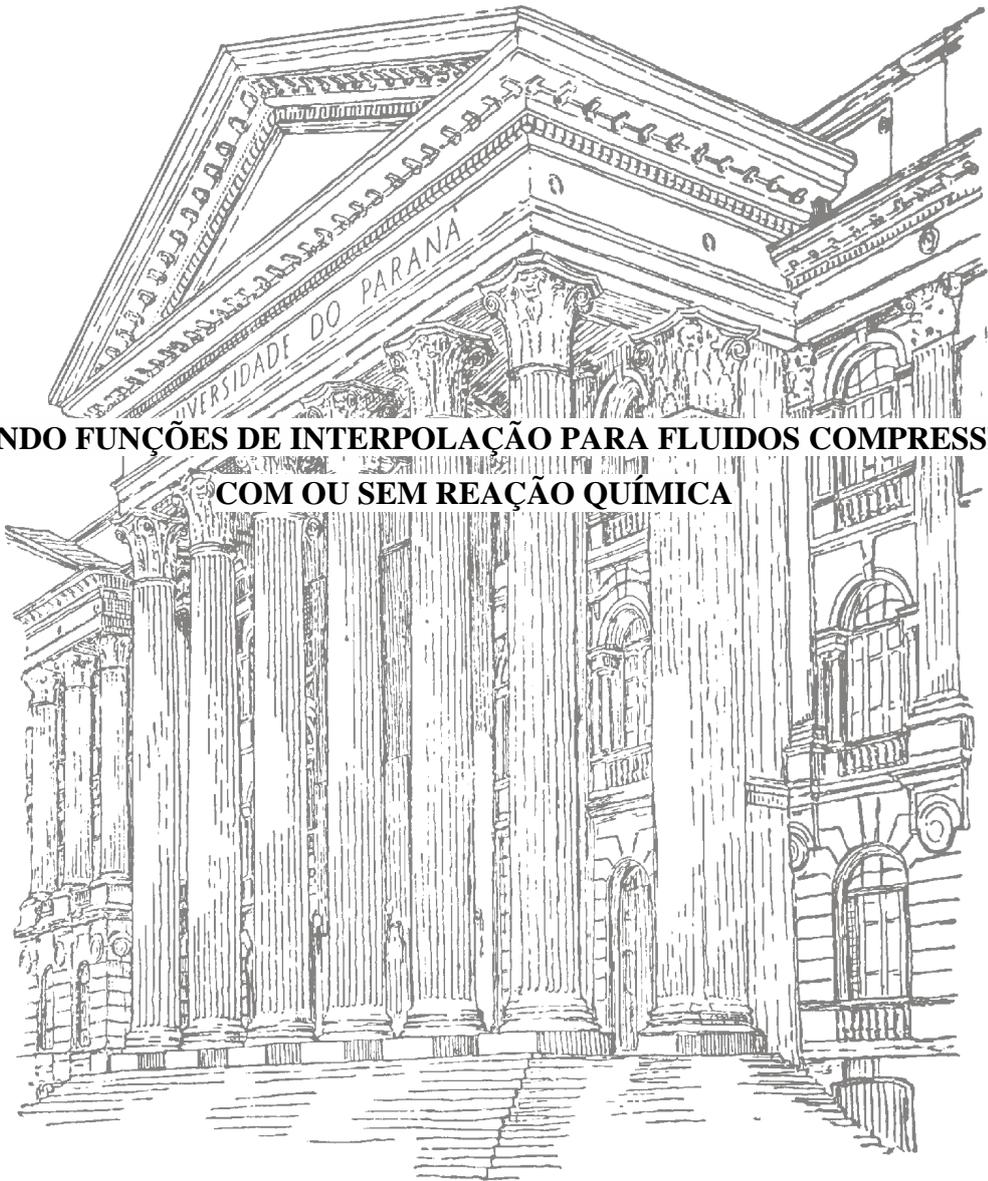


UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

GABRIEL VERGARA

**APLICANDO FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO PARA FLUIDOS COMPRESSÍVEIS  
COM OU SEM REAÇÃO QUÍMICA**



**CURITIBA**

**2017**

GABRIEL VERGARA

APLICANDO FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO PARA FLUIDOS COMPRESSÍVEIS  
COM OU SEM REAÇÃO QUÍMICA

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki

**CURITIBA**

**2017**

---

V494a

Vergara, Gabriel

Aplicando funções de interpolação para fluidos compressíveis com ou sem reação química / Gabriel Vergara. – Curitiba, 2017.

155 f. : il. color. ; 30 cm.

Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 2017.

Orientador: Luciano Kiyoshi Araki.

1. Engenharia mecânica. 2. Propriedades constantes. 3. TVD. 4. Motor-Foguete. I. Universidade Federal do Paraná. II. Araki, Luciano Kiyoshi. III. Título.

CDD: 620.1064

---

## TERMO DE APROVAÇÃO

GABRIEL VERGARA

### APLICANDO FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO PARA FLUIDOS COMPRESSÍVEIS COM OU SEM REAÇÃO QUÍMICA

Dissertação aprovada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica do Curso de Mestrado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Paraná, na área de concentração Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos.

Banca Examinadora:

  
Prof<sup>ª</sup>. Dr<sup>ª</sup>. Viviana Cocco Mariani  
PUC-PR

  
Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi  
UFPR

  
Prof. Dr. Eduardo Matos Germer  
UTFPR

Curitiba, 04 de março de 2016.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço aos meus pais, companheira, amigos e amigas que de alguma maneira contribuíram para a realização deste trabalho bem como de todo o caminho trilhado para chegar até este momento.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki por todo o apoio e conhecimento a mim fornecidos não somente no escopo deste trabalho como também em todas as disciplinas ministradas durante o mestrado. Ao grupo de pesquisa de CFD, Propulsão e Aerodinâmica de Foguetes da UFPR liderado pelo Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi por toda a estrutura fornecida e conhecimentos passados. Aos meus amigos do LENA pela amizade e força durante todo o mestrado.

Agradeço também aos professores da banca: Carlos Henrique Marchi da Universidade Federal do Paraná, Eduardo Matos Germer da Universidade Tecnológica Federal do Paraná e Viviana Cocco Mariani da Pontifícia Universidade Católica do Paraná pelo tempo dedicado a leitura e contribuições a este trabalho.

## RESUMO

O presente trabalho aborda um estudo de diferentes funções de interpolação numérica para escoamentos com ou sem reações químicas, onde pode se incluir casos de descontinuidades (choques) para aplicação de motor foguete utilizando o método de volumes finitos, malha estruturada não uniforme de faces centradas, arranjo co-localizado de variáveis, solução segregada, acoplamento pressão-velocidade via SIMPLEC (*Semi Implicit Linked Equations Consistent*) e técnicas de verificação numérica. Neste trabalho, foca-se implementar no código Mach1D diferentes funções de interpolação considerando o evento do choque, portanto, tem-se como premissa a busca por esquemas numéricos que não apresentem oscilação numérica ou que tal característica seja mínima. Deste modo, optou-se como foco de estudo a família de funções de interpolação TVD (*Total Variation Diminishing*) que surgiram no escopo da dinâmica dos fluidos computacional como esquemas que de um modo geral, atendem o requisito proposto. Além da aplicação de diferentes funções de interpolação, busca-se utilizar estas funções em diferentes modelos físicos (e matemáticos) como: escoamento monoespécie com propriedades constantes, escoamento congelado e escoamento em equilíbrio químico local.

De modo geral, dois problemas são propostos: Euler unidimensional sem descontinuidades e com descontinuidades. Para o primeiro problema mencionado sete diferentes esquemas de interpolação foram estudados: UDS (*Upstream Differencing Scheme*), CDS (*Central Differencing Scheme*), TVD Min-Mod, TVD Superbee, TVD Chakravarthy & Osher, TVD Smart e TVD Sweby. Além de diferentes esquemas numéricos, dois modelos físicos (e matemáticos) foram testados: escoamento congelado e escoamento em equilíbrio químico local. Por sua vez, para o segundo problema trabalha-se com quatro funções de interpolação, sendo três da família TVD. Em comum a ambos os problemas, utilizou-se como malha mais grossa 50 volumes e ordem de refino igual a 2 ( $q = 2$ ), atingindo como malha mais fina 12800 volumes.

Em linhas gerais, obtiveram-se resultados satisfatórios em relação às funções de interpolação TVD, sobretudo, o TVD Smart e o TVD Min-Mod, em se tratando de modelos com reação química. Enquanto que ao se trabalhar com o advento do choque, o TVD Sweby se destaca por sua estabilidade.

Palavras-chave: TVD. Propriedades constantes. Escoamento congelado. Escoamento em equilíbrio químico local. Motor-Foguete. Funções de interpolação.

## ABSTRACT

This paper reports a study of different numerical interpolation functions for reactive flow or not, which can include cases of discontinuities (shocks) to rocket engine application using the finite volume method, non - uniform structured mesh of center faces, co-localated arrangement of variables, segregated solution, coupling pressure-velocity via SIMPLEC (Semi Implicit Linked Equations Consistent) and numerical verification techniques. In this work, the focus is put on Mach 1D code different interpolation functions considering the shock of the event, so it has been premised on the search for numerical schemes that do not show numerical oscillation or that such a characteristic is minimal. Thus, it was chosen as the focus TVD schemes (Total Variation Diminishing) that arose within the scope of computational fluid dynamics as schemes in general, meet the proposed requirement. In addition to the application of different interpolation functions, seek to use these functions on different physical models (and mathematical): constant properties, frozen flow and flow in local chemical equilibrium.

In general, two problems are proposed: unidimensional Euler without discontinuities and with discontinuities. For the first problem mentioned seven different interpolation schemes were studied: UDS (Upstream Differencing Scheme), CDS (Central Differencing Scheme), TVD Min-Mod, TVD Superbee, TVD Chakravarthy & Osher, TVD Smart and TVD Sweby. In addition to different numerical schemes, two physical (and mathematical) models were tested: frozen flow and local equilibrium flow. In turn, for the second problem was worked with four interpolation functions, three of them of the TVD family. In common to both problems, 50 volumes were used as the coarsest grid and a refining order equal to 2 ( $q = 2$ ), reaching 12800 volumes as the finest grid.

In general terms, satisfactory results were obtained in relation to the TVD schemes, especially the TVD Smart and the TVD Min-Mod, when dealing with models with chemical reaction. While working with the advent of shock, TVD Sweby stands out for its stability.

Keywords: *TVD*. Constant properties. Frozen flow. Local equilibrium flow. Rocket nozzle engines. Interpolation functions.

## LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 - ESCOAMENTO SUBSÔNICO SOB UM AEROFÓLIO. ....	22
FIGURA 2 - ESCOAMENTO TRANSÔNICO PARA A FAIXA DE $0,8 < M_{\infty} < 1,0$ . ..	22
FIGURA .3 - ESCOAMENTO TRANSÔNICO PARA A FAIXA DE $1,0 \leq M_{\infty} < 1,2$ . .	23
FIGURA 4 - ESCOAMENTO SUPERSÔNICO SOBRE UMA CUNHA. ....	23
FIGURA 5 - ESCOAMENTO HIPERSÔNICO SOBRE UMA CUNHA. ....	23
FIGURA 6 – PERFIL MOTOR-FOGUETE. ....	25
FIGURA 7 - TUBEIRA DO FOGUETE NK-33. ....	26
FIGURA 8 - MOTOR FOGUETE (TUBEIRA). ....	26
FIGURA 9 - ANÁLISE DE COMPORTAMENTO DE VARIÁVEIS NO MOTOR- FOGUETE. ....	28
FIGURA 10 – AVIÃO X-15 A MACH 3,5. ....	32
FIGURA 11 – CORPO ROMBUDO (ONDA DE CHOQUE DESCOLADA). ....	33
FIGURA 12 – PROCEDIMENTO DE ANÁLISE PARA ONDA DE CHOQUE NORMAL. ....	34
FIGURA 13 - VOLUME DE CONTROLE FINITO PARA ESCOAMENTO QUASE UNIDIMENSIONAL. ....	36
FIGURA 14 - VOLUME INCREMENTAL ....	37
FIGURA 15 – ANÁLISE DE ÁREAS DA TUBEIRA. ....	38
FIGURA 16 – CONDIÇÕES ASSOCIADAS AO CHOQUE NORMAL DENTRO DA TUBEIRA. ....	39
FIGURA 17 – DISTRIBUIÇÃO DE PRESSÃO EM TUBEIRA CONVERGENTE- DIVERGENTE PARA DIFERENTES CONDIÇÕES DE ESCOAMENTO. ....	40
FIGURA 18 – SOLUÇÕES ISENTRÓPICAS E ONDA DE CHOQUE INTERNA. ....	41
FIGURA 19 - DIAGRAMA $r-\psi$ ....	45
FIGURA 20 – MALHA UNIDIMENSIONAL NÃO UNIFORME DE FACES CENTRADAS ENTRE NÓS ....	50
FIGURA 21 – PARÂMETROS GEOMÉTRICOS DO MOTOR-FOGUETE. ....	68
FIGURA 22 – ORDEM APARENTE ( $pU$ ) DA PRESSÃO ( $P_{ex}$ ) PARA ESCOAMENTO CONGELADO. ....	73
FIGURA 23 – ORDEM APARENTE ( $pU$ ) DA PRESSÃO ( $P_{ex}$ ) PARA EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL. ....	73

FIGURA 24 – PERFIL DE TEMPERATURA PARA ESCOAMENTO CONGELADO...	74
FIGURA 25 – PERFIL DE TEMPERATURA PARA EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL.	75
FIGURA 26 – COMPARATIVO DE MODELOS DE ESCOAMENTO.....	75
FIGURA 27 – EFEITO DE REFINO DE MALHA PARA ESCOAMENTO CONGELADO.....	76
FIGURA 28 – EFEITO DE REFINO DE MALHA PARA EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL .....	77
FIGURA 29 – ORDEM APARENTE ( $p_U$ ) DO COEFICIENTE DE DESCARGA ( $C_d$ ) PARA A CONFIGURAÇÃO 1. ....	82
FIGURA 30 – ORDEM APARENTE ( $p_U$ ) DO COEFICIENTE DE DESCARGA ( $C_d$ ) PARA A CONFIGURAÇÃO 2. ....	83
FIGURA 31 – PERFIL DE TEMPERATURA PARA PROPRIEDADES CONSTANTES (CONFIGURAÇÃO 1) .....	83
FIGURA 32 – PERFIL DE TEMPERATURA PARA PROPRIEDADES CONSTANTES (CONFIGURAÇÃO 2) .....	84
FIGURA 33 – EFEITO DE REFINO DE MALHA PARA PROPRIEDADES CONSTANTES (CONFIGURAÇÃO 1).....	85
FIGURA 34 – EFEITO DE REFINO DE MALHA PARA PROPRIEDADES CONSTANTES (CONFIGURAÇÃO 2).....	85

## LISTA DE TABELAS

TABELA 1- IMPULSO ESPECÍFICO EM FUNÇÃO DE DIFERENTES TIPOS DE PROPELENTES LÍQUIDOS .....	29
TABELA 2- IMPULSO ESPECÍFICO EM FUNÇÃO DE DIFERENTES TIPOS DE PROPELENTES SÓLIDOS .....	29
TABELA 3 - FUNÇÕES LIMITADORAS PARA A APLICAÇÃO DO TVD .....	45
TABELA 4 - FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO SIMULADAS .....	52
TABELA 5 - PARÂMETROS FÍSICOS DA TUBEIRA. ....	68
TABELA 6 - CONDIÇÕES DE CONTORNO PARA ESCOAMENTOS EM TUBEIRA.	69
TABELA 7- DADOS DE <i>SOFTWARE</i> E <i>HARDWARE</i> DO COMPUTADOR UTILIZADO.....	69
TABELA 8- PARÂMETROS FÍSICOS UTILIZADOS PARA OS MODELOS DE ESCOAMENTO PROPOSTOS. ....	70
TABELA 9- TEMPO DE PROCESSAMENTO COMPUTACIONAL PARA ESCOAMENTO CONGELADO. ....	71
TABELA 10 - TEMPO DE PROCESSAMENTO COMPUTACIONAL PARA ESCOAMENTO EM EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL. ....	72
TABELA 11 - VARIÁVEIS DE INTERESSE E SUAS RESPECTIVAS INCERTEZAS NUMÉRICAS AVALIADAS PELO ESTIMADOR GCI. ....	78
TABELA 12- PARÂMETROS FÍSICOS UTILIZADOS PARA CADA CONFIGURAÇÃO.....	79
TABELA 13 - TEMPO DE PROCESSAMENTO COMPUTACIONAL PARA PROPRIEDADES CONSTANTES (CONFIGURAÇÃO 1). ....	80
TABELA 14 - TEMPO DE PROCESSAMENTO COMPUTACIONAL PARA PROPRIEDADES CONSTANTES (CONFIGURAÇÃO 2). ....	81
TABELA 15 - VARIÁVEIS DE INTERESSE E SUAS INCERTEZAS. ....	86

## LISTA DE SIMBOLOS

### Letras romanas

- $a$  - Velocidade local do som [ $m/s$ ]  
 $A$  - Área da seção transversal [ $m^2$ ]  
 $A_g$  - Área da garganta [ $m^2$ ]  
 $A_o$  - Área de saída do bocal [ $m^2$ ]  
 $C_d$  - Coeficiente de descarga [*adimensional*]  
 $c_p$  - Calor específico a pressão constante [ $J / kg. K$ ]  
 $c_v$  - Calor específico a volume constante [ $J / kg. K$ ]  
 $d$  - Diâmetro interno [ $m^2$ ]  
 $D$  - Diâmetro externo [ $m^2$ ]  
 $E$  - Erro numérico  
 $f$  - Fator de atrito de Darcy [*adimensional*]  
 $F$  - Empuxo [ $N$ ]  
 $F^*$  - Empuxo [*adimensional*]  
 $h$  - Entalpia específica [ $J/kg$ ]  
 $I_{sp}$  - Impulso específico [ $s$ ]  
 $L_c$  - Comprimento da câmara [ $m$ ]  
 $L_n$  - Comprimento da tubeira [ $m$ ]  
 $M$  - Número de Mach [*adimensional*]  
 $\dot{m}$  - Fluxo de massa [ $kg/s$ ]  
MVF - Método dos Volumes Finitos  
 $OF$  - Razão em massa oxidante/combustível [*adimensional*]  
 $P$  - Pressão [ $Pa$ ]  
 $P'$  - Pressão corrigida [ $Pa$ ]  
 $p_E$  - Ordem efetiva do erro de discretização  
 $p_L$  - Ordem assintótica do erro de truncamento  
 $Pr$  - Número de Prandtl [*adimensional*]  
 $p_U$  - Ordem aparente do erro de discretização  
 $p_V$  - Ordens verdadeiras do erro de truncamento  
 $q$  - razão de refino de malha [*adimensional*]  
 $R$  - Constante universal dos gases [ $J/(kg. mol. K)$ ]

$r_c$  – Raio da curvatura [ $m$ ]  
 $r_e$  – Razão de gradientes [*adimensional*]  
 $r_g$  – Raio na garganta da tubeira [ $m$ ]  
 $r_{in}$  – Raio de entrada da tubeira [ $m$ ]  
 $s$  - Entropia [ $J / kg \cdot K$ ]  
 $S_{eq}$  – Termo fonte químico reativo [*adimensional*]  
 $T$  - Temperatura [ $K$ ]  
 $u$  - Componente normal da velocidade de escoamento [ $m/s$ ]  
 $U$  - Estimativa do erro numérico  
 $U_{GCI}$  – Estimativa de erro baseada no estimador  $GCI$   
 $V$  - Velocidade do escoamento [ $m/s$ ]  
 $v_{ex}$  - Velocidade de exaustão [ $m/s$ ]  
 $w$  - Componente tangencial da velocidade de escoamento [ $m/s$ ]  
 $X_i$  – Fração molar [*adimensional*]  
 $Y_i$  – Fração mássica [*adimensional*]

### **Letras gregas**

$\gamma$  - Razão de calores específicos [*adimensional*]  
 $\gamma_e$  - Razão de calores específicos efetiva [*adimensional*]  
 $\Delta x$  - Tamanho do volume de controle  
 $\rho$  - Massa específica [ $kg/m^3$ ]  
 $\emptyset$  - Solução numérica  
 $\Phi$  - Solução analítica  
 $\Theta$  – Propriedade (média)  
 $\psi(r)$  - Função limitadora  
 $\psi_E$  - Razão de redução do erro de discretização  
 $\psi_U$  - Razão de convergência da solução numérica para analítica

### **Subíndices**

$\infty$  - Propriedade na região não perturbada  
 $atm$  - Propriedade atmosférica  
 $c$  - Propriedade na câmara de combustão do foguete  
 $0$  - Propriedade de estagnação

