,lg} = -\frac{dm_{F,l}}{dx} \quad (2.48.a)$$

Analogamente, da Figura 2.3-b,

$$\dot{m}'_{Ox,lg} = -\frac{dm_{Ox,l}}{dx} \quad (2.48.b)$$

A distribuição axial da razão de equivalência Φ é obtida conhecendo-se a vazão de massa de combustível e de oxidante em uma dada posição axial. A razão de equivalência é definida por:

$$\Phi = \frac{f_x}{f_s} \quad (2.49)$$

onde f_x é a razão de mistura da fase gasosa em uma posição axial qualquer do combustor, ou seja:

$$f_x = \frac{\dot{m}_{F,g}}{\dot{m}_{Ox,g}} = \frac{\dot{m}_{F,g,0} + \int_0^x \dot{m}'_{F,lg} dx}{\dot{m}_{Ox,g,0} + \int_0^x \dot{m}'_{Ox,lg} dx} \quad (2.50)$$

onde $\dot{m}'_{F,lg}$ e $\dot{m}'_{Ox,lg}$ são as taxas de vaporização de combustível e oxidante por unidade de comprimento respectivamente. Podemos resolver esta equação usando as expressões encontradas em (2.48.a-b):

$$f_x = \frac{\dot{m}_{F,g,0} - \int_0^x \frac{d\dot{m}_{F,l}}{dx} dx}{\dot{m}_{Ox,g,0} - \int_0^x \frac{d\dot{m}_{Ox,l}}{dx} dx} = \frac{\dot{m}_{F,g,0} - \int_0^x d\dot{m}_{F,l}}{\dot{m}_{Ox,g,0} - \int_0^x d\dot{m}_{Ox,l}} = \frac{\dot{m}_{F,l,0}}{\dot{m}_{Ox,l,0}}$$

$$f_x = \frac{\text{vazão de combustível vaporizado de 0-x (kg/s)}}{\text{vazão de oxidante vaporizado de 0-x (kg/s)}} = \frac{\dot{m}_{F,g,0} + \dot{m}_{F,l,0} - \dot{m}_{F,l}}{\dot{m}_{Ox,g,0} + \dot{m}_{Ox,l,0} - \dot{m}_{Ox,l}} \quad (2.51)$$

Derivando as expressões (2.49) e (2.50), obtemos:

$$\frac{df_x}{dx} = \frac{(\dot{m}_{F,g,0} + \dot{m}_{F,l,0} - \dot{m}_{F,l}) \frac{d\dot{m}_{Ox,l}}{dx} - (\dot{m}_{Ox,g,0} + \dot{m}_{Ox,l,0} - \dot{m}_{Ox,l}) \frac{d\dot{m}_{F,l}}{dx}}{(\dot{m}_{Ox,g,0} + \dot{m}_{Ox,l,0} - \dot{m}_{Ox,l})^2} \quad (2.52)$$

$$\frac{d\Phi}{dx} = \frac{1}{f_s} \frac{df_x}{dx} \quad (2.53)$$

2.4.5. Conservação da Energia

Com base na Figura 2.2-b a equação da conservação da energia para um elemento de volume de espessura “ dx ” pode ser expressa como:

$$\begin{aligned}
 & \frac{d}{dx} \left[\dot{m}_g \left(h_g + \frac{v_g^2}{2} \right) \right] + \sum_{i=1}^I \frac{d}{dx} \left[\dot{m}_{F,l,i} \left(h_{F,l,i} + \frac{v_{d,F,i}^2}{2} \right) \right] + \\
 & \sum_{j=1}^J \frac{d}{dx} \left[\dot{m}_{Ox,l,j} \left(h_{Ox,l,j} + \frac{v_{d,Ox,j}^2}{2} \right) \right] + \frac{d\dot{Q}_{conv,p}}{dx} + \frac{d\dot{Q}_{rad,p}}{dx} = 0
 \end{aligned}
 \tag{2.54}$$

onde $\dot{Q}_{conv,p}$ é o calor transferido por convecção do gás para a parede da câmara de combustão e $\dot{Q}_{rad,p}$ é o calor transferido por radiação do gás para a parede da câmara de combustão.

Expandindo o primeiro termo da equação (2.54), temos:

$$W_g = \dot{m}_g \frac{dh_g}{dx} + h_g \frac{d\dot{m}_g}{dx} + \dot{m}_g v_g \frac{dv_g}{dx} + \frac{v_g^2}{2} \frac{d\dot{m}_g}{dx}
 \tag{2.55}$$

Podemos escrever a entalpia do gás como uma função da temperatura, pressão e da razão de equivalência da seguinte maneira:

$$h_g = f(T_g, P_g, \Phi_g)
 \tag{2.56}$$

Aplicando a regra da cadeia na equação (2.56) e admitindo a pressão do gás P_g constante, resulta:

$$\frac{dh_g}{dx} = \frac{dh_g}{dT_g} \frac{dT_g}{dx} + \frac{dh_g}{d\Phi} \frac{d\Phi}{dx}
 \tag{2.57}$$

Substituindo a equação (2.57) em (2.55) e expandindo, obtém-se:

$$W_g = \dot{m}_g \frac{dh_g}{dT_g} \frac{dT_g}{dx} + \dot{m}_g v_g \frac{dv_g}{dx} + \dot{m}_g \frac{dh_g}{d\Phi} \frac{d\Phi}{dx} + h_g \frac{d\dot{m}_g}{dx} + \frac{v_g^2}{2} \frac{d\dot{m}_g}{dx} \quad (2.58)$$

Expandindo o segundo e o terceiro termo da equação (2.54), temos:

$$W_F = \sum_{i=1}^I \left\{ \underbrace{\dot{m}_{F,l,i} C_{pF,l,i} \frac{dT_{F,l,i}}{dx} + h_{F,l,i} \frac{d\dot{m}_{F,l,i}}{dx}}_{\text{energia interna do combustivel}} \right\} + \sum_{i=1}^I \left\{ \underbrace{\dot{m}_{F,l,i} v_{d,F,i} \frac{dv_{d,F,i}}{dx} + \frac{v_{d,F,i}^2}{2} \frac{d\dot{m}_{F,l,i}}{dx}}_{\text{energia cinetica do combustivel}} \right\} \quad (2.59)$$

$$W_{Ox} = \sum_{j=1}^J \left\{ \underbrace{\dot{m}_{Ox,l,j} C_{pOx,l,j} \frac{dT_{Ox,l,j}}{dx} + h_{Ox,l,j} \frac{d\dot{m}_{Ox,l,j}}{dx}}_{\text{energia interna do oxidante}} \right\} + \sum_{j=1}^J \left\{ \underbrace{\dot{m}_{Ox,l,j} v_{d,Ox,j} \frac{dv_{d,Ox,j}}{dx} + \frac{v_{d,Ox,j}^2}{2} \frac{d\dot{m}_{Ox,l,j}}{dx}}_{\text{energia cinetica do oxidante}} \right\} \quad (2.60)$$

As equações (2.59) e (2.60) são expressões conhecidas e podem-se calcular das equações obtidas anteriormente sendo a única variável desconhecida dT_g/dx . Seguindo o mesmo procedimento e simplificando variáveis, a equação da energia fornece uma expressão para dT_g/dx :

$$\frac{dT_g}{dx} = - \frac{\left(a_1 + W_F + W_{Ox} + \frac{d\dot{Q}_{conv,p}}{dx} + \frac{d\dot{Q}_{rad,p}}{dx} \right)}{a_2} \quad (2.61)$$

onde

$$a_1 = \dot{m}_g v_g^2 \left[\frac{3}{2\dot{m}_g} \frac{d\dot{m}_g}{dx} - \frac{1}{A_g} \frac{dA_g}{dx} \right] + \left[\dot{m}_g \frac{dh_g}{d\Phi} \frac{d\Phi}{dx} + h_g \frac{d\dot{m}_g}{dx} \right] \quad (2.62)$$

$$a_2 = \dot{m}_g \left[\frac{dh_g}{dT_g} - v_g^2 \left(\frac{1}{\bar{M}_g} \frac{d\bar{M}_g}{dT_g} - \frac{1}{T_g} \right) \right] \quad (2.63)$$

A entalpia do gás h_g e as suas derivadas dh_g/dT , $dh_g/d\Phi$ e dh_g/dP podem ser calculadas conhecendo-se o estado de equilíbrio químico da mistura gasosa para valores de T , P e Φ especificados. No Apêndice A é descrito em detalhe o programa de equilíbrio químico desenvolvido para o cálculo dessas propriedades.

O calor por convecção e o calor por radiação do gás até a parede podem ser calculados usando as seguintes equações:

$$\frac{d\dot{Q}_{conv,p}}{dx} = \hat{h}_g \pi D_c (T_g - T_{wi}) \quad (2.64)$$

$$\frac{d\dot{Q}_{rad,p}}{dx} = \varepsilon_g \sigma \pi D_c (T_g^4 - T_{wi}^4) \quad (2.65)$$

onde T_{wi} é a temperatura interna da parede da câmara, \hat{h}_g é o coeficiente de convecção dos gases quentes e D_c é o diâmetro interno da câmara de combustão.

O coeficiente de convecção, \hat{h}_g , é uma função tanto das propriedades do fluido como das propriedades do escoamento. Resultados empíricos para escoamentos de gases quentes a altas velocidades podem ser usados para aproximar a troca de calor em câmaras de combustão de foguete. Uma correlação empírica é dado por McAdams (1954):

$$\hat{h}_g = \frac{\lambda_g}{D_c} \left[0.026 \left(\frac{D_c v_g \rho_g}{\eta_g} \right)^{0.8} \left(\frac{\eta_g C_{pg}}{\lambda_g} \right)^{0.4} \right] \quad (2.66)$$

A emissividade do gás foi calculada usando as fórmulas dadas por Leckner (1972), considerando que as moléculas que emitem mais radiação são o vapor da água e o dióxido de carbono:

$$\varepsilon_g = f_{CO_2} \varepsilon_{CO_2}^\circ + f_{H_2O} \varepsilon_{H_2O}^\circ - \Delta \varepsilon \quad (2.67)$$

onde, $\varepsilon_{CO_2}^\circ$ e $\varepsilon_{H_2O}^\circ$ são as emissividades no estado padrão ($P=1\text{atm}$) do CO_2 e H_2O respectivamente, f_{CO_2} e f_{H_2O} são os fatores de correção de pressão para as emissividades de CO_2 e H_2O , respectivamente, e $\Delta\varepsilon$ é o fator de compensação pelos efeitos de sobreposição entre as bandas de CO_2 e H_2O .

Expressões para os fatores de correção e para as emissividades no estado padrão de cada um dos gases são dadas no Apêndice D.

2.4.6. Determinação da Temperatura da Parede da Câmara

Neste trabalho considera-se a transferência de calor por convecção e radiação para uma parede contendo n camadas de diferentes materiais com espessuras ΔL_i , $i = 1, \dots, n$. A Figura 2.8 a seguir mostra o balanço de energia para uma parede com n camadas e mostra o perfil de temperaturas ao longo das camadas. É necessário determinar a temperatura interna T_{wi} para calcular as perdas de calor por convecção e por radiação do gás para a parede, bem como para determinar as temperaturas máximas de cada camada a fim de que não ultrapassem os limites de temperatura para cada material.

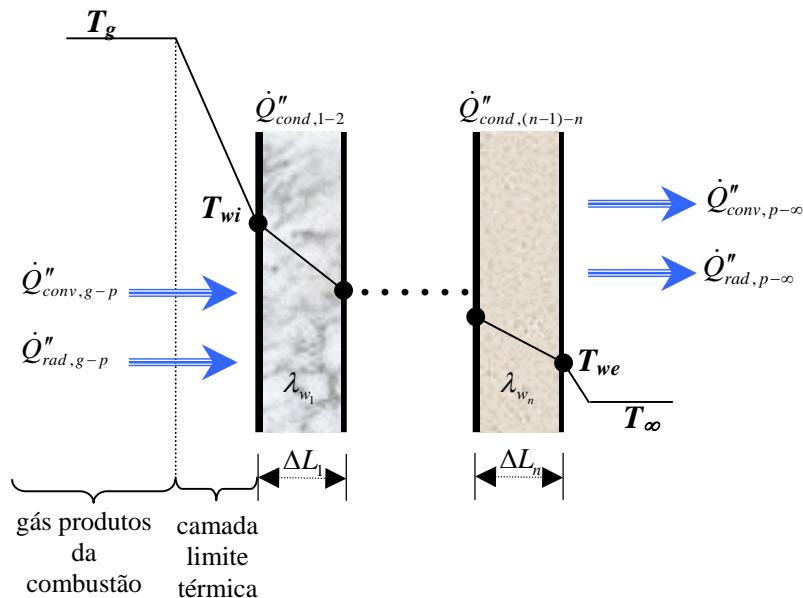


FIGURA 2.8 – Balanço de energia na parede da câmara.

Da Figura 2.8 pode-se escrever o balanço de energia junto à parede interna como:

$$\dot{Q}''_{conv,g-p} + \dot{Q}''_{rad,g-p} = \dot{Q}''_{cond,i-1} \quad (2.68)$$

onde $\dot{Q}''_{conv,g-p}$ e $\dot{Q}''_{rad,g-p}$ são as taxas do calor transferido do gás até a camada interna por convecção e por radiação, respectivamente, e $\dot{Q}''_{cond,i-1}$ é a taxa de calor transferido por condução através da primeira camada da parede.

Usando as equações (2.64) e (2.65), pode-se reescrever a equação (2.68) como:

$$\hat{h}_g (T_g - T_{wi}) + \varepsilon_g \sigma (T_g^4 - T_{wi}^4) = \frac{\lambda_{w_1}}{\Delta L_1} (T_{wi} - T_1) \quad (2.69)$$

onde λ_{w_1} e ΔL_1 são a condutividade térmica e a espessura da primeira camada da parede respectivamente e T_{wi} e T_1 são as temperaturas da parede interna e da parede externa da primeira camada, respectivamente. A equação anterior pode ser reescrita como:

$$AT_{wi}^4 + BT_{wi} - T_1 - C = 0 \quad (2.70)$$

onde $A = \frac{\Delta L_1}{\lambda_{w_1}} \varepsilon_g \sigma$, $B = \frac{\Delta L_1}{\lambda_{w_1}} \hat{h}_g + 1$ e $C = \frac{\Delta L_1}{\lambda_{w_1}} (\hat{h}_g T_g + \varepsilon_g \sigma T_g^4)$.

Fazendo um balanço de energia na região externa (última camada) pode-se escrever uma equação similar à equação (2.68), da seguinte maneira:

$$\dot{Q}''_{cond,(n-1)-n} = \dot{Q}''_{conv,p-\infty} + \dot{Q}''_{rad,p-\infty} \quad (2.71)$$

onde $\dot{Q}''_{conv,p-\infty}$ e $\dot{Q}''_{rad,p-\infty}$ são os fluxos de calor transferidos da última camada até o ambiente por convecção e por radiação, respectivamente, e $\dot{Q}''_{cond,(n-1)-n}$ é o fluxo de calor conduzido através da última camada.

Portanto, a equação (2.71) pode ser reescrita como:

$$\frac{\lambda_{w_n}}{\Delta L_n} (T_n - T_{we}) = \hat{h}_\infty (T_{we} - T_\infty) + \varepsilon_{w_n} \sigma (T_{we}^4 - T_\infty^4) \quad (2.72)$$

onde \hat{h}_∞ e T_∞ são o coeficiente de película e a temperatura do ambiente externo respectivamente e ε_{w_n} é a emissividade da parede da ultima camada. Uma expressão similar à (2.70) pode também ser obtida:

$$DT_{we}^4 + ET_{we} - T_n - F = 0 \quad (2.73)$$

onde $D = \frac{\lambda_{w_n}}{\Delta L_n} \varepsilon_{w_n} \sigma$, $E = \frac{\lambda_{w_n}}{\Delta L_n} \hat{h}_\infty + 1$ e $F = \frac{\lambda_{w_n}}{\Delta L_n} (\hat{h}_\infty T_\infty + \varepsilon_{w_n} \sigma T_\infty^4)$.

Finalmente é feito um balanço de energia por condução nas camadas interiores da seguinte maneira:

$$\dot{Q}_{cond,i-1}'' = \dot{Q}_{cond,1-2}'' = \dots = \dot{Q}_{cond,n-e}'' \quad (2.74)$$

ou $\frac{\lambda_{w_1}}{\Delta L_1} (T_{wi} - T_1) = \frac{\lambda_{w_2}}{\Delta L_2} (T_1 - T_2) = \dots = \frac{\lambda_{w_n}}{\Delta L_n} (T_n - T_{we})$.

As expressões anteriores podem ser desenvolvidas para cada camada em particular:

$$\begin{aligned}
& \left[\begin{array}{c} \lambda_{w_1} \Delta L_2 \\ \Delta L_1 \lambda_{w_2} \end{array} \right]_{G_1} (T_{wi} - T_1) = (T_1 - T_2) \Rightarrow T_2 - T_1 + G_1 (T_{wi} - T_1) = 0 \\
& \left[\begin{array}{c} \lambda_{w_2} \Delta L_3 \\ \Delta L_2 \lambda_{w_3} \end{array} \right]_{G_2} (T_1 - T_2) = (T_2 - T_3) \Rightarrow T_3 - T_2 + G_2 (T_1 - T_2) = 0 \\
& \vdots \\
& \left[\begin{array}{c} \lambda_{w_{n-1}} \Delta L_n \\ \Delta L_{n-1} \lambda_{w_n} \end{array} \right]_{G_n} (T_{n-1} - T_n) = (T_n - T_{we}) \Rightarrow T_{we} - T_n + G_n (T_{n-1} - T_n) = 0
\end{aligned} \tag{2.75}$$

O sistema anterior de equações (2.70), (2.71) e (2.75) é usado para encontrar as temperaturas internas e externas de cada camada através do método de Newton-Raphson para sistemas não lineares. O sistema de equações não lineares e o jacobiano do sistema são:

$$f(\mathbf{T}_n) = \begin{cases} AT_{wi}^4 + BT_{wi} - T_1 - C = 0 \\ T_2 - T_1 + G_1 (T_{wi} - T_1) = 0 \\ \vdots \\ T_{we} - T_n + G_n (T_{n-1} - T_n) = 0 \\ DT_{we}^4 + ET_{we} - T_n - F = 0 \end{cases} \tag{2.76a}$$

$$f'(\mathbf{T}_n) = \begin{bmatrix} (4AT_{wi}^3 + B) & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ G_1 & -(G_1 + 1) & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & G_2 & -(G_2 + 1) & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & & & & & \vdots \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & -1 & (4DT_{we}^3 + E) \end{bmatrix} \tag{2.76b}$$

O método de Newton-Raphson para resolver o sistema de equações não lineares é apresentado a seguir:

$$T_{n+1} = T_n - \frac{f(T_n)}{f'(T_n)} \quad (2.77)$$

No caso de uma parede com apenas uma camada, as equações (2.76a) e (2.76b) ficam:

$$f(T_n) = \begin{cases} AT_{wi}^4 + BT_{wi} - T_{we} - C = 0 \\ DT_{we}^4 + ET_{we} - T_{wi} - F = 0 \end{cases} \quad (2.78a)$$

$$f'(T_n) = \begin{bmatrix} (4AT_{wi}^3 + B) & -1 \\ -1 & (4DT_{we}^3 + E) \end{bmatrix} \quad (2.78b)$$

2.4.7. Conservação da Quantidade de Movimento

Os fluxos de quantidade de movimento ao longo da câmara de combustão, desde a injeção até o fim da vaporização das gotas, são mostrados na Figura 2.9 a seguir.

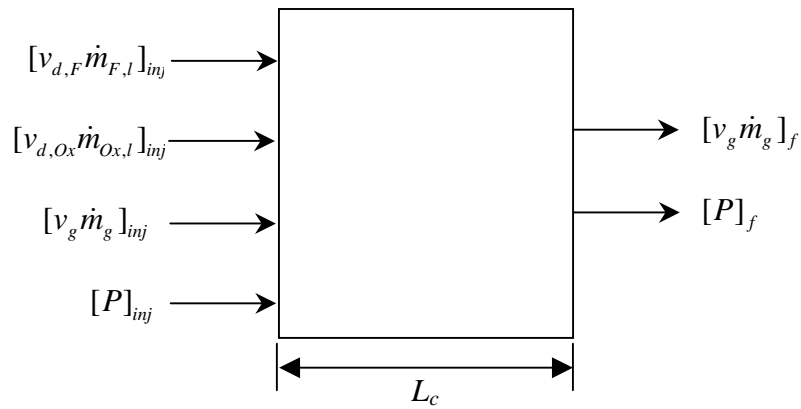


FIGURA 2.9 – Fluxos de quantidade de movimento dentro da câmara de combustão. (*inj*: condições de injeção; *f*: condições ao fim da vaporização)

Um balanço dos fluxos de quantidade de movimento na injeção e no fim da vaporização fornece:

$$P_{inj} + (\rho_g v_g^2)_{inj} + \left(\frac{\dot{m}_{F,l}}{A_c} v_{d,F} \right)_{inj} + \left(\frac{\dot{m}_{Ox,l}}{A_c} v_{d,Ox} \right)_{inj} = P_f + (\rho_g v_g^2)_f \quad (2.79)$$

Considerando que $\rho_g v_g^2 = \gamma P M^2$, onde γ é a razão de calores específicos do gás, M é o número de Mach do escoamento e P é a pressão, pode-se obter a seguinte expressão para a pressão da mistura gasosa no fim da vaporização:

$$P_f = \frac{P_{inj} \left(1 + \gamma_{inj} M_{inj}^2\right) + \left(\frac{\dot{m}_{F,l}}{A_c} v_{d,F}\right)_{inj} + \left(\frac{\dot{m}_{Ox,l}}{A_c} v_{d,Ox}\right)_{inj}}{1 + \gamma_f M_f^2} \quad (2.80)$$

Observa-se que em câmaras de combustão de foguetes, em geral:

$$M_{inj} \ll 1, \quad M_f \ll 1, \quad \left(\frac{\dot{m}_{F,l}}{A_c} v_{d,F}\right)_{inj} + \left(\frac{\dot{m}_{Ox,l}}{A_c} v_{d,Ox}\right)_{inj} \ll P_{inj},$$

conseqüentemente, $P_f \cong P_{inj}$, e as variações de pressão ao longo da câmara podem ser desprezadas e o processo de vaporização e queima pode ser considerado isobárico.

A seguir é descrita a variação de quantidade de movimento das gotas no escoamento.

2.4.8 Conservação da Quantidade de Movimento das Gotas

As gotas de combustível são injetadas em altas velocidades em relação à mistura gasosa a qual reduz a velocidade das gotas por arrasto. Admite-se que o arrasto seja a única força atuando sobre a gota e que atue na mesma direção da velocidade relativa gás-gota, v_{rel} . A Figura 2.10a mostra um esquema da velocidade relativa gás-gota.

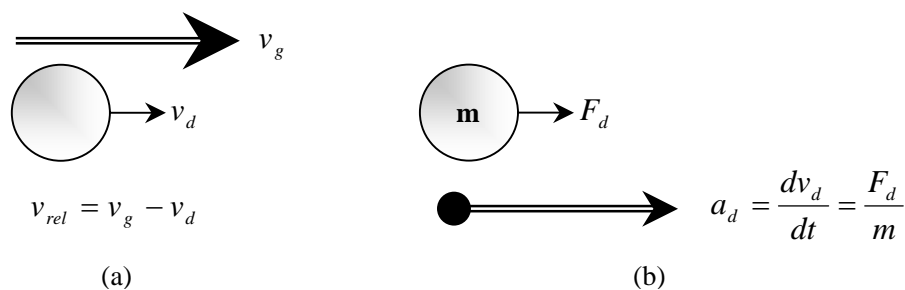


FIGURA 2.10 – (a) Velocidade relativa entre uma gota e um escoamento; (b) Segunda Lei de Newton aplicada à gota.

Aplicando a Segunda Lei de Newton à gota, tem-se:

$$F_d = m_d \frac{dv_d}{dt} = m_d v_d \frac{dv_d}{dx} \quad (2.81)$$

De acordo com a Figura 2.10a, a velocidade relativa é:

$$v_{rel} = v_g - v_d \quad (2.82)$$

A força de arrasto é dada por:

$$F_d = \frac{C_D \rho_g \pi D^2 v_{rel}^2}{8} \quad (2.83)$$

A correlação dada por Wiegand (1987) é usada para calcular os efeitos de deformação aerodinâmica sobre o coeficiente de arrasto, C_D :

$$C_D \cong f(\text{Re}, \text{We}) = 0.28 + \frac{21}{\text{Re}} + \frac{6}{\sqrt{\text{Re}}} + \text{We} (0.2319 - 0.1579 \log \text{Re} + 0.0471 \log^2 \text{Re} - 0.0042 \log^3 \text{Re}) \quad (2.84)$$

válido para $[5 \leq \text{Re} \leq 2000]$.

O número de Reynolds Re nesta expressão é função das propriedades dos produtos da combustão, da velocidade relativa gás-gota e do diâmetro da gota, sendo definido como:

$$\text{Re} = \frac{\rho_g D v_{rel}}{\eta_g} \quad (2.85)$$

O número de Weber é um parâmetro adimensional que relaciona as forças inerciais e as forças de tensão superficial, τ_l , dado por:

$$\text{We} = \frac{\rho_g D v_{rel}^2}{\tau_l} \quad (2.86)$$

onde τ_l é a tensão superficial do líquido.

Igualando a expressões (2.81) e (2.83), obtém-se:

$$\frac{dv_d}{dx} = \frac{3C_D \rho_g v_{rel}^2}{4\rho_l v_d D}$$

ou

$$\frac{dv_d}{dx} = \frac{3C_D \rho_g (v_g - v_d) |v_g - v_d|}{4\rho_l v_d D} \quad (2.87)$$

onde o sinal de dv_d/dx é a mesma da velocidade relativa.

Adicionalmente, pode-se encontrar o tempo de evaporação através da seguinte expressão:

$$\frac{dt_e}{dx} = \frac{1}{v_d} \quad (2.88)$$

As equações (2.35-b), (2.47.b), (2.87) e (2.88) são equações diferenciais ordinárias não lineares e podem ser integradas numericamente. Considerando dois propelentes líquidos (combustível e oxidante), escrevem-se as equações mencionadas da seguinte maneira:

$$\frac{dT_{F,i}}{dx} = \frac{\dot{Q}_{rad,F,i} + \dot{Q}_{conv,F,i} - \dot{Q}_{v,F,i}}{m_{d,F,i} v_{d,F,i} C_{pl,F,i}} \quad (2.89)$$

$$\frac{dT_{Ox,j}}{dx} = \frac{\dot{Q}_{rad,Ox,j} + \dot{Q}_{conv,Ox,j} - \dot{Q}_{v,Ox,j}}{m_{d,Ox,j} v_{d,Ox,j} C_{pl,Ox,j}} \quad (2.90)$$

$$\frac{dD_{F,i}}{dx} = - \left(\frac{2\dot{m}_{v,F,i}}{\pi \rho_{F,l,i} v_{d,F,i} D_{F,i}^2} + \frac{D_{F,i}}{3\rho_{F,l,i}} \frac{d\rho_{F,l,i}}{dT_{F,l,i}} \frac{dT_{F,l,i}}{dx} \right) \quad (2.91)$$

$$\frac{dD_{Ox,j}}{dx} = - \left(\frac{2\dot{m}_{v,Ox,j}}{\pi\rho_{Ox,l,j}v_{d,Ox,j}D_{Ox,j}^2} + \frac{D_{Ox,j}}{3\rho_{Ox,l,j}} \frac{d\rho_{Ox,l,j}}{dT_{Ox,l,j}} \frac{dT_{Ox,l,j}}{dx} \right) \quad (2.92)$$

$$\frac{dv_{d,F,i}}{dx} = \frac{3C_{D,F,i}\rho_g(v_g - v_{d,F,i})|v_g - v_{d,F,i}|}{4\rho_{F,l,i}v_{d,F,i}D_{F,i}} \quad (2.93)$$

$$\frac{dv_{d,Ox,j}}{dx} = \frac{3C_{D,Ox,j}\rho_g(v_g - v_{d,Ox,j})|v_g - v_{d,Ox,j}|}{4\rho_{Ox,l,j}v_{d,Ox,j}D_{Ox,j}} \quad (2.94)$$

$$\frac{dt_{e,F,i}}{dx} = \frac{1}{v_{d,F,i}} \quad (2.95)$$

$$\frac{dt_{e,Ox,j}}{dx} = \frac{1}{v_{d,Ox,j}} \quad (2.96)$$

$$\frac{dT_g}{dx} = - \frac{\left(a_1 + W_F + W_{Ox} + \frac{d\dot{Q}_{conv,p}}{dx} + \frac{d\dot{Q}_{rad,p}}{dx} \right)}{a_2} \quad (2.97)$$

O sistema de equações não lineares foi integrado numericamente usando-se rotinas do programa MATLAB. Detalhes das técnicas numéricas e computacionais empregadas são dadas no Capítulo 3. Um procedimento detalhado para o cálculo das propriedades termodinâmicas e de transporte pode ser encontrado nos Apêndices B e C, respectivamente.

2.5 Variáveis a serem Determinadas

Dado o sistema de equações diferenciais do problema e as condições iniciais para a fase líquida e a fase gasosa, serão determinados os seguintes parâmetros:

Na fase gasosa:

T_g → Temperatura do gás.

Φ_g → Razão de equivalência.

v_g → Velocidade do gás.

\dot{m}_g → Vazão de massa do gás.

Na fase líquida:

$T_{F,l,i}$ → Temperatura do combustível líquido da parcela i .

$T_{Ox,l,j}$ → Temperatura do oxidante líquido da parcela j .

$D_{F,i}$ → Diâmetro das gotas do combustível da parcela i .

$D_{Ox,j}$ → Diâmetro das gotas do oxidante da parcela j .

$v_{d,F,i}$ → Velocidade das gotas de combustível da parcela i .

$v_{d,Ox,j}$ → Velocidade das gotas de oxidante da parcela j .

$\dot{m}_{F,l}$ → Vazão total de massa de combustível líquido.

$\dot{m}_{Ox,l}$ → Vazão total de massa de oxidante líquido.

A parcela i e a parcela j correspondem a um conjunto de gotas com um dado diâmetro ou faixa de diâmetros iniciais, obedecendo à função de distribuição de Rosin-Rammler.

CAPÍTULO 3

RESULTADOS E DISCUSSÕES

3.1. Técnicas Numéricas

No capítulo 2 foram desenvolvidas nove equações principais para descrever o processo de mistura, reação, vaporização e queima de uma nuvem de gotas ou “spray” em uma câmara de combustão de foguete. Tais expressões constituem um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO's) não lineares cuja variável independente é a distância.

No caso de sistemas rígidos de equações, isto é, envolvendo diferentes escalas de tempo ou distância, é recomendado o uso de métodos implícitos de integração. Para a solução numérica das EDO's do presente modelo, com variações bruscas de temperaturas, utilizou-se o método implícito ODE15s do programa MATLAB.

3.2. Técnicas Computacionais

O método de integração ODE15s é um integrador de ordem variável de 1 a 5 e de passos múltiplos, descrito em detalhe por Shampine e Reichelt (1997) e Shampine et al. (1999). Outros métodos de integração poderiam ter sido empregados neste trabalho, como os métodos de Runge-Kutta, Adams-Moulton e Adams-Bashfort, porém o tempo de integração seria muito maior que o obtido com o método ODE15s.

A solução do sistema de equações algébricas não-lineares descrevendo a composição de equilíbrio químico foi determinada utilizando-se o método de Newton-Raphson cujos detalhes são descritos no Apêndice A. As condições iniciais são obtidas a partir da reação de equilíbrio do gás de água, permitindo assim uma convergência rápida.

O programa MATLAB oferece as seguintes vantagens:

- Interface gráfica versátil e simples;
- Ferramentas de visualização, programação, modelamento e específicas;
- Rotinas matemáticas, de engenharia e de análise de dados;
- Computação numérica e simbólica.

O compilador usado foi o MATLAB 6.5.0.180913a Release 13 da MathWorks (2003).

3.3. Sistemas Bipropelentes Simulados

Dimensões da câmara de combustão

A Figura 3.1 representa um esquema simplificado de uma câmara de combustão de forma cilíndrica. As dimensões abaixo mostradas foram utilizadas no cálculo numérico e na obtenção dos parâmetros característicos de cada um dos sistemas bipropelentes:

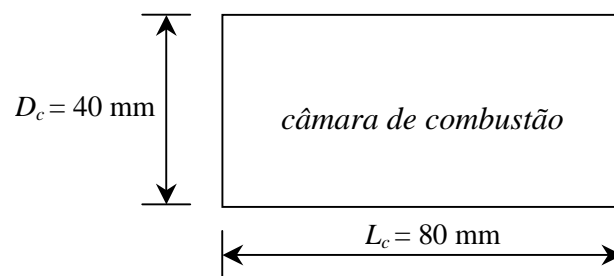


FIGURA 3.1 – Esquema simplificado de uma câmara de combustão cilíndrica.

Na Figura 3.1 D_c é o diâmetro interno e L_c é o comprimento da câmara de combustão.

Propelentes líquidos

Foram simulados os seguintes sistemas bipropelentes líquidos:

- N_2H_4 / N_2O_4
- MMH / N_2O_4
- UDMH / N_2O_4

Produtos da combustão

Os produtos da combustão incluem 11 espécies, 6 espécies principais: CO_2 , CO, H_2O , H_2 , O_2 e N_2 e 5 espécies secundárias: H, OH, O, NO e N. Outras espécies secundárias poderiam ter sido consideradas, por exemplo, N_2O , NO_2 , HO_2 , H_2O_2 , etc., porém verifica-se que a concentração delas é muito baixa em relação às outras 11 espécies consideradas.

Temperatura de entrada do líquido

- Combustível, $T_{F,l,0}$: 280 K
- Oxidante, $T_{Ox,l,0}$: 286 K

Temperatura do gás na entrada, $T_{g,0} = 800$ K. Admitida como condição inicial.

Espessura da parede da câmara, $t_w = 3$ mm

Adota-se uma câmara de combustão com uma parede constituída da liga Inconel 600, cujas propriedades termodinâmicas e de transporte foram obtidas do site (www.specialmetals.com, 2003).

Temperatura do ambiente externo à câmara, $T_\infty = 300$ K

Admite-se que o propulsor seja testado em vácuo e, portanto, não existe transferência de calor por convecção da parede para o exterior, apenas por radiação.

Área total de injeção

- Combustível, $A_{F,l,0}$: 15 mm²
- Oxidante, $A_{Ox,l,0}$: 35 mm²

Este parâmetro é calculado a partir das dimensões do injetor, ou seja, do diâmetro de canal de saída do propelente. Se o injetor tem mais de um canal de saída então a área total é a soma de todas as áreas individuais.

Vazão de massa dos propelentes

- Combustível, $\dot{m}_{F,l,0}$: 11,43 g/s
- Oxidante, $\dot{m}_{Ox,l,0}$: 28,57 g/s

Este parâmetro determina as características principais de funcionamento do propulsor tais como: impulso específico, velocidade de exaustão, empuxo, etc. Deve-se notar que se considera que uma certa fração fixa das vazões iniciais de cada propelente líquido, $\dot{m}_{F,g,0}$ e $\dot{m}_{Ox,g,0}$, vaporiza instantaneamente ao entrar na câmara, originando um escoamento de gases pré-misturados o que seria correspondente a recirculação dos gases

na câmara. A vazão de massa total dos propelentes é portanto $\dot{m}_{l,0} = \dot{m}_{F,l,0} + \dot{m}_{Ox,l,0} = 40$ gr/s.

Parâmetros de Rosin-Rammler

Os parâmetros de Rosin-Rammler D_{32} e q utilizados são os mesmos para cada um dos sistemas bipropelentes MMH/N₂O₄, N₂H₄/N₂O₄, UDMH/N₂O₄. Os resultados para cada um dos sistemas bipropelentes serão comparados e discutidos a seguir.

3.4. Análise e Discussão dos Resultados Obtidos

3.4.1. Câmaras de Combustão Bipropelentes

A distância de vaporização, x_{vap} , é um parâmetro importante no projeto e desenvolvimento da câmara de combustão de um foguete a fim de garantir uma vaporização e combustão completa das gotas dentro da câmara e conseguir um melhor desempenho do propulsor.

Os parâmetros de Rosin-Rammler $q = 2,5$ e $D_{32} = 50 \mu\text{m}$ foram utilizados para a obtenção das Figuras 3.2 à 3.24, excetuando as Figuras 3.10, 3.11 e 3.12.

A vazão de massa do oxidante gasoso, para as Figuras 3.2 à 3.24, excetuando as Figuras 3.15, 3.16 e 3.17, foi considerada como 10% da vazão do oxidante líquido, ou seja, $\dot{m}_{Ox,g,0} = 0,1\dot{m}_{Ox,l,0}$, e a vazão do combustível gasoso foi considerada como 85% da vazão do oxidante gasoso, ou seja, $\dot{m}_{F,g,0} = 0,85\dot{m}_{Ox,g,0}$. Esta última expressão pode ser escrita como a razão de mistura parcial dada por $f_P = \dot{m}_{F,g,0} / \dot{m}_{Ox,g,0} = 0,85$.

As Figuras 3.2, 3.3 e 3.4 mostram a influência da pressão interna da câmara, P , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} , para o combustível e para o oxidante dos sistemas bipropelentes N₂H₄/N₂O₄, MMH/N₂O₄ e UDMH/N₂O₄. Observa-se dos gráficos que quando P aumenta x_{vap} diminui, uma vez que um aumento na pressão causa um aumento na taxa de vaporização do líquido (Chin e Lefebvre, 1983). Os gráficos incluem resultados para 4 distribuições de tamanho de gotas ou número de parcelas, N , isto é, para 1, 2, 3 e 4 parcelas de gotas. A escolha de um número adequado de parcelas é importante, porque o uso de um número grande de parcelas pode aumentar

excessivamente o tempo de cálculo, por outro lado, um número pequeno de parcelas pode produzir erros grandes na estimativa da distância de vaporização. Comparando-se os gráficos para cada um dos combustíveis líquidos observa-se que a distância de vaporização das gotas da hidrazina (N_2H_4) é maior do que para o MMH e o UDMH, principalmente porque o ponto de ebulição do N_2H_4 ($T_{boil}=113,5$ °C) é muito maior do que do MMH ($T_{boil}=90,9$ °C) e da UDMH ($T_{boil}=63$ °C) e, por conseguinte, o N_2H_4 precisa de tempo maior para atingir a temperatura de equilíbrio, T_{eq} , equivalente a uma temperatura de bulbo úmido T_{bu} , nas mesmas condições de pressão, temperatura e velocidade do gás. Observa-se também que as distâncias de vaporização completa das gotas do oxidante para cada sistema combustível é aproximadamente a mesma.

A Figura 3.5 compara a influência da pressão sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} , para os combustíveis N_2H_4 , MMH e UDMH e utilizando N_2O_4 como oxidante.

As Figuras 3.6, 3.7 e 3.8 mostram a influência do número de parcelas de gotas, N , admitidas na entrada da câmara, sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} . Observa-se que as curvas convergem assintoticamente à medida que o número de parcelas aumenta. Dos gráficos conclui-se também que para pressões maiores que 15 atm um total de 8 parcelas é suficiente para obter resultados com precisão adequada da distância de vaporização completa. Além disso observa-se que para pressões menores de 15 atm o número de parcelas adequado deve ser maior que 8. Para pressões maiores que 25 atm, a escolha de 4 parcelas de gotas pode ser suficiente para garantir uma boa estimativa da distância de vaporização completa.

A Figura 3.9 compara a influência do número de parcelas de gotas, N , sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} , para os combustíveis N_2H_4 , MMH e UDMH e utilizando N_2O_4 como oxidante.

As Figuras 3.10, 3.11 e 3.12 mostram os efeitos dos parâmetros de Rosin-Rammler, q e D_{32} , sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} . Os gráficos foram obtidos considerando uma distribuição de 8 parcelas de gotas e uma pressão da câmara de 15 atm. Pode-se observar que a medida que q aumenta a distância de vaporização diminui

exponencialmente, porque a distribuição do spray é mais uniforme e as gotas tendem a ser todas do mesmo tamanho como mostrado nas Figuras 3.2, 3.3 e 3.4. Os gráficos mostram também que para valores crescentes de diâmetros D_{32} , o tempo de residência e a distância de vaporização das gotas aumentam.

As Figuras 3.13 e 3.14 comparam a influência dos parâmetros q e D_{32} respectivamente sobre a distância de vaporização completa, para os combustíveis N_2H_4 , MMH e UDMH e utilizando N_2O_4 como oxidante.

As Figuras 3.15, 3.16 e 3.17 mostram a influência da razão de equivalência pré-misturada, Φ_P , sobre a distância de vaporização completa. A vazão de massa do oxidante gasoso foi considerada como 10% da vazão do oxidante líquido, ou seja, $\dot{m}_{Ox,g,0} = 0,1\dot{m}_{Ox,l,0}$, e a vazão do combustível gasoso foi calculado da equação $\dot{m}_{F,g,0} = \dot{m}_{Ox,g,0}\Phi_P f_s$, com Φ_P e f_s conhecidas. Os resultados foram obtidos usando-se 8 parcelas de gotas de diâmetros diferentes. Os gráficos mostram que a razão de mistura parcial, Φ_P , não tem influência significativa sobre a distância de vaporização completa das gotas. Embora um aumento de Φ_P implique um aumento em $\dot{m}_{F,g,0}$, a quantidade de oxidante líquido foi admitida fixa e mantém a distância de vaporização aproximadamente constante para cada pressão.

As Figuras 3.18, 3.19 e 3.20 mostram a influência da razão de equivalência total sobre a distância de vaporização para diferentes pressões. A vazão de massa do combustível líquido varia de acordo com a equação $\dot{m}_{F,l,0} = \dot{m}_{F,g,0} + \Phi_T f_s (\dot{m}_{Ox,g,0} + \dot{m}_{Ox,l,0})$, conhecidos Φ_T e f_s . A distância de vaporização do oxidante permanece relativamente constante a medida que Φ_T aumenta, visto que se manteve constante a vazão de oxidante líquido na entrada. Para o combustível ocorre um aumento da distância de vaporização devido ao aumento na vazão de massa do combustível injetado na entrada. Observa-se também que para maiores pressões a distancia de vaporização diminui, devido ao aumento da taxa de vaporização, como mencionado anteriormente.

A Figura 3.21 compara a influência da razão de equivalência total, Φ_T , sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} , para os combustíveis N_2H_4 , MMH e UDMH e utilizando N_2O_4 como oxidante.

As Figuras 3.22, 3.23 e 3.24 mostram o efeito das temperaturas dos gases na entrada, T_{g0} , sobre a distância de vaporização para várias pressões. Observa-se que as temperaturas dos gases na entrada não influem significativamente sobre a distância de vaporização, no intervalo de temperaturas de 500 a 2500 K. Isto ocorre porque os gases pré-misturados reagem rapidamente após a entrada na câmara, atingindo a temperatura de combustão que depende basicamente da razão de mistura e da pressão na câmara.

A Figura 3.25 compara a influência da temperatura do gás na entrada, T_{g0} , sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} , para os combustíveis N_2H_4 , MMH e UDMH e utilizando N_2O_4 como oxidante.

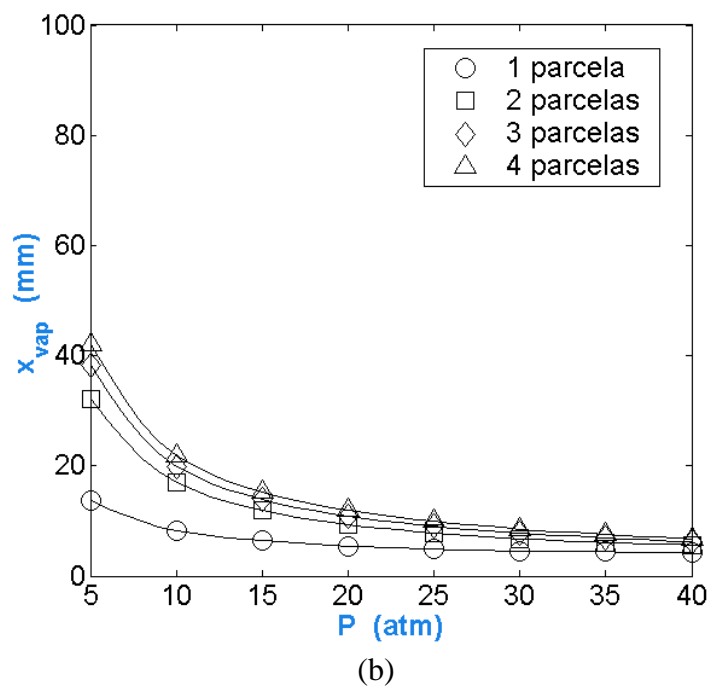
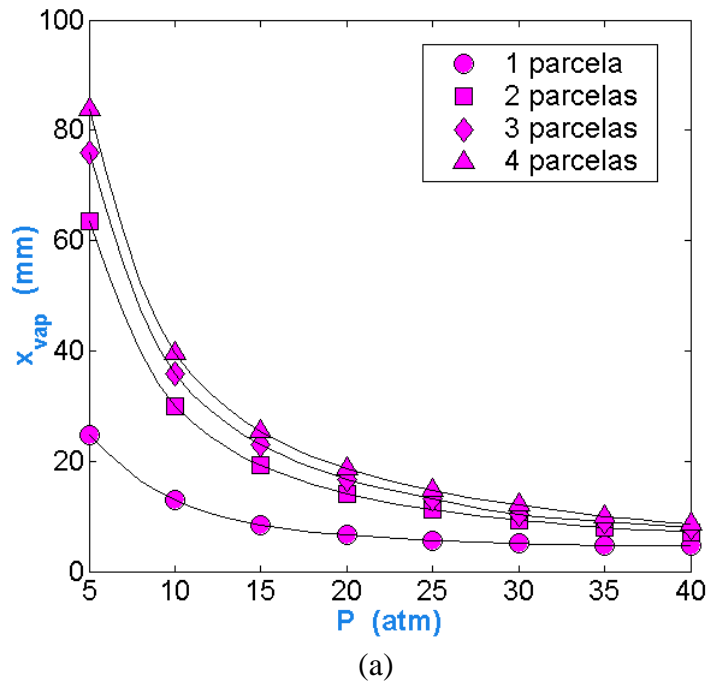


FIGURA 3.2 – Influência da pressão interna da câmara de combustão, P , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} , para vários números de parcelas de gotas, N . Propelentes: (a) N_2H_4 , (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{E,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 0,574$, $\Phi_P = 1,22$, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$.

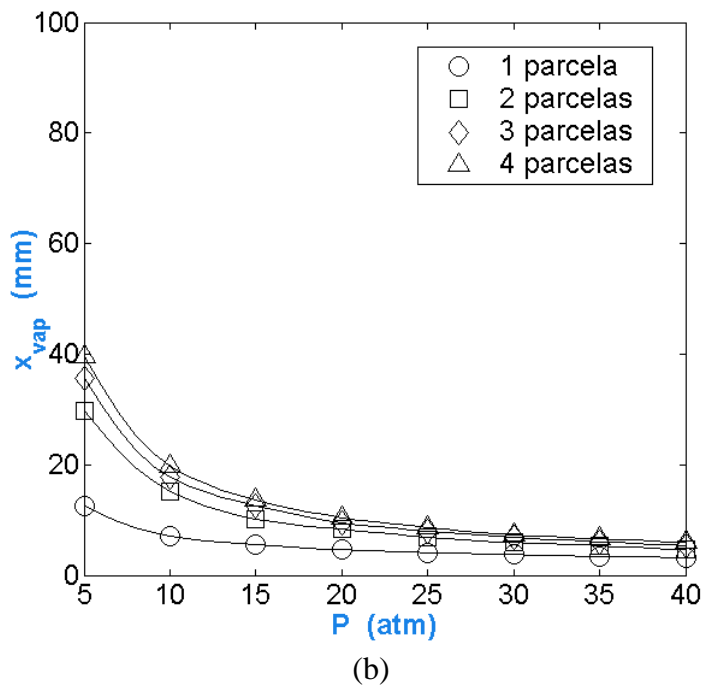
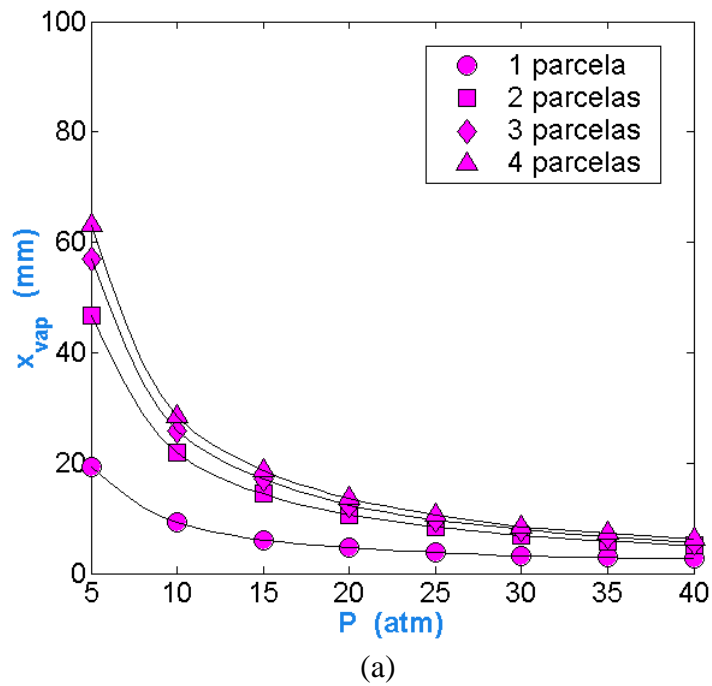


FIGURA 3.3 – Influência da pressão interna da câmara de combustão, P , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} , para vários números de parcelas de gotas, N . Propelentes: (a) MMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 1$, $\Phi_P = 2,12$, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$.

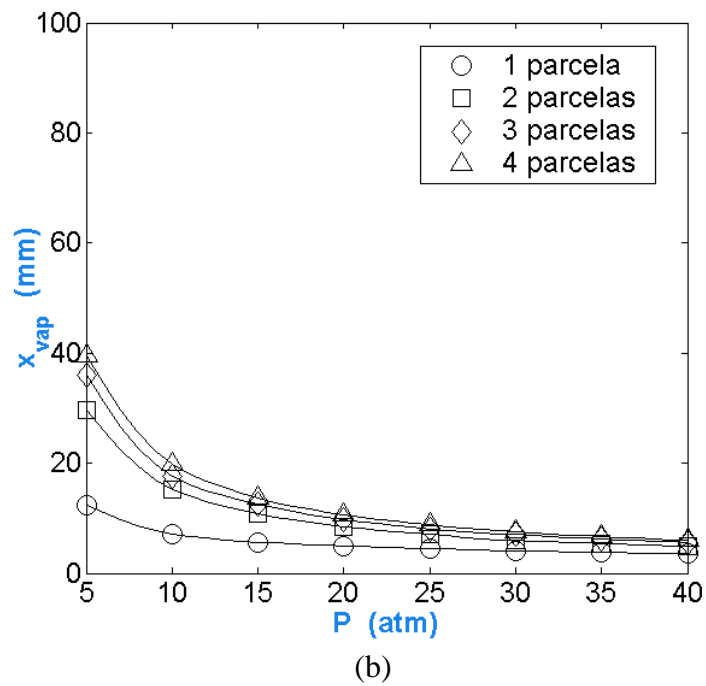
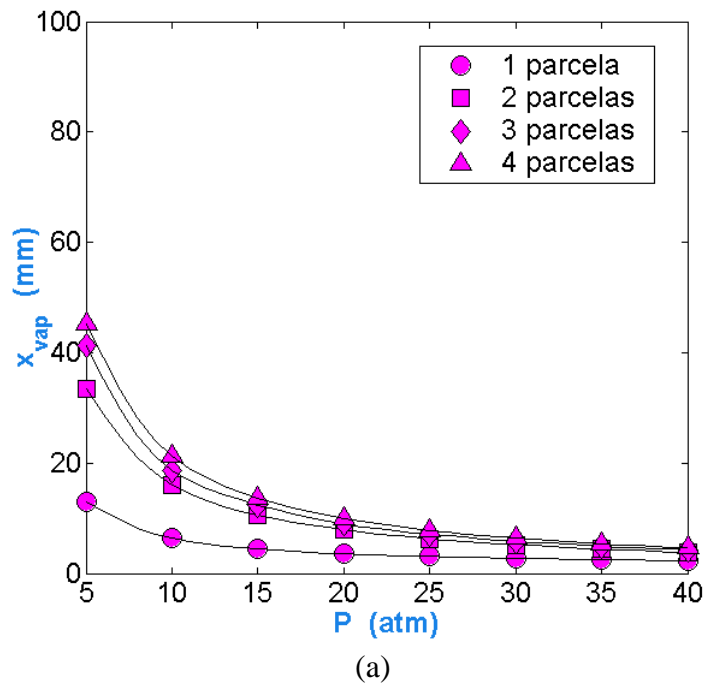


FIGURA 3.4 – Influência da pressão interna da câmara de combustão, P , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} , para vários números de parcelas de gotas, N . Propelentes: (a) UDMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,1,0} = 280$ K, $T_{Ox,1,0} = 286$ K, $\Phi_T = 1,23$, $\Phi_P = 2,6$, $D_{32} = 50 \mu\text{m}$, $q = 2,5$.

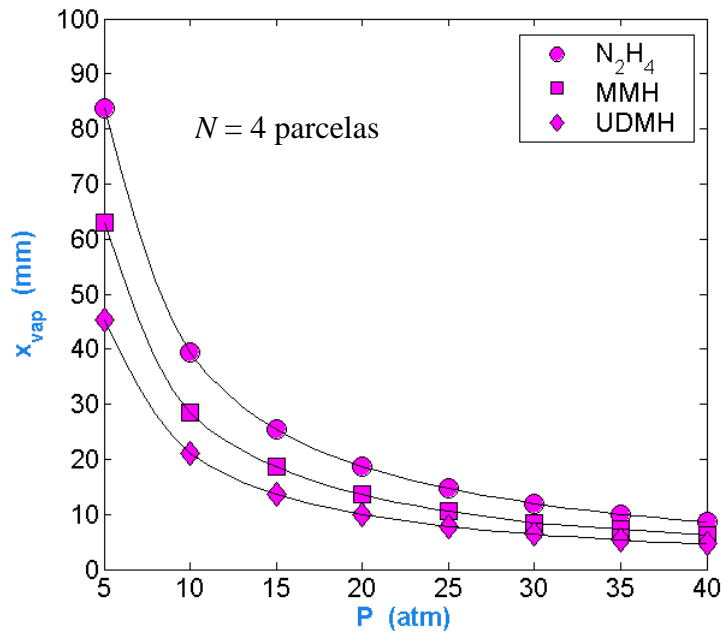


FIGURA 3.5 – Influência da pressão, P , sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} , para vários combustíveis e N_2O_4 como oxidante. $D_{32} = 50 \mu m$, $q = 2.5$, $T_{g,0} = 800 K$, $T_{F,l,0} = 280 K$, $T_{Ox,l,0} = 286 K$.

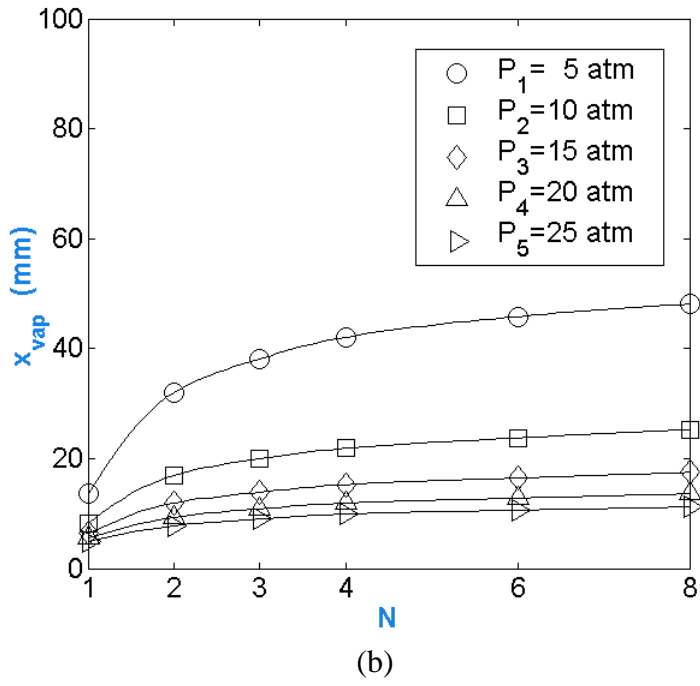
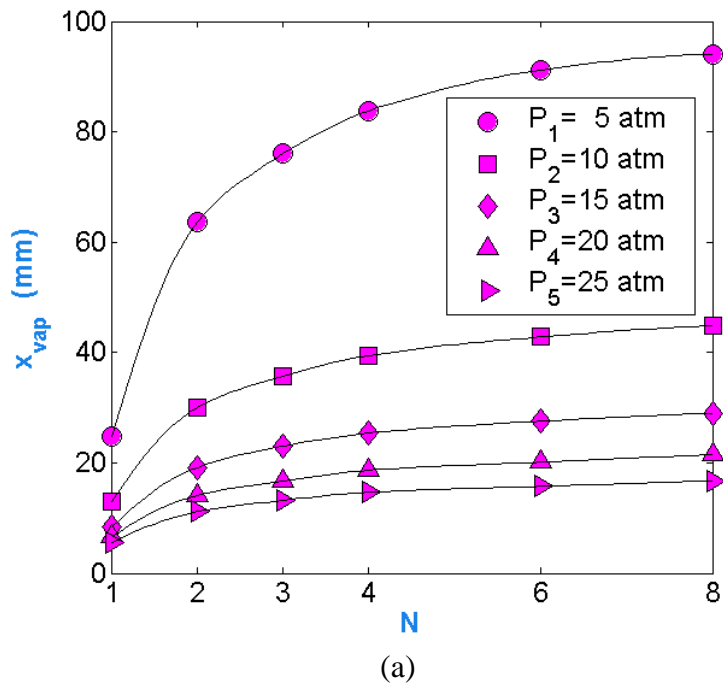


FIGURA 3.6 – Influência do número de parcelas de gotas, N , entrando na câmara de combustão sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} , para várias pressões da câmara. Propelentes: (a) N_2H_4 , (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 0,574$, $\Phi_P = 1,22$, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$.

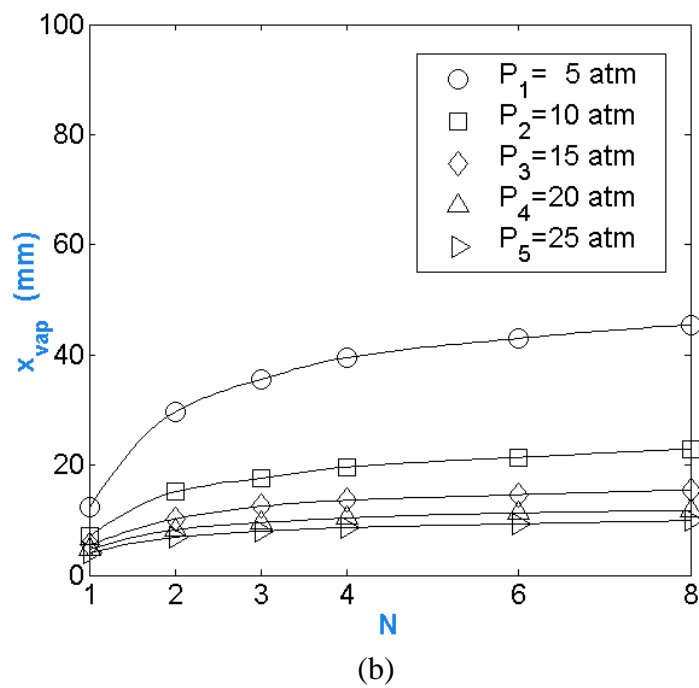
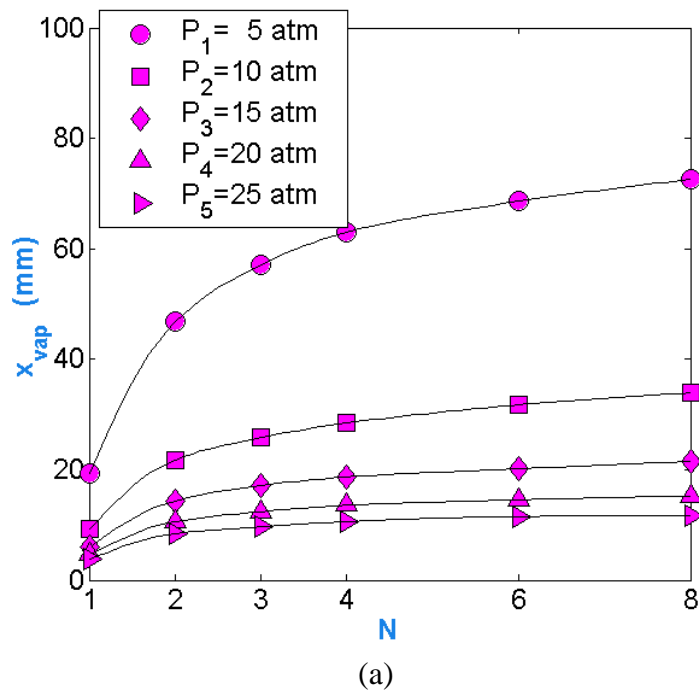


FIGURA 3.7 – Influência do número de parcelas de gotas, N , entrando na câmara de combustão sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} , para várias pressões da câmara. Propelentes: (a) MMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 1$, $\Phi_P = 2,12$, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$.

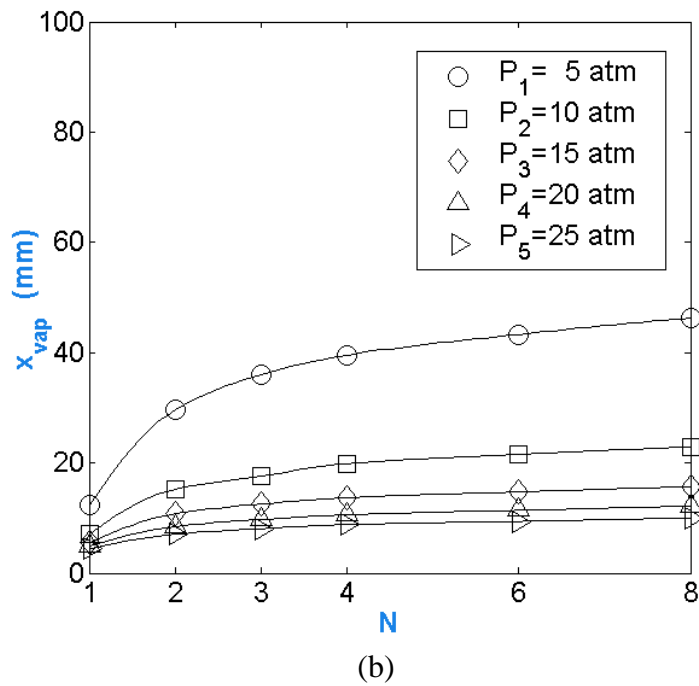
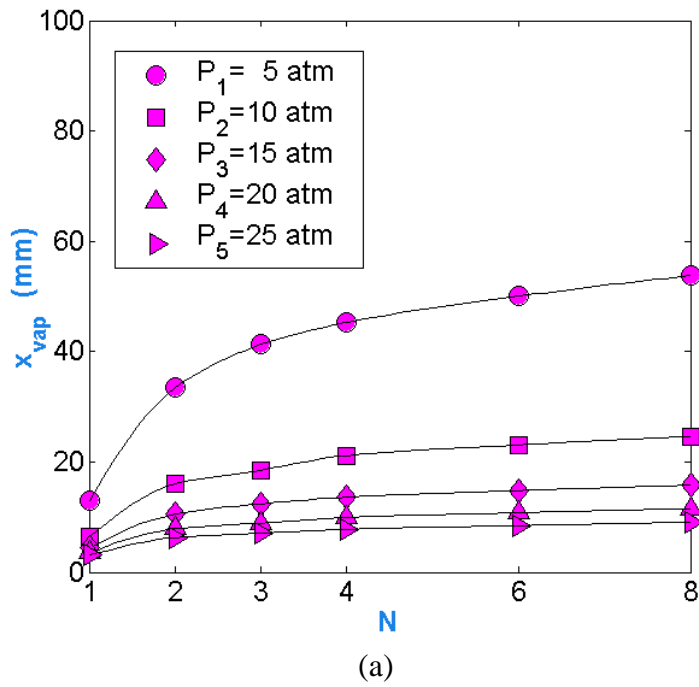


FIGURA 3.8 – Influência do número de parcelas de gotas, N , entrando na câmara de combustão sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} , para várias pressões da câmara. Propelentes: (a) UDMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 1,23$, $\Phi_P = 2,6$, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$.

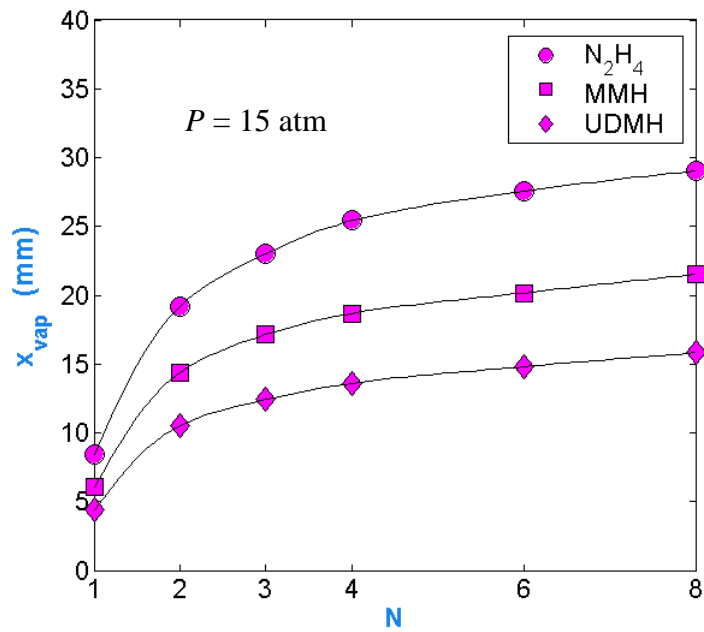
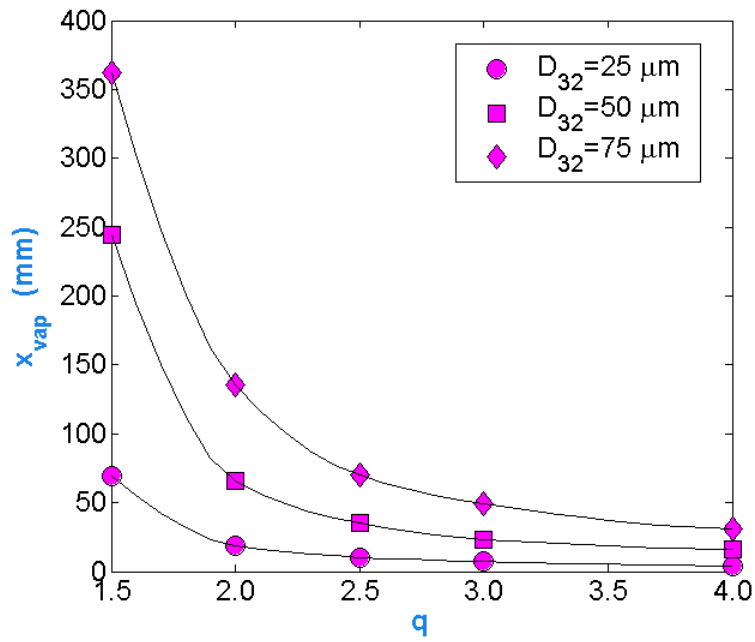
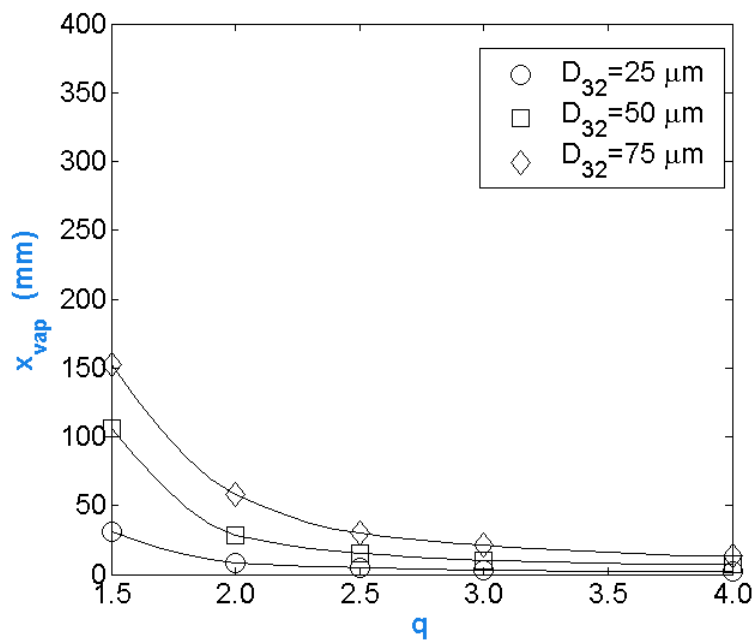


FIGURA 3.9 – Influência do número de parcelas de gotas, N , sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} , para vários combustíveis e N_2O_4 como oxidante. $D_{32} = 50 \mu\text{m}$, $q = 2,5$, $T_{g,0} = 800 \text{ K}$, $T_{F,l,0} = 280 \text{ K}$, $T_{ox,l,0} = 286 \text{ K}$.



(a)



(b)

FIGURA 3.10 – Influência dos parâmetros de Rosim-Rammmler q e D_{32} sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) N_2H_4 , (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 0,574$, $\Phi_P = 1,22$, $P = 15$ atm, $N = 8$ parcelas.

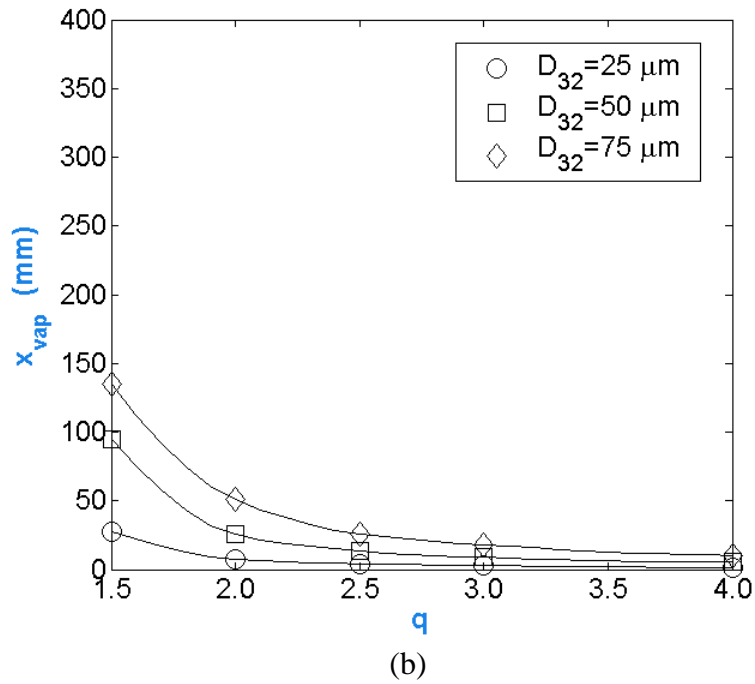
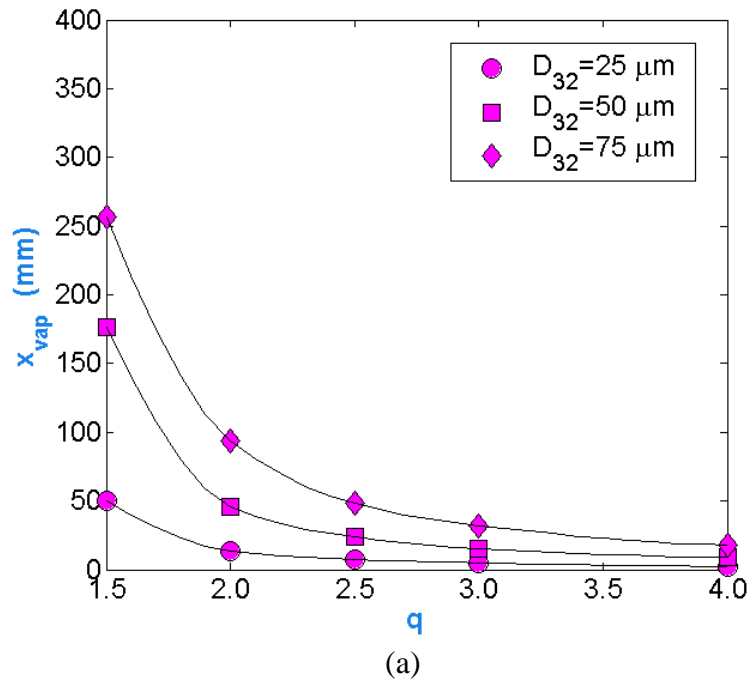


FIGURA 3.11 – Influência dos parâmetros de Rosim-Rammler q e D_{32} sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) MMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,1,0} = 280$ K, $T_{Ox,1,0} = 286$ K, $\Phi_T = 1$, $\Phi_P = 2,12$, $P = 15$ atm, $N = 8$ parcelas.

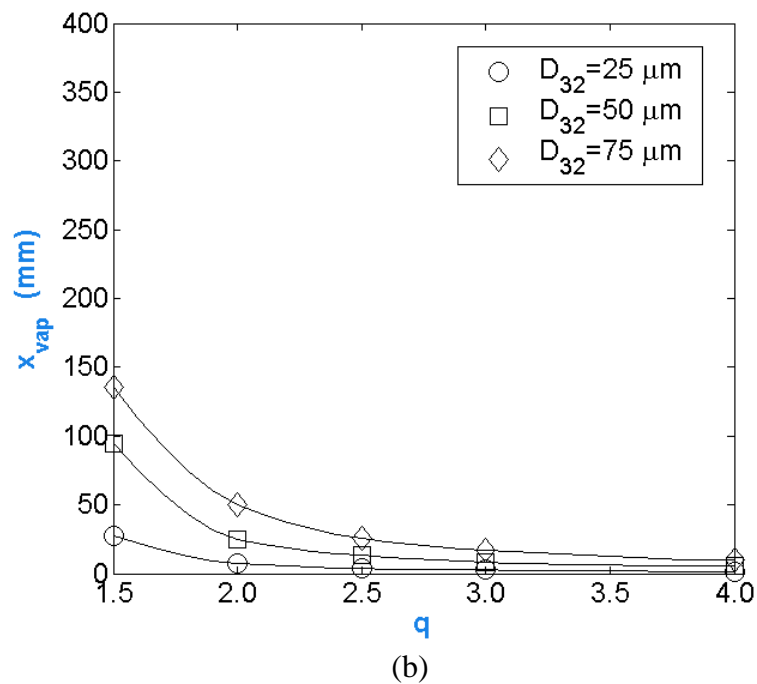
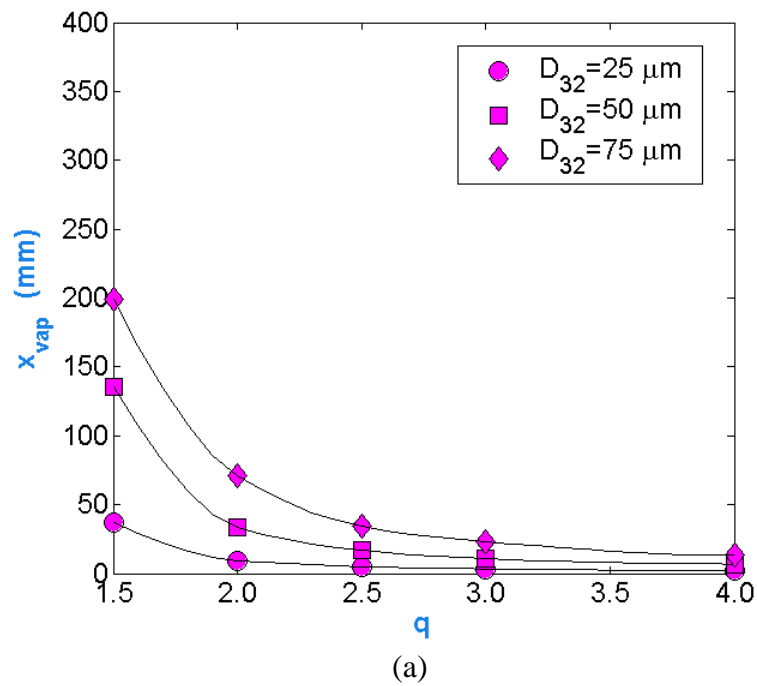


FIGURA 3.12 – Influência dos parâmetros de Rosim-Rammler q e D_{32} sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) UDMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,1,0} = 280$ K, $T_{Ox,1,0} = 286$ K, $\Phi_T = 1,23$, $\Phi_P = 2,6$, $P = 15$ atm, $N = 8$ parcelas.

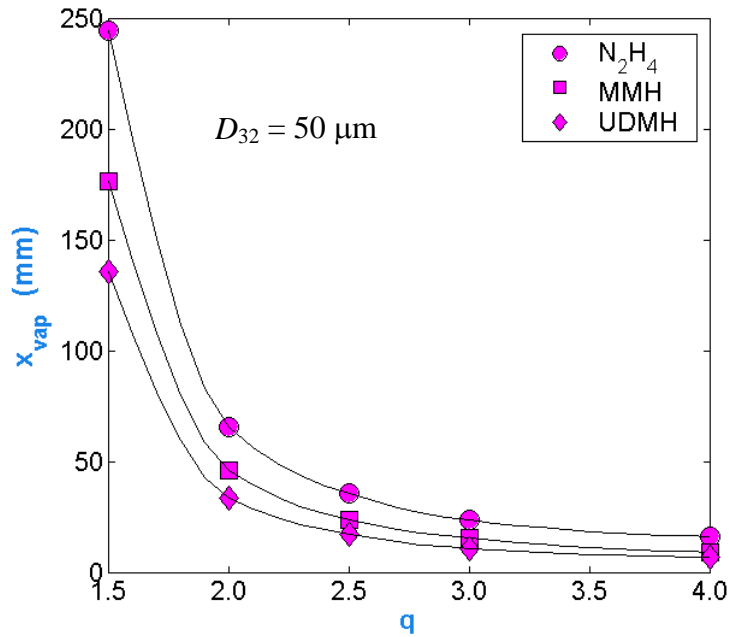


FIGURA 3.13 – Influência do parâmetro q sobre a distância de vaporização completa, para vários combustíveis e N_2O_4 como oxidante. $P = 15 \text{ atm}$, $N = 8$ parcelas, $T_{g,0} = 800 \text{ K}$, $T_{F,l,0} = 280 \text{ K}$, $T_{Ox,l,0} = 286 \text{ K}$.

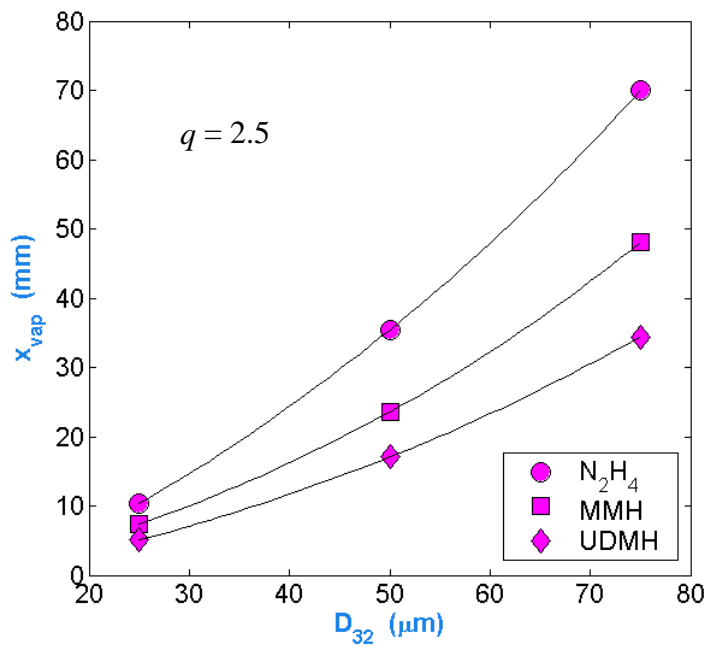


FIGURA 3.14 – Influência do diâmetro médio de Sauter, D_{32} , sobre a distância de vaporização completa, para vários combustíveis e N_2O_4 como oxidante. $P = 15 \text{ atm}$, $N = 8$ parcelas, $T_{g,0} = 800 \text{ K}$, $T_{F,l,0} = 280 \text{ K}$, $T_{Ox,l,0} = 286 \text{ K}$.