1 - Propriedade antes do choque

2 - Propriedade depois do choque

*s* - Propriedade isentrópica

*n* - Propriedade normal a onda de choque

*ex* - Propriedade na saída da tubeira

*wall* - Propriedade na parede

*aw* - Propriedade na parede adiabática

*amb* – Propriedade em condição ambiente

### **Superíndices**

\* - Propriedade característica

*ant* – Remete a variável em iteração anterior

## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>13</b>
1.1 DEFINIÇÕES DO PROBLEMA .....	13
1.2 JUSTIFICATIVA DO ESTUDO .....	15
1.3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....	15
1.4 MOTIVAÇÃO .....	18
1.5 OBJETIVOS .....	20
<b>2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....</b>	<b>21</b>
2.1 ESCOAMENTOS COMPRESSÍVEIS .....	21
2.2 MOTOR FOGUETE .....	24
2.3 TEORIA DE CHOQUES .....	32
2.4 TEORIA DE ESCOAMENTO QUASE UNIDIMENSIONAL.....	36
2.5 DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL (CFD).....	41
2.6 FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO .....	43
2.6.1 Justificativa de seleção de funções de interpolação.....	48
<b>3 METODOLOGIA.....</b>	<b>49</b>
3.1 MODELO MATEMÁTICO .....	49
3.2 MÉTODO DE VOLUMES FINITOS .....	50
3.3 CONTEXTUALIZAÇÃO DAS FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO .....	52
3.4 VERIFICAÇÃO E VALIDAÇÃO DO PROBLEMA .....	53
3.5 PROGRAMA MACH1D.....	58
3.5.1 Solução analítica de escoamento monoespécie com propriedades constantes .....	59
3.5.2 Solução numérica de escoamento monoespécie com propriedades constantes.....	60
3.5.3 Solução numérica de escoamento congelado .....	63
3.5.4 Solução numérica de escoamento em equilíbrio químico local .....	64
<b>4 RESULTADOS E DISCUSSÕES .....</b>	<b>67</b>
4.1 EULER UNIDIMENSIONAL SEM DESCONTINUIDADES.....	70
4.2 EULER UNIDIMENSIONAL COM DESCONTINUIDADES.....	79
4.3 DISCUSSÕES .....	87
<b>5 CONCLUSÃO.....</b>	<b>89</b>
<b>REFERÊNCIAS .....</b>	<b>91</b>
<b>APÊNDICES .....</b>	<b>94</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Este capítulo tem por objetivo descrever o problema, contextualizar o mesmo e também justificar o porquê do estudo. No capítulo, além dessas considerações tem-se na sequência a motivação bem como os objetivos pertinentes a este trabalho.

### 1.1 DEFINIÇÕES DO PROBLEMA

Dois diferentes tipos de problemas são tratados neste trabalho. O primeiro destes problemas abrange o estudo de diferentes funções de interpolação para escoamentos compressíveis reativos em motor foguete sem inclusão de descontinuidades considerando os modelos físicos (e matemáticos) de escoamento congelado e escoamento em equilíbrio químico local. Em suma, tais modelos físicos são idealizações do modelo físico real, pois para o escoamento congelado se considera que a composição química dos gases de combustão seja a mesma, desde a câmara de combustão até a exaustão da tubeira, deste modo, a composição química é calculada apenas uma única vez. Por sua vez, no escoamento em equilíbrio químico local, a composição química deve ser calculada em todas as seções transversais do escoamento, assumindo que haja tempo suficiente para que a composição química atinja o equilíbrio químico. Para a análise dos resultados, se considera a presença da solução analítica como comparação as soluções numéricas obtidas utilizando as diferentes funções de interpolação, levando em consideração algumas variáveis de interesse como pressão, temperatura e massa específica. O procedimento de pós-processamento é baseado na análise de erros, ordem efetiva e tempo computacional no intuito de buscar uma função de interpolação mais adequada frente a modelos físicos que possuem reações químicas.

Por sua vez, o segundo problema abordado abrange o estudo de diferentes funções de interpolação numérica para escoamento compressível não reativo em motor foguete onde se inclui o advento do choque considerando o modelo físico (e matemático) de escoamento monoespécie com propriedades constantes. Para a análise dos resultados, se considera a presença da solução analítica como comparação as soluções numéricas conforme mencionado no primeiro problema apresentado. Como pós-processamento, admite-se a análise de erros, ordem efetiva e tempo computacional de modo a se verificar qual função de interpolação é mais adequada considerando a presença de onda de choque (descontinuidades).

Para tanto, faz-se necessário o entendimento do que vem a ser o motor foguete e suas características, os modelos físicos (e matemáticos) abordados (propriedades constantes, escoamento congelado, equilíbrio químico local), bem como a teoria de choques e a importância de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) como ferramenta na resolução do problema. Tais tópicos estarão inseridos nos demais capítulos adiante.

De modo a contextualizar os problemas estudados neste trabalho de forma mais ampla, pode-se definir os mesmos, como sendo problemas diretamente ligados à dinâmica dos fluidos computacional, uma vez que a mesma tem por função de representar um dado fenômeno físico via simulação numérica, sendo essa utilizada para diversas etapas como a de gerar um modelo numérico, visando uma solução numérica tendo-se ou não a solução analítica. Outro ponto bastante importante em se tratando de CFD é a questão da escolha do tipo de malha, onde a mesma pode ser uma malha estruturada ou não de acordo com cada fenômeno estudado. A malha a ser trabalhada para cada fenômeno é de vital importância, pois em se tendo elementos de malha bem distribuídos pode-se obter melhores resultados, visto que o fenômeno irá ser capturado com maior precisão. Um exemplo bastante simples para justificar tal fator seria, por exemplo, se na tubeira do motor foguete se considerar a viscosidade pelo contato da parede da tubeira com gases de combustão. Para este caso em específico seria necessário haver um maior refinamento dos elementos de malha próximos da parede, contudo se como hipótese assumirmos a inexistência desse fenômeno viscoso, pode-se trabalhar com malha uniforme refinada por direção com razão de refino constante.

Um dos fenômenos a ser estudado neste trabalho, abrangendo as funções de interpolação, é a captura de discontinuidades (choques) no motor foguete levando-se em consideração diferentes modelos físicos (escoamento congelado e escoamento em equilíbrio químico local). Pelo fato de o choque ocorrer em uma pequena espessura e de um modo geral brusco, as funções de interpolação como CDS para o termo difusivo apresentam problemas de oscilação numérica, enquanto esquemas de interpolação como UDS apresentam falsa difusão. Logo, tanto o fenômeno estudado bem como a função de interpolação empregada são de grande importância para que o fenômeno físico seja interpretado corretamente, justificando assim a importância deste trabalho.

Dentro da área de simulação numérica um dos atuais desafios é o desenvolvimento de funções de interpolação que possuam a menor oscilação numérica possível como as funções de interpolação TVD já mais difundida e ENO (*Essentially Non-Oscillatory*) que atualmente está em desenvolvimento por grupos de pesquisa.

## 1.2 JUSTIFICATIVA DO ESTUDO

Ao se deparar com um fenômeno físico duas vertentes são possíveis. A primeira e mais tradicional delas é a montagem de uma bancada de testes e a segunda é implementar as equações pertinentes ao fenômeno via ferramenta de CFD (*Computational Fluids Dynamics*). Ambas vertentes possuem como premissa aproximar o máximo possível da realidade do problema proposto, contudo, independente da escolha realizada erros são automaticamente embutidos no que se deseja representar.

Ao se optar pelo experimental se tem erros inerentes aos equipamentos utilizados para medição, por exemplo. Por sua vez, ao se optar pela simulação a maior vantagem se encontra no custo/benefício uma vez que não se tem investimento em bancadas.

Como a premissa de qualquer método seja ele teórico ou experimental é o de exprimir a realidade do fenômeno, ao se optar pelo método teórico abrangido através da modelagem matemática e ramificado em modelo analítico e numérico alguns critérios devem ser ressaltados.

Alguns problemas propostos no âmbito de CFD podem ou não possuir soluções analíticas, assim é de grande importância que as ferramentas numéricas envolvidas sejam de grande confiabilidade para que o fenômeno seja devidamente representado. Para tal, recorrentes pesquisas foram realizadas no intuito de se encontrar funções de interpolação que sejam de ordem superior ao UDS (*Upstream Differencing Scheme*).

## 1.3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Com relação a escoamentos reativos em motores foguete, análise de erros numéricos, teoria de choque e funções de interpolação, citam-se os seguintes trabalhos:

- Na solução numérica de escoamentos reativos em motores foguete, Wang (2006) observou que: simulações em malhas estruturadas apresentam melhores resultados que em malhas não estruturadas; os efeitos de trocas térmicas devido à radiação são pequenos quando comparados aos efeitos convectivos, apresentando pequena influência sobre o empuxo; de um modo geral, modelos de taxa finita apresentam resultados melhores do que aos de equilíbrio químico local; e a consideração das perdas térmicas em motores refrigerados regenerativamente melhora a predição do empuxo consideravelmente. Nota-se,

contudo, que nenhuma estimativa de erros numéricos é feita para os resultados obtidos.

- Hagemann *et al.* (2003) comentam que: os métodos numéricos são uma ajuda fundamental para entender a física do escoamento em motores foguete; a predição de fenômenos de escoamento dominados por efeitos viscosos alcançou elevado nível de confiabilidade; e comparações com resultados experimentais apresentam concordância razoavelmente boa para tubeiras refrigeradas radiativamente.
- Naraghi e Nunes (2002) observam que embora o aumento no fluxo de calor para a parede seja pequeno ao se considerar a radiação, os efeitos podem ser significativos na temperatura da parede e nas propriedades do fluido refrigerante. Tais efeitos são mais significativos na câmara de combustão e na seção convergente da tubeira e negligenciá-los pode acarretar em uma falha do sistema de refrigeração.
- As tubeiras e as câmaras são geralmente de seção transversal circular e possuem uma seção convergente, uma garganta na parte mais estreita de localização (mínima seção transversal) e uma seção divergente. A principal diferença nas configurações das diferentes tubeiras encontra-se na seção divergente onde se tem o fluxo supersônico (SUTTON e BIBLARZ, 2001). Atualmente têm-se disponíveis e testadas, um número considerável de diferentes configurações de tubeira.
- Moura e Rosa (2013) comentam que para facilitar o projeto de um motor de combustão supersônico, um programa de computador foi recentemente desenvolvido para permitir cálculos mais fáceis das propriedades através tanto de choques normais quanto oblíquos, sendo possível também, cálculo de propriedades para uma sequência de choques oblíquos. O programa foi criado para fazer cálculos, tanto para o ar quanto para um gás caloricamente perfeito e para o equilíbrio químico e termodinâmico. Além disso, o programa é fácil de usar e realiza cálculos rápidos das propriedades através de ondas de choque, economizando tempo em cálculos necessários durante as atividades do projeto. Os resultados foram gerados para a verificação do programa e validação do modelo, em comparação com os resultados existentes na literatura.