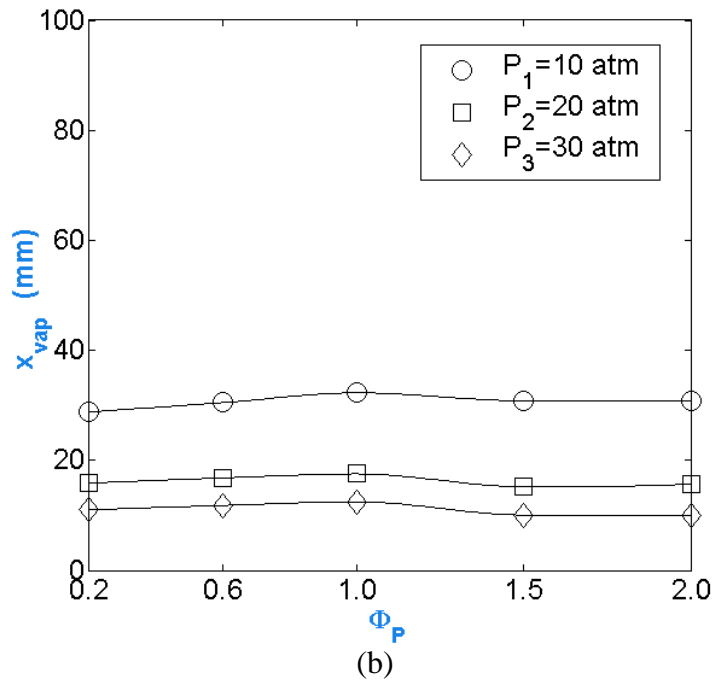
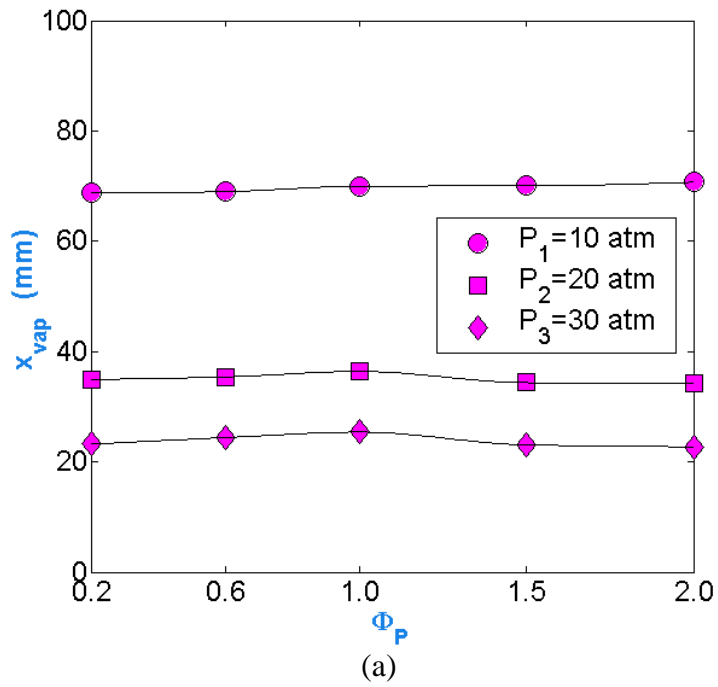


FIGURA 3.15 – Influência da razão de equivalência pré-misturada Φ_P sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) N₂H₄, (b) N₂O₄. $T_{g,0} = 800$ K, $T_{f,l,0} = 280$ K, $T_{ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 0,574$, $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$.

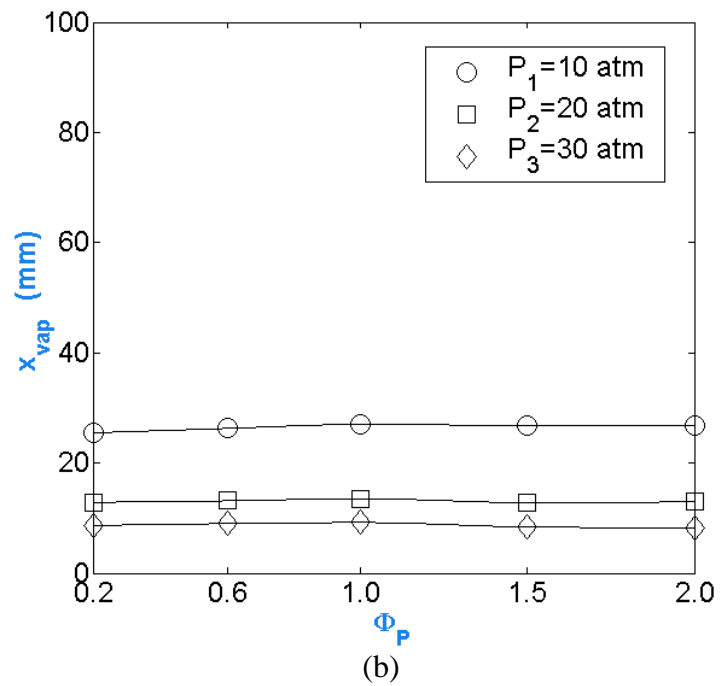
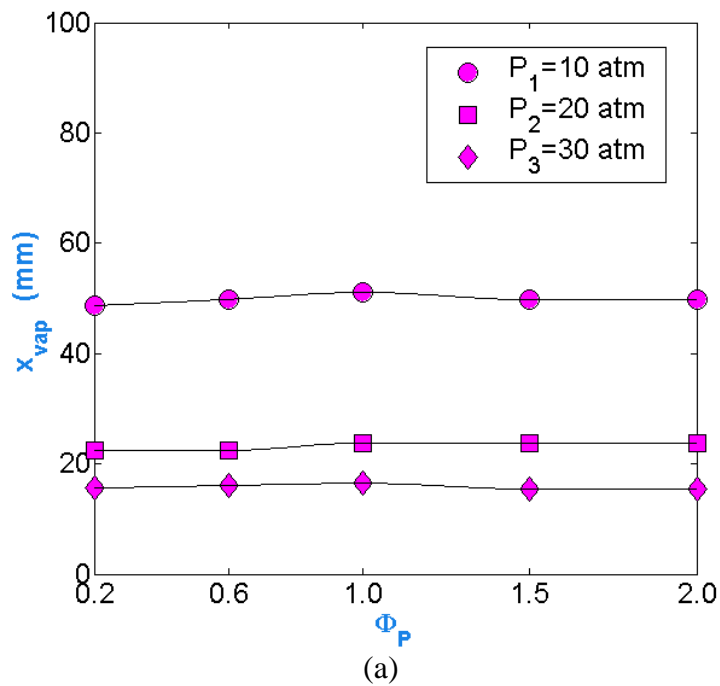


FIGURA 3.16 – Influência da razão de equivalência pré-misturada Φ_P sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) MMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 1$, $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$.

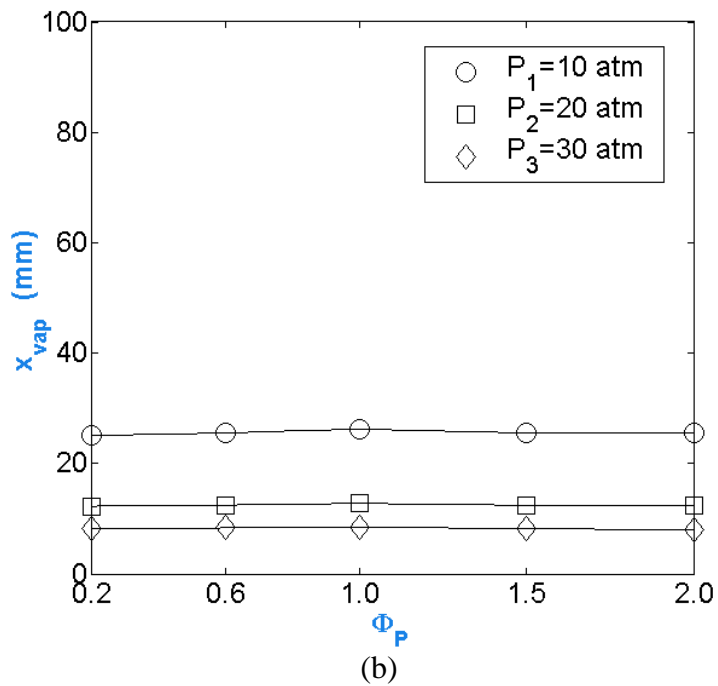
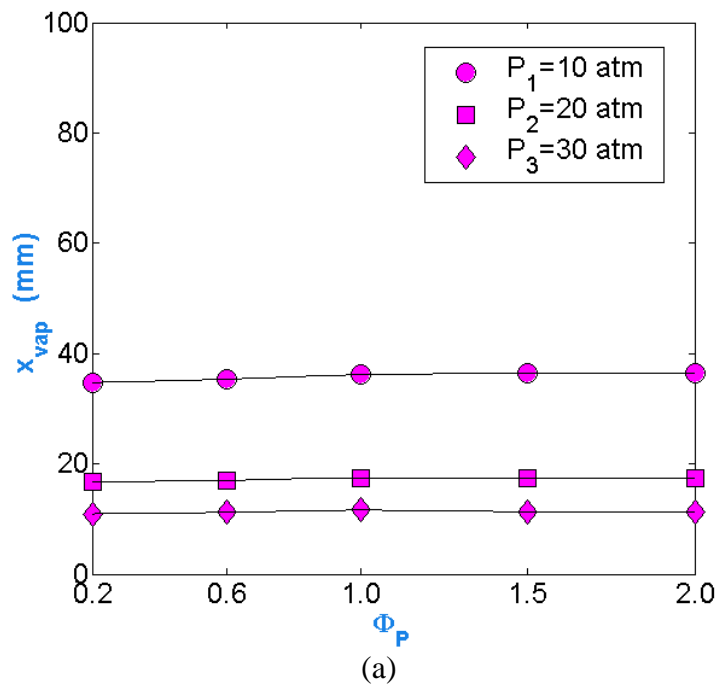


FIGURA 3.17 – Influência da razão de equivalência pré-misturada Φ_P sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) UDMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_T = 2,6$, $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$.

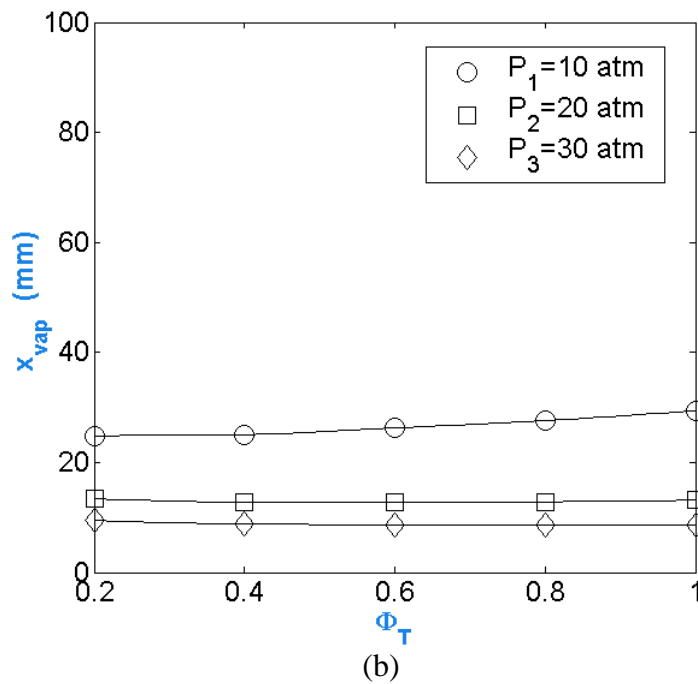
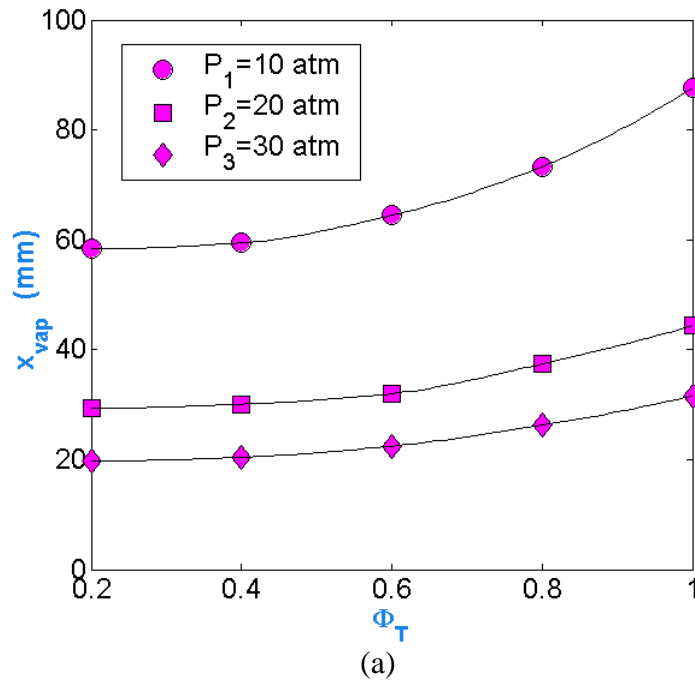


FIGURA 3.18 – Influência da razão de equivalência total, Φ_T , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) N_2H_4 , (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_P = 1,22$, $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$.

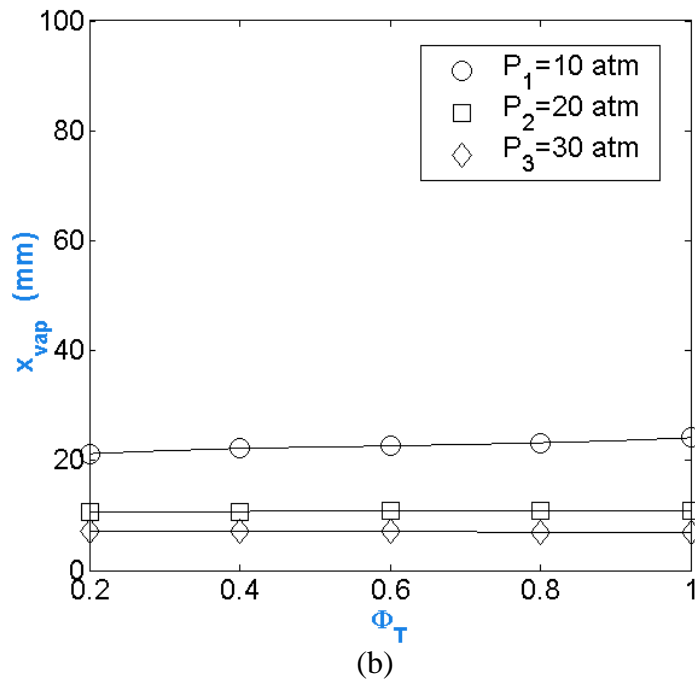
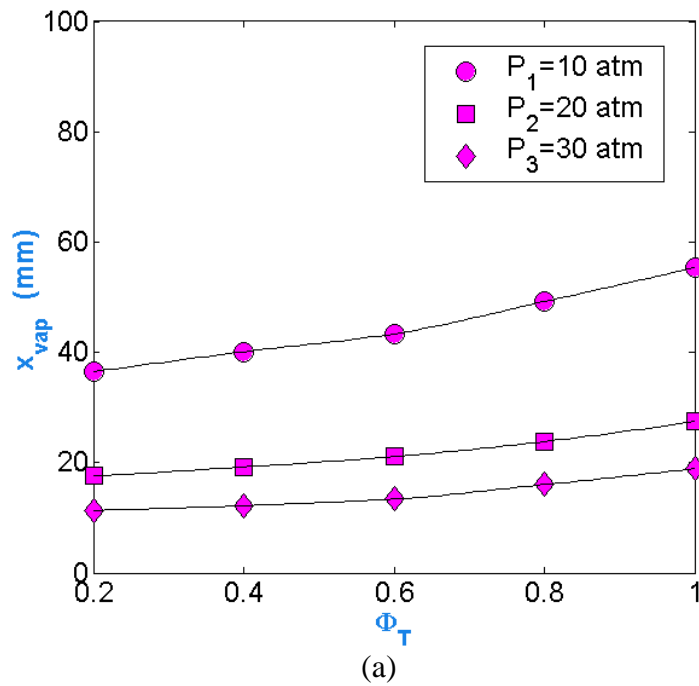


FIGURA 3.19 – Influência da razão de equivalência total, Φ_T , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) MMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_P = 2,12$, $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$.

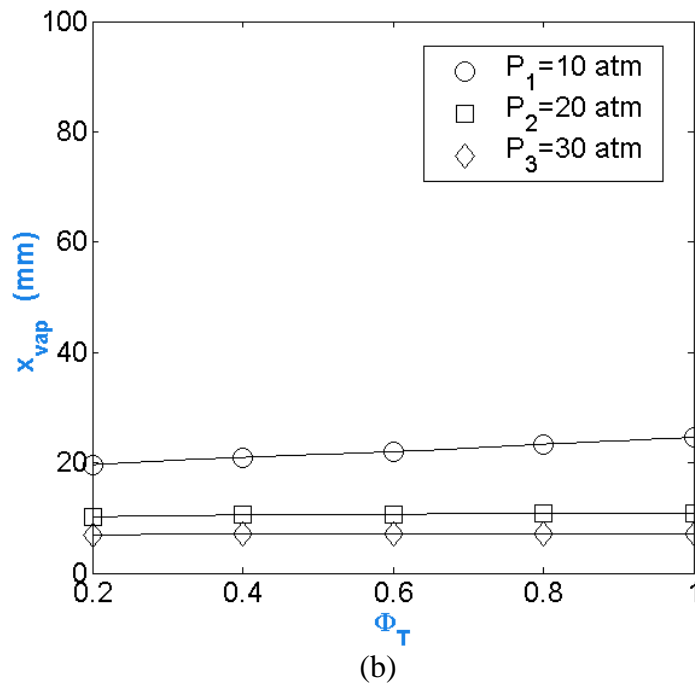
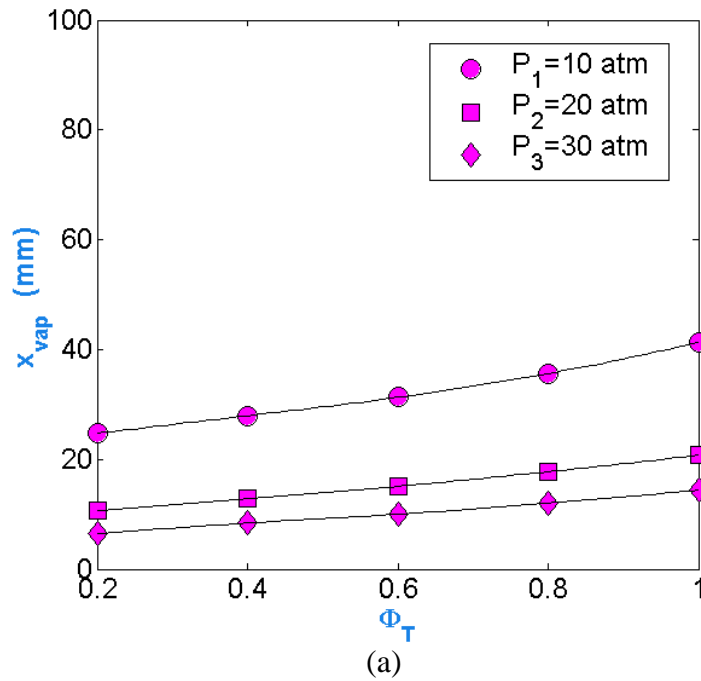


FIGURA 3.20 – Influência da razão de equivalência total, Φ_T , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) UDMH, (b) N_2O_4 . $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_P = 2,6$, $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50$ μm , $q = 2,5$.

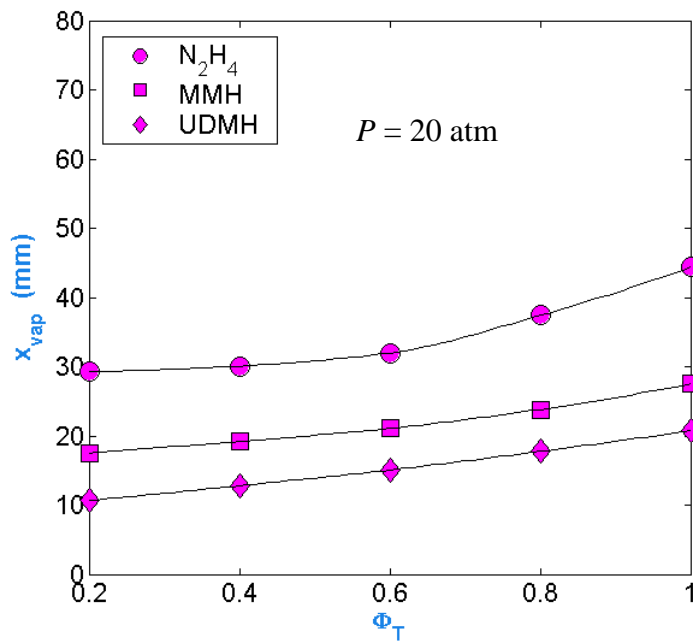


FIGURA 3.21 – Influência da razão de equivalência total, Φ_T , sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} , para vários combustíveis e N_2O_4 como oxidante. $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50 \mu m$, $q = 2.5$, $T_{g,0} = 800 K$, $T_{F,l,0} = 280 K$, $T_{Ox,l,0} = 286 K$.

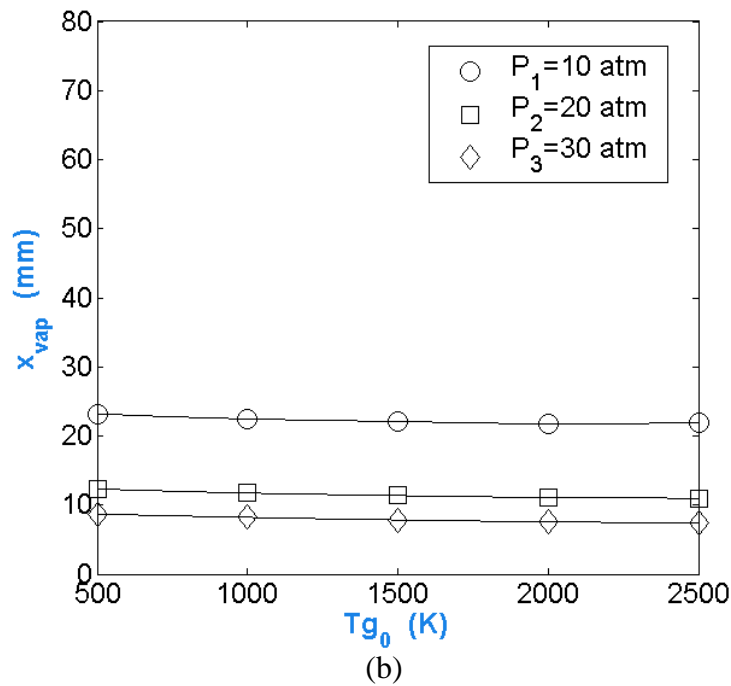
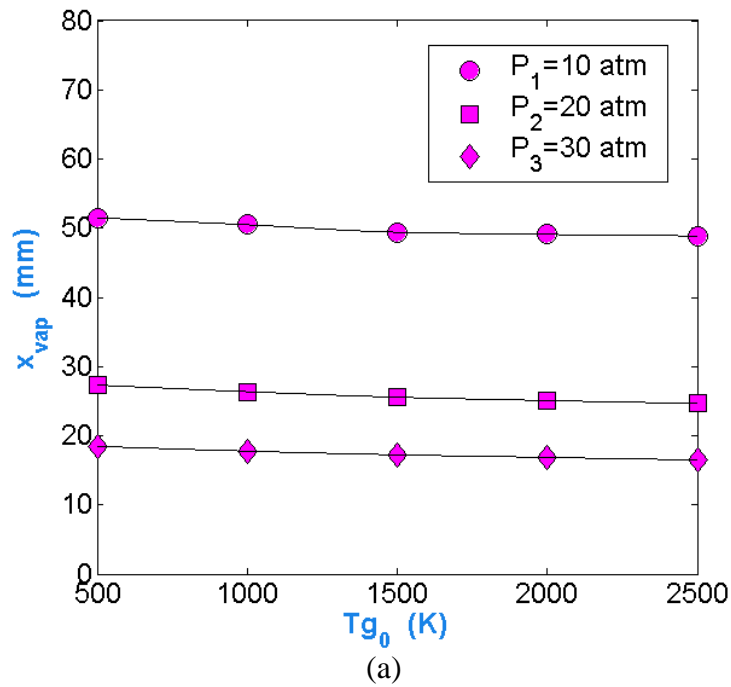


FIGURA 3.22 – Influência da temperatura do gás na entrada, T_{g0} , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) N_2H_4 , (b) N_2O_4 . $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50 \mu m$, $q = 2.5$, $T_{F,l0} = 280$ K, $T_{Ox,l0} = 286$ K, $\Phi_P = 1,22$, $\Phi_T = 0,574$.

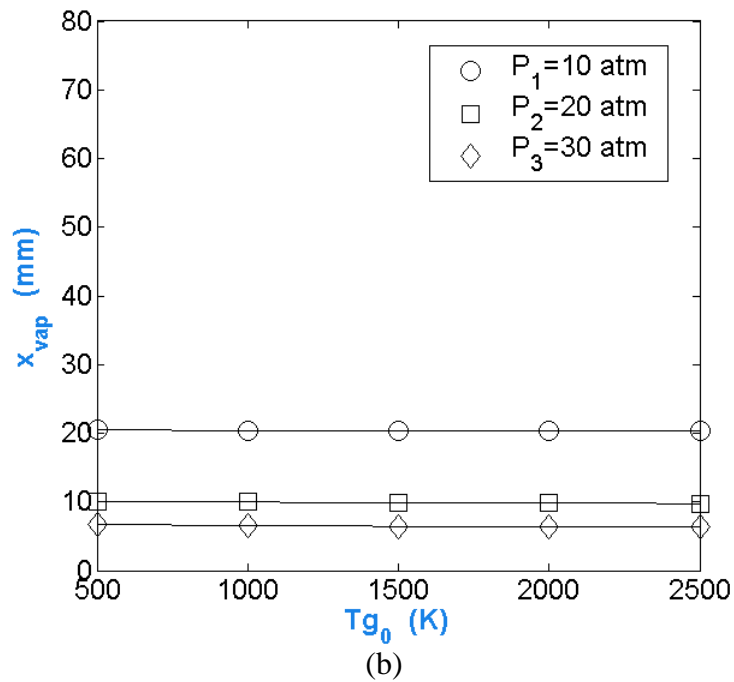
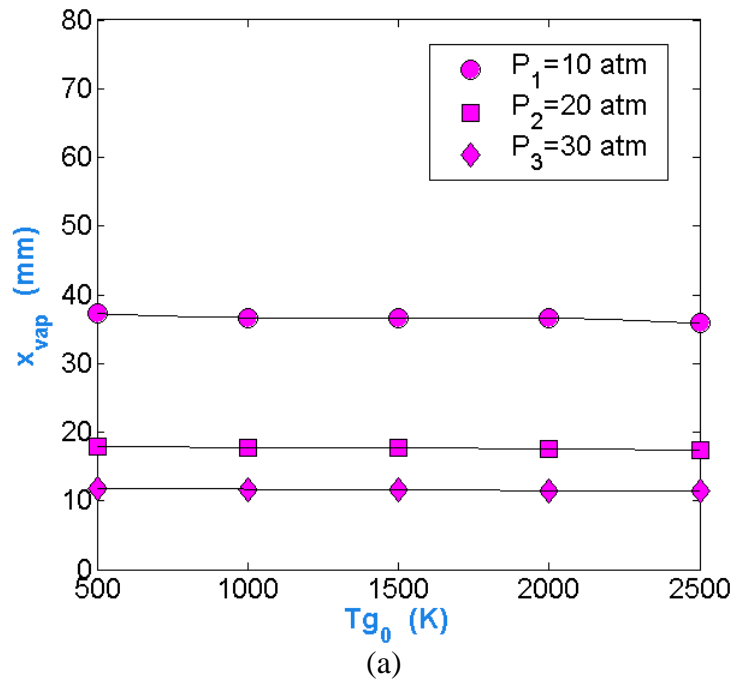


FIGURA 3.23 – Influência da temperatura do gás na entrada, T_{g0} , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) MMH, (b) N_2O_4 . $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50 \mu\text{m}$, $q = 2,5$, $T_{F,l0} = 280$ K, $T_{Ox,l0} = 286$ K, $\Phi_P = 2,12$, $\Phi_T = 1$.

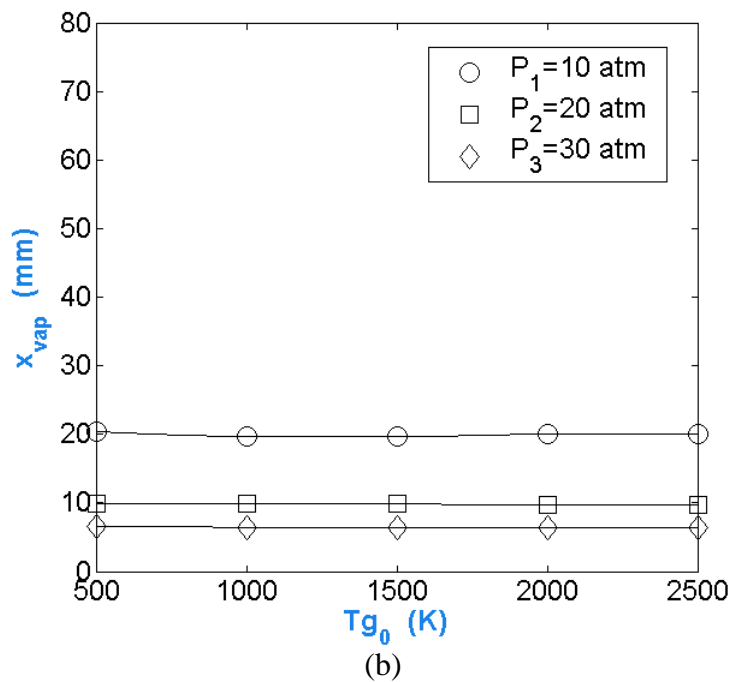
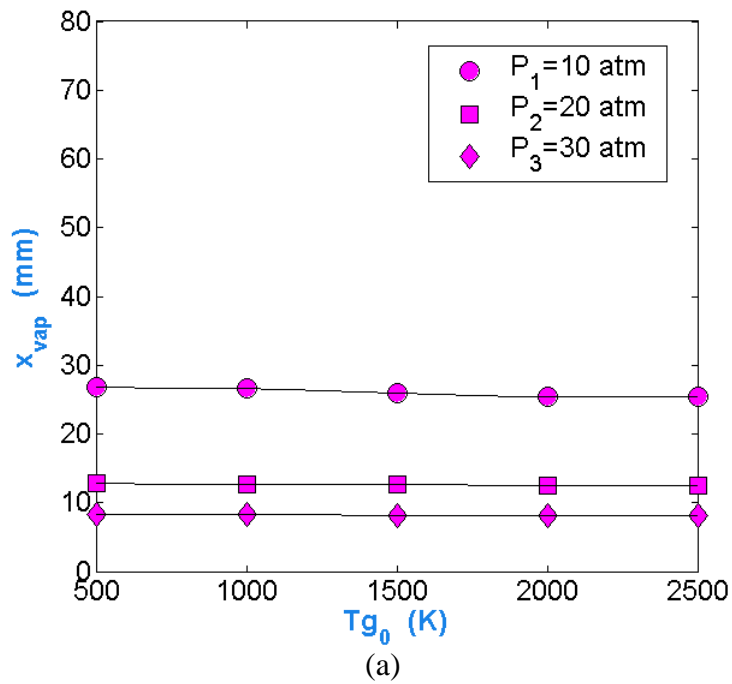


FIGURA 3.24 – Influência da temperatura do gás na entrada, T_{g0} , sobre a distância de vaporização completa das gotas, x_{vap} . Propelentes: (a) UDMH, (b) N_2O_4 . $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50 \mu m$, $q = 2.5$, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $\Phi_P = 2,6$, $\Phi_T = 1,23$.

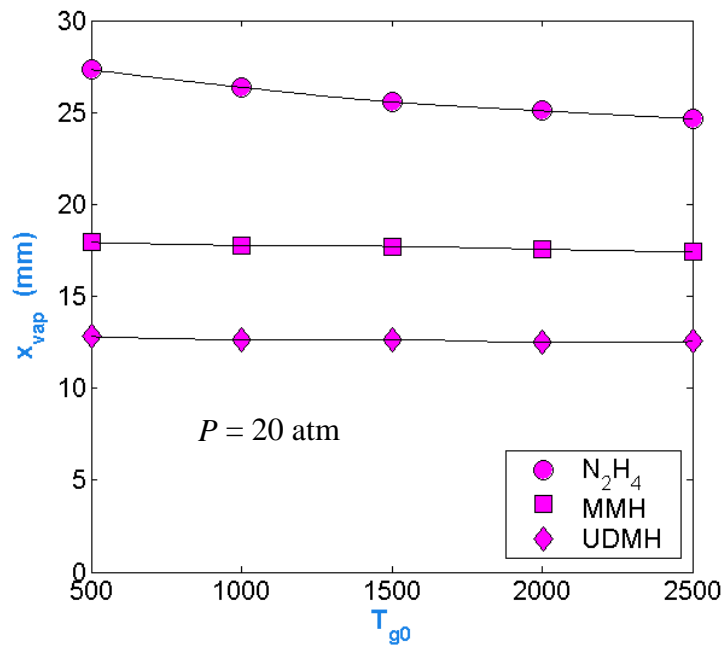


FIGURA 3.25 – Influência da temperatura do gás na entrada, T_{g0} , sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} , para vários combustíveis e N_2O_4 como oxidante. $N = 8$ parcelas, $D_{32} = 50 \mu m$, $q = 2,5$, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K.

As figuras apresentadas a seguir foram obtidas para o sistema bipropelente MMH/N₂O₄. As condições de entrada usadas na determinação dos parâmetros são um caso particular da Figura 3.3 para $P = 15$ atm e uma distribuição de 4 parcelas de gotas.

A Figura 3.26 mostra a evolução do diâmetro normalizado, D/D_0 , das gotas ao longo da câmara de combustão para 1 parcela de gotas e para 4 parcelas de gotas. Nota-se que o número de parcelas influi significativamente sobre a distância de vaporização. A diferença entre as distâncias de vaporização completa das gotas, obtidas para 1 e para 4 parcelas, indica o erro produzido ao se admitir que todas as gotas sejam do mesmo tamanho, ou seja, quando $q = \infty$, tal como explicado na análise da Figura 3.3.

Cada parcela de gotas é representada por um diâmetro característico, ou seja, o respectivo SMD descrito no Capítulo 2. Observa-se na Figura 3.26 que um comprimento de 30 mm é suficiente para que o processo de mistura, vaporização e combustão das gotas seja completado dentro da câmara. Isto é importante porque a combustão incompleta produz perdas no impulso específico e na velocidade de saída dos gases de exaustão.

Outro detalhe importante observado na Figura 3.26 é uma região de expansão das gotas indicando a zona onde ocorre o período transiente ou de pré-aquecimento. Tal período aumenta quando aumenta a pressão e diminui quanto aumenta a temperatura, o que foi também comprovado anteriormente por Chin e Lefebvre (1985). O comprimento da zona de expansão do líquido depende, além da pressão, da temperatura inicial do líquido, isto é, quanto mais próxima for a temperatura de entrada da temperatura crítica, menor é a duração do período de aquecimento transiente.

O processo de vaporização, mistura e queima dos propelentes dentro da câmara de combustão produz um incremento quase instantâneo na temperatura do gás, porque as gotas pequenas vaporizam mais rapidamente do que as gotas maiores. Temperaturas muito altas perto do injetor podem danificar os canais de saída dos jatos dos propelentes. Uma possível solução para que a temperatura do gás não seja tão alta perto do injetor é aumentar a velocidade de saída dos jatos líquidos.

A Figura 3.27 mostra os perfis de temperatura e de razão de equivalência dos gases na câmara. A temperatura do gás aumenta de 800 K na entrada até atingir a temperatura máxima $T_{max} = 3179$ K quando a razão de equivalência é aproximadamente $\Phi \approx 1$. A distância onde o gás atinge T_{max} é cerca de 10 mm a partir da entrada do combustor. Na maioria dos propulsores pequenos, sem refrigeração regenerativa, utiliza-se uma cortina de proteção ou camada de propelente líquido junto à parede a fim de diminuir a temperatura da parede e evitar que esta ultrapasse os limites de temperatura que causam a ruptura do material.

A razão de equivalência varia desde um valor na entrada $\Phi_P = 2,12$ até $\Phi_T = 1$, isto indica que a injeção total de propelentes é estequiométrica e portanto a temperatura máxima será atingida na saída como observado na Figura 3.27. A razão de equivalência diminui perto da entrada até um valor menor que 0,8 porque a taxa de vaporização do combustível é menor do que a taxa de vaporização do oxidante, diminuindo assim a razão de mistura, f_P , e portanto a razão de equivalência.

A Figura 3.28 mostra o coeficiente de película do gás, \hat{h}_g ou $h_{pel,g}$, e a emissividade do gás, ε_g , utilizados para determinar as perdas de calor por convecção e por radiação, respectivamente. O valor mínimo do $\hat{h}_{g,min} = 63,84$ W/m²K é dado na entrada, e o valor máximo $\hat{h}_{g,max} = 314,45$ W/m²K é atingido quando a temperatura do gás é máxima. Por outro lado a emissividade do gás tem um valor máximo na entrada, $\varepsilon_{g,max} = 0,35$, e um valor mínimo, $\varepsilon_{g,min} = 0,07$, quando a temperatura é máxima, ou seja, quando a vaporização das gotas é completa. A emissividade total do gás depende das emissividades individuais das espécies que emitem mais radiação como o CO₂ e H₂O, Leckner (1972) mostrou que as emissividades destas espécies diminuem com a temperatura para $T_g > 800$ K.

A Figura 3.29 mostra a evolução das temperaturas das gotas de combustível e de oxidante, com valores na entrada $T_{F,1,0} = 280$ K e $T_{Ox,1,0} = 286$ K. As temperaturas das gotas aumentam até atingirem a temperatura de equilíbrio (equivalente à uma temperatura de bulbo úmido) na pressão da câmara como mostrados na Figura 3.29, indicando o fim do período transiente ou de pré-aquecimento. Para $P_c = 15$ atm a

temperatura de equilíbrio para o combustível é $T_{equil} \approx 467,5$ K e para o oxidante é de $T_{equil} \approx 364,5$ K.

A Figura 3.30 mostra a história de velocidade das gotas do combustível e do oxidante, com diversos diâmetros iniciais. As velocidades de entrada do combustível e do oxidante líquidos são de $v_{d,F,l} = 0,68$ m/s e $v_{d,Ox,l} = 0,5$ m/s. A velocidade do gás na entrada é de $v_{g,0} = 1,068$ m/s e a velocidade máxima atingida pelo gás e pelas gotas é de $v_{g,max} = 23,3$ m/s a 21 mm da entrada a câmara. A velocidade das gotas aumenta até a velocidade do gás devido à força de arrasto do gás sobre as gotas.

A Figura 3.31 mostra as perdas de calor por convecção e por radiação e por unidade de comprimento do gás para as paredes da câmara, dQ_{conv}/dx e dQ_{rad}/dx . Estas perdas são diretamente proporcionais à temperatura do gás. As perdas máximas de calor por convecção e por radiação são de $dQ_{conv}/dx = 59,5$ kW/m e $dQ_{rad}/dx = 42$ kW/m atingidas na saída da câmara.

A Figura 3.32 apresenta os perfis das temperaturas interna e externa da parede da câmara de combustão. Estas temperaturas podem ser medidas usando-se termopares colocados na parede. Nota-se uma diferença não significativa de temperaturas entre as duas paredes porque a espessura da parede é muito fina e a condutividade térmica do material da parede (Inconel 600) é elevada.

A Figura 3.33 mostra a variação em forma percentual das perdas de calor por convecção e por radiação e por unidade de comprimento ao longo da câmara de combustão. Estas perdas estão relacionadas diretamente à razão de equivalência e o ponto de interseção das curvas ocorre aproximadamente quando $\Phi = 1$. Estas percentagens são calculadas usando: $\dot{Q}'_{Tot} = \dot{Q}'_{rad} + \dot{Q}'_{conv}$, $\% \dot{Q}'_{rad} = \dot{Q}'_{rad} / \dot{Q}'_{Tot}$ e $\% \dot{Q}'_{conv} = \dot{Q}'_{conv} / \dot{Q}'_{Tot}$. O gráfico mostra também detalhes do ponto de interseção destas curvas.

A Figura 3.34 mostra a variação do coeficiente politrópico, γ , e do número de Mach, M , ao longo da câmara de combustão. Estes parâmetros são dados por:

$$\gamma = \frac{C_{pg}}{C_{pg} - R_g}, \quad R_g = \frac{R_0}{M_g}, \quad v_{som} = \sqrt{\gamma R_g T_g} \quad \text{e} \quad M = \frac{v_g}{v_{som}}$$

Observa-se que o número de Mach é diretamente proporcional à velocidade do gás, atingindo um valor máximo quando termina o processo de evaporação das gotas. Nota-se também que o valor máximo é aproximadamente $M_{max} \approx 0,022$ indicando um escoamento subsônico ao longo da câmara. O coeficiente politrópico é a razão entre o calor específico a pressão constante e o calor específico a volume constante. Ambos os parâmetros dependem da temperatura dos gases.

As Figuras 3.35 e 3.36 mostram as variações dos produtos da combustão das espécies principais e secundárias, respectivamente. Nota-se a formação de uma grande quantidade de nitrogênio e de dióxido de carbono na entrada devido à reação entre o MMH e o N_2O_4 . A formação de produtos gasosos baseados em NO_x , devem de ser considerados no projeto de uma câmara de combustão de foguete devido a que constituem um agente de contaminação para o ambiente.

As Figuras 3.37 e 3.38 mostram as perdas de calor por convecção e por radiação do gás para as gotas para cada um dos propelentes. Nota-se que a transferência de calor por convecção é 60 vezes maior do que a transferência de calor por radiação. Esta é uma razão pela qual na maioria dos projetos de câmaras de combustão não é considerada a radiação como uma perda significativa devido a que constituem uma quantidade mínima de perda de energia em comparação com a energia gerada devido à combustão.