- Não são encontrados na literatura dados suficientes para realizar comparações com resultados experimentais ou numéricos (MARCHI *et al.*, 2004).
- A fundamentação teórica sobre a análise de erros “a priori” e “a posteriori” para problemas não lineares hiperbólicos é muito aquém da satisfatória. A estimativa de erros em problemas hiperbólicos tem recebido uma maior atenção apenas recentemente, apesar de sua importância em aplicações práticas (ZHANG *et al.*, 2001), como é o caso das equações que regem o escoamento supersônico em uma tubeira.
- Em geral, não são estimados erros envolvidos nas soluções numéricas. Deste modo, ao se comparar resultados obtidos ao se utilizar diferentes modelos matemáticos (ou confrontando-se resultados numéricos a dados experimentais), pode-se chegar a conclusões equivocadas, uma vez que não é conhecida a incerteza relacionada à solução numérica (MARCHI e HOBMEIR, 2007).
- Bonfiglioli e Paciorri (2010) comentam que muitos autores tem observado que a ordem de convergência de esquemas de captura de choques se reduzem a primeira ordem não só na vizinhança da captura de discontinuidades como também na região a jusante do choque. A maioria dessas análises foram realizadas utilizando malhas estruturadas, que são particularmente adequados para o uso da extrapolação de Richardson para a medição da ordem de convergência.
- Delery e Dussauge (2009) comentam que a interação onda de choque/camada limite é predominantemente uma consequência da resposta da camada limite para a compressão local repentina transmitida pelo choque e reage como um fluxo não uniforme em que os termos viscosos e inerciais se combinam de forma complexa. O resultado mais significativo disso é a propagação da discontinuidade da pressão causada pelo choque de modo que sua influência é sentida bem a montante do local onde este teria sido localizado em um modelo de fluido viscoso. Quando o choque é suficientemente forte para separar a camada limite, a interação tem consequências dramáticas para o desenvolvimento da camada limite e para o campo de fluxo invíscido adjacente. Padrões de choque complexos são então formados que envolvem interferências choque / choque cuja natureza depende do número Mach e sobre a forma como o choque primário é produzido.

- Fujii (2008) comenta que a dinâmica de fluidos computacional contribui de forma intensa na análise de problemas de choques relacionado a altas velocidades. Alguns dos exemplos de estudo estão atrelados a veículos de transporte e outros na compressão de escoamentos de fluidos.
- Castro (2009) comenta sobre um novo esquema de interpolação não oscilatório denominado de WENO-Z, função de interpolação de quinta ordem e ponderada comparando com WENO (*Weighted Essentially Non-Oscillatory*) mapeado e WENO clássico. Foi verificado que em termos de dissipação, o WENO mapeado se mostrou o menos dissipativo, seguido do WENO-Z e por fim o WENO clássico. Em termos computacionais, o WENO-Z se mostrou mais rápido do que WENO mapeado em torno de 20%.
- Hu *et al.* (2011) comentam que estender o algoritmo para a reconstrução de mais alta ordem do WENO é bastante trabalhoso afirmando que a reconstrução WENO afeta a derivabilidade dos esquemas numéricos, e que também pode afetar a convergência da solução para o regime estacionário.
- Oliveira (2010) comenta sobre a busca pela obtenção de métodos numéricos de ordem mais elevada e que não possuam oscilações na região de choque, sendo este método desenvolvido por Harten *et al.* (1987) e denominado por ENO (*Essentially Non-Oscillatory*). O método é baseado nas técnicas de interpolação polinomial e no método de reconstrução desenvolvido por Colella e Woodwardem (1984).
- Gao *et al.* (2012) comentam que a função de interpolação TVD (*Total Variation Diminishing*) apresenta robustez e alta resolução para o problema da equação de Burgers Modificada.

#### 1.4 MOTIVAÇÃO

O contínuo desenvolvimento em sistemas de propulsão de foguetes vem ocorrendo em mais de 30 países, sendo que alguns destes possuem uma real contribuição ao estado da arte referente a tal tecnologia.

Os sistemas de propulsão de foguetes podem ser classificados de acordo com o tipo de fonte de energia (química, nuclear ou solar), função básica, tipo de veículo (aeronave,

míssil, entre outros), tipo de propelente e concepção de construção (SUTTON e BIBLARZ, 2001).

Perante oportunidade de desenvolvimento nas mais diversas áreas da classificação citadas acima, juntamente com a contínua contribuição de diversos países e seus respectivos grupos de pesquisa gera-se incentivo ainda maior a pesquisa visto à mentalidade cooperativa na troca de conhecimento.

Dentre outros adventos da tecnologia e de grande incentivo para o trabalho em questão é o fato de se poder com certa precisão representar um fenômeno físico via simulação numérica. O campo da simulação numérica cresceu e se encontra em constante crescimento devido ao avanço de tecnologia de computadores de alta velocidade. Devido a tal incentivo, o número de pesquisas e de artigos ligados à simulação numérica aumentou consideravelmente.

Pertinente à área da simulação numérica como também ao enfoque deste trabalho que basicamente é o estudo de diferentes funções de interpolação como o TVD, recentes estudos foram realizados e outros mais se encontram em desenvolvimento por grupos de pesquisa. Como exemplo de estudo já realizado pode se citar o TVD, onde diversos esquemas de implementação de tal função de interpolação foi estudado com o intuito de sempre minimizar as oscilações numéricas como em: Boris e Book (1973, 1976), Van Leer (1974), Harten (1983,1984), Sweby (1984), Roe (1985), Osher e Chakravarthy (1984), entre vários outros. Por sua vez, outras funções de interpolações com mesmo intuito são os esquemas ENO no qual, diversos estudos foram realizados como em Shu (1997), Wolf e Azevedo (2007), Hu et.al. (2011), Maciel e Ferreira (2012), inclusive tratando do tema de escoamentos compressíveis. Comparando as funções de interpolação acima mencionadas, ambas possuem como característica reduzir a oscilação numérica, contudo para o ENO, pode-se obter uma maior ordem de acurácia através da reconstrução por diferenças divididas.

Através de revisão bibliográfica realizada referente aos esquemas ENO bem como estudos realizados pelo grupo de pesquisa em CFD, propulsão e aerodinâmica de foguetes da Universidade Federal do Paraná verificou-se uma linha de pesquisa diferente ao que é proposto no programa Mach1D o que é fato motivador para um futuro tema de tese de doutorado uma vez que se focará na ampliação das aplicações em diversos temas que envolvem funções de interpolação.

## 1.5 OBJETIVOS

O objetivo geral deste trabalho é realizar um estudo de diferentes funções de interpolação para diversos problemas de escoamentos compressíveis, incluindo choques e reações químicas. Para tanto serão avaliados esquemas tradicionais, como o UDS (*Upstream Differencing Scheme*) e o CDS (*Central Differencing Scheme*), bem como funções do tipo TVD (*Total Variation Diminishing*). O estudo dos esquemas numéricos será realizado via implementação no código numérico Mach1D.

Em estudos preliminares via artigos e livros técnicos, verificou-se a necessidade de se controlar o problema da oscilação numérica no termo difusivo de uma dada EDO. Para tal, buscou-se a utilização de funções interpolação que em princípio devem reduzir o problema, no caso esquemas TVD.

Outros objetivos deste trabalho são:

- Comparar parâmetros numéricos como o tempo de processamento para problemas de escoamentos reativos, mas sem descontinuidades.
- Estudar o comportamento de soluções numéricas para problemas sujeitos a descontinuidades (ondas de choque), em especial no caso de escoamentos reativos.
- Obter o erro numérico associado às soluções obtidas.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo serão apresentados conceitos relacionados a escoamentos compressíveis, motores foguete, teoria de choque, funções de interpolação e dinâmica dos fluidos computacional (CFD), sendo estes assuntos fundamentais para o desenvolvimento da dissertação.

### 2.1 ESCOAMENTOS COMPRESSÍVEIS

Segundo Fox *et al.*(2006), embora todo escoamento de fluido apresente em maior ou menor grau variação de massa específica, idealmente dois casos são considerados: os escoamentos incompressíveis e os compressíveis. Nos escoamentos incompressíveis se considera que a massa específica seja constante, o que é geralmente utilizado em escoamentos líquidos, exceto para casos em que o golpe de aríete se faz presente, como em tubulações. Por sua vez, ao assumir o escoamento como compressível passasse a considerar que a massa específica é variável, caso este podendo ser aplicado, por exemplo, quando se tem gases da atmosfera sobre uma asa de avião.

As consequências da compressibilidade não estão limitadas somente a variações na massa específica, pois tal variação indica também a possibilidade de se ter trabalho de expansão ou de compressão significativo sobre um gás o que ocasionará a modificação do estado termodinâmico deste gás em propriedades como: temperatura, energia interna e entropia.

Segundo Anderson (2003), um escoamento compressível ocorre quando

$$\frac{d\rho}{\rho} \geq 0,05 \quad (2.1)$$

Tal relação equivale a um escoamento com velocidades iguais ou superiores a 0,3 vezes a velocidade do som (Mach 0,3). Abaixo desta velocidade, pode-se considerar que se tenha escoamento incompressível sem prejuízo na solução final e na representação do fenômeno físico. Por sua vez, a relação de interesse que envolve o conceito de velocidade do som pode ser definida por:

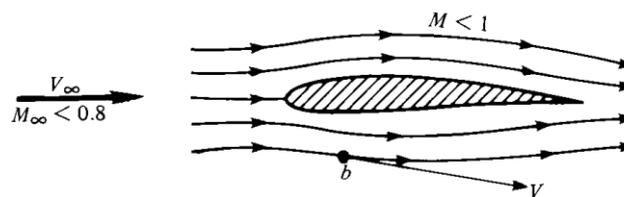
$$M = \frac{V}{a} \quad (2.2)$$

onde,  $M$  representa o número de Mach,  $V$  a velocidade de escoamento [m/s] e  $a$  vem a ser a velocidade do som [m/s].

Segundo os tipos de escoamento em Anderson (2003), citam-se o escoamento: subsônico, transônico para duas diferentes faixas de  $M_\infty$ , supersônico e hipersônico.

Ao se ter  $M_\infty \leq 0,8$  ou  $M < 1$ , tem-se o que se denomina por escoamento subsônico, como representado em (Fig.1) para o caso de um aerofólio onde o subíndice “ $\infty$ ” representa a velocidade não perturbada, ou seja, onde se tem escoamento livre.

FIGURA 1 - ESCOAMENTO SUBSÔNICO SOB UM AEROFÓLIO.

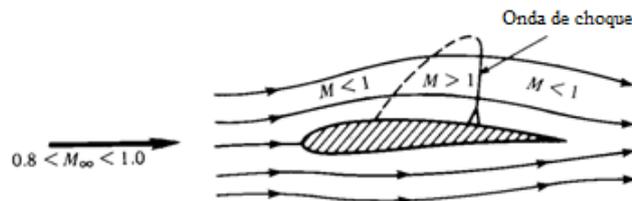


FONTE: ANDERSON (2003).

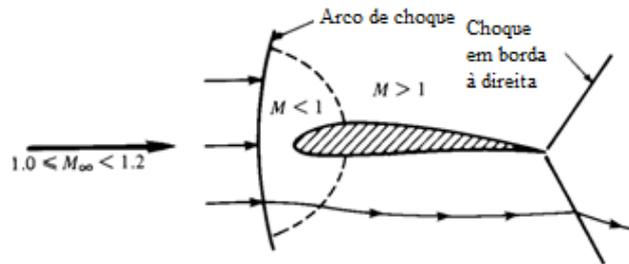
Tal regime de escoamento é caracterizado por linhas de corrente suaves e por variações contínuas das propriedades.

Quando se tem  $0,8 < M_\infty < 1,2$  como ilustrados nas Fig.2 e Fig.3, o escoamento é classificado como sendo transônico. Dentro da faixa mencionada há tanto regiões de regime subsônico como supersônicos além da presença de ondas de choque. O que altera o local da formação de ondas de choque é a faixa de número de Mach que o escoamento se encontra como é mostrado abaixo:

FIGURA 2 - ESCOAMENTO TRANSÔNICO PARA A FAIXA DE  $0,8 < M_\infty < 1,0$ .



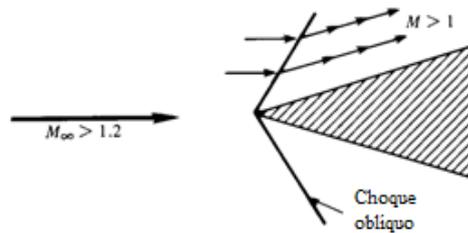
FONTE: Adaptado de ANDERSON (2003).

FIGURA .3 - ESCOAMENTO TRANSÔNICO PARA A FAIXA DE  $1,0 \leq M_{\infty} < 1,2$ .

FONTE: Adaptado de ANDERSON (2003)

Por sua vez, o escoamento supersônico ocorre quando se tem  $M > 1$  ou  $M_{\infty} > 1,2$  para todos os pontos. Na prática tal regime é encontrado em aviões do tipo caça onde por projeto se tem um nariz pontiagudo como um cone, ao invés de mais rombudo como ocorre com os aviões comerciais. Tal fator tem por consequência a formação de ondas de choque oblíquas como pode ser ilustrado na Fig.4:

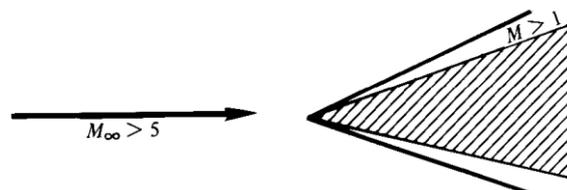
FIGURA 4 - ESCOAMENTO SUPERSÔNICO SOBRE UMA CUNHA.



FONTE: Adaptado de ANDERSON (2003).

Além de todos os tipos de regime de escoamento anteriormente explicitados, pode-se citar ainda o regime hipersônico caracterizado por possuir  $M_{\infty} > 5$ . Pelo fato de o número de Mach para o escoamento livre ser maior em relação ao escoamento livre do regime supersônico, as ondas de choque oblíquas se aproximam ainda mais da superfície do corpo. Outra característica pertinente a este tipo de regime de escoamento se encontra no fato de o gás poder ser dissociado ou mesmo ionizado.

FIGURA 5 - ESCOAMENTO HIPERSÔNICO SOBRE UMA CUNHA.



FONTE: ANDERSON (2003).

Tais regimes são de grande importância, pois ocorrem em uma grande gama de aplicações como em escoamentos internos em motores foguete, turbinas a gás, motores de combustão interna e túneis de vento (subsônicos, transônicos, supersônicos e/ou hipersônicos). Para escoamentos externos um bom exemplo de aplicação são aviões modernos, sendo estes projetados para velocidades de cruzeiro superiores a 0,3 vez a velocidade do som.

## 2.2 MOTOR FOGUETE

Segundo Brown (1996), um foguete gera empuxo através da aceleração de um gás sob alta pressão para velocidades supersônicas em um bocal convergente-divergente. Na maioria dos casos, o gás em alta pressão é gerado pela decomposição dos propelentes (combustível e oxidante) sob altas temperaturas. O empuxo acima mencionado segundo Sutton (2010) é a força produzida por um sistema de propulsão que atua sobre o veículo. De um modo simplificado, é a reação experimentada pela estrutura devido a expulsão da matéria em alta velocidade.

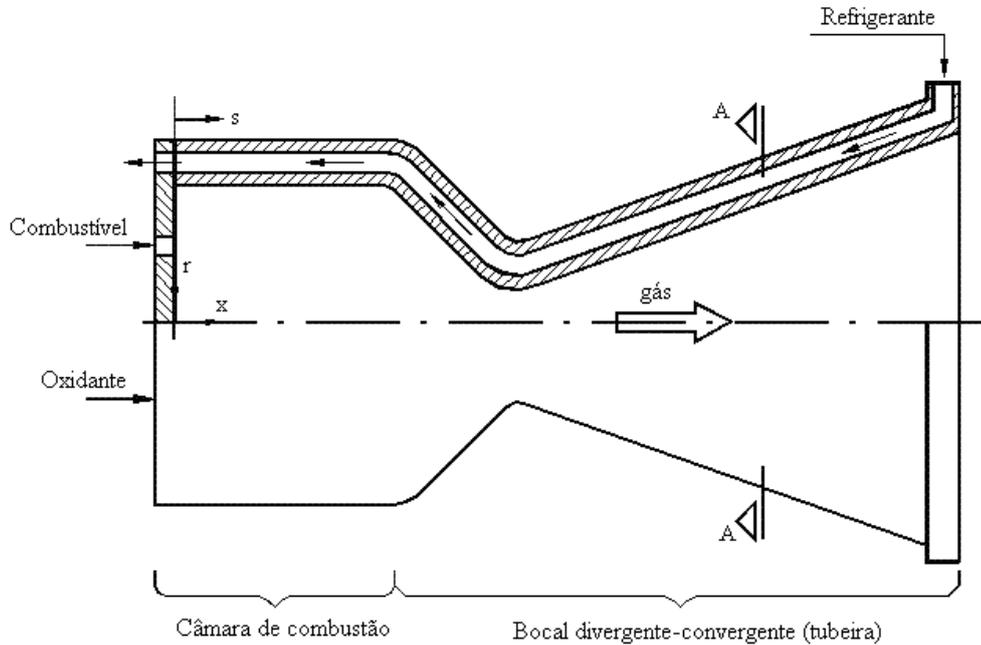
Um foguete pode obter um alto valor empuxo de duas maneiras: (i) consumindo uma grande quantidade de propelente lentamente ou (ii) consumindo uma pequena quantidade de propelente rapidamente. O impulso específico,  $I_{sp}$ , é uma grandeza que indica o empuxo obtido pelo consumo de uma determinada quantidade de propelente, isto é:

$$I_{sp} = \frac{\text{empuxo}}{\left(\frac{\text{peso do propelente}}{\text{tempo de combustão}}\right)} \quad [s] \quad (2.3)$$

Pode-se notar através da Eq.(2.3), que a obtenção do impulso específico real dependerá do empuxo, que se atribui a aceleração de gases na saída do bocal, como também ao peso do propelente e o tempo de combustão. Perante breve observação, ressalta-se que para um maior valor de impulso específico real, deve-se trabalhar com propelentes de baixo peso e configuração de geometria de tubeira adequada.

Em uma abordagem mais geral, o movimento do foguete se dá pela ação de uma força de reação sobre ele. Para tal caso, tem-se o que se denomina de retropropulsão, o qual ocorre nos foguetes atuais através da conversão de uma forma de energia em outra através do processo químico da combustão.

FIGURA 6 – PERFIL MOTOR-FOGUETE.



FONTE: MARCHI ET AL.(2000).

Os motores foguete trabalham com uma mistura de compostos que são basicamente o combustível e o oxidante nomeados genericamente por propelentes como ilustrado na Fig.6. Tais compostos, reagem na câmara de combustão onde o oxidante retira elétrons do combustível, gerando uma produção de gás sob alta pressão que por expansão provoca uma força de reação sobre o foguete denominada de empuxo.

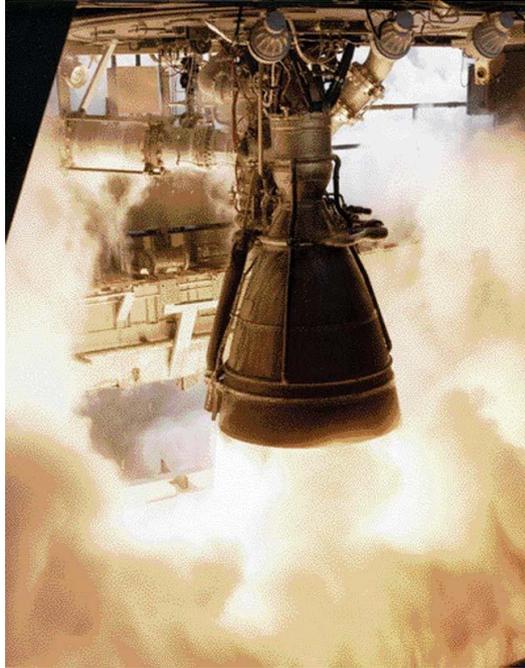
O empuxo pode ser definido matematicamente como sendo a razão entre a quantidade de momento linear do gás e o tempo de combustão dos propelentes conforme Sutton e Biblarz (2001):

$$F = \frac{dm}{dt} v = \dot{m}v \quad (2.4)$$

Em geral, denomina-se tuboira o conjunto formado pelas seções divergente e convergente, tradicionalmente denominado por bocal convergente-divergente, sendo este responsável pela transformação da energia química existente no par combustível-oxidante líquidos em energia cinética, responsável pelo movimento do foguete. O oxidante é injetado na entrada da tuboira, juntamente com o combustível, através de placas constituídas por dezenas ou centenas de injetores. Da mistura entre oxidante e combustível surgem diversas espécies químicas que dão origem a uma mistura de gases superaquecidos, que são, então,

expandidos através do bocal, sendo acelerados a altas velocidades. Tal quantidade de movimento gerada tem por consequência o impulsionamento do foguete. A definição de tubeiras é baseada na propulsão química devido a sua larga utilização desde a conquista espacial bem como pela facilidade de construção e suas características de empuxo.