A Figura 3.39 apresenta a variação da taxa de vaporização em função da distância para gotas de vários diâmetros representativos do combustível e do oxidante, em kg/s. A taxa de vaporização aumenta durante o período de pré-aquecimento da gota até ser atingida a temperatura de equilíbrio da gota na pressão da câmara e posteriormente diminui até a evaporação completa das gotas. A taxa de vaporização é diretamente proporcional ao diâmetro da gota e aumenta devido a sua expansão.

As Figuras 3.40, 3.41, 3.42, 3.43 e 3.44 mostram o número de Weber, We , o número de Reynolds para convecção, Re_d , o número de Reynolds para arrasto, Re_{CD} , o número de Prandtl, Pr , e o número de Nusselt, Nu , respectivamente, em função da distância para gotas de vários diâmetros representativos. Estes números adimensionais dependem

fortemente do diâmetro da gota, isto é, aumentam durante o pré-aquecimento devido à expansão das gotas.

A Figura 3.45 mostra a velocidade relativa entre o gás e as gotas, v_{rel} , ao longo da câmara de combustão para o combustível e para o oxidante. O arrasto é a força principal que controla a velocidade relativa. Quando as gotas diminuem de tamanho por vaporização ou se as gotas são muito pequenas, estas rapidamente atingem uma velocidade relativa igual a zero.

A Figura 3.46 mostra os efeitos do diâmetro inicial das gotas sobre a temperatura de referência para os propelentes ao longo do comprimento da câmara. Observa-se que a temperatura de referência fica constante a poucos mm da entrada, após o pré-aquecimento das gotas.

A Figura 3.47 mostra as percentagens das vazões de massa das parcelas do combustível líquido, $\dot{m}_{F,L,i} / \dot{m}_{total}$, e do oxidante líquido, $\dot{m}_{Ox,L,i} / \dot{m}_{total}$, e a percentagem da vazão de massa do gás, $\dot{m}_g / \dot{m}_{total}$, ao longo da câmara, onde $\dot{m}_{total} = \dot{m}_{F,L,0} + \dot{m}_{Ox,L,0} + \dot{m}_{g,0}$. O eixo X está em escala logarítmica para dar uma melhor visualização. Observa-se que a vazão de massa de líquido diminui até a vaporização completa das gotas.

A Figura 3.48 mostra a variação das percentagens das áreas ocupadas pelo líquido e pelo gás para cada diâmetro de gota e ao longo da câmara de combustão. O comportamento é semelhante ao obtido na Figura 3.41.

A Figura 3.49 apresenta a variação da densidade e da viscosidade do gás ao longo da câmara de combustão. A densidade do gás diminui até atingir um valor constante, isto é, devido a que a densidade do gás é inversamente proporcional à temperatura. Por outro lado a viscosidade do gás é diretamente proporcional à temperatura.

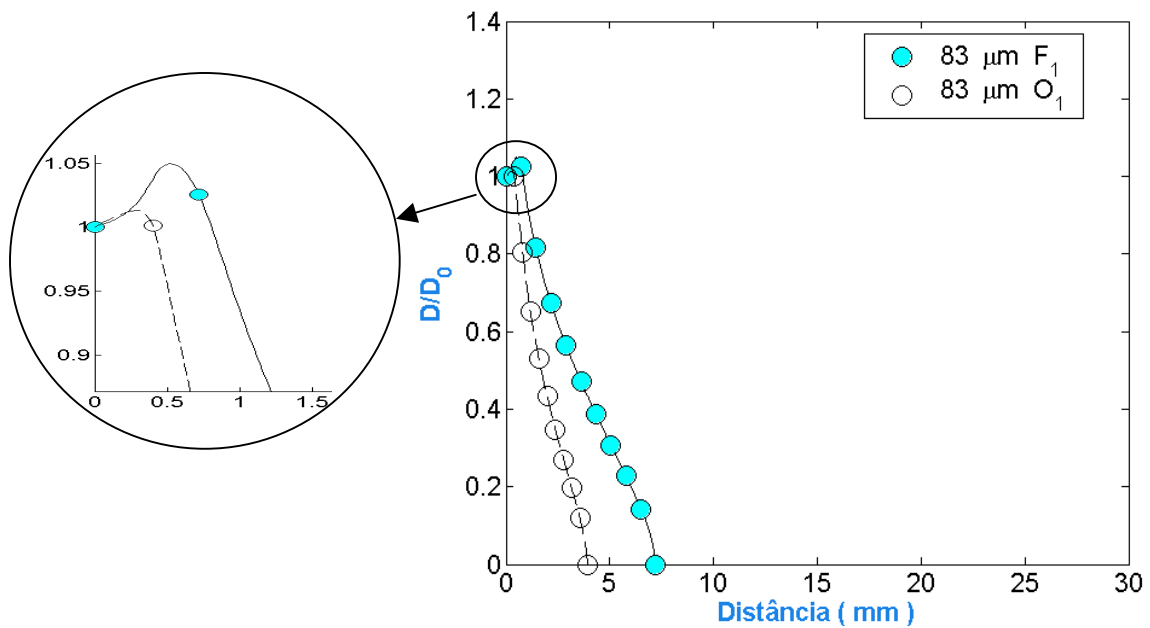
A Figura 3.50 mostra o comportamento da massa molar do gás e do calor específico do gás a pressão constante ao longo do comprimento da câmara. O calor específico aumenta quando se incrementa a temperatura devido a sua relação direta. Ambos parâmetros são calculados usando o programa de equilíbrio descrito no Apêndice A.

A Figura 3.51 mostra a variação da área superficial das gotas adimensionalizada em função do tempo de vaporização. Observa-se que a lei do D^2 é aproximadamente válida durante um certo período, após o pré-aquecimento. O tempo de vaporização é relativamente curto, da ordem de milésimos de segundo.

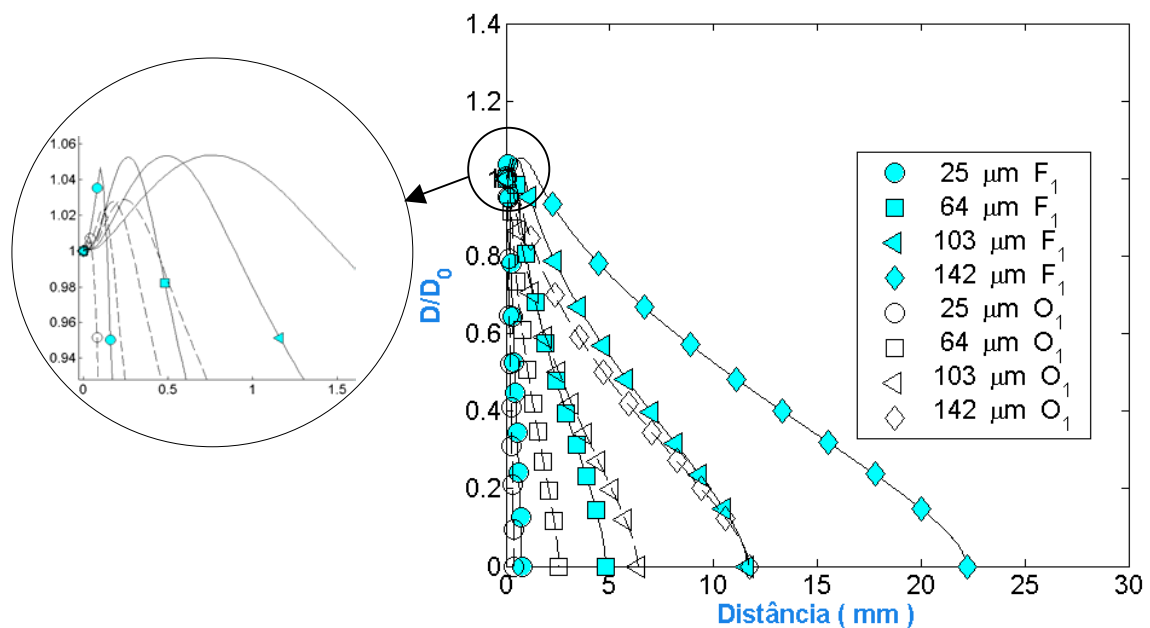
A Figura 3.52 mostra a evolução no tempo do diâmetro adimensional das gotas, para os propelentes. O aumento está determinado pelo pré-aquecimento das gotas, ou seja, pelo período onde as gotas se expandem termicamente.

A Figura 3.53 mostra a temperatura das diferentes parcelas dos propelentes líquidos em função do tempo. Observa-se que a temperatura de equilíbrio de cada uma das gotas é a mesma e depende apenas da pressão interna da câmara.

A Figura 3.54 mostra as percentagens de massa vaporizada dos propelentes líquidos em função do tempo.



(a)



(b)

FIGURA 3.26 – Evolução do diâmetro adimensional, D/D_0 , das gotas do combustível e do oxidante, para vários diâmetros iniciais de gotas. (a) 1 parcela, (b) 4 parcelas. Propelentes: MMH/N₂O₄. $P = 15$ atm, $T_{g,0} = 800$ K, $T_{F,l,0} = 280$ K, $T_{Ox,l,0} = 286$ K, $D_{32} = 50$ μm, $q = 2,5$.

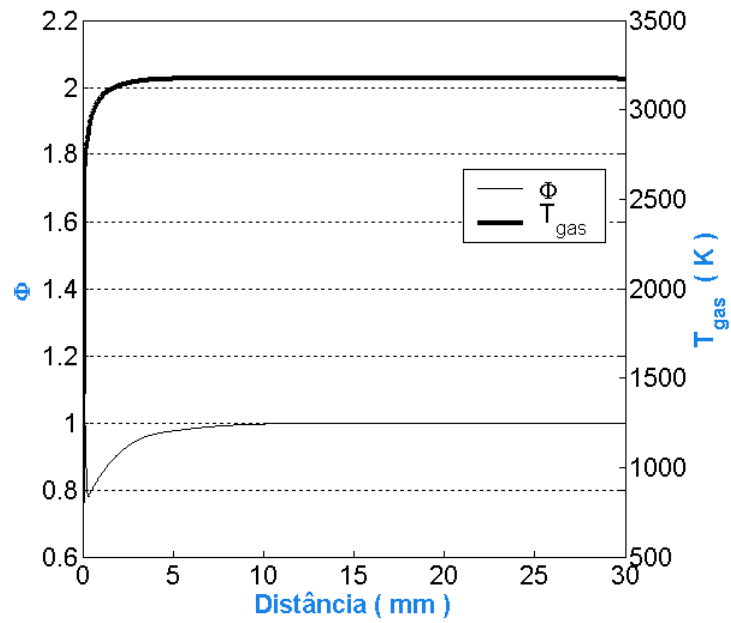


FIGURA 3.27 – Variação da temperatura do gás, T_g , e da razão de equivalência, Φ_g , ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N₂O₄.

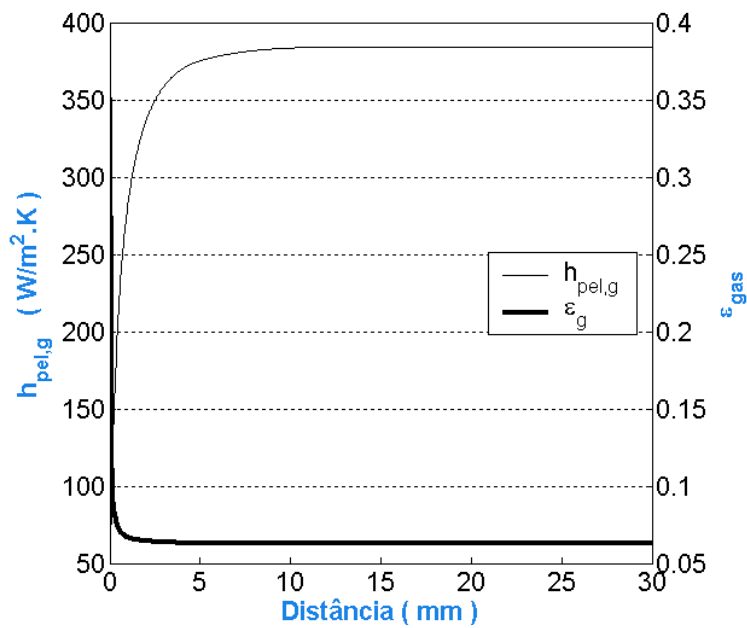


FIGURA 3.28 – Variação do coeficiente de película do gás, $\hat{h}_{\text{pel,g}}$, e da emissividade do gás, ϵ_g , ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N₂O₄.

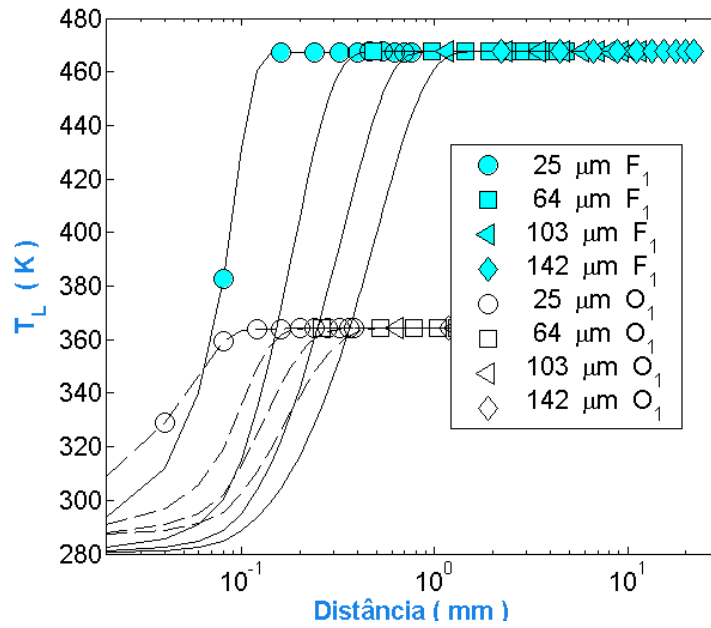


FIGURA 3.29 – Evolução da temperatura do líquido, T_l , ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N₂O₄.

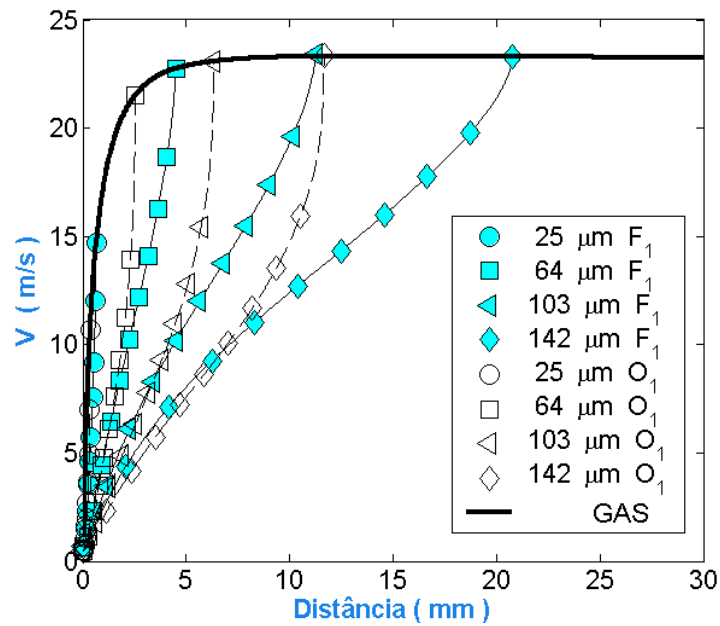


FIGURA 3.30 – Velocidades das gotas, v_d , e velocidade do escoamento gasoso, v_g , ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N₂O₄.

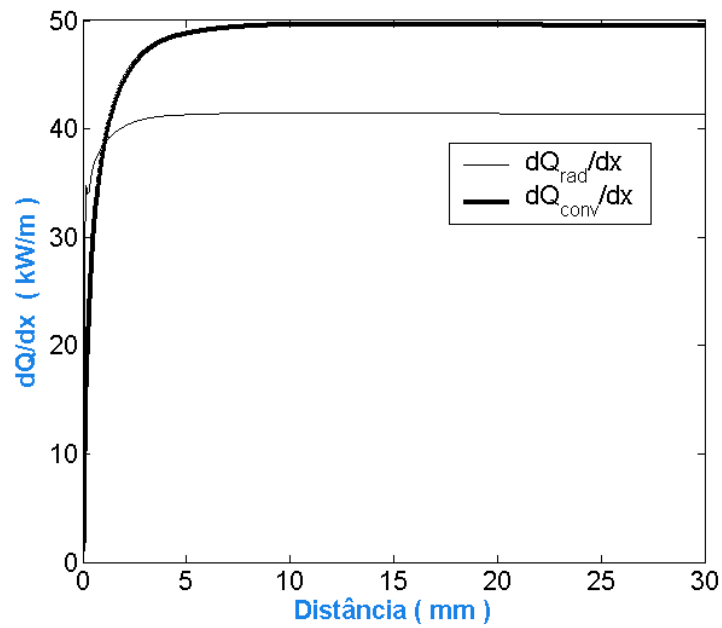


FIGURA 3.31 – Perdas de calor, por unidade de comprimento, do gás para a parede por convecção, dQ_{conv}/dx , e por radiação, dQ_{rad}/dx , ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N₂O₄.

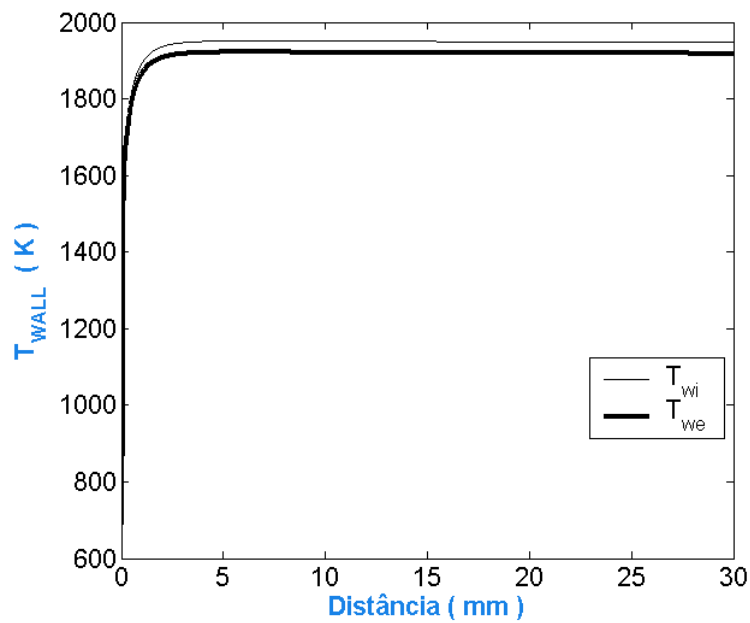


FIGURA 3.32 – Temperaturas interna e externa da parede da câmara, T_{wi} e T_{we} , ao longo do combustor. Propelentes: MMH/N₂O₄.

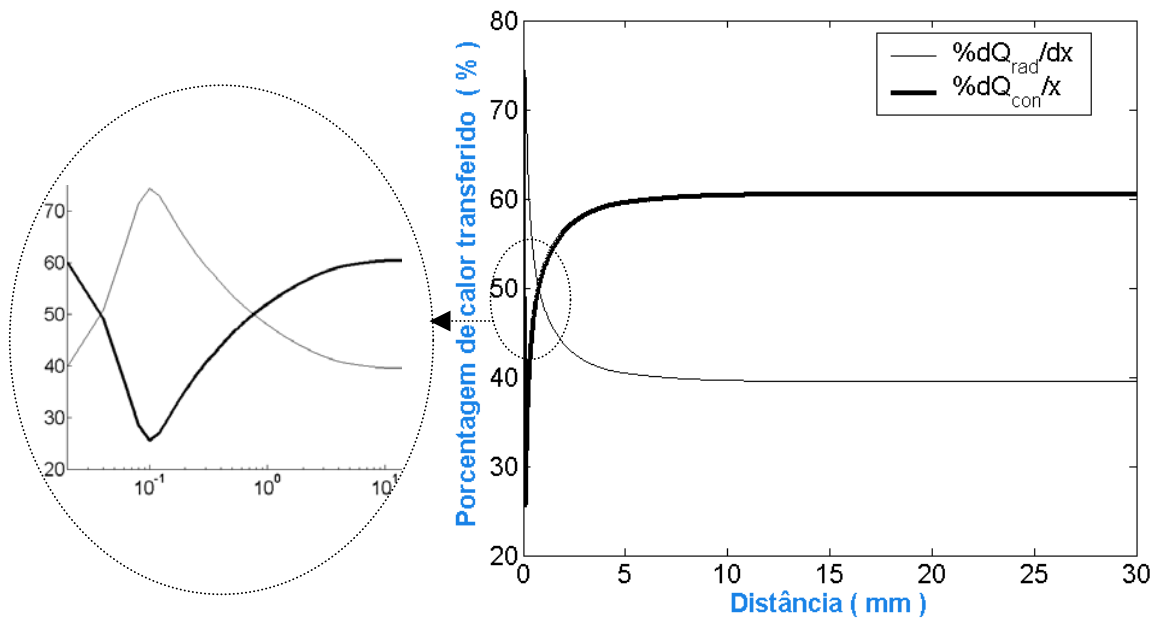


FIGURA 3.33 – Variação da porcentagem de perdas de calor por convecção e por radiação do gás para a parede da câmara ao longo do combustor. Propelentes: MMH/N₂O₄.

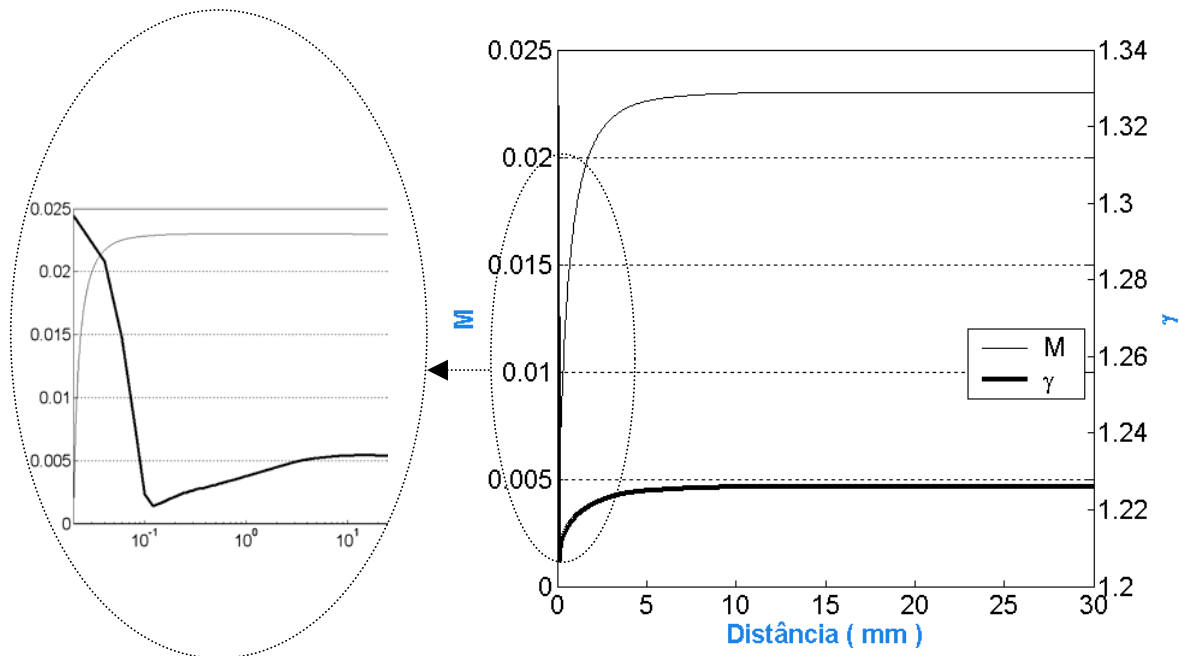


FIGURA 3.34 – Variação do número de Mach, M , e do coeficiente politrópico, γ , dos produtos da combustão ao longo do combustor. Propelentes: MMH/N₂O₄.

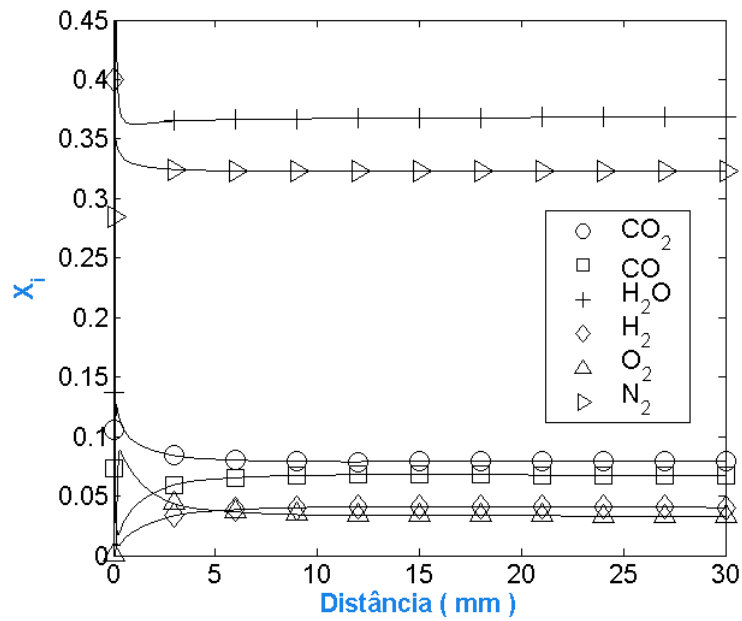


FIGURA 3.35 – Variação das frações molares, X_i , dos produtos principais da combustão, CO_2 , CO , H_2O , H_2 , O_2 e N_2 ao longo do combustor. Propelentes: $\text{MMH}/\text{N}_2\text{O}_4$.

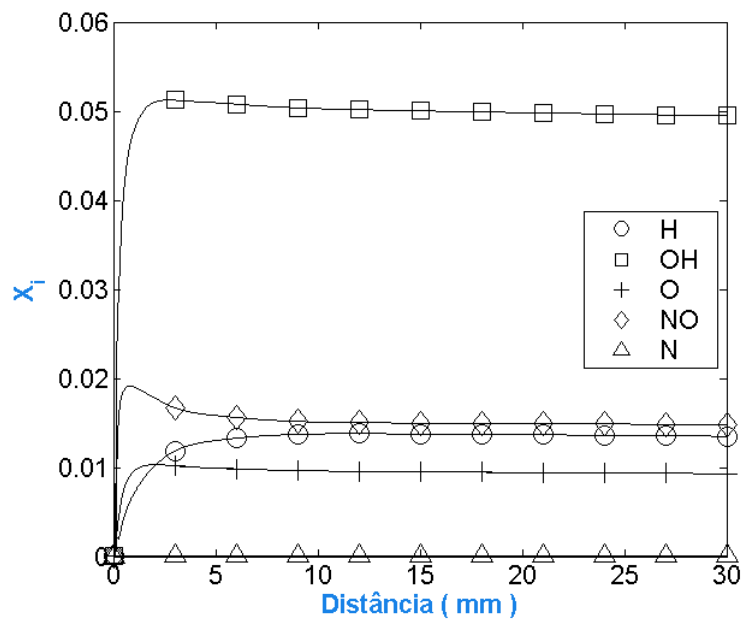


FIGURA 3.36 – Variação das frações molares, X_i , dos produtos secundários da combustão, H , OH , O , NO e N ao longo do combustor. Propelentes: $\text{MMH}/\text{N}_2\text{O}_4$.

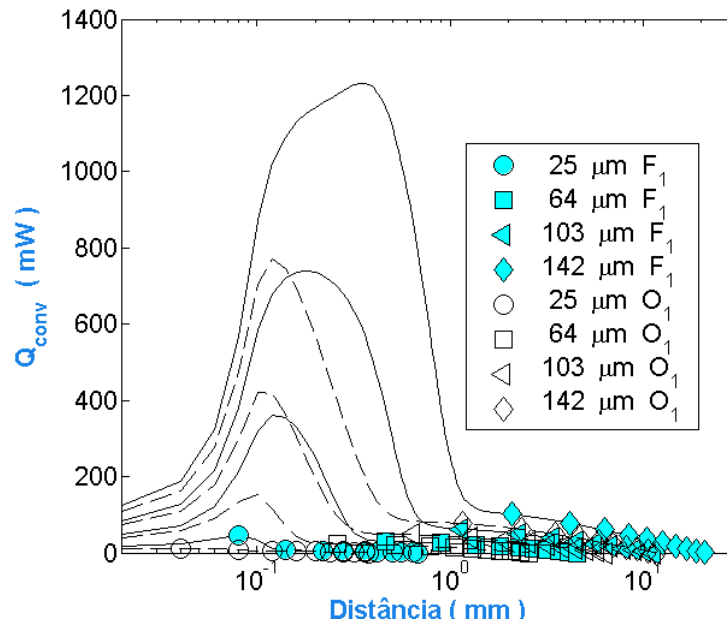


FIGURA 3.37 – Perdas de calor por convecção, \dot{Q}_{conv} , do gás para as gotas do combustível e do oxidante ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N₂O₄.

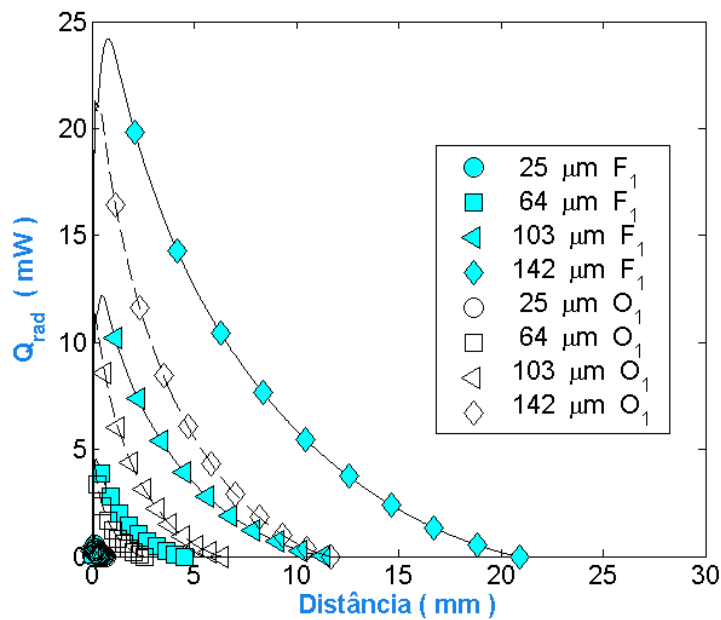


FIGURA 3.38 – Perdas de calor por radiação, \dot{Q}_{rad} , do gás para as gotas do combustível e do oxidante ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N₂O₄.

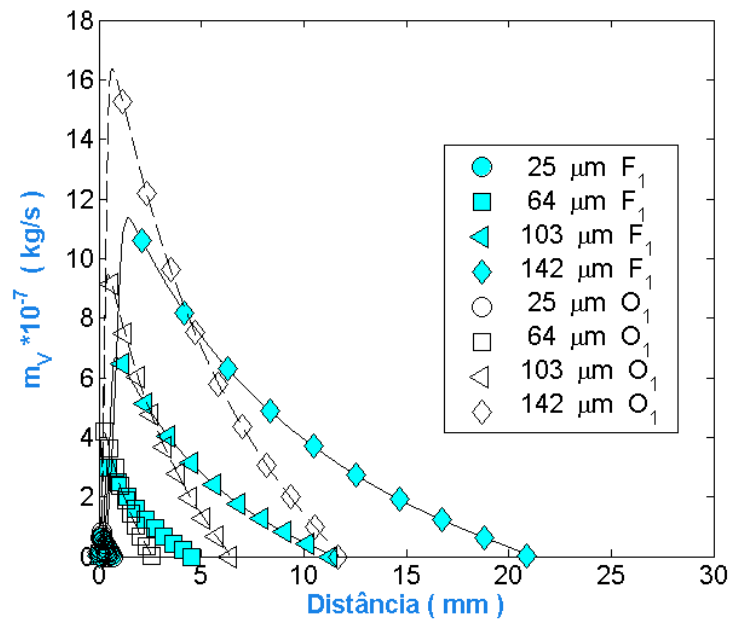


FIGURA 3.39 – Evolução da taxa de vaporização, \dot{m}_v , das gotas do combustível e do oxidante ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/ N_2O_4 .

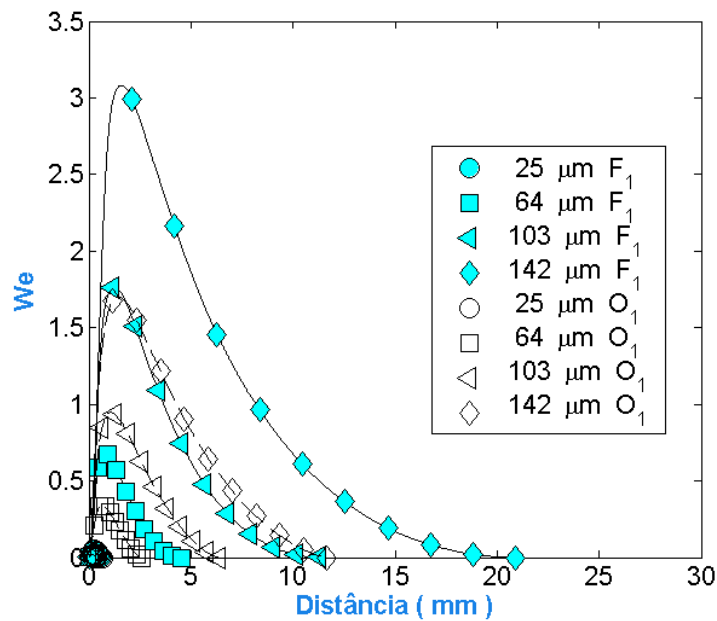


FIGURA 3.40 – Variação do número de Weber, We , das gotas de combustível e de oxidante ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/ N_2O_4 .

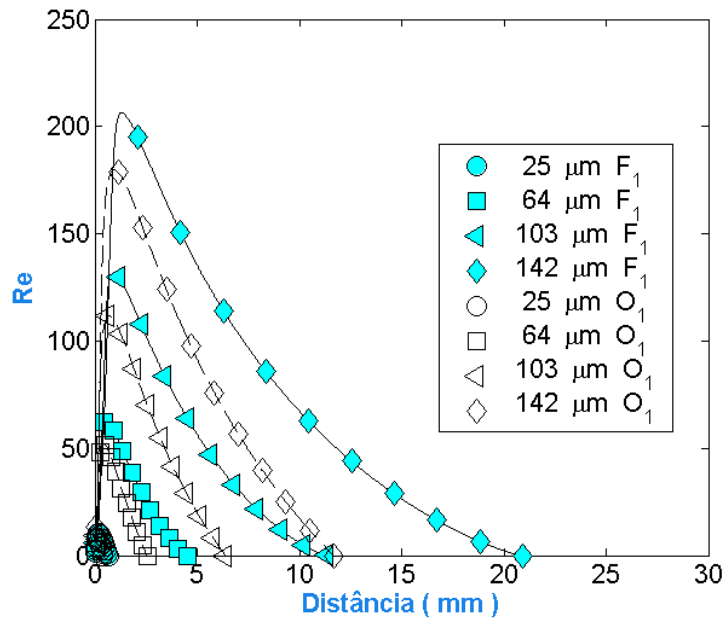


FIGURA 3.41 – Variação do número de Reynolds, Re_d , para cálculo da convecção de calor sobre as gotas ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/ N_2O_4 .

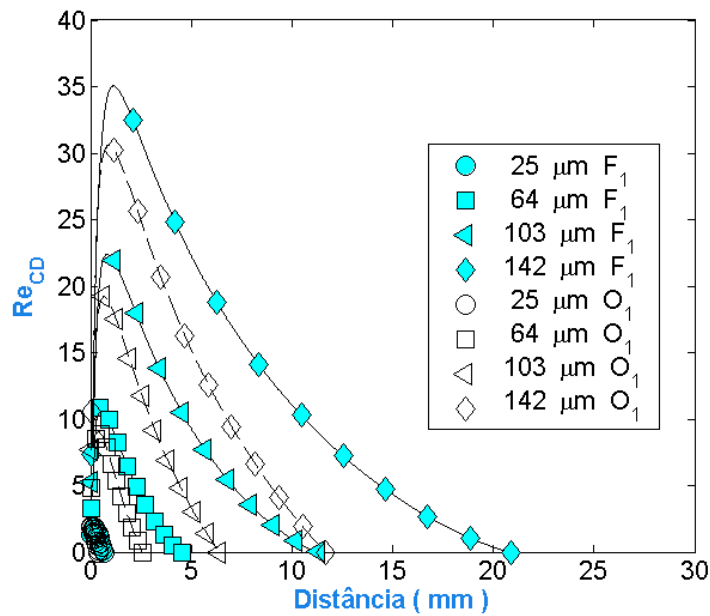


FIGURA 3.42 – Variação do número de Reynolds, Re_{CD} , para cálculo do arrasto sobre as gotas de combustível e de oxidante ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/ N_2O_4 .

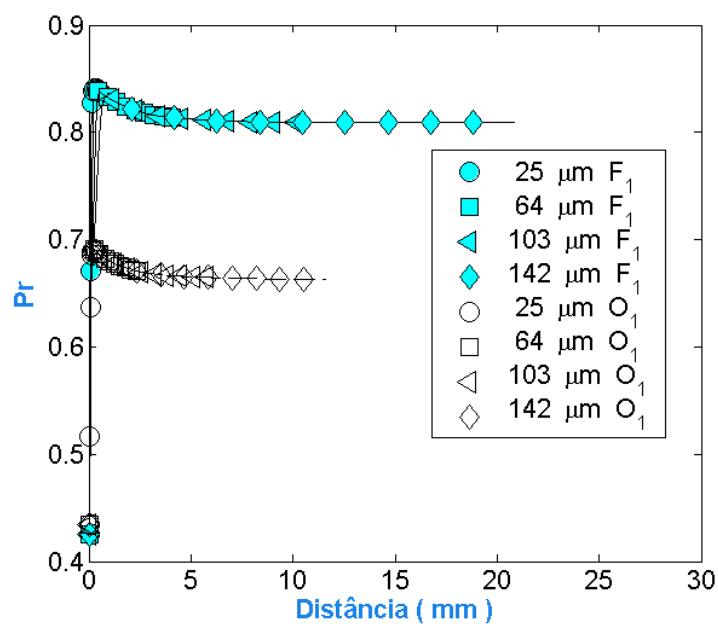


FIGURA 3.43 – Variação do número de Prandtl, Pr , para as misturas dos vapores dos propelentes com os produtos da combustão, ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/ N_2O_4 .

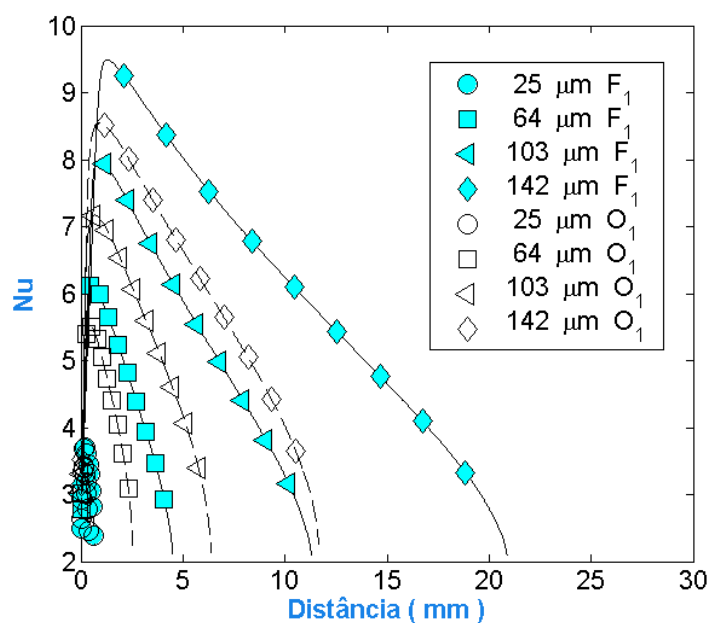


FIGURA 3.44 – Variação do número de Nusselt, Nu , das gotas de combustível e de oxidante, ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/ N_2O_4 .

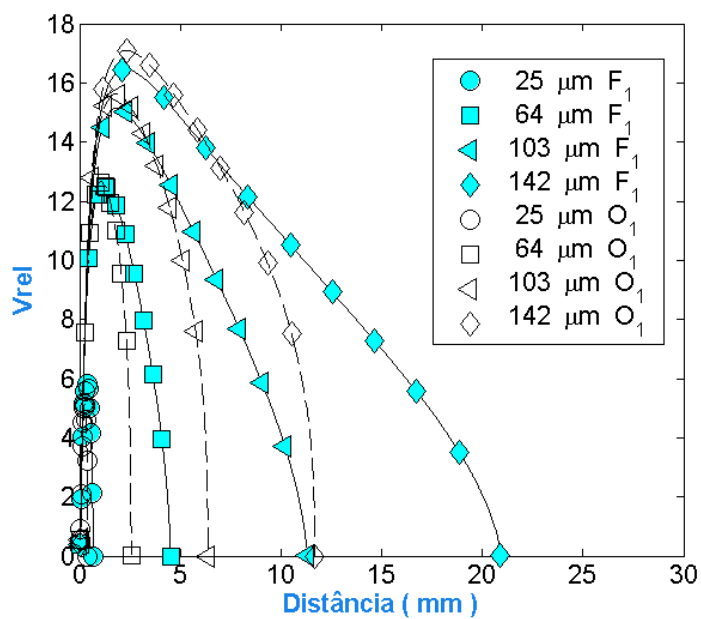


FIGURA 3.45 – Velocidade relativa gás-gota, v_{rel} , para o combustível e para o oxidante ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N₂O₄.

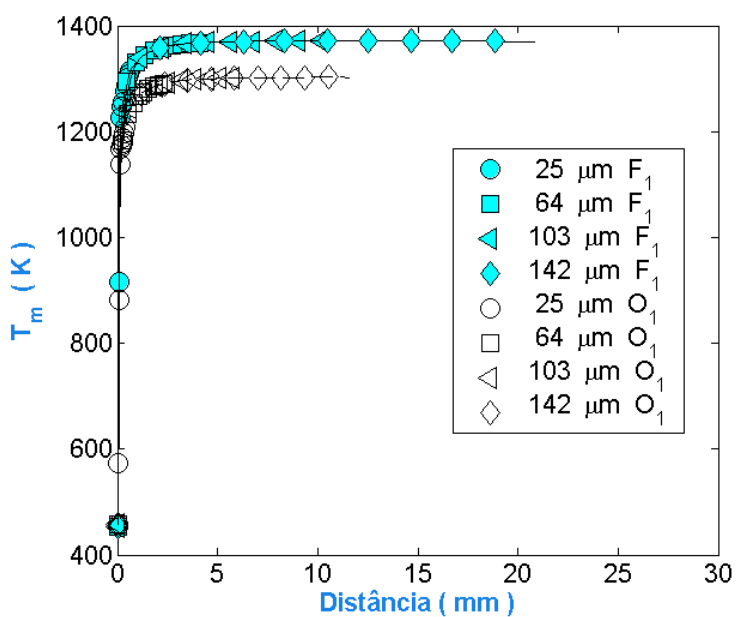


FIGURA 3.46 – Temperatura de referência, T_r , do combustível e do oxidante ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/N₂O₄.

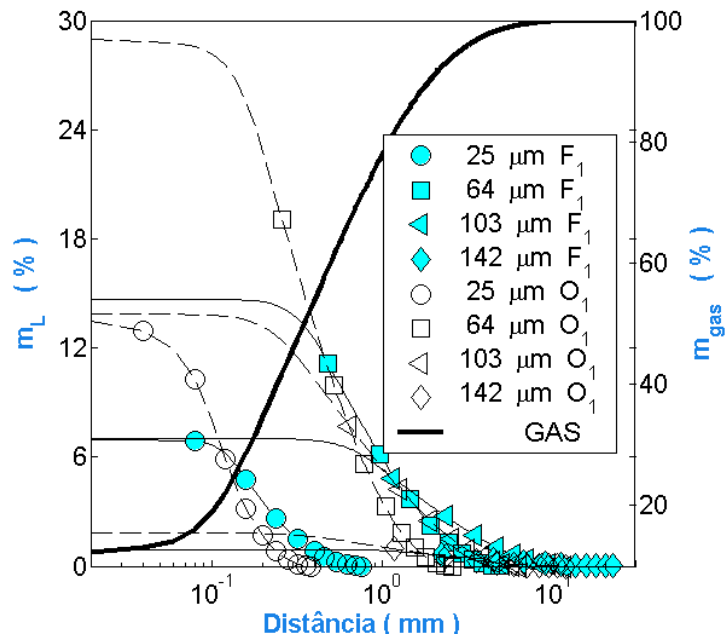


FIGURA 3.47 – Percentagens das vazões de massa das parcelas do combustível e do oxidante líquidos e do gás ao longo da câmara de combustão, para 4 parcelas de gotas. Propelentes: MMH/N₂O₄.

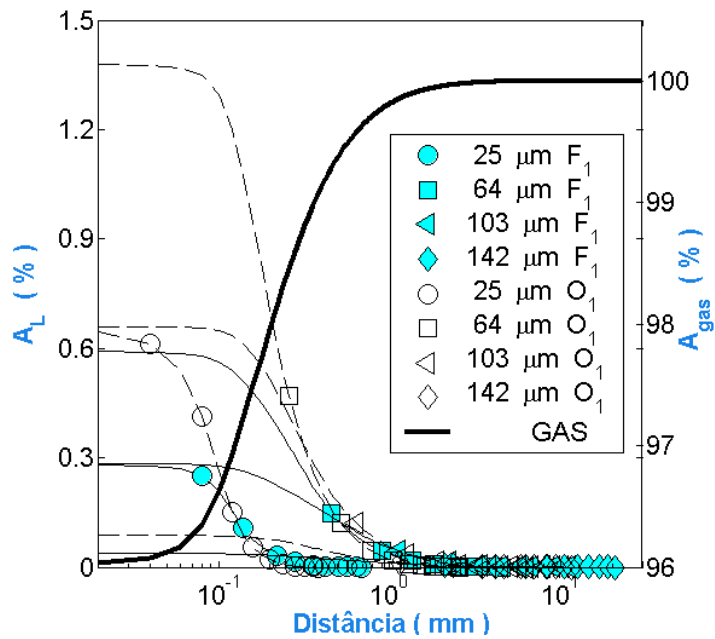


FIGURA 3.48 – Percentagens da área do líquido e do gás ao longo da câmara de combustão e para 4 parcelas de gotas. Propelentes: MMH/N₂O₄.

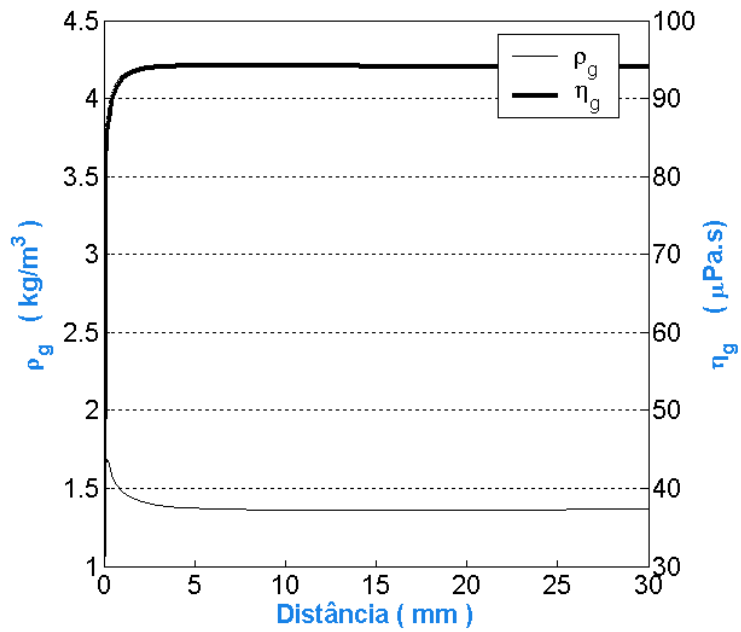


FIGURA 3.49 – Variação da densidade e da viscosidade do gás, ρ_g e η_g , ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/ N_2O_4 .

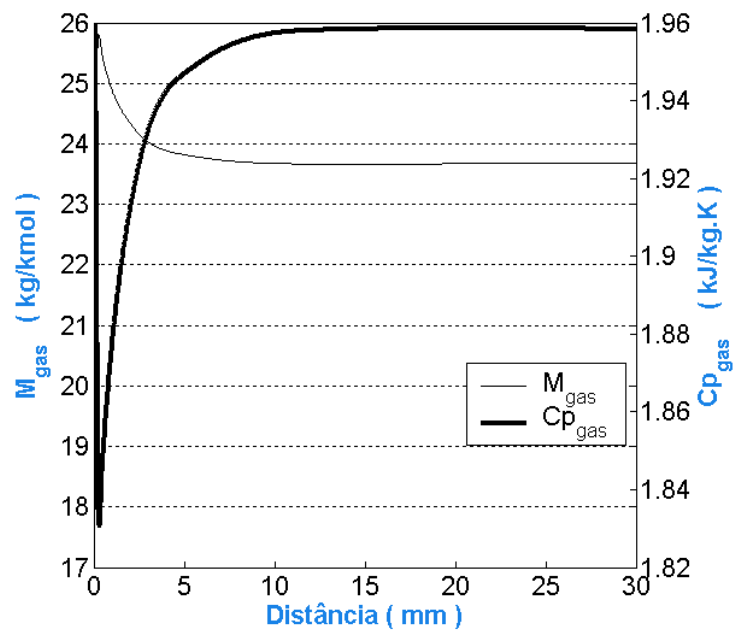


FIGURA 3.50 – Variação da massa molar e do calor específico do gás, M_g e C_{pg} , ao longo da câmara de combustão. Propelentes: MMH/ N_2O_4 .

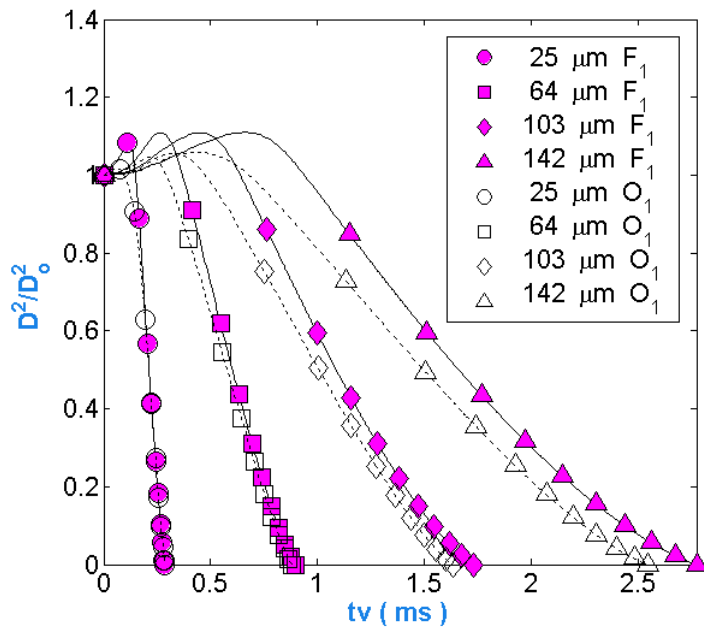


FIGURA 3.51 – Área superficial adimensional, D^2/D_0^2 , vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: MMH/N₂O₄.

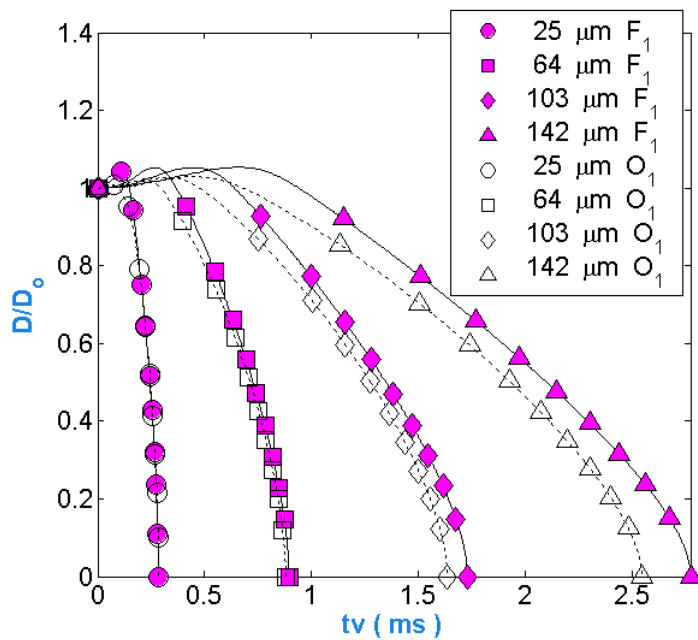


FIGURA 3.52 – Diâmetro adimensional, D/D_0 , vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: MMH/N₂O₄.

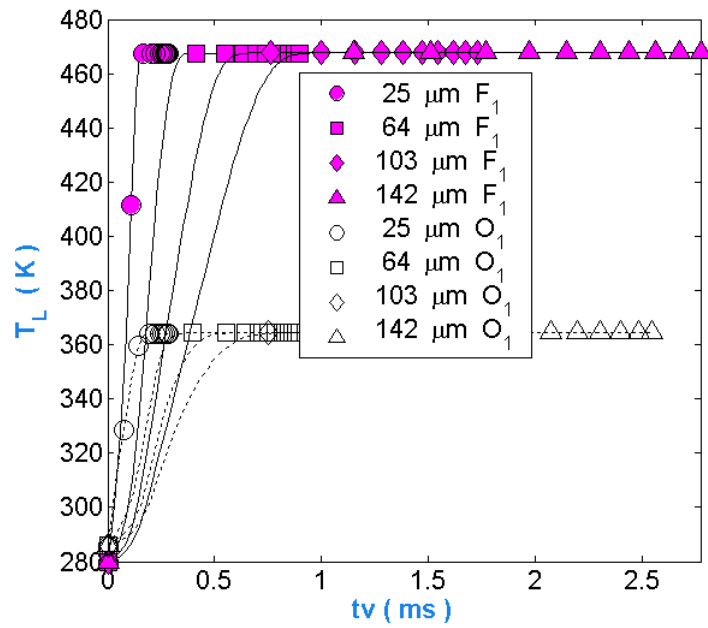


FIGURA 3.53 – Temperatura do líquido, T_L , vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: MMH/N₂O₄.

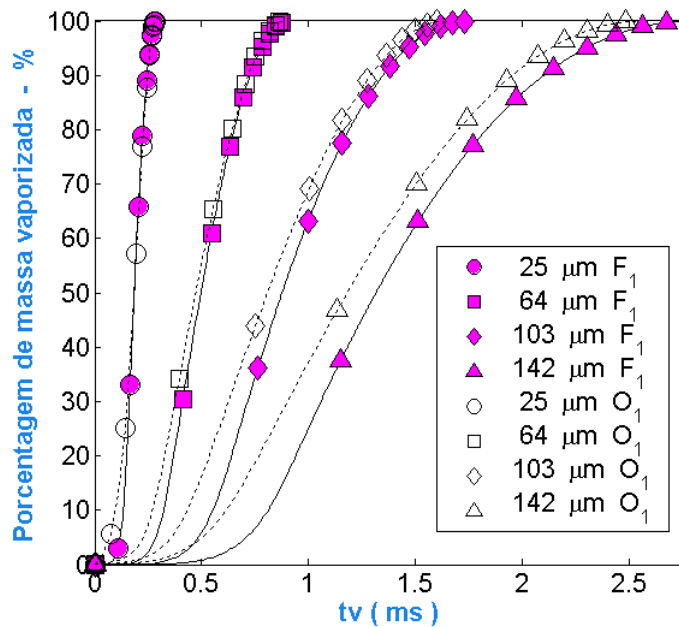


FIGURA 3.54 – Porcentagem de massa vaporizada, $\% \dot{m}_v$, vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: MMH/N₂O₄.

Para comparar os resultados numéricos dos sistemas bipropelentes MMH/N₂H₄, N₂H₄/N₂O₄ e UDMH/N₂O₄ foram obtidas várias figuras mostrando a variação dos principais parâmetros característicos ao longo da câmara de combustão.

A Figura 3.55 mostra a influência do diâmetro inicial das gotas sobre a evolução do diâmetro adimensional das mesmas ao longo da câmara de combustão para N₂H₄/N₂O₄ e UDMH/N₂O₄. Observa-se que as gotas de 142 µm da UDMH vaporizam mais rapidamente do que as gotas de 142 µm do MMH e do N₂H₄ para as mesmas condições de temperatura, pressão e razão de equivalência, como mencionado anteriormente.

A Figura 3.56 faz uma comparação da área superficial adimensional das gotas vs. tempo de vaporização para os sistemas N₂H₄/N₂O₄ e UDMH/N₂O₄. Observa-se claramente o pré-aquecimento para cada uma das gotas. No caso do N₂H₄ a vaporização completa das gotas do combustível ocorre antes que a do oxidante, e no caso do UDMH o oxidante vaporiza a uma taxa muito mais rápida que do combustível, controlando assim a distância de vaporização. Nota-se também uma expansão das gotas de N₂H₄ até atingir um diâmetro 1,2 vezes maior do que o diâmetro na entrada e as gotas de UDMH se expandem até um diâmetro 1,1 vezes maior do que o diâmetro de entrada, porque o coeficiente de expansão térmica do N₂H₄ é maior do que do UDMH.

A Figura 3.57 apresenta o diâmetro adimensional das gotas vs. tempo de vaporização para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão, para os sistemas N₂H₄/N₂O₄ e UDMH/N₂O₄.

A Figura 3.58 mostra a evolução da temperatura do líquido vs. tempo de vaporização para os sistemas bipropelentes N₂H₄/N₂O₄ e UDMH/N₂O₄.

A Figura 3.59 descreve a porcentagem de massa vaporizada vs. tempo de vaporização para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão, para os sistemas N₂H₄/N₂O₄ e UDMH/N₂O₄.

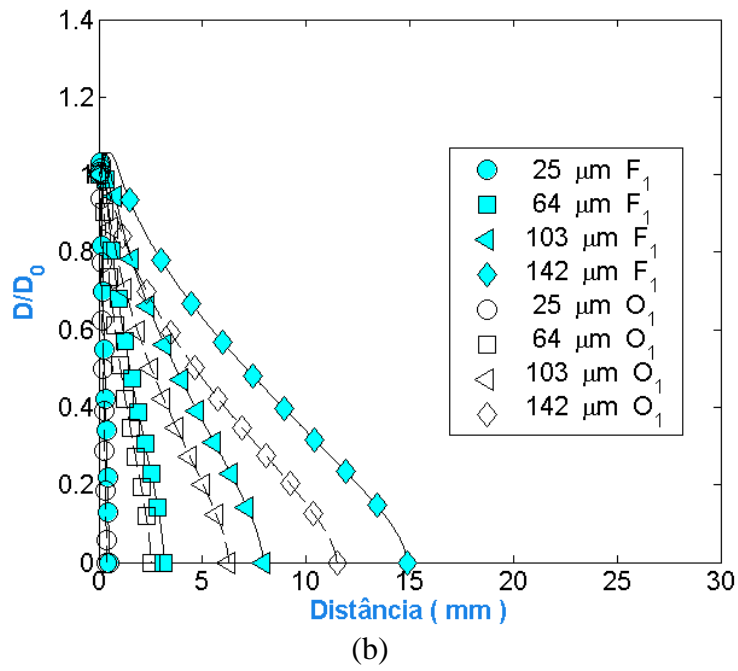
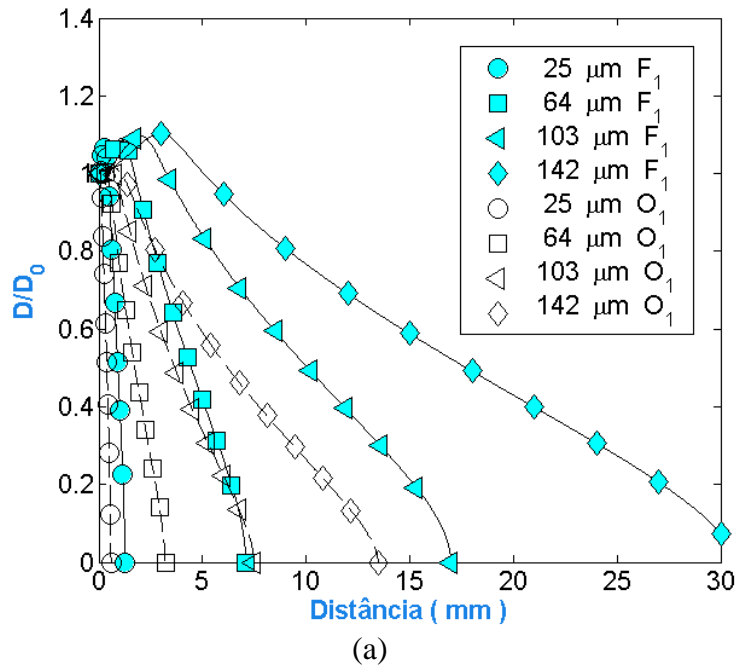
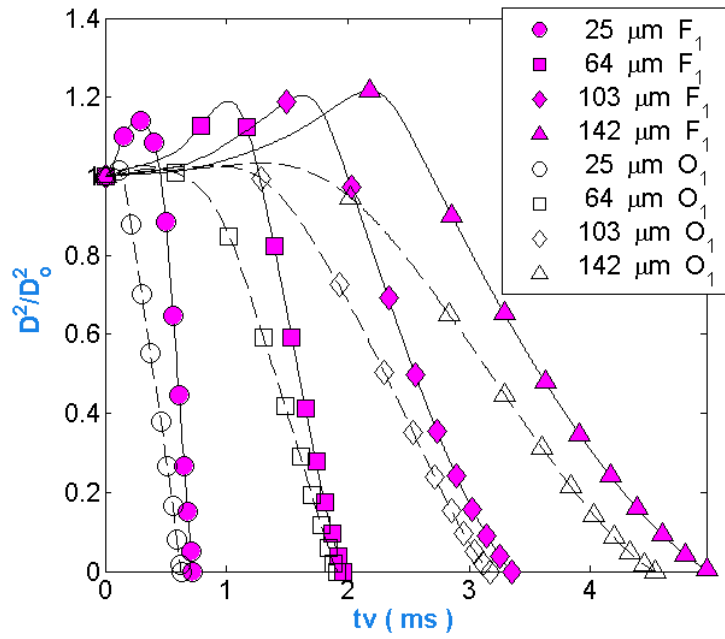
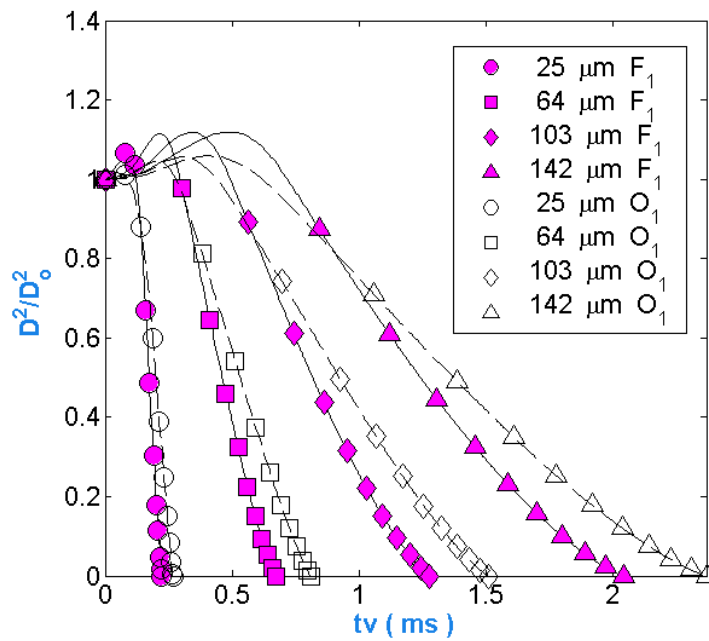


FIGURA 3.55 – Evolução do diâmetro adimensional das gotas, D/D_0 , do combustível e do oxidante. Propelentes: (a) N_2H_4/N_2O_4 , (b) $UDMH/N_2O_4$.

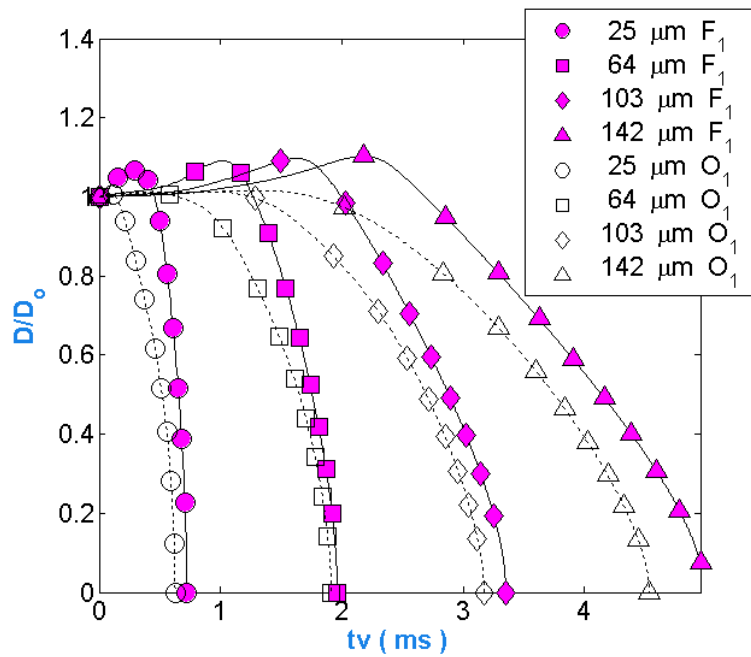


(a)

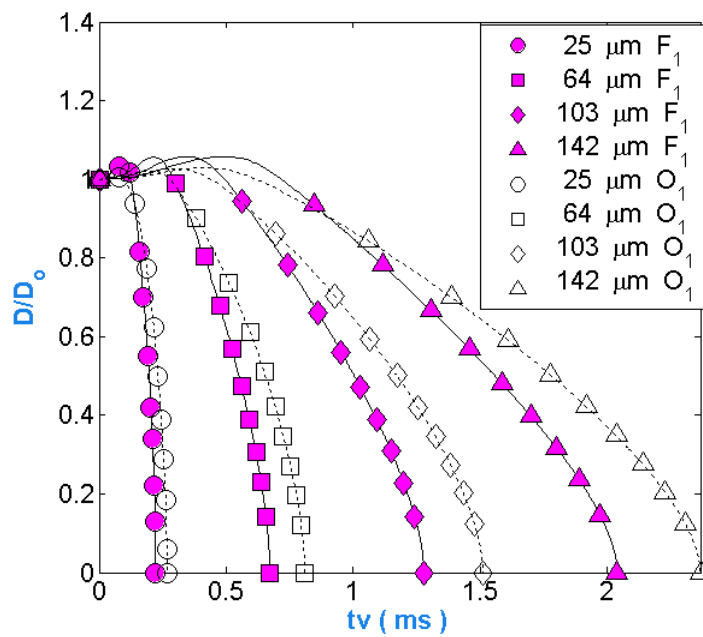


(b)

FIGURA 3.56 – Diâmetro adimensional ao quadrado, D^2/D_0^2 , vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: (a) N_2H_4/N_2O_4 , (b) $UDMH/N_2O_4$.

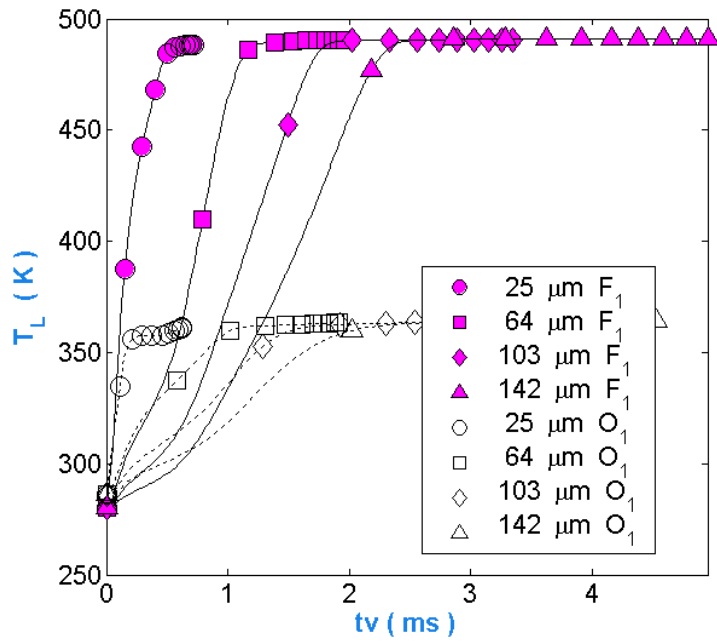


(a)

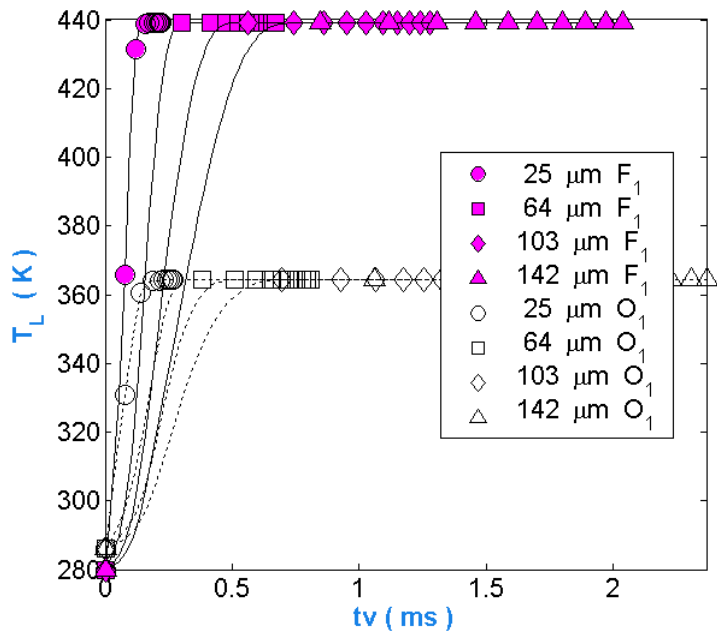


(b)

FIGURA 3.57 – Diâmetro adimensional, D/D_0 , vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: (a) N_2H_4/N_2O_4 , (b) $UDMH/N_2O_4$.

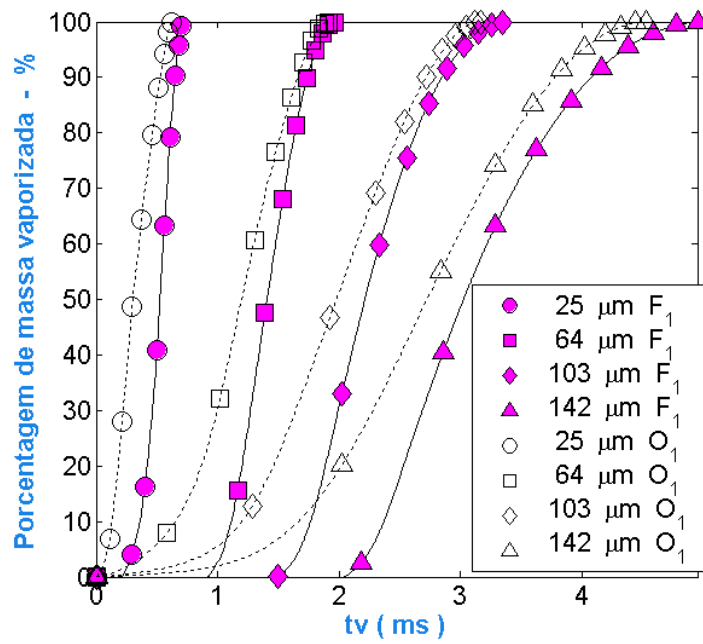


(a)

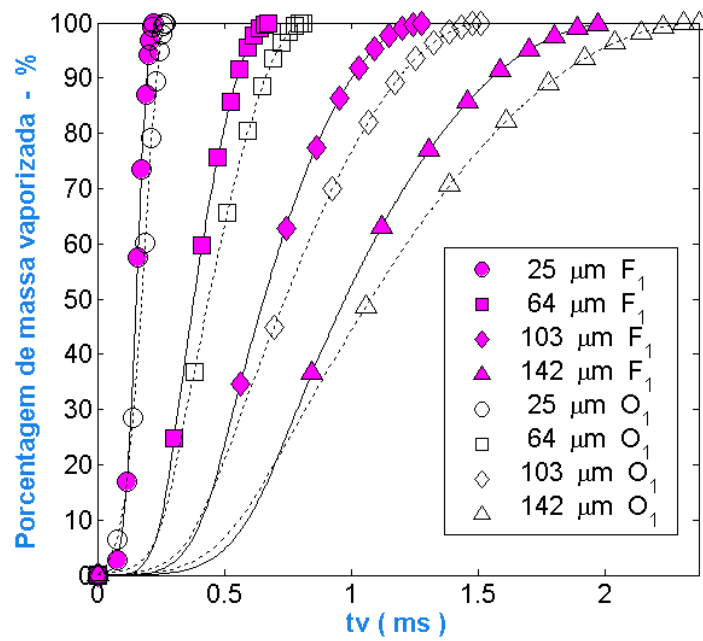


(b)

FIGURA 3.58 – Temperatura do líquido, T_l , vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: (a) N_2H_4/N_2O_4 , (b) $UDMH/N_2O_4$.



(a)



(b)

FIGURA 3.59 – Porcentagem de massa vaporizada, $\% \dot{m}_v$, vs. tempo de vaporização, t_v , para 4 parcelas de gotas entrando na câmara de combustão. Propelentes: (a) N_2H_4/N_2O_4 , (b) $UDMH/N_2O_4$.

3.4.2. Câmaras de Combustão Multipropelentes

Nesta seção são apresentados resultados para câmaras de combustão multipropelentes, ou seja, câmaras onde são injetados mais de um combustível e mais de um oxidante líquidos. Conforme mencionado anteriormente, um caso típico é a Aerozina (50 % de N_2H_4 e 50 % de UDMH em massa). Esta mistura pode ser simulada como dois propelentes diferentes e separados entrando na câmara em forma de gotas e, assim, a Equação (2.6) é usada em lugar da equação (2.5).

Os gráficos apresentados a seguir mostram a influência da percentagem em massa de N_2H_4 na mistura N_2H_4 -UDMH sobre a distância de vaporização completa das gotas x_{vap} , assim como para a mistura N_2H_4 -MMH. Foram consideradas as perdas de calor por radiação e por convecção do gás para as paredes e para as gotas, assim como o período de pré-aquecimento das gotas.

Os dados de entrada usados na simulação são apresentados na Tabela 3.1.

TABELA 3.1 – Dados de entrada para a simulação de câmaras de combustão multipropelentes.

$D_c = 40 \text{ mm}$	$D_{32} = 50 \text{ }\mu\text{m}$
$T_{F1,l,0} = T_{F2,l,0} = T_{Ox,l,0} = 280 \text{ K}$	$q = 2.5$
$T_{g,0} = 800 \text{ K}$	$N = 4 \text{ parcelas.}$
$A_{F1,l,0} = A_{F2,l,0} = 10 \text{ mm}^2.$	$t_w = 3 \text{ mm}$
$m_{F,l,0} = 30 \text{ g/s}$	$m_{Ox,g,0} = 0.1 m_{Ox,l,0}$
$m_{Ox,l,0} = 50 \text{ g/s}$	$m_{F,g,0} = 0.85 m_{Ox,g,0},$

As Figuras 3.60 (a,b) mostram a influência da porcentagem de N_2H_4 na mistura N_2H_4 -MMH sobre a distância de vaporização completa das gotas de N_2H_4 e MMH. Observa-se que um aumento na pressão diminui a distância de vaporização, devido ao aumento na taxa de vaporização. Um aumento na porcentagem de N_2H_4 também aumenta x_{vap} , visto que $T_{eb-N_2H_4} = 113,5^0 C > T_{eb-MMH} = 90,9^0 C > T_{eb-UDMH} = 63^0 C$. Nota-se também que x_{vap} de N_2H_4 é sempre maior do que x_{vap} de MMH e do N_2O_4 para todos os casos, ou

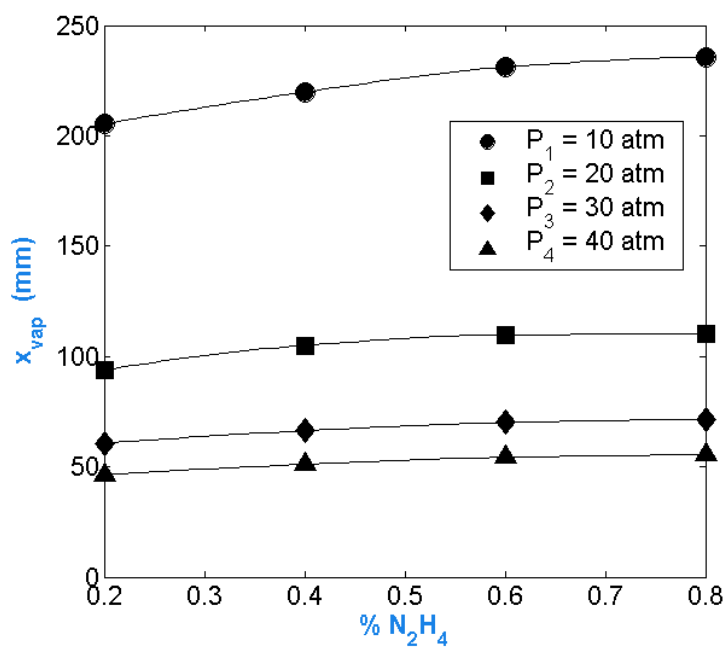
seja, para qualquer pressão e porcentagem do N_2H_4 injetada na entrada. O fato de o N_2H_4 ser o propelente que controla o comprimento da câmara neste caso não significa que pode ser estendida a mesma regra para todos os casos de câmaras multipropelentes. Isto dependerá também de outros fatores, por exemplo, da temperatura do N_2H_4 na entrada. Se a temperatura do N_2H_4 na entrada for muito próxima da sua temperatura de ebulição, em comparação com a diferença de temperaturas do MMH, esta poderia controlar a distância de vaporização completa e por conseguinte o comprimento da câmara de combustão.

A Figura 3.61 (a,b) apresenta a variação da distância de vaporização com a porcentagem de N_2H_4 . Como mencionado, a Hidrazina continua neste caso sendo o propelente que controla a distância máxima de vaporização completa devido a uma maior temperatura de ebulição.

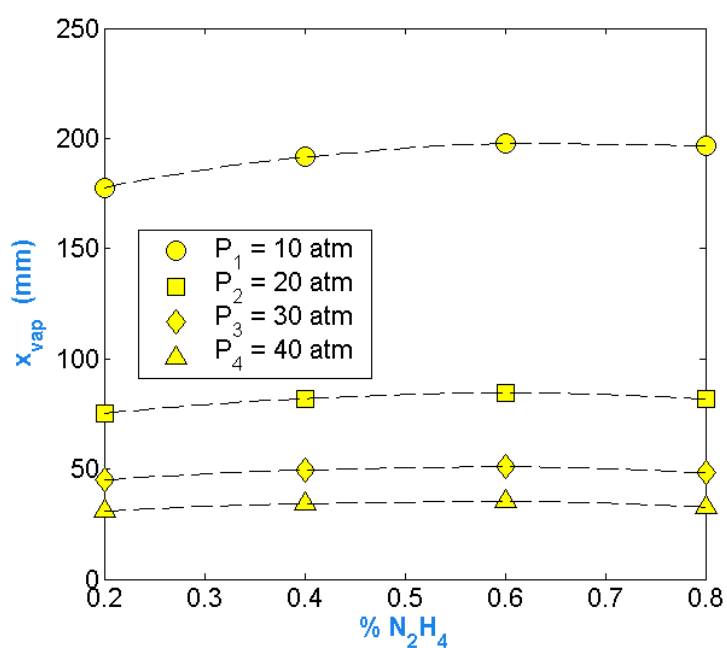
As Figuras 3.62 e 3.63 apresentam uma comparação dos resultados mostrados nas Figuras 3.60 e 3.61. Mostra-se que o N_2H_4 na mistura N_2H_4 -MMH tem maior distância de vaporização do que para a N_2H_4 na mistura N_2H_4 -UDMH. Isto deve-se principalmente à diferença de temperaturas de ebulição entre os propelentes. Nota-se que a diferença entre as distâncias de vaporização da N_2H_4 na Figura 3.62 é muito pequena comparada com a diferença entre as distâncias do MMH/UDMH na Figura 3.63.

As Figuras 3.64 e 3.65 mostram a influência da porcentagem de N_2H_4 em massa das misturas N_2H_4 -MMH e N_2H_4 -UDMH, respectivamente, sobre a temperatura máxima do gás, $T_{g,max}$, em uma câmara de combustão multipropelente. Nota-se que um aumento na porcentagem N_2H_4 produz um aumento na temperatura máxima do gás quando $\Phi_g \approx 1$. Nota-se também que a temperatura máxima aumenta com a pressão para este caso.

A Figura 3.66 apresenta um resumo das Figuras 3.64 e 3.65 para uma pressão de 30 atm, onde se observa que para uma mesma porcentagem em massa de N_2H_4 a temperatura máxima do gás da MMH é sempre menor do que para a UDMH, porque para se obter uma maior distância de vaporização como mostrado na Figura. 3.63 é necessário também que a temperatura do gás seja menor.