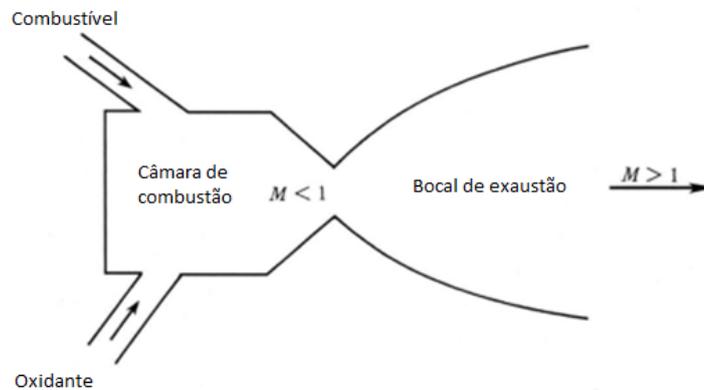
FIGURA 7 - TUBEIRA DO FOGUETE NK-33.



FONTE: SPACENEWS (2009).

Em outros termos a função principal de uma tubeira é canalizar e acelerar os produtos da combustão produzidos pela queima do propelente, de tal modo a maximizar a velocidade da exaustão, à velocidade supersônica. O resultado desejado é obtido pela variação da área da seção transversal de forma criteriosa.

FIGURA 8 - MOTOR FOGUETE (TUBEIRA).



FONTE: Adaptado de ANDERSON (2003).

Atualmente há uma grande gama de configurações de tubeiras disponíveis para estudo e análise. Segundo Sutton e Biblarz (2010), a seção convergente do bocal entre a câmara de combustão e a garganta (figura 8) de modo geral não afeta a obtenção de um alto desempenho, pois o fluxo subsônico nesta seção possui uma queda de pressão muito baixa e qualquer raio, ângulo do cone, curva de contorno da parede, ou de entrada do bocal é satisfatória. Em contraponto a tal citação Germer (2014) afirma que, as soluções numéricas da geometria do convergente pode variar em até 2,5% os coeficientes de empuxo e de descarga, com pouca variação do impulso específico. Tal taxa de variação é significativa e demonstra sinais de avanço no estado da arte. Outros pontos bastante pertinentes analisados em Germer (2014) a respeito da geometria do convergente demonstram que o raio de curvatura na garganta no trecho do convergente é o fator de maior impacto no empuxo enquanto que o raio de curvatura na transição da câmara de combustão para o convergente tem efeito pouco significativo.

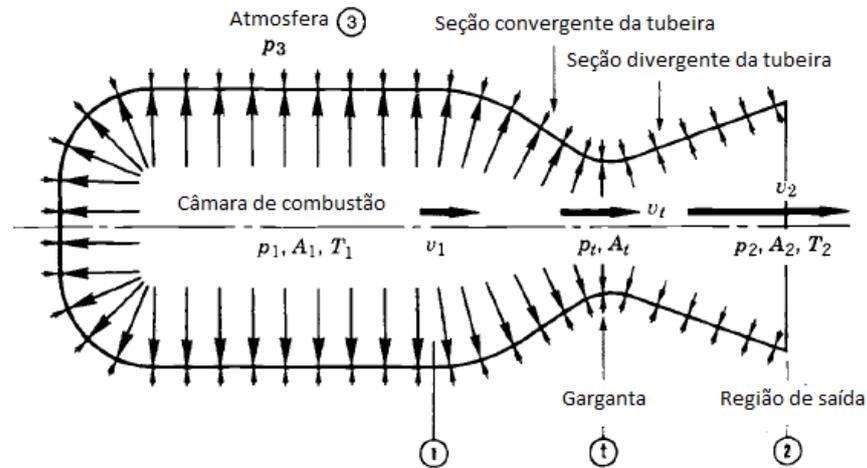
A principal diferença entre as configurações de bocal encontra-se na seção de fluxo supersônico (divergente), como descrito abaixo. A superfície da parede ao longo da tubeira deve ser suave e polida para minimizar o atrito, absorção de radiação e transferência de calor por convecção, devido à rugosidade superficial. Bordas afiadas ou saliências devem ser evitadas. De um modo geral uma boa configuração de tubeira é aquela em que se obtém o mais alto impulso específico, uma minimização da massa inerte na tubeira, entre outras características.

Atrelado ao conceito de tubeiras bem como de impulso específico anteriormente mencionado, tem-se um importante parâmetro a ser ressaltado, que vem a ser a velocidade de exaustão.

A velocidade de exaustão do jato depende dos propelentes utilizados, das características do motor, da reação de combustão e da geometria da tubeira. Sutton e Biblarz (2010) citam seis diferentes tipos de geometria de tubeira onde duas delas possuem maior destaque: cônica e sino. A primeira geometria se destaca por ser uma das geometrias mais antigas como também por possuir configuração simplificada. Por sua vez, a geometria cossenoidal vem sendo amplamente utilizada por permitir maiores razões de expansão na região do divergente.

A Fig.9, apresenta configuração tradicional de uma tubeira onde se pode verificar o comportamento de algumas variáveis como pressão, temperatura e velocidade:

FIGURA 9 - ANÁLISE DE COMPORTAMENTO DE VARIÁVEIS NO MOTOR-FOGUETE.



Fonte: Adaptado SUTTON e BIBLARZ (2001).

Analisando a Fig.9, notamos que o balanço de pressão na câmara de combustão e no interior das paredes da tubeira não são uniformes, sendo tal conclusão indicada pelo comprimento das setas voltadas para a parede onde indicam uma maior pressão interna do gás na câmara de combustão ( $p_1$ ) e diminui de forma constante até atingir a pressão na saída da tubeira ( $p_2$ ) podendo esta ser ou não próxima a pressão atmosférica ( $p_3$ ). Ao se ter  $p_2 = p_3$  se atinge o que se denomina por razão de expansão ótima. As variáveis descritas no centro da Fig.9 referem-se às quantidades específicas locais das variáveis: pressão ( $p$ ), área da seção transversal ( $A$ ), temperatura ( $T$ ) e velocidade ( $v$ ). O subíndice que  $t$  representam as variáveis na região da garganta.

A Eq.(2.3) anteriormente mencionada é de grande importância, pois representa bem o cálculo para foguetes monoestágios. Contudo, observa-se que os valores verdadeiros representam cerca de 95% do valor calculado. Tal fator ocorre pelo conhecido fenômeno da combustão incompleta na câmara de combustão, entre outros fatores.

Ao se projetar um motor foguete é de vital importância estabelecer que tipo de propelente será utilizado, pois o mesmo possui influência direta, por exemplo, quanto ao impulso específico. Abaixo seguem breves tabelas no intuito de se verificar tal influência:

TABELA 1 - IMPULSO ESPECÍFICO EM FUNÇÃO DE DIFERENTES TIPOS DE PROPELENTES LÍQUIDOS

Propelentes Líquidos		
Oxidante	Combustível	$I_s$ (s)
Oxigênio	Metano	296
	Hidrazina	301
	Hidrogênio	386
Flúor	Hidrazina	365
	Hidrogênio	389
Tetróxido de Hidrogênio	Hidrazina	283

FONTE: SUTTON e BIBLARZ (2001)

TABELA 2 - IMPULSO ESPECÍFICO EM FUNÇÃO DE DIFERENTES TIPOS DE PROPELENTES SÓLIDOS

Propelentes Sólidos		
Oxidante	Combustível	$I_s$ (s)
Nitrato de amônia	11% de Hidrocarbonetos e 7% de aditivos	192
Perclorato de amônia 78-66%	18% de liga polímero orgânico e 4-20% de alumínio	262
Perclorato de amônia 84-68%	12% de liga polimérica e 4-20% de alumínio	266

FONTE: SUTTON e BIBLARZ (2001)

A reação química de combustão é exotérmica e é acompanhada pela geração de grandes quantidades de gases. A temperatura destes gases depende basicamente da relação oxidante/combustível, de quem são o oxidante e o combustível e, em menor grau, da pressão da câmara. Esta, por sua vez, depende da taxa em que os propelentes são consumidos e das dimensões da garganta da tubeira. Uma equação geral para a combustão de propelentes num motor foguete pode ser escrita como segue:



Assim, por exemplo, quando o hidrogênio reage com o oxigênio, seis são os principais produtos: água, hidrogênio e oxigênio moleculares, hidrogênio e oxigênio atômicos e hidroxila. Como parte integrante do lado dos produtos ainda se realça a presença de energia. De um modo geral, busca-se como características dos propelentes um baixo peso molecular, porém com alto impulso, deseja-se que o propelente possua baixa temperatura de ignição, baixa formação de resíduos após o processo da combustão, entre outras.

Os propelentes existentes podem ser classificados de um modo geral em: líquidos, sólidos ou híbridos. Como o trabalho baseia-se em foguetes a propelentes líquidos, haverá uma maior profundidade neste tipo de propelente, enquanto os demais serão apenas citados.

O termo propelente sólido possui diversas denominações, entre elas: a borracha ou plástico como mistura de oxidante, combustível, e outros ingredientes que tenham sido processados e constituem o grão acabado. Outra possível conotação é: um único ingrediente como combustível ou oxidante. De maneira geral os propelentes sólidos são caracterizados pelo fato de todos os ingredientes utilizados na mistura estarem contidos numa composição química chamada “grão”. Basicamente as possíveis falhas de se ocorrer em um grão são: ruptura, descolamento das paredes de seu compartimento, deformação e autoignição.

Quanto aos propelentes sólidos, os mesmos podem ser classificados em dois grupos: grupo de dupla base e grupo composto. As principais vantagens do uso de propelentes sólidos segundo Paubel (2002) são: manutenção das características físico químicas do grão por longos períodos de tempo, não necessidade de sistema interno de refrigeração e distribuição, e ignição imediata. Contudo, tais vantagens são comprometidas, por exemplo, pelo advento do baixo impulso específico.