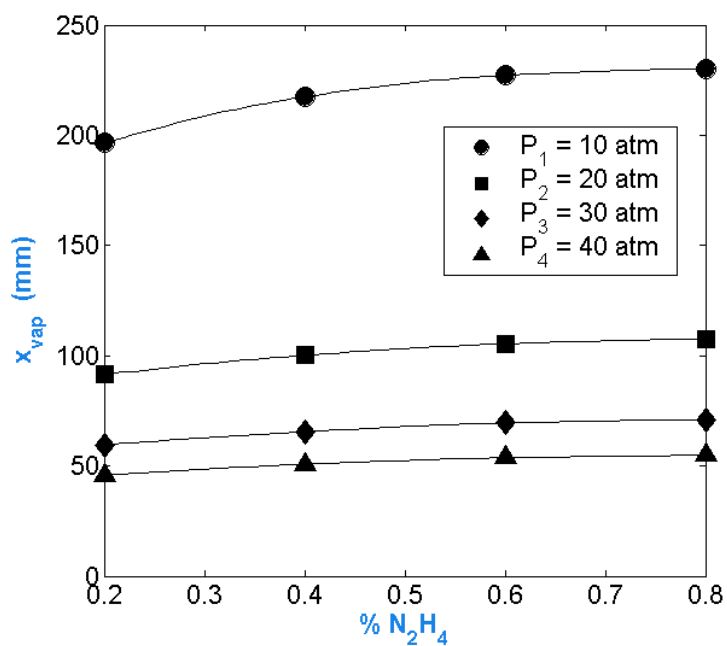


(a)

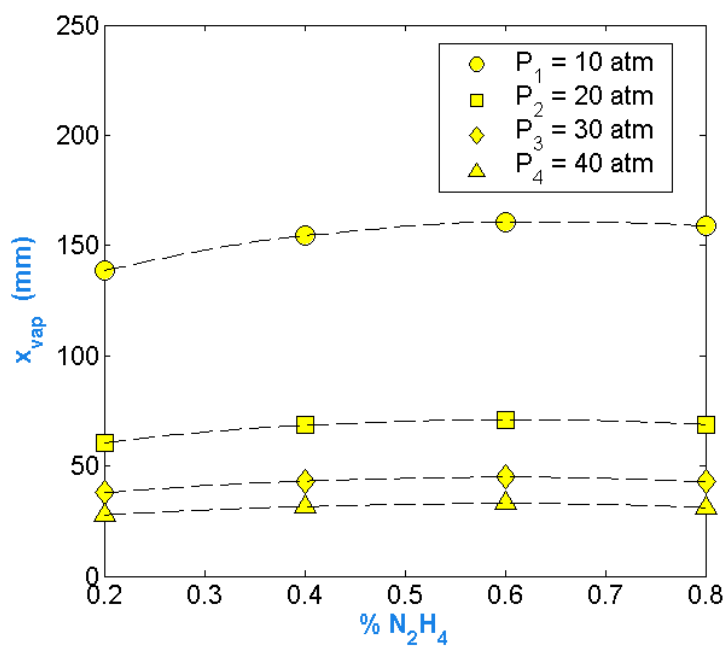


(b)

FIGURA 3.60 – Influência da percentagem de massa de N_2H_4 sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} , em uma câmara de combustão multipropelente, para várias pressões: (a) x_{vap} de N_2H_4 , (b) x_{vap} de MMH. Combustíveis: N_2H_4 e MMH. Oxidante: N_2O_4 .



(a)



(b)

FIGURA 3.61 – Influência da percentagem de massa de N_2H_4 sobre a distância de vaporização completa, x_{vap} , em uma câmara de combustão multipropelente, para várias pressões: (a) x_{vap} de N_2H_4 , (b) x_{vap} de UDMH. Combustíveis: N_2H_4 e UDMH. Oxidante: N_2O_4 .

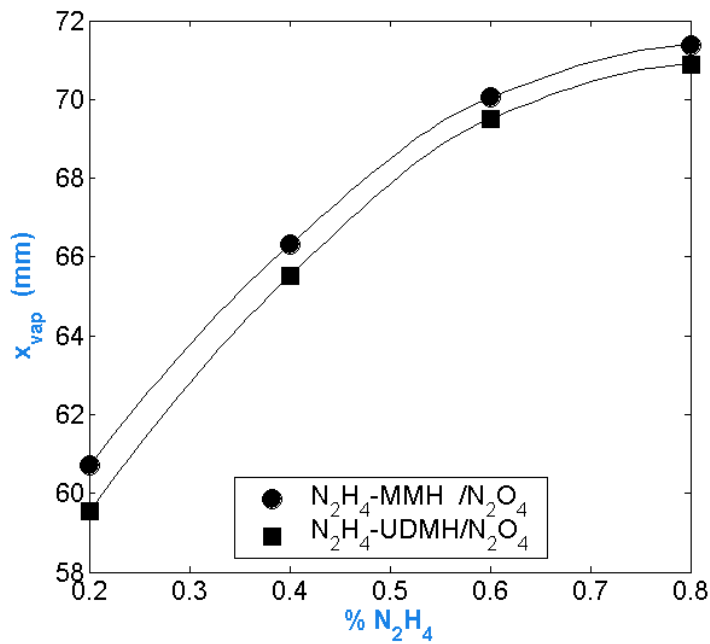


FIGURA 3.62 – Influência da porcentagem de N₂H₄ em massa sobre a distância de vaporização completa de N₂H₄ misturado com MMH ou UDMH, x_{vap} , em uma câmara de combustão multipropelente. $P = 30$ atm.

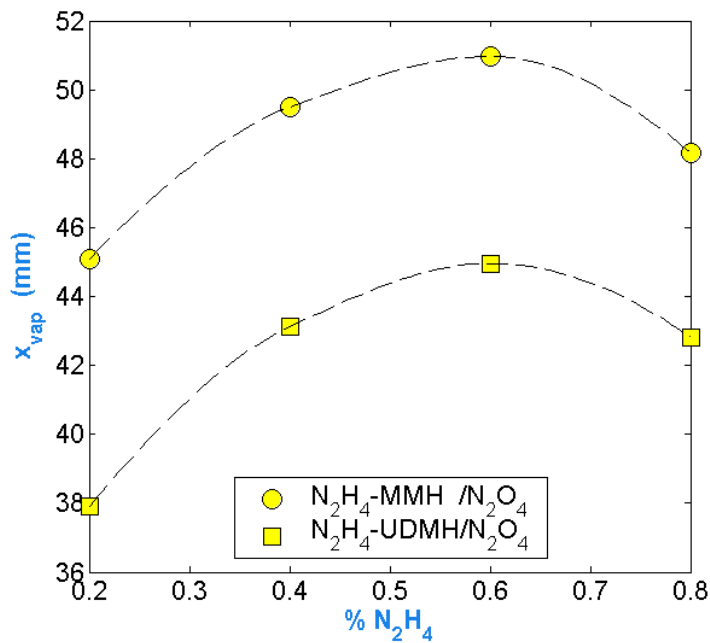


FIGURA 3.63 – Influência da porcentagem de N₂H₄ em massa sobre a distância de vaporização completa dos combustíveis MMH e UDMH com N₂H₄, x_{vap} , em uma câmara de combustão multipropelente. $P = 30$ atm.

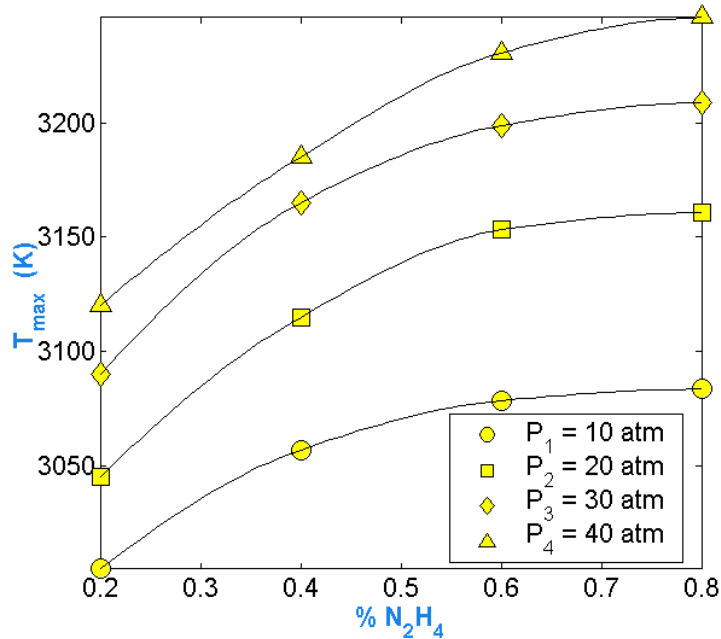


FIGURA 3.64 – Influência da porcentagem em massa de N_2H_4 sobre a temperatura máxima do gás, $T_{g,max}$, em uma câmara de combustão multipropelente, para várias pressões. Combustíveis: N_2H_4 e MMH. Oxidante: N_2O_4 .

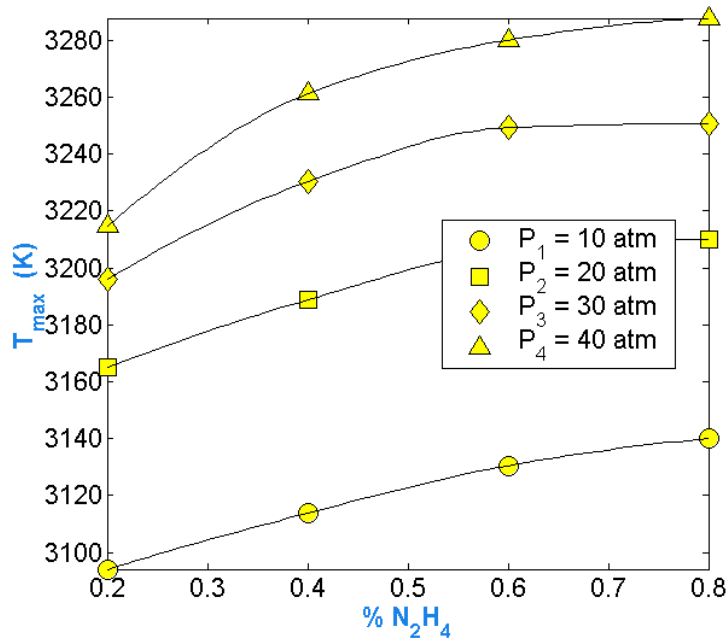


FIGURA 3.65 – Influência da porcentagem em massa de N_2H_4 sobre a temperatura máxima do gás, $T_{g,max}$, em uma câmara de combustão multipropelente, para várias pressões. Combustíveis: N_2H_4 e UDMH. Oxidante: N_2O_4 .

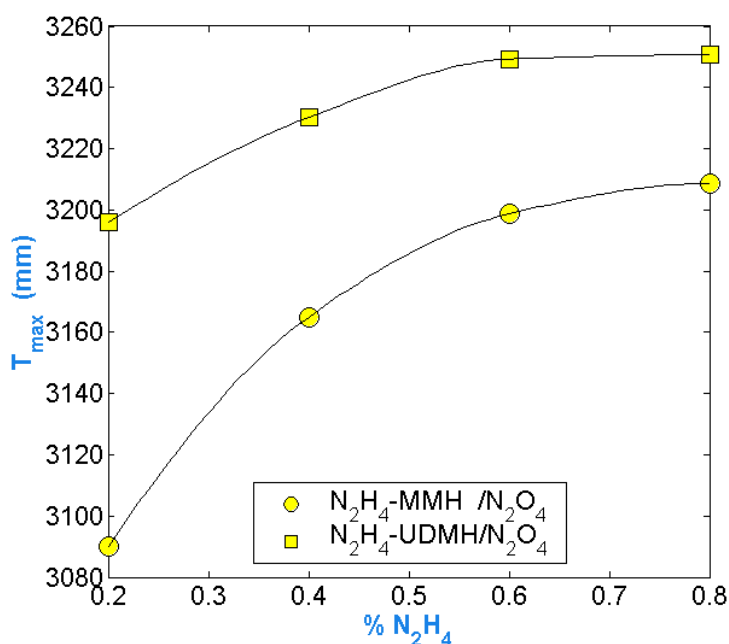


FIGURA 3.66 – Influência da porcentagem em massa de N_2H_4 em misturas de MMH e de UDMH sobre a temperatura máxima do gás, $T_{g,max}$, em uma câmara de combustão multipropelente. $P = 30$ atm.

3.4.3. Comparação dos Resultados Numéricos com Medidas Experimentais

Nesta seção são obtidos resultados numéricos empregando-se o modelo desenvolvido no presente trabalho, utilizando-se os dados de um propulsor de 200 N testado no Laboratório Associado de Combustão e Propulsão (LCP) do INPE. Os propelentes usados foram N_2H_4 e N_2O_4 . Os dados do propulsor são apresentados na Tabela 3.1.

TABELA 3.2 – Dados do Propulsor de 200 N testado no LCP/INPE.

F (N)	200	T_∞ (K)	300	$\dot{m}_{F,l,0}$ (gr/s)	30,23	q_F	2,5	f_s	0,400
L_c (mm)	80	$T_{g,0}$ (K)	800	$\dot{m}_{Ox,l,0}$ (gr/s)	40,03	q_{Ox}	2,5	f_T	0,755
D_c (mm)	42	$T_{F,l,0}$ (K)	300	$A_{F,l}$ (mm ²)	20,73	$D_{32,F}$ (μ m)	66	Φ_T	1,887
t_w (mm)	3	$T_{Ox,l,0}$ (K)	300	$A_{Ox,l}$ (mm ²)	3,97	$D_{32,Ox}$ (μ m)	32	P_c (atm)	10

As áreas de saída dos propelentes foram calculadas a partir das dimensões da placa injetora mostrada na Figura 3.67.

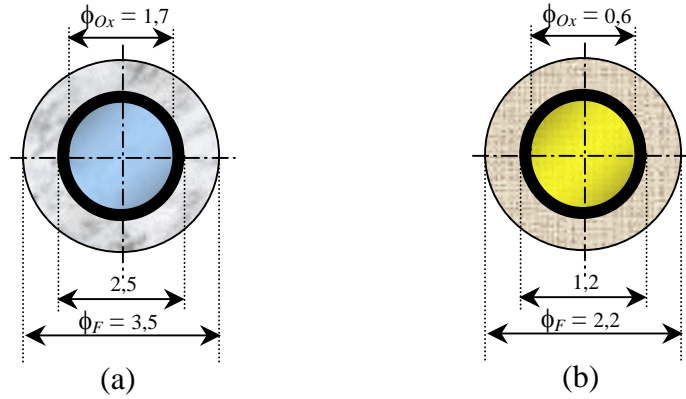


FIGURA 3.67 – Dimensões dos elementos injetores do motor bipropelente de 200 N.
 (a) Injetor central; (b) Injetor periférico.

A placa injetora consta de 6 elementos injetores periféricos e um injetor central. O diâmetro médio de Sauter D_{32} foi estimado usando-se uma expressão empírica dada no trabalho de Couto et al. (1997) para este tipo de injetores:

$$U_0 = \sqrt{\frac{2\Delta P_L}{\rho_L}} \quad (3.1)$$

$$FN = \frac{\dot{m}}{\sqrt{\rho_L \Delta P_L}} \quad (3.2)$$

$$x = \frac{\sin^2 \theta}{1 + \cos^2 \theta} \quad (3.3)$$

$$d_0 = 2 \sqrt{\frac{FN}{\sqrt{2\pi}(1-x)}} \quad (3.4)$$

$$h_0 = \frac{0,00805 \sqrt{\rho_L} FN}{d_0 \cos \theta} \quad (3.5)$$

$$d_L = 0,9615 \cos \theta \left(\frac{h_0^4 \tau^2 \cos^2 \theta}{U_0^4 \rho_a \rho_L} \right)^{1/6} \left[1 + 2,6 \mu_L \cos \theta \left(\frac{h_0^2 \rho_a^4 U_0^7}{72 \rho_L^2 \tau^5 \cos^8 \theta} \right)^{1/3} \right]^{0.2} \quad (3.6)$$

$$D_{32} = 1,89d_L \quad (3.7)$$

onde as perdas de carga nos injetores de oxidante e de combustível são $\Delta P_{L,Ox} = \Delta P_{L,F} = 0,5$ MPa, ρ_L e ρ_a são as densidades do propelente e do ar nas condições de entrada, θ é o semiângulo de saída do cone do propelente dado por: $\theta_F = 67,783^\circ$ e $\theta_{Ox} = 35,559^\circ$ e τ é a tensão superficial do propelente que pode ser obtido das Tabelas dadas no Apêndice E. Finalmente escolheu-se um valor médio de $q = 2,5$.

A distância de vaporização calculada pelo modelo numérico, utilizando-se os dados da Tabela 3.1, é cerca de 80 mm, equivalente ao comprimento da câmara o qual foi especificado a partir de um comprimento característico $L^* = 1,2$ m. Deve-se notar que o comprimento característico é igual à razão entre o volume e a área da câmara, sendo obtido experimentalmente para um dado par de propelentes em vários propulsores e injetores.

A Figura 3.68 mostra a evolução do diâmetro adimensional, D/D_0 , das gotas ao longo da câmara de combustão. Observa-se que a distância de vaporização completa das gotas calculada pelo modelo, cerca de 85 mm, é bem próxima do comprimento da câmara do motor de 200 N, de 80 mm.

Embora a vazão de massa de oxidante seja maior do que a vazão de massa de combustível, a vaporização completa do oxidante ocorre mais rapidamente porque ele apresenta um menor D_{32} que o combustível. A vaporização do combustível controla a distância de vaporização e, conseqüentemente, o comprimento da câmara. Embora o parâmetro q tenha sido arbitrado na análise igual a 2,5 pode-se observar que a adoção de um valor maior de q diminuiria o diâmetro máximo D_{max} como mostrado na Figura 2.6 e, por conseguinte, também diminuiria a distância de vaporização completa.

Da Figura 3.69 observa-se que a velocidade de escoamento atingida na saída da câmara é cerca de 65 m/s resultando em um regime subsônico ($M < 1$) ao longo da câmara de combustão, como observado na Figura 3.70.

A Figura 3.71 mostra a variação da temperatura do gás e das paredes interna e externa da câmara de combustão. Do gráfico observa-se que a temperatura máxima foi atingida

perto do injetor principalmente porque quase todo o oxidante foi vaporizado nessa região como mostrado na Figura 3.68. No caso da utilização de uma camada de combustível líquido ao redor da parede interna da câmara para resfriamento da mesma, pode-se admitir, simplificadamente, que a temperatura da parede seja uma média entre a temperatura de ebulição do combustível e a temperatura da parede sem resfriamento, usando-se uma função peso linear ao longo da câmara, dada por:

$$f(x) = 1 - \frac{x}{x_{vap}} \quad (3.8)$$

$$T_{wic} = f(x)T_{eb} + (1 - f(x))T_{wi} \quad (3.9)$$

onde x_{vap} é a distância de vaporização, T_{eb} é a temperatura de ebulição e T_{wi} é a temperatura da parede interna sem resfriamento. Com esta função peso obtém-se um perfil linear de temperaturas ao longo da câmara, conforme mostra a Figura 3.71.

Embora o perfil de temperaturas na câmara não seja conhecido em detalhe, observou-se que em um ponto próximo ao injetor, com $T_g = 1200$ K (Hinckel et al., 2002), a temperatura prevista com o modelo sem a camada de resfriamento e a temperatura medida em regime permanente da parede externa eram cerca de 900 K, concordando razoavelmente.

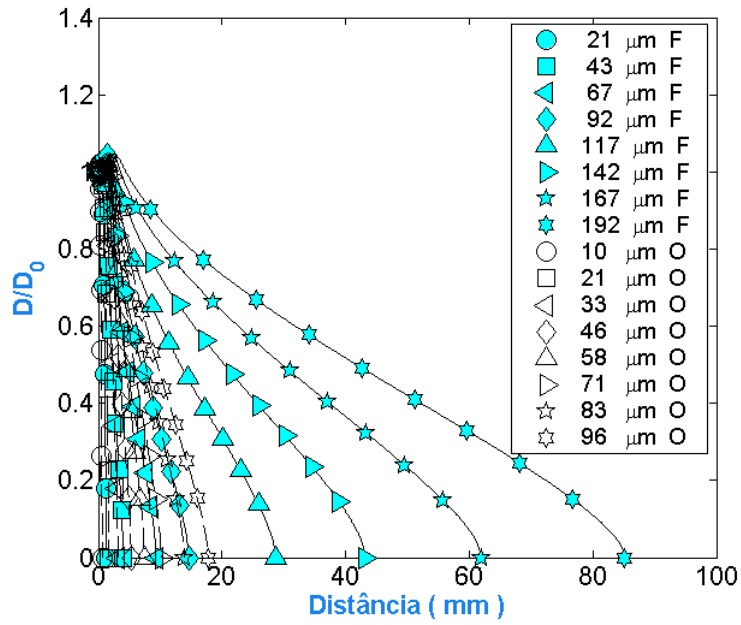


FIGURA 3.68 – Evolução do diâmetro adimensional, D/D_0 , das gotas ao longo da câmara de combustão. Simulação do motor bipropelente de 200 N.

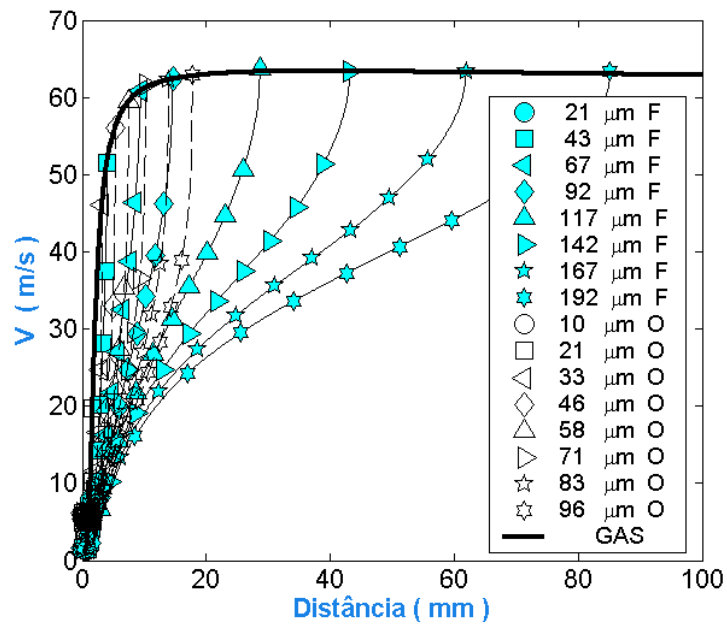


FIGURA 3.69 – Velocidade das gotas, v_d , e velocidade do escoamento, v_g , ao longo da câmara. Simulação do motor bipropelente de 200 N.

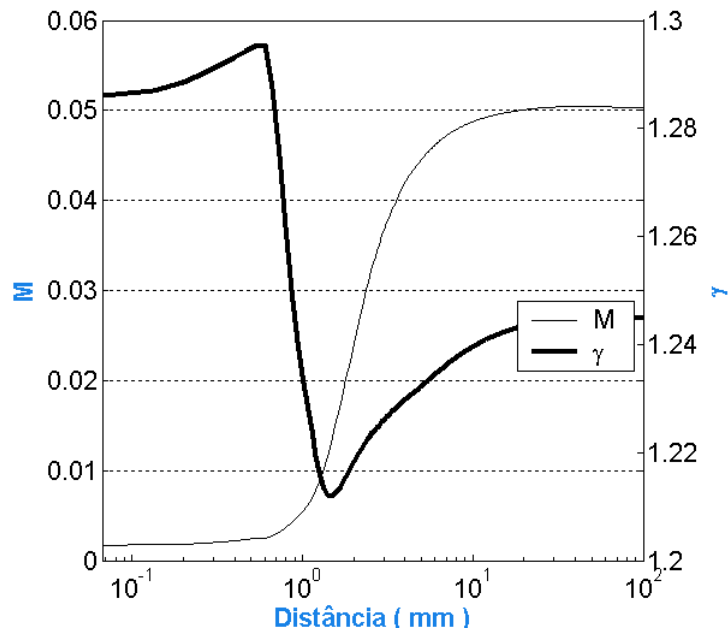


FIGURA 3.70 – Variação do número de Mach, M , e do coeficiente politrópico, γ , ao longo do câmara de combustão. Motor bipropelente de 200 N.

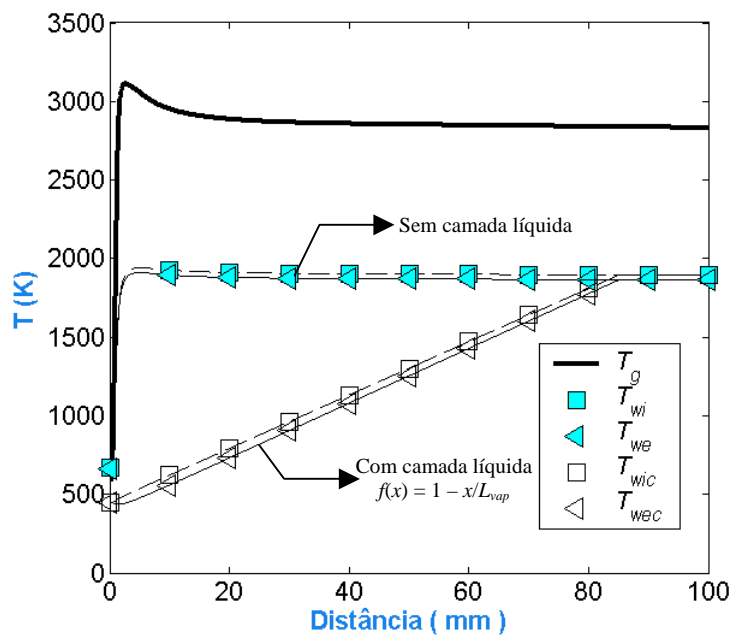


FIGURA 3.71 – Variação da temperatura do gás, T_g , e das paredes interna e externa, T_{wi} e T_{we} . Motor bipropelente de 200 N.

CAPÍTULO 4

CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

O presente trabalho apresenta um modelo unidimensional para descrever a vaporização, mistura, reação e queima de propelentes líquidos em uma câmara de combustão de foguete. Foram realizadas simulações numéricas a fim de determinar a distância de vaporização completa das gotas de propelente, bem como para analisar os efeitos da pressão, temperatura de entrada, razão de equivalência, distribuição de tamanho de gotas, perdas de calor por convecção e radiação, pré-aquecimento das gotas, velocidade relativa entre o gás e as gotas e os efeitos da deformação das gotas sobre o arrasto.

Foi escrito um programa em Matlab para comparar o desempenho de sistemas multipropelentes, incluindo-se misturas de combustíveis e oxidantes do tipo $C_xH_yO_zN_t$ e N_qO_p . Escreveu-se um programa de equilíbrio químico a pressão e temperatura constantes, a uma dada razão de equivalência dos propelentes, para o cálculo da composição dos produtos da combustão, admitindo-se até 11 produtos: CO_2 , CO , H_2O , H_2 , O_2 , N_2 , H , OH , O , NO e N , bem como para o cálculo da entalpia e das derivadas da entalpia da mistura gasosa.

Os desempenhos dos sistemas bipropelentes N_2H_4/N_2O_4 , MMH/N_2O_4 , $UDMH/N_2O_4$ e dos sistemas multipropelentes N_2H_4 - MMH/N_2O_4 e N_2H_4 - $UDMH/N_2O_4$ foram analisados e comparados.

A função de distribuição de Rosin-Rammler foi usada para descrever a distribuição de tamanho de gotas na câmara de combustão, adotando-se um número finito de parcelas de gotas na entrada.

Foi analisada a influência dos parâmetros de Rosin-Rammler, q e D_{32} , sobre o D_{max} para vários números de parcelas de gotas, N , entrando na câmara de combustão. Encontrou-se que um aumento de q diminui o D_{max} assim como um aumento de D_{32} aumenta o D_{max} .

Observou-se que a escolha de um número de parcelas de gotas adequado é importante no cálculo da distância de vaporização completa e/ou tempo de residência das gotas e, assim, estimar o comprimento da câmara de combustão.

Verificou-se que o uso de 8 parcelas de gotas é suficiente para obter resultados com precisão adequada entre 15 e 25 atm, independentemente dos parâmetros de Rosin-Rammler. Para pressões menores de 15 atm recomenda-se utilizar um número maior que 8 parcelas e para pressões acima de 25 atm é suficiente utilizar 4 parcelas de gotas.

Verificou-se que a distância de vaporização completa aumenta com o aumento do diâmetro médio de Sauter D_{32} , diminui com o aumento do parâmetro adimensional q da distribuição de Rosin-Rammler, diminui quando aumenta a pressão (na faixa subcrítica), aumenta quando a razão de equivalência total Φ_T aumenta. A razão de equivalência pré-misturada não afeta significativamente a distância de vaporização no intervalo de 0,2 a 2, admitindo-se uma quantidade de oxidante líquido fixa.

A temperatura na saída da câmara, acima de 3000 K, não é afetada pela temperatura na entrada, na faixa de 800 a 2500 K. Verificou-se que a troca de calor por radiação para as gotas é muito pequena comparada com a troca por convecção, enquanto a perda de calor por radiação para as paredes representa cerca de 45 % da perda total.

Verificou-se que a percentagem de massa dos propelentes vaporizada é significativa durante a fase de pré-aquecimento das gotas e conclui-se, portanto, que modelos de combustão de sprays devem sempre incluir o período de pré-aquecimento.

O número de Mach calculado para todos os casos é menor que 1 indicando um escoamento subsônico ao longo da câmara de combustão.

O tempo de vaporização completa é da ordem de milésimos de segundos e a distância de vaporização é da ordem de milímetros para as condições de operação utilizadas.

A técnica numérica utilizada para a simulação dos sistemas se mostrou eficiente na maioria dos casos rodados no computador e, portanto, recomenda-se, em geral, o uso de métodos

implícitos para sistemas rígidos (*stiff*) em modelos matemáticos de câmaras de combustão que incluam reações químicas e variações bruscas de temperaturas.

Finalmente compararam-se os resultados numéricos com medidas experimentais do propulsor bipropelente MMH/NTO de 200 N testado no Laboratório Associado de Combustão e Propulsão do INPE. A distância de vaporização completa prevista pelo modelo é aproximadamente 85 mm, muito próxima do comprimento da câmara utilizada nos testes, $L_c = 80$ mm, projetada com valores de L^* estabelecidos na literatura. A temperatura prevista em um ponto próximo ao injetor concordou, aproximadamente, com a medida experimental.

Como sugestões para trabalhos futuros recomenda-se a inclusão de vários aperfeiçoamentos no modelo: efeitos da variação de área da câmara, acoplamento da tubeira e de sistemas de refrigeração regenerativa, efeitos de pressões supercríticas com o uso de equações de gases reais e modelos de colisão e de quebra de gotas, turbulência e cinética química.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Avery, W. H.; Hart, R. W. Combustor performance with instantaneous mixing. **Industrial and Engineering Chemistry**, v. 45, n. 8, p. 1634-1637, Aug. 1953.

Avampato, T. J.; Saltiel, C. Dynamic modeling of starting capabilities of liquid propellant rocket engines. **Journal of Propulsion and Power**, v. 11, n. 2, p. 292-300, Apr. 1995.

Barbosa, F. I.; Santana Jr., A. mathematical model and numerical simulation of liquid rocket engine during the transient operation mode.. In: Brazilian Congress of Mechanical Engineering (COBEM), 16., Uberlândia, 2001. **Proceedings**. Rio de Janeiro: ABCM 2001, p. 560-572. 1CD ROM.

Bazdidi-Tehrani, F.; Jahromi, F. Three dimensional simulation of the flow inside a model gas turbine combustor, **College of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology**, Narmak Tehran 16844-Iran, 2001. Disponível em: <http://tetra.mech.ubc.ca/CFD03/papers/paper30AA4.pdf>. Acesso em: Sept. 2003.

Bird, R. B.; Stewart, W. E.; Lightfoot, E. N. **Transport phenomena**. New York: John Wiley and Sons, 1960. 345p.

Borman, G. L.; Ragland, K. W. **Combustion engineering**. New York: McGraw-Hill, 1998, 613p.

Bracco, F. V. Theoretical analysis of stratified, two-phase Wankel engine combustion **Combustion Science and Technology**, v. 8, n. 1, p. 69-84, 1973.

Brau, C. C.; Jonkman, R. M. Classical theory of rotational relaxation in diatomic gases. **Journal of Chemical Physics**, v. 52, n. 2, p. 477-484, 1970.

Bragg, S. L. Application of reaction rate theory to combustion chamber analysis. **Aeronautical Research Council**. England: ARC-16170, , Sept. 1953. Disponível em: <http://tetra.mech.ubc.ca/CFD03/papers/comsy56.pdf>. Acesso em: Aug. 2003.

Burstein, S. Z.; Hammer, S. S.; Agosta, V. D. Spray combustion model with droplet breakup: analytical and experimental results in detonation and two phase flow. In: Penner S. S.; Williams F. A. (eds.). **Progress in astronautics and rocketry**. New York: Academic Press, v. 6, p. 243-267, 1962.

Chin, J. S.; Lefebvre, A. H. Steady-State Evaporation Characteristics of Hydrocarbon Fuel Drops. **AIAA Journal**, v. 21, n. 10, p.1437-1443, 1985.

Couto, H. S.; Carvalho Jr., J. A.; Bastos-Netto, D. Theoretical Formulation for Sauter Mean Diameter of Pressure-Swirl Atomizers, **Journal of Propulsion and Power**, v.13, n. 5, p.691-696, 1997.

Dickinson, D. R.; Marshall Jr., W. R. Rates of evaporation of sprays. **AICHE Journal**, v.14, n.4, p. 541-552, 1968.

Dipprey, D. F. Liquid Rocket Engines. In: Landel R.F. ; Rembaum A. (eds.). **Chemistry in space research**, New York: Elsevier, p. 464-597, 1972.

Einecke, S; Schulz, C. Sick, V.; Dreizler, A. Schießl, R.; Maas, U. Two-dimensional temperature measurements an SI engine using two-line tracer LIF. In: International Fall Fuels and Lubricants Meeting and Exposition, San Francisco, CA, 1998. **Proceedings...** Washington, DC: SAE, 1988. p. 19-22. (SAE-982468).

Essenhigh, R. H. Combustion Technology: Some Modern Developments. In: Palmer, H.B.; Beer, J.M. (ed.) **An introduction to stirred reactor theory applied to design of combustion chambers**. New York: Academic Press, 1974. cap.10, p. 374-415.

Faeth, G. M. Current Status of Droplet and Liquid Combustion. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 3, n. 12, p. 191-224, 1977.

Gordon, S.; McBride, B. J. **Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks, and Chapman-Jouguet detonations**. Washington, DC: NASA, 1971. (NASA SP-273).

Haggenmacher, J. E. The heat of vaporization as a function of pressure and temperature. **Journal of the American Chemical Society**, n. 68, n.8, p. 1633-1634, 1946.

Hersch, M. **A mixing model for rocket engine combustion**. Washington, D.C.: NASA, 1965. (NASA TN D-2881).

Heywood, J. B.; Fletcher, R. S. **A model for nitric oxide emissions from aircraft gas turbines**. Reston, VA: AIAA, 1971. (AIAA Paper 71-123).

Hinckel, J. N.; Kozlov, A. A.; Vicente de Moraes, F. J.; Cardoso, H. P. Desenvolvimento de um propulsor bipropelente com empuxo de 200 N. In: Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas (ENCIT), 9., Caxambu, 2002. **Anais...** Rio de Janeiro: ABCM, CIT02-0654.

Hirschfelder, J. O.; Curtiss, C. F.; Bird, R. B. **Molecular theory of gases and liquids**. New York: John Wiley and Sons, 1954.

Hottel, H. C.; Sarofim, A. F. **Radiative heat transfer**. New York: McGraw-Hill, 1967.

Hubbard, G. L.; Denny, V. E.; Milss, A.F. Droplet evaporation: effects of transient and variable properties. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 18, n.9, p. 1003-1008, 1975.

- Kee, R. J. et al. **Chemkin Collection Release v. 3.7: aurora application user manual.** modeling steady or transient reactor networks, including plasmas, with gas and surface reactions. San Diego, CA: Reaction Design, Aug. 2002. 1CD ROM.
- Kee, R. J. et al. **Chemkin Collection Release v. 3.7: gas phase kinetics.** Pre-processor and subroutine library for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics. San Diego, CA: Reaction Design, Aug. 2002. 1CD ROM.
- Kee, R. J. et al. **Chemkin Collection Release v. 3.7: plug.** modeling plug-flow reactors with gas-phase and surface chemistry. San Diego, CA: Reaction Design, Aug. 2002. 1CD ROM.
- Kee, R. J. et al. **Chemkin Collection Release v. 3.7: transport core utility manual.** Pre-processor and subroutine library for the analysis of gas-phase transport properties. San Diego, CA: Reaction Design, Aug. 2002. 1CD ROM
- Kee, R. J. et al. **Chemkin Collection Release v. 3.7: thermodynamic data.** thermodynamic property database and the FITDAT data-fitting utility. San Diego, CA: Reaction Design, Aug. 2002. 1CD ROM.
- Khaleghi, H. S.; Hosseini, M. **Numerical modeling of spray combustion in DI diesel engine using partially stirred reactor (PaSR) model.** Tarbiat Modares: University: Tehran-Iran, 2001. Disponível em: <http://tetra.mech.ubc.ca/CFD03/papers/paper30PD5.pdf>. Acesso em: Dec. 2003.
- Kollrack, R.; Aceto, L. D. **Recirculation effects in gas turbine combustors.** New York: ASME, 1974. (ASME Paper N° 74-WA/GT-3).
- Krioukov V. G.; Iskhakova, R. L.; Niwa, M.; Dregalin, A. F.; Jukova, I. K. Mathematical modeling of two-phase reacting flow in supersonic nozzle. In: International Congress of Mechanical Engineering, (COBEM), 17., São Paulo, 2003. **Proceedings...** Rio de Janeiro: ABCM, 2003.
- Kuo, K. K. **Principles of combustion,** New York: John Wiley & Sons, 1986. 399p.
- Lambiris, S.; Combs, L. P.; Levine R. S. Stable combustion processes in liquid propellant rocket engines. In: AGARD Combustion and Propulsion Colloquium, 5., Braunschweig, 1962. **Proceedings...** Braunschweig: AGARD, 1963.
- Law, C. K. Theory of monodisperse spray vaporization in adiabatic and isothermal systems. **International Journal of Heat and Mass Transfer.** v. 18, n.11, p. 1285-1292, 1975.
- Leckner, B. Spectral and total emissivity of water vapor and carbon dioxide. **Combustion and Flame,** v. 19, n.1, p. 33-48, 1972.

Lefebvre, A. H. **Atomization and sprays combustion**. New York: Hemisphere Publishing, 1989.

Liang, P. Y.; Fisher, S.; Chang, Y. M. Comprehensive modeling of a liquid rocket combustion chamber. In: AIAA Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, 23., Reno, NV, 1985. **Proceedings...** Reston, VA: AIAA, 1985. (AIAA-85-0232).

Lieuwen, T.; Zinn, B. T. Theoretical investigation of combustion instability mechanisms in lean premixed gas turbines. In: AIAA Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, 36. Reno, NV, 1998. **Proceedings...** Reston, VA: AIAA, 1998. (AIAA 98-0641).

Longwell, J. P.; Weiss, M. A. High temperature reaction rates in hydrocarbon combustion. **Industrial and Engineering Chemistry**, v. 47, n. 8, p. 1634-1643, Aug. 1956.

Mathur, S.; Tondon, P.K.; Saxena, S. C. Thermal conductivity of binary ternary and quaternary mixture of rare gases. **Molecular physics**, v.12, n.6, p.569, 1967.

McAdams, W. H. **Heat transmission**. 3. ed. New York: McGraw-Hill, 1954. 532p.

Mellor, A. M.; Tuttle, J. H.; Shisler, R. A.; Bilger, R. W. **Emissions from aircraft fuel nozzle flames**. West Lafayette: The Combustion Laboratory, 1975. (PURDU-CL-75-04).

Miraglia, J. **Modelagem e simulação de motores foguete a propelente líquido pressurizados a gás**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Aeronáutica) – Centro Técnico Aeroespacial, São José dos Campos.1994.

Monchick, L.; Mason, E.A. Transport properties of polar gases. **Journal of chemical physics**. v. 35, n.5, p.1676, 1961.

National Institute of Standards and Technology (NIST). Thermophysical properties of fluid systems. Disponível em: <<http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>>. Acesso em: Oct. 2003.

Odgers, J.; Clarke, A. E.; Harrison, A. J. Combustion stability in a spherical combustor. In: Symposium International on Combustion, 7., London and Oxford, 1958. **Proceedings...** London: Butterworth Scientific Publications, 1959. p. 664-673.

Odgers, J.; Clarke, A. E.; Ryan, P. Further studies of combustion phenomena in a spherical combustor. In: Symposium International on Combustion, 8., Pasadena, CA, 1960. **Proceedings...** Pasadena, CA: The Williams & Wilkins, 1962. p. 982-994.

Odgers, J.; Clarke, A. E.; Stringer, F. W.; Harrison, A. J. Combustion processes in a spherical combustor. In: Symposium International on Combustion, 10., Cambridge, 1964. **Proceedings...** Pittsburg: The Combustion Institute, 1965. p. 1151-1166.

Odgers, J.; Kretschmer, D. Modeling of gas turbine combustors - A convenient reaction rate equation. **ASME Journal of Engineering for Power**, v. 94, n. 3, p. 173-180, July 1972.

Parker, J. G. Rotational and vibrational relaxation in diatomic gases. **Physics of fluids**, v. 2, n.4, p. 449-462, 1959.

Priem, R. J.; Heidmann, M. F. **Propellant vaporization as a design criterion for rocket-engine combustion chambers**. Washington, D.C.: NASA, 1960. (NASA TR-67).

Raju, M. S.; Sirignano, W. A. Multicomponent spray computations in a modified centerbody combustor. In: **AIAA Aerospace Sciences Meeting, 26.**, Reno, NV, 1988. **Proceedings...** Reston, VA: AIAA, 1988. (AIAA-88-0638).

Rashidi, M.; Noori, A. R. CFD simulation of heat transfer in SI engine combustion chamber. In: **ASME Summer Heat Transfer Conference**, Las Vegas, NV, 2003. **Proceedings...** New York: ASME, 2003. (HT 200 3-47063).

Reitz, R. D.; Rutland, C. J. **Three-dimensional modeling of diesel engine intake flow, combustion and emissions-II**. Washington, D.C.: NASA, 1993. (NASA CR-191189).

Rizk, N. K.; Mongia, H. C. Gas turbine combustor design methodology. In: **AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference, 22**, Huntsville, AL, 1986. **Proceedings**. New York, NY: AIAA, 1986. (AIAA-86-1531).

Rosin, P.; Rammler, E. The laws governing the fineness of powdered coal. **Journal Institute Fuel**, v. 7, n. 31, p. 29-36, 1933.

Schley, C. A.; Hagemann, G.; Krülle, G. Towards and optimal concept for numerical codes simulating thrust chamber processes in high pressure chemical propulsion system. **American Institute of Aeronautics and Astronautics**, v. 38, n. 4-8, p. 427-436, 1996.

Schmidt, E. W. **Hydrazine and its derivatives-preparation, properties, applications**. New York: John Wiley & Sons, 1984. 530 p.

Shampine, L. F.; Reichelt, M. W. The Matlab ODE suite. **SIAM Journal on Scientific Computing**, v. 18, n.1, p.1-22, 1997.

Shampine, L. F.; Reichelt, M. W.; Kierzenka, J. A. Solving index-1 DAEs in Matlab and simulink. **SIAM Review**, v. 41, n.3, p 538-552, 1999.

Spalding, D. B. **A one-dimensional theory of liquid fuel rocket combustion**. [S.l]: A.R.C. Technical Report, (TR 20-175), Current Paper n. 445, 1959.

Spalding, D. B.; Patankar, S.V. **Heat and mass transfer in boundary layers**. 2.ed. London: Intertext Books., 1970.

Spalding, D. B. **Numerical computation of practical combustion chamber flows.** analytical and numerical methods for the investigation of flows fields with chemical reactions specially related to combustion. Neuilly Sur Seine, France: AGARD, 1974. (AGARD CP-164).

Spalding, D. B.; Serag-Eldin, M.A. Prediction of the flow and combustion processes in a three-dimensional combustion chamber. In: International Symposium on Air Breathing Engines, 3. **Proceedings...** France: Bucher Deutsche Gesellschaft fuer Luft und Raumfahrt, p. 489-514, 1976.

Sparrow, E. M.; Gregg, J. L.; **Trans ASME**, v. 80, p. 879-886, 1958.
Specials Metals. Disponível em: .
<<http://www.specialmetals.com/products/inconelalloy600.htm>>. Acesso em: Sept. 2003.

Steffen, C.J.; Bond, R. B.; Edwards, J. R. **Three dimensional CFD analysis of the GTX combustor.** Washington, D.C.: NASA, 2002. (NASA TM-2002-211572).

Svelha, R. A. **Estimated viscosities and thermal conductivities of gases at high temperatures.** Washington, D.C.: NASA, 1962. (NASA TR-132).

Talpallikar, M. V.; Smith, C. E.; Lai, M. C.; Holdeman, J. D. **CFD analysis of jet mixing in low NO_x flamel tube combustors.** Washington, D.C.: NASA, 1991. (NASA TM-104466 ASME-91-GT-217).

Thiele, M.; Selle, S.; Riedel, U.; Warnatz, J.; Schießl, R.; Maas, U. A detailed two-dimensional numerical study of spark ignition including ionization. In: SAE 2002 World Congress, Detroit, MI, 2002. **Proceedings...** Warrendale, PA: SAE Publications Group, 2002. (SAE 2002-01-1110).

Turns, S. R. and Faeth, G.M. A one-dimensional model of a carbon-black slurry-fueled combustor. **Journal of Propulsion and Power**, v. 1, n. 1, p. 5-10, 1985.

Turns, S. R. **An introduction to combustion.** New York: The Pennsylvania State University/McGraw-Hill, 1996.

Vulis, L. A. **Thermal regions of combustion.** New York: McGraw-Hill Book , 1961.

Wadel, M. F. **Comparison of high aspect ratio cooling channel designs for a rocket combustion chamber with development of an optimized design** Washington, D.C.: NASA, Jan. 1998. (NASA TM-1998-206313).

Warnatz, J. **Numerical methods in flame propagation.** Wiesbaden: Vieweg and Sohn, 1982.

Wiegand, H. Die **Einwirkung eines ebenen strömungsfeldes auf frei bewegliche tropfen und ihren widerstandsbeiwert im Reynoldszahlenbereich von 50 bis 2000.** Reihe: Fortschrittberichte VDI , 1987.

Williams, F. A. **Physics of fluids 1**. New York: John Wiley & Sons, 1985, 541 p.

Wilke, C. R. A viscosity equation for gas mixtures. **Journal of Chemical Physics**, v. 18, n.4, p. 517-519, 1950.

Yang, S. L.; Chen, R. **Numerical simulation of a low emissions gas turbine combustor using Kiva-II part II: Quick-quench/lean-combustion zones analysis**. Washington, D.C.: NASA, Aug. 1997. (NASA CR-204140).

Zhou, L. **Theoretical and numerical modeling of turbulent gas flows and combustion.**, Boca Raton, FL: CRC Press ,1993.

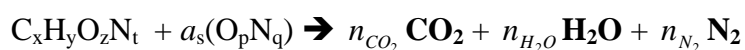
APÊNDICE A

PROGRAMA DE EQUILÍBRIO QUÍMICO

Foi escrito um programa para o cálculo do equilíbrio químico a pressão e a temperatura constantes a fim de se obterem a composição dos produtos e as derivadas da entalpia do gás em função da temperatura, da pressão e da razão de equivalência. O programa baseia-se no método das constantes de equilíbrio, derivadas a partir da minimização da energia livre de Gibbs da mistura reativa. O sistema de equações não lineares obtido é resolvido pelo método de Newton-Raphson de primeira ordem. O programa é aplicável a combustíveis do tipo $C_xH_yO_zN_t$ como, por exemplo, C_7H_{16} e N_2H_4 , e oxidantes do tipo N_qO_p como, por exemplo, O_2 e N_2O_4 , e são considerados os produtos CO_2 , CO , H_2O , H_2 , O_2 , N_2 , O , H , OH , NO e N .

A.1. Reação Estequiométrica, $\Phi = 1$

A reação estequiométrica (razão de equivalência $\Phi = 1$) de um hidrocarboneto qualquer envolvendo unicamente as espécies principais é expressa como:



Fazendo um balanço dos elementos, obtém-se:

$$C \rightarrow x = n_{CO_2}$$

$$H \rightarrow y = 2n_{H_2O}$$

$$O \rightarrow z + pa_s = 2n_{CO_2} + n_{H_2O}$$

$$N \rightarrow t + qa_s = 2n_{N_2}$$

Portanto, escreve-se o número de moles de cada espécie como:

$$n_{CO_2} = x \tag{A.1}$$

$$n_{H_2O} = y/2 \quad (A.2)$$

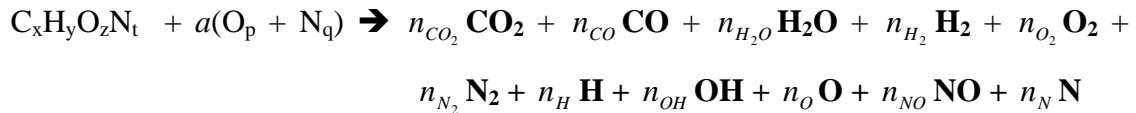
$$n_{N_2} = \frac{t + qa_s}{2} \quad (A.3)$$

$$a_s = \frac{2x + y/2 - z}{p} \quad (A.4)$$

onde a_s é o número de moles de oxidante nas condições estequiométricas.

A.2. Equilíbrio Completo

A reação química com uma razão de equivalência qualquer formando 11 espécies diferentes como produtos da combustão é descrita pela equação química:



O balanço de elementos desta reação fornece:

$$C \rightarrow x = n_{CO_2} + n_{CO}$$

$$H \rightarrow y = 2n_{H_2O} + 2n_{H_2} + n_H + n_{OH}$$

$$O \rightarrow z + pa = 2n_{CO_2} + n_{CO} + n_{H_2O} + 2n_{O_2} + n_{OH} + n_O + n_{NO}$$

$$N \rightarrow t + qa = n_{NO} + 2n_{N_2} + n_N$$

Estas equações podem também ser expressas em função das frações molares:

$$\frac{x}{n_T} = X_{CO_2} + X_{CO} \quad (A.5)$$

$$\frac{y}{n_T} = 2X_{H_2O} + 2X_{H_2} + X_H + X_{OH} \quad (A.6)$$

$$\frac{(z + pa)}{n_T} = 2X_{CO_2} + X_{CO} + X_{H_2O} + 2X_{O_2} + X_{OH} + X_O + X_{NO} \quad (A.7)$$

$$\frac{(t+qa)}{n_T} = X_{NO} + 2X_{N_2} + X_N \quad (\text{A.8})$$

onde n_T é o número de moles totais. Têm-se 4 equações e 12 variáveis desconhecidas, os 11 produtos e n_T . Portanto, precisam-se mais 8 equações as quais são obtidas a partir das constantes de equilíbrio. No caso da reação:



a sua constante de equilíbrio é dada pela relação:

$$K_P(T) = \frac{X_C^c X_D^d}{X_A^a X_B^b} P^{(c+d)-(a+b)}$$

onde K_P é a constante de equilíbrio da reação, X_i é a fração molar da espécie i e P é a pressão total (atm).

As reações de equilíbrio consideradas e as suas respectivas constantes de equilíbrio são:

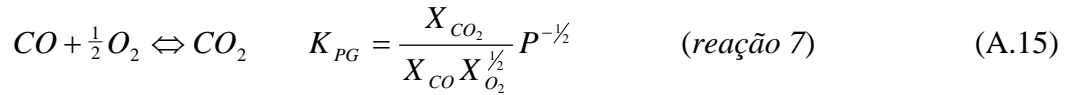
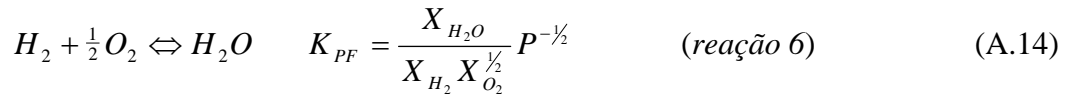
$$\frac{1}{2} H_2 \Leftrightarrow H \quad K_{PA} = \frac{X_H}{X_{H_2}^{1/2}} P^{1/2} \quad (\text{reação 1}) \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{1}{2} O_2 \Leftrightarrow O \quad K_{PB} = \frac{X_O}{X_{O_2}^{1/2}} P^{1/2} \quad (\text{reação 2}) \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{1}{2} N_2 \Leftrightarrow N \quad K_{PC} = \frac{X_N}{X_{N_2}^{1/2}} P^{1/2} \quad (\text{reação 3}) \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{1}{2} H_2 + \frac{1}{2} O_2 \Leftrightarrow OH \quad K_{PD} = \frac{X_{OH}}{(X_{H_2} X_{O_2})^{1/2}} \quad (\text{reação 4}) \quad (\text{A.12})$$

$$\frac{1}{2} N_2 + \frac{1}{2} O_2 \Leftrightarrow NO \quad K_{PE} = \frac{X_{NO}}{(X_{N_2} X_{O_2})^{1/2}} \quad (\text{reação 5}) \quad (\text{A.13})$$



Foram obtidas até agora 11 equações a partir do balanço de elementos e das constantes de equilíbrio e, portanto, uma equação adicional é necessária para se resolver o sistema de equações não lineares simultaneamente. Para isso utiliza-se a soma das frações molares:

$$\sum_{i=1}^N X_i = 1 \quad (\text{A.16})$$

Outras variáveis são utilizadas no programa, entre elas:

Razão de mistura:

$$f = \frac{\bar{M}_F}{a\bar{M}_{Ox}} \quad (\text{A.17})$$

Razão de mistura estequiométrica:

$$f_s = \frac{\bar{M}_F}{a_s\bar{M}_{Ox}} \quad (\text{A.18})$$

Razão de equivalência:

$$\Phi = \frac{f}{f_s} = \frac{a_s}{a} \quad (\text{A.19})$$

Número de moles de oxidante estequiométrico:

$$a_s = \frac{2x + y/2 - z}{p} \quad (\text{A.20})$$

Número de moles de oxidante:

$$a = \frac{a_s}{\Phi} \quad (\text{A.21})$$

onde \bar{M}_F e \bar{M}_{Ox} são as massas molares de combustível e oxidante, respectivamente.

A.3. Cálculo das Frações Molares, X_i

O sistema completo de 12 equações algébricas não lineares, designadas f_i , $i = 1, \dots, 12$, é reescrito como:

$$f_1 : X_{CO_2} + X_{CO} - \frac{x}{n_T} = 0 \quad (\text{A.22})$$

$$f_2 : 2X_{H_2O} + 2X_{H_2} + X_H + X_{OH} - \frac{y}{n_T} = 0 \quad (\text{A.23})$$

$$f_3 : 2X_{CO_2} + X_{CO} + X_{H_2O} + 2X_{O_2} + X_{OH} + X_O + X_{NO} - \frac{(z + pa)}{n_T} = 0 \quad (\text{A.24})$$

$$f_4 : X_{NO} + 2X_{N_2} + X_N - \frac{(t + qa)}{n_T} = 0 \quad (\text{A.25})$$

$$f_5 : X_H P^{1/2} - X_{H_2}^{1/2} K_{PA} = 0 \quad (\text{A.26})$$

$$f_6 : X_O P^{1/2} - X_{O_2}^{1/2} K_{PB} = 0 \quad (\text{A.27})$$

$$f_7 : X_N P^{1/2} - X_{N_2}^{1/2} K_{PC} = 0 \quad (\text{A.28})$$

$$f_8 : X_{OH} - (X_{H_2} X_{O_2})^{1/2} K_{PD} = 0 \quad (\text{A.29})$$

$$f_9 : X_{NO} - (X_{N_2} X_{O_2})^{1/2} K_{PE} = 0 \quad (\text{A.30})$$

$$f_{10} : X_{H_2O} - X_{H_2} (X_{O_2} P)^{1/2} K_{PF} = 0 \quad (\text{A.31})$$

$$f_{11} : X_{CO_2} - X_{CO} (X_{O_2} P)^{1/2} K_{PG} = 0 \quad (\text{A.32})$$

$$f_{12} : \sum_{i=1}^N X_i - 1 = 0 \quad (\text{A.33})$$

O sistema de equações f_i , $i=1, \dots, 12$, é resolvido usando o método de Newton-Raphson de primeira ordem para sistemas não lineares (Turns, 1996, *Apêndice E*).

$$X_{n+1} = X_n - \frac{f(X_n)}{f'(X_n)}$$

Uma estimativa inicial adequada para as frações molares X_i torna mais rápido e preciso o cálculo, evitando problemas de convergência das soluções.

No caso de $\Phi \leq 1$, uma boa estimativa inicial é dada por:

$$n_{CO_2} = x; \quad n_{CO} = 0;$$

$$n_{H_2O} = y/2; \quad n_{H_2} = 0;$$

$$n_{O_2} = \frac{pa(1-\Phi)}{2}; \quad n_{N_2} = \frac{t+qa}{2};$$

No caso $\Phi > 1$, uma boa estimativa inicial é obtida a partir da reação de equilíbrio do gás de água:

$$n_{CO_2} = \frac{B-D}{2A}; \quad n_{CO} = x - n_{CO_2};$$

$$n_{H_2O} = W - n_{CO_2}; \quad n_{H_2} = \frac{y - 2(W - n_{CO_2})}{2};$$

$$n_{O_2} = 0; \quad n_{N_2} = \frac{t + qa}{2};$$

onde,

$$W = z + pa - x; \quad A = K_{P,GasA} - 1; \quad B = K_{P,GasA}(x + W) + (y/2 - W)$$

$$C = K_{P,GasA}xW; \quad D = \sqrt{B^2 - 4AC}$$

O Jacobiano analítico usado no método de Newton-Raphson é obtido a partir do sistema de equações (A.22-A.33) é mostrado a seguir:

$$J = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{x}{n_T^2} \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \frac{y}{n_T^2} \\ 2 & 1 & 1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & \frac{z + pa}{n_T^2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & \frac{t + qa}{n_T^2} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}X_{H_2}^{-\frac{1}{2}}K_{PA} & 0 & 0 & P^{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}X_{O_2}^{-\frac{1}{2}}K_{PB} & 0 & 0 & 0 & P^{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}X_{N_2}^{-\frac{1}{2}}K_{PC} & 0 & 0 & 0 & 0 & P^{\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}\left(\frac{X_{O_2}}{X_{H_2}}\right)^{\frac{1}{2}}K_{PD} & -\frac{1}{2}\left(\frac{X_{H_2}}{X_{O_2}}\right)^{\frac{1}{2}}K_{PD} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}\left(\frac{X_{N_2}}{X_{O_2}}\right)^{\frac{1}{2}}K_{PE} & -\frac{1}{2}\left(\frac{X_{O_2}}{X_{N_2}}\right)^{\frac{1}{2}}K_{PE} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -(X_{O_2}P)^{\frac{1}{2}}K_{PF} & -\frac{1}{2}X_{H_2}\left(\frac{P}{X_{O_2}}\right)^{\frac{1}{2}}K_{PF} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -(X_{O_2}P)^{\frac{1}{2}}K_{PG} & 0 & 0 & -\frac{1}{2}X_{CO}\left(\frac{P}{X_{O_2}}\right)^{\frac{1}{2}}K_{PG} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix}$$

A.4. Cálculo das Derivadas

Sistemas de equações para o cálculo das derivadas das espécies são apresentados. Os sistemas foram obtidos derivando as equações (A.22-A.33) em relação à T , Φ e P , respectivamente. Uma característica importante deste conjunto de equações é a linearidade do sistema, a qual simplifica os cálculos. O sistema de equações foi, portanto, resolvido usando o método da inversão da matriz para sistemas lineares.

Sistema $\frac{dX_i}{dT}$:

$$\frac{dX_{CO_2}}{dT} + \frac{dX_{CO}}{dT} + \frac{x}{n_T^2} \frac{dn_T}{dT} = 0 \quad (\text{A.34})$$

$$2 \frac{dX_{H_2O}}{dT} + 2 \frac{dX_{H_2}}{dT} + \frac{dX_H}{dT} + \frac{dX_{OH}}{dT} + \frac{y}{n_T^2} \frac{dn_T}{dT} = 0 \quad (\text{A.35})$$

$$2 \frac{dX_{CO_2}}{dT} + \frac{dX_{CO}}{dT} + \frac{dX_{H_2O}}{dT} + 2 \frac{dX_{O_2}}{dT} + \frac{dX_{OH}}{dT} + \frac{dX_O}{dT} + \frac{dX_{NO}}{dT} + \frac{(z + pa)}{n_T^2} \frac{dn_T}{dT} = 0 \quad (\text{A.36})$$

$$\frac{dX_{NO}}{dT} + 2 \frac{dX_{N_2}}{dT} + \frac{dX_N}{dT} + \frac{(t + qa)}{n_T^2} \frac{dn_T}{dT} = 0 \quad (\text{A.37})$$

$$\frac{1}{X_H} \frac{dX_H}{dT} - \frac{1}{2X_{H_2}} \frac{dX_{H_2}}{dT} = \frac{1}{K_{PA}} \frac{dK_{PA}}{dT} \quad (\text{A.38})$$

$$\frac{1}{X_O} \frac{dX_O}{dT} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{dT} = \frac{1}{K_{PB}} \frac{dK_{PB}}{dT} \quad (\text{A.39})$$

$$\frac{1}{X_N} \frac{dX_N}{dT} - \frac{1}{2X_{N_2}} \frac{dX_{N_2}}{dT} = \frac{1}{K_{PC}} \frac{dK_{PC}}{dT} \quad (\text{A.40})$$

$$\frac{1}{X_{OH}} \frac{dX_{OH}}{dT} - \frac{1}{2X_{H_2}} \frac{dX_{H_2}}{dT} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{dT} = \frac{1}{K_{PD}} \frac{dK_{PD}}{dT} \quad (\text{A.41})$$

$$\frac{1}{X_{NO}} \frac{dX_{NO}}{dT} - \frac{1}{2X_{N_2}} \frac{dX_{N_2}}{dT} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{dT} = \frac{1}{K_{PE}} \frac{dK_{PE}}{dT} \quad (\text{A.42})$$

$$\frac{1}{X_{H_2O}} \frac{dX_{H_2O}}{dT} - \frac{1}{X_{H_2}} \frac{dX_{H_2}}{dT} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{dT} = \frac{1}{K_{PF}} \frac{dK_{PF}}{dT} \quad (\text{A.43})$$

$$\frac{1}{X_{CO_2}} \frac{dX_{CO_2}}{dT} - \frac{1}{X_{CO}} \frac{dX_{CO}}{dT} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{dT} = \frac{1}{K_{PG}} \frac{dK_{PG}}{dT} \quad (\text{A.44})$$

$$\sum_{i=1}^N \frac{dX_i}{dT} = 0 \quad (\text{A.45})$$

Sistema $\frac{dX_i}{d\Phi}$:

$$\frac{dX_{CO_2}}{d\Phi} + \frac{dX_{CO}}{d\Phi} + \frac{x}{n_T^2} \frac{dn_T}{d\Phi} = 0 \quad (\text{A.46})$$

$$2 \frac{dX_{H_2O}}{d\Phi} + 2 \frac{dX_{H_2}}{d\Phi} + \frac{dX_H}{d\Phi} + \frac{dX_{OH}}{d\Phi} + \frac{y}{n_T^2} \frac{dn_T}{d\Phi} = 0 \quad (\text{A.47})$$

$$2 \frac{dX_{CO_2}}{d\Phi} + \frac{dX_{CO}}{d\Phi} + \frac{dX_{H_2O}}{d\Phi} + 2 \frac{dX_{O_2}}{d\Phi} + \frac{dX_{OH}}{d\Phi} + \frac{dX_O}{d\Phi} + \frac{dX_{NO}}{d\Phi} + \frac{(z + pa)}{n_T^2} \frac{dn_T}{d\Phi} = \frac{p}{n_T} \frac{da}{d\Phi} \quad (\text{A.48})$$

$$\frac{dX_{NO}}{d\Phi} + 2 \frac{dX_{N_2}}{d\Phi} + \frac{dX_N}{d\Phi} + \frac{(t + qa)}{n_T^2} \frac{dn_T}{d\Phi} = \frac{q}{n_T} \frac{da}{d\Phi} \quad (\text{A.49})$$

$$\frac{1}{X_H} \frac{dX_H}{d\Phi} - \frac{1}{2X_{H_2}} \frac{dX_{H_2}}{d\Phi} = 0 \quad (\text{A.50})$$

$$\frac{1}{X_O} \frac{dX_O}{d\Phi} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{d\Phi} = 0 \quad (\text{A.51})$$

$$\frac{1}{X_N} \frac{dX_N}{d\Phi} - \frac{1}{2X_{N_2}} \frac{dX_{N_2}}{d\Phi} = 0 \quad (\text{A.52})$$

$$\frac{1}{X_{OH}} \frac{dX_{OH}}{d\Phi} - \frac{1}{2X_{H_2}} \frac{dX_{H_2}}{d\Phi} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{d\Phi} = 0 \quad (\text{A.53})$$

$$\frac{1}{X_{NO}} \frac{dX_{NO}}{d\Phi} - \frac{1}{2X_{N_2}} \frac{dX_{N_2}}{d\Phi} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{d\Phi} = 0 \quad (\text{A.54})$$

$$\frac{1}{X_{H_2O}} \frac{dX_{H_2O}}{d\Phi} - \frac{1}{X_{H_2}} \frac{dX_{H_2}}{d\Phi} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{d\Phi} = 0 \quad (\text{A.55})$$

$$\frac{1}{X_{CO_2}} \frac{dX_{CO_2}}{d\Phi} - \frac{1}{X_{CO}} \frac{dX_{CO}}{d\Phi} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{d\Phi} = 0 \quad (\text{A.56})$$

$$\sum_{i=1}^N \frac{dX_i}{d\Phi} = 0 \quad (\text{A.57})$$

Sistema $\frac{dX_i}{dP}$:

$$\frac{dX_{CO_2}}{dP} + \frac{dX_{CO}}{dP} + \frac{x}{n_T^2} \frac{dn_T}{dP} = 0 \quad (\text{A.58})$$

$$2 \frac{dX_{H_2O}}{dP} + 2 \frac{dX_{H_2}}{dP} + \frac{dX_H}{dP} + \frac{dX_{OH}}{dP} + \frac{y}{n_T^2} \frac{dn_T}{dP} = 0 \quad (\text{A.59})$$

$$2 \frac{dX_{CO_2}}{dP} + \frac{dX_{CO}}{dP} + \frac{dX_{H_2O}}{dP} + 2 \frac{dX_{O_2}}{dP} + \frac{dX_{OH}}{dP} + \frac{dX_O}{dP} + \frac{dX_{NO}}{dP} + \frac{(z+pa) dn_T}{n_T^2 dP} = 0 \quad (\text{A.60})$$

$$\frac{dX_{NO}}{dP} + 2 \frac{dX_{N_2}}{dP} + \frac{dX_N}{dP} + \frac{(t+qa) dn_T}{n_T^2 dP} = 0 \quad (\text{A.61})$$

$$\frac{1}{X_H} \frac{dX_H}{dP} - \frac{1}{2X_{H_2}} \frac{dX_{H_2}}{dP} = -\frac{1}{2P} \quad (\text{A.62})$$

$$\frac{1}{X_O} \frac{dX_O}{dP} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{dP} = -\frac{1}{2P} \quad (\text{A.63})$$

$$\frac{1}{X_N} \frac{dX_N}{dP} - \frac{1}{2X_{N_2}} \frac{dX_{N_2}}{dP} = -\frac{1}{2P} \quad (\text{A.64})$$

$$\frac{1}{X_{OH}} \frac{dX_{OH}}{dP} - \frac{1}{2X_{H_2}} \frac{dX_{H_2}}{dP} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{dP} = 0 \quad (\text{A.65})$$

$$\frac{1}{X_{NO}} \frac{dX_{NO}}{dP} - \frac{1}{2X_{N_2}} \frac{dX_{N_2}}{dP} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{dP} = 0 \quad (\text{A.66})$$

$$\frac{1}{X_{H_2O}} \frac{dX_{H_2O}}{dP} - \frac{1}{X_{H_2}} \frac{dX_{H_2}}{dP} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{dP} = \frac{1}{2P} \quad (\text{A.67})$$

$$\frac{1}{X_{CO_2}} \frac{dX_{CO_2}}{dP} - \frac{1}{X_{CO}} \frac{dX_{CO}}{dP} - \frac{1}{2X_{O_2}} \frac{dX_{O_2}}{dP} = \frac{1}{2P} \quad (\text{A.68})$$

$$\sum_{i=1}^N \frac{dX_i}{dP} = 0 \quad (\text{A.69})$$

O método de inversão da matriz é dado por:

$$AX=B$$

$$X=[A]^{-1}.B$$

onde X é o vetor solução, A é uma matriz quadrada e B é um vetor.

A matriz A é a mesma para os três sistemas de equações lineares $dX_i/d\Phi$, dX_i/dT e dX_i/dP , sendo dada por:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{x}{n_T^2} \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \frac{y}{n_T^2} \\ 2 & 1 & 1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & \frac{z+pa}{n_T^2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & \frac{t+qa}{n_T^2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{-1}{2X_{H_2}} & 0 & 0 & \frac{1}{X_H} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-1}{2X_{O_2}} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{X_O} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-1}{2X_{N_2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{X_N} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{-1}{2X_{H_2}} & \frac{-1}{2X_{O_2}} & 0 & 0 & \frac{1}{X_{OH}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-1}{2X_{O_2}} & \frac{-1}{2X_{N_2}} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{X_{NO}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{X_{H_2O}} & \frac{-1}{X_{H_2}} & \frac{-1}{2X_{O_2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{X_{CO_2}} & \frac{-1}{X_{CO}} & 0 & 0 & \frac{-1}{2X_{O_2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Os vetores B_1 , B_2 e B_3 para $dX_i/d\Phi$, dX_i/dT e dX_i/dP , respectivamente, são:

$$B_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{p}{n_T} \frac{da}{d\Phi} \\ \frac{q}{n_T} \frac{da}{d\Phi} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$B_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{K_{PA}} \frac{dK_{PA}}{dT} \\ \frac{1}{K_{PB}} \frac{dK_{PB}}{dT} \\ \frac{1}{K_{PC}} \frac{dK_{PC}}{dT} \\ \frac{1}{K_{PD}} \frac{dK_{PD}}{dT} \\ \frac{1}{K_{PE}} \frac{dK_{PE}}{dT} \\ \frac{1}{K_{PF}} \frac{dK_{PF}}{dT} \\ \frac{1}{K_{PG}} \frac{dK_{PG}}{dT} \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$B_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{1}{2P} \\ \frac{1}{2P} \\ -\frac{1}{2P} \\ \frac{1}{2P} \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2P} \\ \frac{1}{2P} \\ 0 \end{bmatrix}$$

APÊNDICE B

PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS

B.1. Propriedades Termodinâmicas das Espécies Puras no Estado Padrão:

As propriedades termodinâmicas no estado padrão \bar{C}_{pi}^0 , \bar{h}_i^0 e \bar{s}_i^0 para cada espécie foram extraídas da base de dados do programa CHEMKIN (*thermo.dat*), na forma de coeficientes polinomiais. Admite-se que estas propriedades termodinâmicas no estado padrão sejam função unicamente da temperatura. O superscrito “0” é usado para indicar o estado padrão ($P = 1 \text{ atm}$).

- Calor específico molar a pressão constante:

$$\frac{\bar{C}_{pi}^0}{R_0} = a_{1i} + a_{2i}T_i + a_{3i}T_i^2 + a_{4i}T_i^3 + a_{5i}T_i^4 \quad (\text{B.1})$$

- Entalpia molar:

$$\frac{\bar{h}_i^0}{R_0T_i} = a_{1i} + \frac{a_{2i}}{2}T_i + \frac{a_{3i}}{3}T_i^2 + \frac{a_{4i}}{4}T_i^3 + \frac{a_{5i}}{5}T_i^4 + \frac{a_{6i}}{T_i} \quad (\text{B.2})$$

- Entropia molar:

$$\frac{\bar{s}_i^0}{R_0} = a_{1i} \ln T_i + a_{2i}T_i + \frac{a_{3i}}{2}T_i^2 + \frac{a_{4i}}{3}T_i^3 + \frac{a_{5i}}{4}T_i^4 + a_{7i} \quad (\text{B.3})$$

Outras propriedades termodinâmicas podem ser obtidas em função de \bar{h}_i^0 , \bar{C}_{pi}^0 e \bar{s}_i^0 :

- Calor específico molar a volume constante:

$$\bar{C}_{vi}^0 = \bar{C}_{pi}^0 - R_0 \quad (\text{B.4})$$

- Energia interna:

$$\bar{u}_i^0 = \bar{h}_i^0 - R_0 T_i \quad (\text{B.5})$$

- Energia livre de Gibbs:

$$\bar{g}_i^0 = \bar{h}_i^0 - T_i \bar{s}_i^0 \quad (\text{B.6})$$

- Energia livre de Helmholtz:

$$\bar{a}_i^0 = \bar{u}_i^0 - T_i \bar{s}_i^0 \quad (\text{B.7})$$

B.2. Propriedades Termodinâmicas de uma Mistura Gasosa

As propriedades termodinâmicas da mistura de gases são obtidas a partir da lei de Gibbs-Dalton. As frações molares das espécies são representadas como uma função da temperatura, da pressão e da razão de equivalência, ou seja, $X_i = f(\Phi, T, P)$.

A seguir são apresentadas algumas formulas básicas para o cálculo das propriedades termodinâmicas de uma mistura de gases:

B.2.1. Propriedades Molares

- Número total de moles:

$$n_T = \sum_{i=1}^N n_i \quad (\text{B.8})$$

onde n_i é o número de moles de cada espécie.

- Fração molar:

$$X_i = \frac{n_i}{n_T} \quad (\text{B.9})$$

- Massa molar:

$$\bar{M}_g = \sum_{i=1}^N X_i \bar{M}_i \quad (\text{B.10})$$

onde \bar{M}_i é a massa molar de cada espécie.

- Calor específico a pressão constante:

$$\bar{C}_{pg} = \sum_{i=1}^N \left(X_i \bar{C}_{pi} + \bar{h}_i \frac{\partial X_i}{\partial T} \right) \quad (\text{B.11})$$

onde \bar{h}_i e \bar{C}_{pi} são a entalpia molar e o calor específico molar de cada espécie. Como estas propriedades independem da pressão no caso de um gás ideal, seus valores correspondem aos do estado padrão.

O segundo termo em (B.11) para o cálculo do calor específico molar a pressão constante resulta da dissociação das moléculas a alta temperatura.

- Entalpia molar:

$$\bar{h}_g = \sum_{i=1}^N X_i \bar{h}_i \quad (\text{B.12})$$

- Calor específico a volume constante:

$$\bar{C}_{vg} = \bar{C}_{pg} - R_0 \quad (\text{B.13})$$

- Energia interna:

$$\bar{u}_g = \sum_{i=1}^N X_i \bar{u}_i \quad (\text{B.14})$$

onde \bar{u}_i é a energia interna molar de cada espécie.

- Entropia:

$$\bar{s}_g = \sum_{i=1}^N X_i \left(\bar{s}_i^0 - R_0 \ln \left(\frac{X_i P}{P_{atm}} \right) \right) \quad (\text{B.15})$$

- Energia livre de Gibbs:

$$\bar{g}_g = \sum_{i=1}^N X_i \left[\bar{h}_i - T_i \left(\bar{s}_i^0 - R_0 \ln \left(\frac{X_i P}{P_{atm}} \right) \right) \right] \quad (\text{B.16})$$

- Energia livre de Helmholtz:

$$\bar{a}_g = \sum_{i=1}^N X_i \left[\bar{u}_i - T_i \left(\bar{s}_i^0 - R_0 \ln \left(\frac{X_i P}{P_{atm}} \right) \right) \right] \quad (\text{B.17})$$

onde \bar{s}_i é a entropia molar de cada espécie em estado padrão e P_{atm} é a pressão atmosférica.

B.2.2. Propriedades Específicas

- Fração de massa:

$$Y_i = X_i \frac{\bar{M}_i}{\bar{M}_g} \quad (\text{B.18})$$

- Calor específico a pressão constante:

$$C_{pg} = \frac{\bar{C}_{pg}}{\bar{M}_g} \quad (\text{B.19})$$

- Entalpia:

$$h_g = \frac{\bar{h}_g}{\bar{M}_g} \quad (\text{B.20})$$

- Calor específico a volume constante:

$$C_{vg} = \frac{\bar{C}_{vg}}{\bar{M}_g} \quad (\text{B.21})$$

- Entropia:

$$s_g = \frac{\bar{s}_g}{\bar{M}_g} \quad (\text{B.22})$$

- Energia interna:

$$u_g = \frac{\bar{u}_g}{\bar{M}_g} \quad (\text{B.23})$$

- Energia livre de Gibbs:

$$g_g = \frac{\bar{g}_g}{\bar{M}_g} \quad (\text{B.24})$$

- Energia livre de Helmholtz:

$$a_g = \frac{\bar{a}_g}{\bar{M}_g} \quad (\text{B.25})$$

A seguir serão obtidas expressões para as derivadas parciais das propriedades termodinâmicas. Derivando as equações (B.11) e (B.13), obtém-se:

- Derivadas em relação a Φ :

$$\frac{d\bar{M}_g}{d\Phi} = \sum_{i=1}^N \frac{dX_i}{d\Phi} \bar{M}_i \quad (\text{B.26})$$

$$\frac{d\bar{h}_g}{d\Phi} = \sum_{i=1}^N \frac{dX_i}{d\Phi} \bar{h}_i \quad (\text{B.27})$$

$$\frac{dh_g}{d\Phi} = \frac{\bar{M}_g \frac{d\bar{h}_g}{d\Phi} - \bar{h}_g \frac{d\bar{M}_g}{d\Phi}}{\bar{M}_g^2} \quad (\text{B.28})$$

- Derivadas em relação a T :

$$\frac{d\bar{M}_g}{dT} = \sum_{i=1}^N \frac{dX_i}{dT} \bar{M}_i \quad (\text{B.29})$$

$$\frac{d\bar{h}_g}{dT} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{dX_i}{dT} \bar{h}_i + \bar{C}_{pi} X_i \right) \quad (\text{B.30})$$

$$\frac{dh_g}{dT} = \frac{\bar{M}_g \frac{d\bar{h}_g}{dT} - \bar{h}_g \frac{d\bar{M}_g}{dT}}{\bar{M}_g^2} \quad (\text{B.31})$$

- Derivadas em relação a P :

$$\frac{d\bar{M}_g}{dP} = \sum_{i=1}^N \frac{dX_i}{dP} \bar{M}_i \quad (\text{B.32})$$

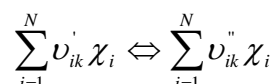
$$\frac{d\bar{h}_g}{dP} = \sum_{i=1}^N \frac{dX_i}{dP} \bar{h}_i \quad (\text{B.33})$$

$$\frac{dh_g}{dP} = \frac{\bar{M}_g \frac{d\bar{h}_g}{dP} - \bar{h}_g \frac{d\bar{M}_g}{dP}}{\bar{M}_g^2} \quad (\text{B.34})$$

B.3. Constantes de Equilíbrio

Algumas fórmulas para avaliar a constante de equilíbrio são apresentadas, as quais requerem o conhecimento das propriedades termodinâmicas.

Sejam um mecanismo químico de K reações reversíveis envolvendo N espécies, conforme a equação química:



para $(k = 1, \dots, K)$, e onde ν_{ik}' e ν_{ik}'' são os coeficientes estequiométricos dos reagentes e dos produtos respectivamente e χ_i é o símbolo químico da espécie i . Pode-se calcular a constante de equilíbrio K_{Pk} da seguinte maneira:

$$K_{Pk} = \exp\left(-\frac{\Delta \bar{g}_k^0}{R_0 T}\right) \quad (\text{B.35})$$

onde Δ é a variação da energia livre de Gibbs na k -ésima reação, calculada por:

$$\frac{\Delta \bar{g}_k^0}{R_0 T} = \sum_{i=1}^I \nu_{ik} \frac{\bar{g}_i^0}{R_0 T} \quad (\text{B.36})$$

onde $\nu_{ik} = \nu_{ik}'' - \nu_{ik}'$. A derivada dK_{Pk}/dT é dada por:

$$\frac{dK_{Pk}}{dT} = K_{Pk} \frac{\Delta \bar{h}_k^0}{R_0 T_k^2} \quad (\text{B.37})$$

APÊNDICE C

PROPRIEDADES DE TRANSPORTE

C.1. Propriedades de Transporte das Espécies

As propriedades de transporte das espécies são calculadas a partir de expressões da teoria cinética dos gases dadas por Hirschfelder (1954) e usadas no programa CHEMKIN.

O coeficiente de viscosidade η_i é obtido da expressão:

$$\eta_i = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi m_i k_B T_i}}{\pi \sigma_i^2 \Omega^{(2,2)*}} \quad (\text{C.1})$$

onde σ_i é o diâmetro de colisão de Lennard-Jones, m_i é a massa molecular, k_B é a constante de Boltzmann, T_i é a temperatura e $\Omega^{(2,2)*}$ é a integral de colisão para a viscosidade. O subíndice “i” é utilizado para indicar a cada espécie.

O valor da integral de colisão $\Omega^{(2,2)*}$ depende da temperatura reduzida T_i^* e do momento dipolo reduzido δ_i^* que é determinado por interpolação quadrática de tabelas baseadas no potencial de Stockmayer, dadas em Monchick e Mason (1961). Assim, a temperatura reduzida e o momento dipolo reduzido podem ser calculados a partir das seguintes equações:

$$T_i^* = \frac{k_B T_i}{\varepsilon_i} \quad (\text{C. 2})$$

$$\delta_i^* = \frac{1}{2} \frac{\mu_i^2}{\varepsilon_i \sigma_i^2} \quad (\text{C. 3})$$

onde ε_i é um parâmetro do potencial de Lennard-Jones e μ_i é o momento dipolo. Os parâmetros de Lennard-Jones ε_i/k_B , σ_i e μ_i para cada espécie em particular podem ser encontrados na Tabela C.1.