O conceito de foguete a propelente híbrido segundo Paubel (2002) é aquele que utiliza uma combinação dos propelentes sólido e líquido tendo este surgido na década de 1930 na Alemanha, recebendo o nome de *litergol*. Várias combinações de combustíveis sólidos e oxidantes líquidos, bem como os combustíveis líquidos e oxidantes sólidos têm sido experimentalmente avaliados para utilização em motores de foguete híbridos como o flúor líquido, o peróxido de hidrogênio como oxidantes e hidrocarbonetos sólidos como combustíveis.

Neste conceito de motor híbrido, o oxidante é injetado numa pré-combustão ou numa câmara de vaporização a montante do grão combustível primário. O grão de combustível contém vários orifícios de combustão axial que geram vapor de combustível para reagir com o oxidante injetado. Uma câmara de mistura é utilizada para assegurar que todo o combustível e o oxidante são queimados antes de sair do bocal (SUTTON e BIBLARZ, 2001).

As principais vantagens na utilização de propelentes híbridos são:

- Maior segurança durante fabricação, armazenamento e operação;
- Sistema de baixo custo;
- Maior impulso específico do que motores-foguete a propelentes sólidos;

Por sua vez, as desvantagens ao se utilizar propelentes híbridos são:

- Razão de mistura e impulso específico podem variar durante o regime permanente de operação;
- Resíduos podem permanecer na câmara de combustão contribuindo para redução da fração mássica (razão entre a massa de um elemento e massa total da mistura) do motor;
- Viabilidade do sistema de propulsão não comprovada em grande escala.

Quanto aos foguetes que utilizam propelentes líquidos, os mesmos possuem uma diferente constituição em comparação aos foguetes que se utilizam de propelentes sólidos. De modo geral, os foguetes são formados por uma ou mais câmaras de empuxo, sistema de alimentação de propelentes e sistema de controle. Geralmente se utilizam propelentes líquidos em motores foguete quando se objetiva fornecer empuxo constante o que permite se trabalhar com pressão fixa na câmara de combustão. Tal propelente pode ser utilizado como: oxidante (oxigênio líquido, ácido nítrico), combustível (gasolina, álcool, hidrogênio líquido), composto químico ou mistura de oxidante e combustível capaz de autodecomposição.

Em relação às características, os propelentes líquidos podem ser divididos em algumas classes (SUTTON e BIBLARZ, 2010):

- Bipropelente: onde se tem dois propelentes líquidos separados, um oxidante e um combustível. Eles são armazenados separadamente e não são misturados fora da câmara de combustão.
- Monopropelente: contém apenas um agente oxidante. Este pode ser uma mistura de vários compostos, ou pode ser um material homogêneo, tal como peróxido de hidrogênio ou de hidrazina. Monopropelentes são estáveis em condições atmosféricas normais, mas se decompõem e produzem gases de combustão quentes quando aquecidos ou catalisados.
- Propelente a gás frio (por exemplo, o nitrogênio) é armazenado sob alta pressão, fornecendo um baixo desempenho, permite a utilização de um sistema simples e geralmente muito confiável. Tem sido utilizado para o controle do movimento de rotação e de altitude.
- Propelente criogênico se torna um gás liquefeito a baixas temperaturas, assim como oxigênio líquido (-183°C) ou hidrogênio líquido (-253°C). Provisões para ventilação do tanque de armazenamento e minimização das perdas de vaporização são necessárias a este tipo de propelente.

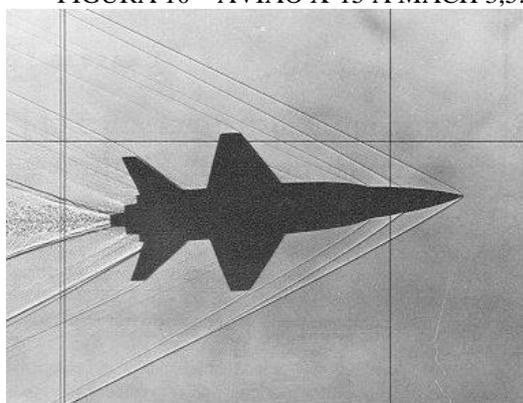
- Propelentes que podem ser armazenados (por exemplo, ácido nítrico ou gasolina) são líquidos a temperatura ambiente e podem ser armazenados por longos períodos em tanques fechados. Propelentes armazenáveis no espaço são líquidos no espaço terrestre. Esta armazenagem depende do design de projeto do tanque, das condições térmicas e de pressão do tanque. Um exemplo é a amônia.
- Propelente com características de gel é um líquido tixotrópico com aditivo. Ele se comporta como uma geléia ou tinta espessa. Tal gênero de propelente não derrama ou vaza prontamente, pode fluir sob pressão, queima em seguida e é mais seguro em alguns aspectos.

Dentre os diversos pares de propelentes líquidos, destaque é dado ao par hidrogênio/oxigênio, utilizado em veículos da série “*Saturn*”, bem como no estágio superior do veículo “*Centaur*” e no motor principal do Ônibus Espacial (BROWN, 1996; SUTTON e BIBLARZ, 2001). Outro exemplo de utilização de propelente líquido é o ônibus espacial *Buran* da Rússia.

### 2.3 TEORIA DE CHOQUES

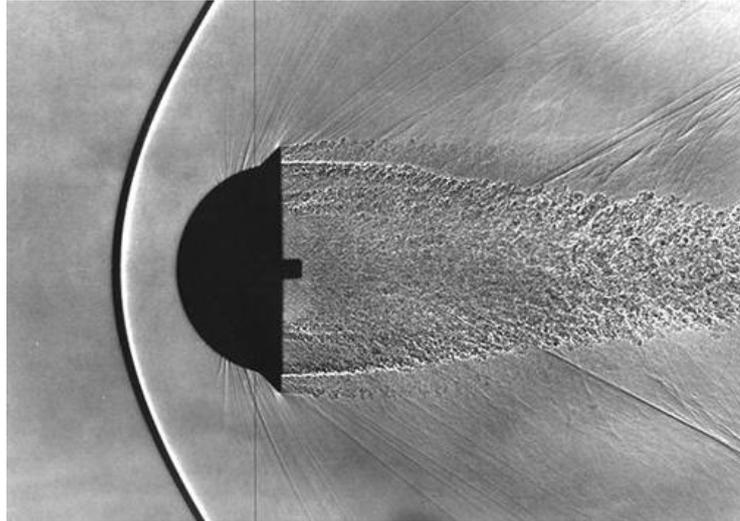
Na abordagem de escoamentos compressíveis, diferentes tipos de comportamento de escoamento podem ser observados como, por exemplo, o escoamento compressível externo em aviões e escoamentos compressíveis internos em túneis de vento e motores foguete. De um modo geral, os fenômenos verificados são: ondas de choque normais, ondas de choque oblíquas e ondas de expansão. Para este trabalho o fenômeno abordado é o de ondas de choques normais.

FIGURA 10 – AVIÃO X-15 A MACH 3,5.



FONTE: NASA (2014).

FIGURA 11 – CORPO ROMBUDO (ONDA DE CHOQUE DESCOLADA).



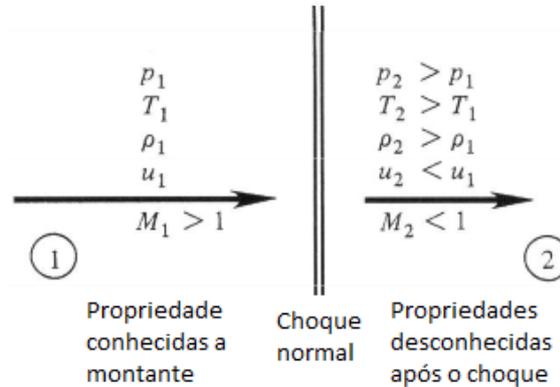
FONTE: NASA (2014).

Segundo John e Keith (2006), o processo de choque representa uma mudança abrupta nas propriedades de fluido em que as variações finitas de pressão, temperatura, densidade ocorrem ao longo de uma pequena espessura comparável com o percurso médio livre das moléculas de gás envolvidas. Ressalta-se ainda que o fluxo supersônico ajusta-se à presença de um corpo por meio de tais ondas de choque, enquanto que o fluxo subsônico se ajusta por mudanças graduais nas propriedades de fluxo.

Nas Figs. 10 e 11 pode-se notar as possíveis formas de onda de choque, que são: ondas de expansão e choques oblíquos sendo o choque normal um caso especial de choque oblíquo. Na Fig.10 observa-se a formação de ondas de expansão na parte traseira do avião bem como choques oblíquos na parte frontal do mesmo. Por sua vez na Fig.11, observa-se a formação de onda de choque oblíquo perante um corpo rombudo. Considerando o formato da onda pode-se observar que existe uma pequena porção da mesma que podemos considerar perpendicular ao escoamento. Neste trecho, pode-se aplicar as relações pertinentes a choques normais, tendo por base o esquema apresentado na Fig.12 e assumir as seguintes hipóteses:

- Considerar as ondas de choque como descontinuidades através das quais elas abruptamente se modificam.
- Considerar as propriedades a montante conhecidas.
- Considera-se escoamento adiabático.
- Gás caloricamente perfeito (calores específicos constantes)

FIGURA 12 – PROCEDIMENTO DE ANÁLISE PARA ONDA DE CHOQUE NORMAL



FONTE: ANDERSON (2003).

Onde as equações da continuidade, de *momentum*, de energia, de estado e entalpia específica para gás caloricamente perfeito são apresentadas respectivamente, considerando-se choque normal:

$$\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2 \quad (2.5)$$

$$p_1 + \rho_1 u_1^2 = p_2 + \rho_2 u_2^2 \quad (2.6)$$

$$h_1 + \frac{u_1^2}{2} = h_2 + \frac{u_2^2}{2} \quad (2.7)$$

$$p = \rho RT \quad (2.8)$$

$$h = c_p T \quad (2.9)$$

onde,  $\rho$  é a massa específica [ $kg/m^3$ ],  $u$  a velocidade normal à onda de choque [ $m/s$ ],  $p$  é a pressão [ $Pa$ ],  $h$  a entalpia específica [ $J/kg$ ],  $R$  a constante universal do gás [ $J/(kg.mol.K)$ ],  $T$  a temperatura [ $K$ ],  $c_p$  o calor específico [ $J/kg.K$ ] e os subíndices 1 e 2 são referentes aos estados 1 e 2, respectivamente.