Os coeficientes de autodifusão D_{ii} são dados em termos da pressão e da temperatura como:

$$D_{ii} = \frac{3 \sqrt{\pi k_B^3 T_i^3 / m_i}}{8 P \pi \sigma_i^2 \Omega^{(1,1)*}} \quad (\text{C.4})$$

onde $\Omega^{(1,1)*}$ é a integral de colisão para o cálculo da difusividade dos gases (baseada no potencial de Stockmayer).

De acordo com Warnatz (1982) a condutividade térmica dos gases λ_i pode ser dividida em parcelas de energia translacional, rotacional e vibracional:

$$\lambda_i = \frac{\eta_i}{M_i} \left(\underbrace{f_{\text{trans.}} C_{v,\text{trans.}}}_{\text{Energia translac.}} + \underbrace{f_{\text{rot.}} C_{v,\text{rot.}}}_{\text{Energia rotac.}} + \underbrace{f_{\text{vib.}} C_{v,\text{vib.}}}_{\text{Energia vibrac.}} \right) \quad (\text{C.5})$$

onde $C_{v,\text{trans.}}$, $C_{v,\text{rot}}$ e $C_{v,\text{vib}}$ são as parcelas dos calores específicos molares devidas às energias translacional, rotacional e vibracional, respectivamente.

$$f_{\text{trans.}} = \frac{5}{2} \left(1 - \frac{2}{\pi} \frac{C_{v,\text{rot.}}}{C_{v,\text{trans.}}} \frac{A}{B} \right) \quad (\text{C.6})$$

$$f_{\text{rot.}} = \frac{\rho_i D_{ii}}{\eta_i} \left(1 + \frac{2}{\pi} \frac{A}{B} \right) \quad (\text{C.7})$$

$$f_{\text{vib.}} = \frac{\rho_i D_{ii}}{\eta_i} \quad (\text{C.8})$$

Nas equações acima, A e B são constantes que podem ser obtidas a partir das equações:

$$A = \frac{5}{2} - \frac{\rho_i D_{ii}}{\eta_i} \quad (\text{C.9})$$

$$B = Z_{\text{rot.}} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{5}{3} \frac{C_{v,\text{rot.}}}{R_0} + \frac{\rho_i D_{ii}}{\eta_i} \right) \quad (\text{C.10})$$

A densidade da espécie i pode ser calculada por:

$$\rho_i = \frac{P\bar{M}_i}{R_0T_i} \quad (\text{C.11})$$

O número de colisão de relaxação rotacional $Z_{\text{rot}}(298)$ é um parâmetro conhecido a 298 K e seus valores são dados na Tabela C.1. Uma expressão dependente da temperatura para $Z_{\text{rot}}(T_i)$ é dada por Parker (1959) e Brau e Jonkman (1970), podendo ser expressa como:

$$Z_{\text{rot}}(T_i) = Z_{\text{rot}}(298) \frac{F(298)}{F(T_i)} \quad (\text{C.12})$$

$$F(T_i) = 1 + \frac{\pi^{3/2}}{2} \left(\frac{\varepsilon_i/k_B}{T_i} \right)^{1/2} + \left(\frac{\pi^2}{4} + 2 \right) \left(\frac{\varepsilon_i/k_B}{T_i} \right) + \pi^{3/2} \left(\frac{\varepsilon_i/k_B}{T_i} \right)^{3/2} \quad (\text{C.13})$$

$$C_{\nu,\text{trans.}} = \frac{3}{2} R_0 \quad (\text{C.14})$$

As contribuições do calor específico molar $C_{\nu,\text{rot}}$ e $C_{\nu,\text{vib}}$ dependem de cada espécie em particular:

- Átomo simples (não há contribuições de C_{ν}):

$$C_{\nu,\text{rot.}} = 0 \quad (\text{C.15})$$

$$C_{\nu,\text{vib.}} = 0 \quad (\text{C.16})$$

- Molécula linear:

$$C_{\nu,\text{rot.}} = R_0 \quad (\text{C.17})$$

$$C_{\nu,\text{vib.}} = C_{\nu} - \frac{5}{2} R_0 \quad (\text{C.18})$$

- Molécula não-linear:

$$C_{v,\text{rot.}} = \frac{3}{2} R_0 \quad (\text{C.19})$$

$$C_{v,\text{vib.}} = C_v - 3R_0 \quad (\text{C.20})$$

onde C_v é o calor específico molar da espécie pura a volume constante.

C.2. Propriedades de Transporte da Mistura Gasosa

Para o cálculo das propriedades médias da mistura gasosa foram usadas fórmulas semi-empíricas dadas por Wilke (1950) e modificadas por Bird et al. (1960). Assim, pode-se calcular a viscosidade de uma mistura de gases η_g como:

$$\eta_g = \frac{\sum_{i=1}^I X_i \eta_i}{\sum_{j=i}^J X_j \Theta_{ij}} \quad (\text{C.21})$$

onde Θ_{ij} é dado por:

$$\Theta_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{\bar{M}_i}{\bar{M}_j} \right)^{-1/2} \left(1 + \left(\frac{\eta_i}{\eta_j} \right)^{1/2} \left(\frac{\bar{M}_j}{\bar{M}_i} \right)^{1/4} \right)^2 \quad (\text{C.22})$$

A expressão a seguir, apresentada por Mathur et al. (1967), foi usada no cálculo da condutividade térmica da mistura gasosa, λ_g :

$$\lambda_g = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^I X_i \lambda_i + \frac{1}{\sum_{i=1}^I X_i / \lambda_i} \right) \quad (\text{C.23})$$

A Tabela C.1, a seguir, apresenta parâmetros de Lennard-Jones extraídos do manual do programa CHEMKIN para o cálculo das propriedades de transporte.

A Tabela C.2 mostra alguns métodos de cálculo, descritos por Svehla (1962), para a obtenção de parâmetros de Lennard-Jones não encontrados no manual do CHEMKIN.

TABELA C.1 – Parâmetros de Lennard-Jones.

Nº	Nome	Formula	Geom.	ε/k_B (K)	σ (Å)	μ	α	Z_{rot}
1	Dióxido de carbono	CO ₂	1	244.00	3.763	0.000	2.65	2.10
2	Monóxido de carbono	CO	1	98.100	3.650	0.000	1.95	1.80
3	Água	H ₂ O	2	572.40	2.605	1.844	0.00	4.00
4	Hidrogênio molecular	H ₂	1	38.000	2.920	0.000	0.79	280
5	Oxigênio molecular	O ₂	1	107.40	3.458	0.000	1.60	3.80
6	Nitrogênio molecular	N ₂	1	97.530	3.621	0.000	1.76	4.00
7	Hidrogênio atômico	H	0	145.00	2.050	0.000	0.00	0.00
8	Radical hidróxido	OH	1	80.000	2.750	0.000	0.00	0.00
9	Oxigênio atômico	O	0	80.000	2.750	0.000	0.00	0.00
10	Monóxido de nitrogênio	NO	1	97.530	3.621	0.000	1.76	4.00
11	Nitrogênio atômico	N	0	71.400	3.298	0.000	0.00	0.00
12	Dióxido de nitrogênio	NO ₂	2	200.00	3.500	0.000	0.00	1.00
13	Óxido de dinitrogênio	N ₂ O	1	232.40	3.828	0.000	0.00	1.00
14	Tetróxido de dinitrogênio	N ₂ O ₄	2	335.35	3.877	0.000	0.00	1.00
15	Amidogen radical	NH ₂	2	80.000	2.650	0.000	2.26	4.00
16	Amoníaco	NH ₃	2	481.00	2.920	1.470	0.00	10.0
17	Carbono molecular	C ₂	1	97.530	3.621	0.000	1.76	4.00
18	Metil radical	CH	1	80.000	2.750	0.000	0.00	0.00
19	Trimetil radical	CH ₃	1	144.00	3.800	0.000	0.00	0.00
20	Radical cianídrico	CN	1	75.000	3.856	0.000	0.00	1.00
21	Formil	CHO	2	498.00	3.590	0.000	0.00	0.00
22	Ácido cianídrico	HCN	1	569.00	3.630	0.000	0.00	1.00
23	Radical peróxido	HO ₂	2	107.40	3.458	0.000	0.00	1.00
24	Peróxido de hidrogênio	H ₂ O ₂	2	107.40	3.458	0.000	0.00	3.80
25	Metano	CH ₄	2	141.40	3.746	0.000	2.60	13.0
26	n-Etano	C ₂ H ₆	2	252.30	4.302	0.000	0.00	1.50
27	n-Propano	C ₃ H ₈	2	266.80	4.982	0.000	0.00	1.00
28	n-Butano	C ₄ H ₁₀	2	318.90	5.375	0.000	0.00	1.00
29	n-Pentano	C ₅ H ₁₂	2	341.10	5.784	0.000	0.00	1.00
30	n-Hexano	C ₆ H ₁₄	2	399.30	5.949	0.000	0.00	1.00
31	n-Heptano	C ₇ H ₁₆	2	438.46	6.440	0.000	0.00	1.00
32	n-Octano	C ₈ H ₁₈	2	470.61	6.816	0.000	0.00	1.00
33	Metanol (CH ₃ OH)	CH ₄ O	2	481.80	3.626	0.000	0.00	1.00
34	Etanol (C ₂ H ₅ OH)	C ₂ H ₆ O	2	362.60	4.530	0.000	0.00	1.00
35	1-Propanol (C ₃ H ₇ OH)	C ₃ H ₈ O	2	576.70	4.549	0.000	0.00	1.00
36	2-Propanol (CH ₃) ₂ CHOH	C ₃ H ₈ O	2	400.60	5.085	0.000	0.00	1.00
37	Hidrazina	N ₂ H ₄	2	205.00	4.230	0.000	4.260	1.50
38	Metil-Hidrazina CH ₃ -NH-NH ₂ (MMH)	CH ₆ N ₂	2	425.50	4.610	0.000	0.00	1.50
39	(CH ₃) ₂ N-NH ₂ Dimetil-Hidrazina assimétrica (UDMH)	C ₂ H ₈ N ₂	2	393.68	4.926	0.000	0.00	1.00
40	CH ₃ NH-NHCH ₃ Dimetil- Hidrazina simétrica (SDMH)	C ₂ H ₈ N ₂	2	391.56	4.971	0.000	0.00	1.00
41	AIR \ N ₂ = 78.084 \ O ₂ = 20.9476 \ Ar = 0.9365 \ CO ₂ = 0.0319	Air	2	96.386	3.654	0.000	0.00	0.00
42	Argônio	Ar	0	136.50	3.330	0.000	0.00	0.00

FONTE: Chemkin (2002, cap. 6, p. 52).

Alguns dos parâmetros mostrados na Tabela C.1 foram obtidos de forma aproximada usando-se 4 métodos descritos por Svehla (1962). Estes métodos são apresentados a seguir:

1. Método de ajuste por mínimos quadrados usando dados de viscosidade experimentais para obter σ e ε/k .
2. Método usando constantes críticas para determinar σ .
3. Método da temperatura crítica para o cálculo de ε/k .
4. Método da temperatura de ebulição para o cálculo de ε/k .

TABELA C.2 – Métodos para a determinação de “ σ ” e “ ε/k ”.

Nº	Espécie	σ (A) - Método		ε/k (K) – Método			
		1	2	1	4	3	Valor médio
1	CH ₄	3.758	3.8599	148.6	131.7588	142.9500	137.3544
2	C ₂ H ₆	4.443	4.4280	215.7	217.8870	229.1250	223.5060
3	C ₃ H ₈	5.118	4.9447	237.1	272.7570	277.3500	275.0535
4	C ₄ H ₁₀	4.687	5.3754	531.4	321.7270	318.9000	320.3135
5	C ₅ H ₁₂	5.784	5.7808	341.1	365.6230	352.2000	358.9115
6	C ₆ H ₁₄	5.949	6.1499	399.3	393.4356	380.7750	387.1053
7	C ₇ H ₁₆	-	6.4402	-	438.4644	397.8000	418.1322
8	C ₈ H ₁₈	-	6.8158	-	470.6076	426.4500	448.5288
9	CH ₃ OH	3.626	4.4460	481.8	398.4388	384.4500	391.4444
10	C ₂ H ₅ OH	4.530	4.8237	362.6	414.8880	387.1500	401.0190
11	C ₃ H ₇ OH	-	5.2434	-	437.0130	402.5250	419.7690
12	(CH ₃) ₂ CHOH	-	5.0849	-	419.6670	381.5250	400.5960
13	N ₂ H ₄	4.230	3.9513	205.00	457.0730	489.7500	473.4115
14	MMH	-	4.6096	-	425.7440	425.2500	425.4970
15	UDMH	-	4.9263	-	395.8546	391.5000	393.6773
16	SDMH	-	4.9707	-	393.1170	390.0000	391.5585
17	N ₂ O ₄	-	3.8772	-	347.4510	323.2500	335.3505
18	Air	-	3.6541	-	93.3970	99.3750	96.3860

FONTE: Svehla (1962, p. 25).

$$\sigma = \left[\frac{3(17.28) T_c}{2\pi N P_c} \right]^{1/3} \quad (\text{Método-2})$$

$$\varepsilon/k = 0.75T_c \quad (\text{Método-3})$$

$$\varepsilon/k = 1.18T_b \quad (\text{Método-4})$$

onde T_c : temperatura crítica, (K);

T_b : temperatura de ebulição, (K);

P_c : pressão crítica, (atm);

N : número de Avogadro, 6.023×10^{23} .

APÊNDICE D

EMISSIVIDADE DE UMA MISTURA DE GASES

1. Emissividade Total de uma Mistura de Gases

A emissividade total de uma mistura de gases é uma função do comprimento característico L , da temperatura do gás T_g , da pressão parcial do gás P_i e da pressão total do gás P_g . Expressões para as emissividades totais do CO_2 e H_2O podem ser calculadas a partir das fórmulas dadas por Leckner (1972). Leckner considera que o CO_2 e H_2O são os gases que emitem mais quantidade de calor por radiação em relação a outros menos radioativos e por tanto devem de ser levados em conta:

$$\varepsilon(P_i, L, P_g, T_g) = \underbrace{\varepsilon_0(P_i, L, T_g)}_{\substack{\text{emissividade no estado} \\ \text{de referência (P=1 atm)}}} \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \right) (P_i, L, P_g, T_g) \quad (\text{D.1})$$

onde ε_0 é a emissividade total no estado de referência (P=1 atm) e $(\varepsilon/\varepsilon_0)$ é o fator de correção de pressão. A definição de cada um deles é apresentada a seguir:

$$\varepsilon_0 = \exp \left[\sum_{i=0}^M \sum_{j=0}^N c_{ji} \left(\frac{T_g}{T_0} \right)^j \left(\log_{10} \frac{P_i L}{(P_i L)_0} \right)^i \right] \quad (\text{D.2})$$

$$\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \right) = \left[1 - \frac{(a-1)(1-P_E)}{a+b+P_E-1} \exp \left(-c \left[\log_{10} \frac{(P_i L)_m}{P_i L} \right]^2 \right) \right] \quad (\text{D.3})$$

onde as constantes de correlação a , b , c , c_{ji} , P_g , $(P_i L)_0$, $(P_i L)_m$ e T_0 são dadas na Tabela D.1 para vapor de água e dióxido de carbono.

TABELA D.1 – Constantes de correlação para a determinação da emissividade total do vapor da água e do dióxido de carbono.

Gás	Vapor da água	Dióxido de carbono
M,N	2,2	2,3
$c_{00} \dots c_{N1}$	-2.2118 -1.1987 0.035596	-3.9893 2.7669 -2.1081 0.39163
$\vdots \quad \ddots \quad \vdots$	0.85667 0.93048 -0.14391	1.2710 -1.1090 1.0195 -0.21897
$c_{0M} \dots c_{NM}$	-0.10838 -0.17156 0.045915	-0.23678 0.19731 -0.19544 0.044644
P_E	$(P_g + 2.56P_i/\sqrt{t})/P_0$	$(P_g + 0.28P_i)/P_0$
$(P_iL)_m/(P_iL)_0$	$13.2t^2$	$0.054/t^2, t < 0.7$ $0.225/t^2, t > 0.7$
a	$2.144, \quad t < 0.75$ $1.88 - 2.053 \log_{10} t, \quad t > 0.75$	$1 + 0.1/t^{1.45}$
b	$1.10/t^{1.4}$	0.23
c	0.5	1.47
Nota: $T_0 = 1000$ K, $P_0 = 1$ bar, $t = T/T_0$, $(P_iL)_0 = 1$ bar cm.		

FONTE: Leckner (1972, p. 33).

Sabendo que o CO₂ e a H₂O são as espécies que emitem maior quantidade de calor por radiação, pode-se definir a emissividade do gás formada a partir da mistura de ambas espécies como:

$$\varepsilon_g = \varepsilon_{CO_2} + \varepsilon_{H_2O} - \Delta\varepsilon \quad (D.4)$$

onde as emissividades ε_{CO_2} e ε_{H_2O} são calculadas da equação (D.1) e $\Delta\varepsilon$ é o fator de correção introduzido pelos efeitos de sobreposição entre as bandas de H₂O e CO₂, e é definido como:

$$\Delta\varepsilon = \left(\frac{\zeta}{10.7+101\zeta} - 0.0089\zeta^{10.4} \right) \left(\log_{10} \frac{(P_{H_2O} + P_{CO_2})L}{(P_i L)_0} \right)^{2.76} \quad (D.5)$$

$$\zeta = \frac{P_{H_2O}}{P_{H_2O} + P_{CO_2}} \quad (D.6)$$

As pressões parciais P_{H_2O} e P_{CO_2} são calculadas a partir da pressão total do gás e das frações molares conhecidas anteriormente. O comprimento característico L é a razão entre o volume ocupado pelo gás emitindo radiação (volume da câmara) à superfície que está sendo irradiada (área superficial interna da câmara de combustão), e pode ser representado da seguinte maneira para um cilindro:

$$L = 0.9 \left(\frac{4V}{A} \right) = 0.9 \left(\frac{4 \frac{\pi D_c^2}{4} \Delta x}{\pi D_c \Delta x} \right) = 0.9 D_c \quad (D.7)$$

onde D_c é o diâmetro da câmara de combustão.

APÊNDICE E

PROPRIEDADES DE SATURAÇÃO

TABELA E.1 – Oxigênio (Fase líquida).

T (K)	P (MPa)	ρ (kg/m ³)	h (kJ/kg)	h _{fg} (kJ/kg)	C _p (kJ/kg.K)	η (Pa.s)	λ (W/m.K)	τ (N/m)
54.361	0.00014628	1306.1	-193.61	242.7170	1.6732	0.00090927	0.20075	0.022679
59.361	0.00061549	1284.8	-185.26	238.8740	1.6727	0.00067257	0.19484	0.021297
64.361	0.0020334	1262.6	-176.88	234.9700	1.6769	0.00051513	0.18826	0.019932
69.361	0.0055687	1239.9	-168.49	231.0190	1.6781	0.00040707	0.18138	0.018585
74.361	0.013153	1216.9	-160.10	227.0020	1.6786	0.00033051	0.17436	0.017255
79.361	0.027602	1193.5	-151.69	222.8520	1.6810	0.00027462	0.16724	0.015943
84.361	0.052642	1169.7	-143.26	218.5040	1.6869	0.00023268	0.16006	0.014652
89.361	0.092853	1145.3	-134.78	213.8620	1.6972	0.00020043	0.15282	0.013382
94.361	0.15355	1120.2	-126.22	208.8330	1.7127	0.00017507	0.14553	0.012133
99.361	0.24065	1094.3	-117.57	203.3500	1.7343	0.00015473	0.13825	0.010908
104.36	0.36051	1067.3	-108.77	197.2980	1.7632	0.00013812	0.13088	0.0097078
109.36	0.51984	1039.2	-99.802	190.6030	1.8012	0.00012432	0.12345	0.0085348
114.36	0.72559	1009.5	-90.610	183.1480	1.8511	0.00011263	0.11595	0.0073910
119.36	0.98490	978.03	-81.139	174.7990	1.9172	0.00010255	0.10838	0.0062792
124.36	1.3052	944.24	-71.310	165.3730	2.0069	9.3667e-05	0.10076	0.0052029
129.36	1.6940	907.44	-61.018	154.6170	2.1335	8.5624e-05	0.093100	0.0041667
134.36	2.1596	866.58	-50.102	142.1410	2.3229	7.8100e-05	0.085465	0.0031765
139.36	2.7107	819.80	-38.291	127.2910	2.6355	7.0749e-05	0.077994	0.0022410
144.36	3.3576	763.39	-25.061	108.7960	3.2459	6.3098e-05	0.071007	0.0013742
149.36	4.1133	687.79	-9.0851	83.4041	4.9758	5.4220e-05	0.065359	0.00060221
154.36	5.0001	512.24	20.827	25.3300	112.00	3.7441e-05	0.073759	1.2329e-05

TABELA E.2 – Hidrogênio (Fase líquida).

T (K)	P (MPa)	ρ (kg/m ³)	h (kJ/kg)	h _{fg} (kJ/kg)	C _p (kJ/kg.K)	η (Pa.s)	λ (W/m.K)	τ (N/m)
13.957	0.0077031	76.903	-51.658	449.0880	7.7651	2.5463e-05	0.076293	0.0030028
14.957	0.013150	76.041	-44.230	450.8109	7.1581	2.2332e-05	0.083818	0.0028368
15.957	0.021125	75.155	-36.960	452.0200	7.2828	1.9878e-05	0.089850	0.0026714
16.957	0.032286	74.232	-29.367	452.4571	7.6959	1.7892e-05	0.094605	0.0025067
17.957	0.047333	73.263	-21.254	451.8640	8.2306	1.6246e-05	0.098270	0.0023425
18.957	0.066999	72.240	-12.531	450.0109	8.8241	1.4854e-05	0.10100	0.0021791
19.957	0.092040	71.158	-3.1509	446.7809	9.4563	1.3655e-05	0.10294	0.0020164
20.957	0.12322	70.007	6.9257	442.0749	10.127	1.2607e-05	0.10420	0.0018546
21.957	0.16134	68.781	17.739	435.7510	10.848	1.1679e-05	0.10485	0.0016936
22.957	0.20717	67.470	29.339	427.6537	11.640	1.0845e-05	0.10498	0.0015335
23.957	0.26152	66.060	41.794	417.6160	12.534	1.0088e-05	0.10463	0.0013744
24.957	0.32522	64.536	55.195	405.4158	13.575	9.3913e-06	0.10383	0.0012164
25.957	0.39908	62.876	69.669	390.6210	14.833	8.7421e-06	0.10259	0.0010597
26.957	0.48397	61.048	85.393	372.7885	16.423	8.1291e-06	0.10091	0.00090443
27.957	0.58080	59.009	102.62	351.6400	18.548	7.5409e-06	0.098758	0.00075074
28.957	0.69052	56.689	121.76	326.3489	21.617	6.9656e-06	0.096065	0.00059896
29.957	0.81424	53.967	143.50	293.7300	26.595	6.3873e-06	0.092709	0.00044952

TABELA E.3 – Heptano (Fase líquida).

T (K)	P (MPa)	ρ (kg/m ³)	h (kJ/kg)	h_{fg} (kJ/kg)	Cp (kJ/kg.K)	η (Pa.s)	λ (W/m.K)	τ (N/m)
182.55	1.7549e-07	776.13	-415.37	441.1830	1.9622	0.0038571	0.15574	0.033097
192.55	7.8664e-07	767.56	-395.70	433.8300	1.9730	0.0027242	0.15481	0.031897
202.55	2.9733e-06	759.08	-375.90	426.6860	1.9860	0.0020201	0.15343	0.030710
212.55	9.7235e-06	750.69	-355.97	419.7490	2.0016	0.0015570	0.15171	0.029536
222.55	2.8092e-05	742.35	-335.86	412.9730	2.0197	0.0012379	0.14972	0.028375
232.55	7.2944e-05	734.05	-315.57	406.3630	2.0406	0.0010093	0.14755	0.027227
242.55	0.00017266	725.78	-295.04	399.8700	2.0642	0.00084015	0.14523	0.026092
252.55	0.00037704	717.51	-274.27	393.4900	2.0905	0.00071142	0.14281	0.024971
262.55	0.00076716	709.24	-253.22	387.1900	2.1194	0.00061113	0.14032	0.023863
272.55	0.0014669	700.95	-231.87	380.9500	2.1507	0.00053138	0.13778	0.022768
282.55	0.0026549	692.61	-210.20	374.7600	2.1842	0.00046682	0.13522	0.021687
292.55	0.0045769	684.23	-188.18	368.5800	2.2199	0.00041373	0.13265	0.020619
302.55	0.0075561	675.78	-165.79	362.3800	2.2574	0.00036948	0.13009	0.019564
312.55	0.012002	667.24	-143.02	356.1500	2.2968	0.00033213	0.12754	0.018523
322.55	0.018419	658.60	-119.84	349.8300	2.3377	0.00030026	0.12500	0.017497
332.55	0.027404	649.85	-96.247	343.4270	2.3801	0.00027280	0.12250	0.016484
342.55	0.039654	640.96	-72.218	336.8780	2.4239	0.00024892	0.12002	0.015486
352.55	0.055964	631.91	-47.742	330.1820	2.4690	0.00022798	0.11757	0.014502
362.55	0.077217	622.68	-22.805	323.2750	2.5153	0.00020949	0.11515	0.013533
372.55	0.10439	613.25	2.6040	316.1460	2.5629	0.00019303	0.11276	0.012580
382.55	0.13853	603.57	28.499	308.7510	2.6118	0.00017828	0.11039	0.011642
392.55	0.18079	593.63	54.892	301.0580	2.6622	0.00016498	0.10805	0.010720
402.55	0.23235	583.38	81.799	293.0010	2.7142	0.00015291	0.10573	0.0098156
412.55	0.29451	572.77	109.23	284.5500	2.7681	0.00014189	0.10343	0.0089284
422.55	0.36860	561.75	137.22	275.6300	2.8244	0.00013175	0.10113	0.0080595
432.55	0.45604	550.23	165.77	266.1900	2.8837	0.00012238	0.098823	0.0072098
442.55	0.55831	538.15	194.92	256.1300	2.9471	0.00011364	0.096507	0.0063804
452.55	0.67698	525.37	224.70	245.3400	3.0158	0.00010543	0.094161	0.0055726
462.55	0.81373	511.74	255.16	233.6700	3.0921	9.7654e-05	0.091765	0.0047882
472.55	0.97034	497.06	286.37	220.9400	3.1796	9.0210e-05	0.089292	0.0040291
482.55	1.1488	481.02	318.41	206.8900	3.2843	8.2992e-05	0.086703	0.0032980
492.55	1.3512	463.15	351.42	191.1100	3.4175	7.5881e-05	0.083940	0.0025983
502.55	1.5802	442.70	385.65	172.9700	3.6035	6.8714e-05	0.080908	0.0019348
512.55	1.8386	418.28	421.50	151.4100	3.9038	6.1246e-05	0.077438	0.0013144
522.55	2.1301	386.81	459.90	124.2200	4.5315	5.3001e-05	0.073167	0.00074870
532.55	2.4585	339.03	503.70	85.5300	6.8764	4.2742e-05	0.067054	0.00026164

FONTE: NIST (2003).

**PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS E DE TRANSPORTE EM FUNÇÃO
DA TEMPERATURA PARA ALGUNS PROPELENTES**

Tetróxido de Nitrogênio (N₂O₄)

Densidade do líquido ρ_l entre 288 e 345 K :

$$\rho_l = 2215.3 - 2.6209T \quad \text{kg/m}^3, (T = \text{K}) \quad (\text{E.1})$$

Derivada da densidade em relação a T :

$$\frac{d\rho_l}{dT} = -2.6209 \quad \text{kg/m}^3\text{K} \quad (\text{E.2})$$

O calor específico a pressão constante C_{pl} é obtido usando a equação de Shomate onde as constantes desta equação assim como da entalpia do líquido foram extraídas do “site” do NIST e é válida no intervalo de temperaturas de 298 a 500 K.

$$C_{pl} = \frac{1}{M_v} (a + bt + ct^2 + et^{-2}) \quad \text{kJ/kg.K} \quad (\text{E.3})$$

Entalpia específica h_l entre 298 a 500 K :

$$h_l = \frac{1000}{M_v} \left(at + b \frac{t^2}{2} + c \frac{t^3}{3} + d \frac{t^4}{4} - et^{-1} + f + h_{l,298.15}^0 \right) \quad \text{kJ/kg} \quad (\text{E.4})$$

onde t é um parâmetro adimensional dado por :

$$t = \frac{T}{1000}, (T = \text{K})$$

$a = 89.1631$; $b = 178.9141$; $c = 0.929459$; $e = -0.007107$; $ef = -34.56816$.

$h_{l,298.15}^0 = -19.564 \quad \text{kJ/kmol}$.

Viscosidade η_l , para condições do ambiente $T = 20^\circ\text{C}$ e $P = 1\text{ atm}$.

$$\eta_l = 0.4 \times 10^{-3} \text{ Pa.s} \quad (\text{E.5})$$

Tensão superficial τ_l , para condições do ambiente $T = 25^\circ\text{C}$ e $P = 1\text{ atm}$.

$$\tau_l = 0.0265 \text{ N/m} \quad (\text{E.6})$$

Condutividade térmica λ_l , para condições do ambiente $T = 55^\circ\text{C}$ e $P = 1\text{ atm}$.

$$\lambda_l = 3.6319 \times 10^{-3} \text{ W/m.K} \quad (\text{E.7})$$

Hidrazina (N_2H_4)

Densidade do líquido ρ_l , entre 288 e 640 K :

$$\rho_l = 1766.8 - 1536.1\theta - 971.5(1-\theta)^2 \text{ kg/m}^3 \quad (\text{E.8})$$

Derivada da densidade em relação a T :

$$\frac{d\rho_l}{dT} = \frac{1}{T_c} (406.9 - 1943\theta) \text{ kg/m}^3\text{K} \quad (\text{E.9})$$

onde θ é a razão entre a temperatura T e a temperatura crítica T_c , dada por:

$$\theta = \frac{T}{T_c}, \quad (T = \text{K})$$

Calor específico a pressão constante (Equação de Shomate) C_{pl} , entre 298 e 800 K :

$$C_{pl} = \frac{1}{M_v} \left(a + bt + ct^2 + dt^3 + et^{-2} \right) \text{ kJ/kgK} \quad (\text{E.10})$$

Entalpia específica h_l , entre 298 e 800 K :

$$h_l = \frac{1000}{M_v} \left(at + b \frac{t^2}{2} + c \frac{t^3}{3} + d \frac{t^4}{4} - et^{-1} + f + h_{l,298.15}^\circ \right) \text{ kJ/kg} \quad (\text{E.11})$$

$a = 48.1778; b = 170.486; c = -100.834; d = 45.1135; e = 0.67429; f = -18.8833.$

$$h_{l,298.15}^0 = 50.63 \text{ kJ/kmol.}$$

Viscosidade η_l , entre 270 e 450 K :

$$\log_{10} \eta_l = 0.1788 - 0.015384T + 1.5395 \times 10^{-5} T^2 \text{ Pa.s, (T = K)} \quad (\text{E.12})$$

Tensão superficial τ_l , entre 294 e 313 K :

$$\tau_l = 0.139903 - 0.24637 \times 10^{-3} T \text{ N/m, (T = K)} \quad (\text{E.13})$$

Condutividade térmica λ_l , entre 273 e 520 K :

$$\lambda_l = 8.8144 \times 10^{-2} + 2.7422 \times 10^{-3} T - 4.6773 \times 10^{-6} T^2 \text{ W/m.K, (T = K)} \quad (\text{E.14})$$

MMH (CH_6N_2)

Densidade do líquido ρ_l , entre 350 e 560 K :

$$\rho_l = 1150.34 - 0.9395T \text{ kg/m}^3, \text{ (T = K)} \quad (\text{E.15})$$

Derivada da densidade em relação a T :

$$\frac{d\rho_l}{dT} = -0.9395 \text{ kg/m}^3\text{K, (T = K)} \quad (\text{E.16})$$

Calor específico a pressão constante C_{pl} , entre 274 e 400 K :

$$C_{pl} = 2.7313 - 7.2316 \times 10^{-5} T + 1.6377 \times 10^{-6} T^2 \text{ kJ/kg, (T = K)} \quad (\text{E.17})$$

Entalpia específica h_l , entre 274 e 400 K :

$$h_l = 2.7313T - 7.2316 \times 10^{-5} \frac{T^2}{2} + 1.6377 \times 10^{-6} \frac{T^3}{3} + 825.16 + h_{l,298}^0 \text{ kJ/kg} \quad (\text{E.18})$$

onde $h_{i,298.15}^0 = 1175.122$ kJ/kg.

Viscosidade η_l , entre 220 e 370 K :

$$\log_{10} \eta_l = -10.9944 + 6123.96T^{-1} - 1.7458 \times 10^{-6} T^{-2} + 1.8509 \times 10^{-8} T^{-3} \quad \text{Pa.s, } (T = \text{K}) \quad (\text{E.19})$$

Tensão superficial τ_l , entre 270 e 350 K :

$$\tau_l = 0.06348 - 9.9944 \times 10^{-5} T \quad \text{N/m, } (T = \text{K}) \quad (\text{E.20})$$

Condutividade térmica λ_l , entre 256 e 325 K :

$$\lambda_l = 8.8144 \times 10^{-2} + 2.7422 \times 10^{-3} T - 4.6773 \times 10^{-6} T^2 \quad \text{W/m.K, } (T = \text{K}) \quad (\text{E.21})$$

UDMH ($\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2$)

Densidade do líquido ρ_l , entre 370 e 520 K :

$$\rho_l = 1060.41 - 0.7751T - 4.8648 \times 10^{-4} T^2 \quad \text{kg/m}^3, (T = \text{K}) \quad (\text{E.22})$$

Derivada da densidade em relação a T :

$$\frac{d\rho_l}{dT} = -0.7751 - 8.8648 \times 10^{-4} T \quad \text{kg/m}^3\text{K, } (T = \text{K}) \quad (\text{E.23})$$

Calor específico a pressão constante C_{pl} :

$$C_{pl} = 1.7033 + 3.6978 \times 10^{-3} T \quad \text{kJ/kg, } (T = \text{K}) \quad (\text{E.24})$$

Entalpia específica h_l :

$$h_l = 1.7033T + 3.6978 \times 10^{-3} \frac{T^2}{2} + 671.773 + h_{i,298}^0 \quad \text{kJ/kg} \quad (\text{E.25})$$

onde $h_{l,298.15}^0 = 803.68196$ kJ/kg

Viscosidade η_l , entre 210 e 340 K :

$$\log_{10} \eta_l = -3.25411 - 623.532T^{-1} + 181151.8T^{-2} \text{ Pa.s, } (T = \text{K}) \quad (\text{E.26})$$

Tensão superficial τ_l , entre 270 e 350 K :

$$\tau_l = 0.056705 - 4.2622 \times 10^{-4} T \text{ N/m, } (T = \text{K}) \quad (\text{E.27})$$

Condutividade térmica λ_l , entre 279 e 306 K :

$$\lambda_l = 2.8441 \times 10^{-1} - 4.2622 \times 10^{-4} T \text{ W/m.K, } (T = \text{K}) \quad (\text{E.28})$$

A pressão de vapor P_v (kPa) para cada um dos propelentes é calculada usando a equação de Antoine.

$$\log_{10} P_v = A - \frac{B}{T + C}, (T = \text{K}) \quad (\text{E.29})$$

as constantes da equação de Antoine são apresentadas na Tabela E.4.

A entalpia de vaporização h_{fg} pode ser calculada a partir da equação de Haggmacher (1946), que é uma combinação da equação de Antoine e da equação de Clausius-Clapeyron. Esta expressão é usada para os propelentes N_2O_4 , N_2H_4 , MMH e UDMH.

$$h_{fg} = \frac{BR_v T^2 \log_{10} e}{(T + C)^2} \left[1 - \left(\frac{T_c}{T} \right)^3 \left(\frac{P_v}{P_c} \right) \right]^{1/2} \text{ kJ/kg, } (T = \text{K}) \quad (\text{E.30})$$

onde B e C são as constantes da equação de Antoine e T_c e P_c são a temperatura e pressão críticas do propelente apresentados no Apêndice F.

$$R_v = \frac{R_0}{M_v}; R_0 = 8.3145 \text{ kJ/kmol.K}$$

onde \bar{M}_v é a massa molar do propelente (kg/kmol).

As propriedades termodinâmicas e de transporte para todas as hidrazinas (N₂H₄, MMH e USMD) foram extraídas do Manual de hidrazinas dado por Schmidt (1984).

TABELA E.4 – Constantes da equação de Antoine

Espécie	N ₂ O ₄	N ₂ H ₄	MMH	UDMH
T (K)	[264 - 321] K	[270 - 653] K	[275 - 567] K	[275 - 522] K
Const.				
A	8.2431	6.8413	6.4899	6.7474
B	1921.8	1594	1354.9	1478.9
C	13.788	-57.383	-59.3457	-25.3076

FONTE: NIST (2003] < <http://webbook.nist.gov/chemistry/>>

APÊNDICE F

PROPRIEDADE CRÍTICAS

TABELA F.1 – Propriedades críticas das espécies.

Nº	Fórmula	Massa molar	T _{boil} (P = 1atm)		T _c K	P _c		V _c ml/mol
			°C	K		atm	MPa	
1	CO ₂	44.0095	-78.5	194.65	304.13	72.79	7.375	94.00
2	CO	28.0101	-191.45	81.70	132.91	34.53	3.499	93.00
3	H ₂ O	18.0153	100.00	373.15	647.40	218.30	22.12	56.00
4	H ₂	2.0159	-252.78	20.37	33.23	12.80	1.296	65.00
5	O ₂	31.9988	-182.82	90.33	154.60	49.80	5.046	73.40
6	N ₂	28.0135	-195.78	77.37	126.20	33.50	3.394	89.50
7	H	1.0079	-	-	-	-	-	-
8	OH	17.0073	-	-	-	-	-	-
9	O	15.9994	-	-	-	-	-	-
10	NO	30.0061	-151.78	121.37	180.30	64.60	6.546	58.00
11	N	14.0067	-	-	-	-	-	-
12	NO ₂	46.0055	-	-	-	-	-	-
13	N ₂ O	44.0129	-88.50	184.65	309.60	71.60	7.25	97.40
14	N ₂ O ₄	92.0111	21.30	294.50	431.00	101.30	10.26	167.30
15	NH ₂	16.0226	-	-	-	-	-	-
16	NH ₃	17.0306	-33.50	239.65	405.60	111.30	11.28	72.50
17	C ₂	24.0214	-	-	-	-	-	-
18	CH	13.0186	-	-	-	-	-	-
19	CH ₃	15.0345	-	-	-	-	-	-
20	CN	26.0174	-	-	-	-	-	-
21	CHO	29.0180	-	-	-	-	-	-
22	HCN	27.0254	-	-	-	-	-	-
23	HO ₂	33.0067	-	-	-	-	-	-
24	H ₂ O ₂	34.0147	150.25	423.40	728.00	217.12	22.00	-
25	CH ₄	16.0425	-161.49	111.66	190.60	45.40	4.600	99.00
26	C ₂ H ₆	30.0690	-88.50	184.65	305.50	48.20	4.880	148.00
27	C ₂ H ₈	44.0956	-42.00	231.15	369.80	41.90	4.246	203.00
28	C ₄ H ₁₀	58.1222	-0.50	272.65	425.20	37.50	3.800	255.00
29	C ₅ H ₁₂	72.1488	36.07	309.22	469.60	33.30	3.370	304.00
30	C ₆ H ₁₄	86.1754	68.74	341.89	507.70	29.90	3.030	370.00
31	C ₇ H ₁₆	100.2019	98.43	371.58	540.20	27.00	2.736	432.00
32	C ₈ H ₁₈	114.2285	125.67	398.82	568.60	24.60	2.493	492.00
33	CH ₄ O	32.0419	64.51	337.66	512.60	79.90	8.096	118.00
34	C ₂ H ₆ O	46.0684	78.45	351.60	516.20	63.00	6.383	167.00
35	C ₃ H ₈ O	60.0950	97.20	370.35	536.70	51.00	5.168	218.50
36	C ₃ H ₈ O	60.0950	82.50	355.65	508.71	53.00	5.370	220.00
37	N ₂ H ₄	32.0452	113.50	386.65	653.00	145.00	14.69	96.10
38	CH ₆ N ₂	46.0718	90.90	364.05	567.00	79.30	8.035	271.0
39	C ₂ H ₈ N ₂	60.0984	63.00	336.10	522.00	59.81	6.06	-
40	C ₂ H ₈ N ₂	60.0984	60.00	303.00	-	-	-	-
41	Air	28.9652	-194.00	79.15	132.50	37.20	3.77	92.70
42	Ar	39.9480	-185.89	87.26	150.70	48.00	4.86	74.90

FONTE: CRC Handbook of Chemistry and Physics (2002, Cap. 6, p. 48)