Partindo-se da relação de Prandtl, sendo esta uma combinação das Eqs.(2.5) a (2.7) e a equação de estado Eq.(2.8), tem-se:

$$a^{*2} = u_1 u_2 \quad (2.10)$$

Trabalhando com a Eq. (2.10), chega-se em

$$1 = \frac{u_1 u_2}{a^* a^*} = M_1^* M_2^* \quad (2.11)$$

$$M_2^* = \frac{1}{M_1^*} \quad (2.12)$$

Onde o índice (\*) representa quando se trabalha com propriedades características que seriam as propriedades de dado escoamento se o mesmo fosse acelerado ou desacelerado isentropicamente até o número de Mach unitário. Pela Fig.12, verifica-se que  $M_1^* > 1$  e  $M_2^* < 1$ . Se utilizando da Eq.(2.13), obtém-se a Eq.(2.14):

$$M^2 = \frac{2}{[(\gamma+1)/M^{*2}] - (\gamma-1)} \quad (2.13)$$

$$M^{*2} = \frac{(\gamma+1)M^2}{2+(\gamma-1)M^2} \quad (2.14)$$

Substituindo a Eq.(2.14) em (2.12)

$$M_2^2 = \frac{1 + [(\gamma-1)/2]M_1^2}{\gamma M_1^2 - (\gamma-1)/2} \quad (2.15)$$

Observa-se com a Eq.(2.15) que o número de Mach a jusante depende apenas do número de Mach a montante. Outro fato bastante interessante é que se  $M_1 = 1$  tem-se  $M_2 = 1$ , para este caso se obtém o que se denomina de onda de Mach. As demais propriedades dependem apenas do número de Mach a montante e da razão de calor específico:

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{u_1}{u_2} = \frac{(\gamma+1)M_1^2}{2+(\gamma-1)M_1^2} \quad (2.16)$$

$$\frac{p_2}{p_1} = 1 + \frac{2\gamma}{\gamma+1}(M_1^2 - 1) \quad (2.17)$$

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{h_2}{h_1} = \left[1 + \frac{2\gamma}{\gamma+1}(M_1^2 - 1)\right] \left[\frac{2+(\gamma-1)M_1^2}{(\gamma+1)M_1^2}\right] \quad (2.18)$$

Matematicamente, as relações obtidas são válidas para qualquer regime de velocidades, contudo fisicamente apenas no caso de escoamentos supersônicos tais relações podem ser empregadas. Para mostrar tal fato, é necessário utilizar a segunda lei da termodinâmica, que origina a seguinte expressão:

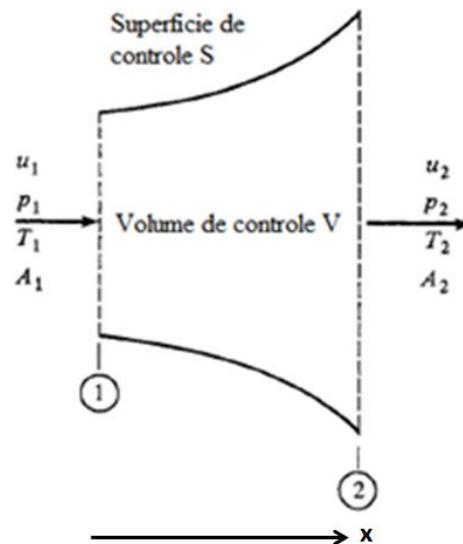
$$s_2 - s_1 = c_p \ln \left\{ \left[1 + \frac{2\gamma}{\gamma+1}(M_1^2 - 1)\right] \left[\frac{2+(\gamma-1)M_1^2}{(\gamma+1)M_1^2}\right] \right\} - R \ln \left[1 + \frac{2\gamma}{\gamma+1}(M_1^2 - 1)\right] \quad (2.19)$$

Para a Eq.(2.19), o escoamento somente será supersônico se o valor da expressão acima for positivo. O aumento de entropia é originado de efeitos viscosos, no caso, atrito e condução de calor. Pelo fato de as variações das propriedades ocorrerem em distâncias muito pequenas, os gradientes originados são elevados o que torna os efeitos viscosos relevantes.

## 2.4 TEORIA DE ESCOAMENTO QUASE UNIDIMENSIONAL

A teoria de escoamento quase unidimensional é bastante importante em estudos preliminares para motor foguete, por se tratar de soluções aproximadas para casos tridimensionais. De um modo geral, a teoria quase unidimensional considera a área em função da posição, ou seja,  $A(x)$  como ilustrado na Fig.13:

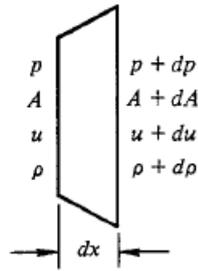
FIGURA 13 - VOLUME DE CONTROLE FINITO PARA ESCOAMENTO QUASE UNIDIMENSIONAL.



FONTE: Adaptado de ANDERSON (2003).

A Fig.13 ilustra um volume de controle finito em que se tem no ponto 1 a entrada no volume de controle e no ponto 2 a sua saída. A abordagem matemática utilizada será a diferencial, uma vez que se tem interesse em diferentes pontos dentro do volume de controle definido, utilizando-se assim o que se denomina de volume incremental, sendo este ilustrado pela Fig.14:

FIGURA 14 - VOLUME INCREMENTAL



FONTE: ANDERSON (2003).

onde  $p, A, u$  e  $\rho$  são respectivamente: pressão, área da seção transversal, velocidade normal ao escoamento e massa específica.

O sistema de equações que abrange essa teoria é

$$d(\rho u A) = 0 \quad (2.20)$$

$$dp = -\rho u du \quad (2.21)$$

$$dh + u du = 0 \quad (2.22)$$

$$h_0 = \text{const.} \quad (2.23)$$

onde, as Eqs.(2.20) a (2.22), representam respectivamente as equações: da continuidade, momentum e da energia. O índice “0” se refere a propriedades de estagnação que seriam as propriedades de um dado escoamento desacelerado isentropicamente até que sua velocidade seja nula. A Eq.(2.23), por sua vez, é em que se assume entalpia específica de estagnação constante como hipótese para a obtenção da relação de áreas.

Das Eqs. (2.20) e (2.21), pode-se obter:

$$\frac{d\rho}{\rho} + \frac{du}{u} + \frac{dA}{A} = 0 \quad (2.24)$$

$$\frac{dp}{\rho} = \frac{dp}{d\rho} \frac{d\rho}{\rho} = -u du \quad (2.25)$$

Como se trata de um escoamento isentrópico, a seguinte expressão é válida:

$$\frac{dp}{d\rho} = \left( \frac{dp}{d\rho} \right)_s = a^2 \quad (2.26)$$

Combinando as Eqs. (2.26) e (2.25)

$$\frac{d\rho}{\rho} = -\frac{u du}{a^2} = -\frac{u^2 du}{a^2 u} = -M^2 \frac{du}{u} \quad (2.27)$$

Substituindo a Eq.(2.27) na Eq.(2.24)

$$\frac{dA}{A} = (M^2 - 1) \frac{du}{u} \quad (2.28)$$

A Eq.(2.28) possui grande importância, uma vez que a mesma representa a relação área-velocidade tanto para difusores como para bocais (tubeadas). Considerando novamente gás caloricamente perfeito e que o escoamento na tubeadas abaixo é puramente isentrópico, têm-se as seguintes relações:

$$M^* = 1 \quad (2.29)$$

$$u^* = a^* \quad (2.30)$$

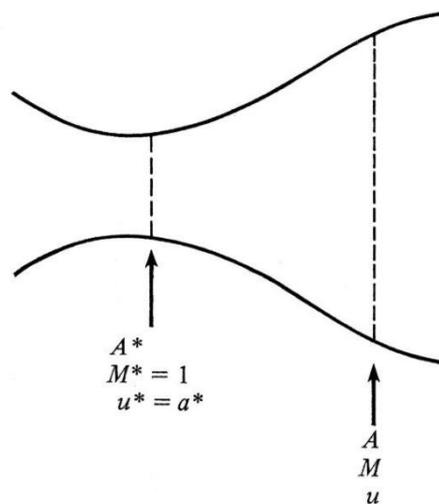
$$\rho^* u^* A^* = \rho u A \quad (2.31)$$

Relacionando as Eqs. (2.30) e (2.31)

$$\frac{A}{A^*} = \frac{\rho^* a^*}{\rho u} = \frac{\rho^* \rho_0 a^*}{\rho_0 \rho u} \quad (2.32)$$

O índice (\*) representa quando se trabalha com propriedades características que seriam as propriedades de dado escoamento se o mesmo fosse acelerado ou desacelerado isentropicamente até o número de Mach unitário.

FIGURA 15 – ANÁLISE DE ÁREAS DA TUBEIRA.



FONTE: ANDERSON (2003).

Considerando as relações isentrópicas como também a expressão que calcula o número de Mach característico ( $M^*$ ) é obtida como resultado a relação área-Mach abaixo:

$$\left(\frac{A}{A^*}\right)^2 = \frac{1}{M^2} \left[ \frac{2}{\gamma+1} \left( 1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2 \right) \right]^{(\gamma+1)/(\gamma-1)} \quad (2.33)$$

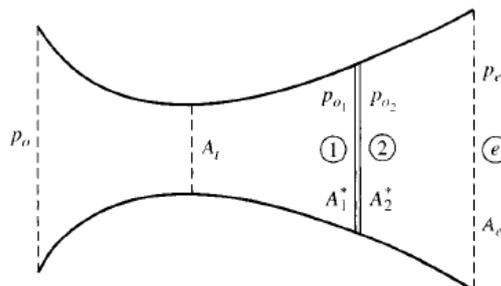
Em vias de projeto, a Eq. (2.33) é bastante importante, pois se definindo a área de saída do bocal é possível de calcular qual é a menor área de garganta possível. Além disso, em vias de projeto se calcula qual deve ser o fluxo de massa para se ter escoamento bloqueado (ou bloqueado). Para a obtenção de escoamento bloqueado (ou bloqueado), deve-se analisar a pressão de saída verificando que ao se chegar um dado patamar é obtido  $M = 1$  na garganta. Ao reduzir ainda mais a pressão de saída da tubeira o número de Mach não se alterará e o escoamento isentrópico na parte convergente do bocal não sofrerá variações na pressão de saída como também no fluxo de massa (ANDERSON, 2003). Para a condição de escoamento bloqueado, o fluxo de massa é calculado pela Eq.(2.33):

$$\dot{m} = \frac{p_0 A^*}{\sqrt{T_0}} \sqrt{\frac{\gamma}{R} \left( \frac{2}{\gamma+1} \right)^{(\gamma+1)/(\gamma-1)}} \quad (2.34)$$

Para a determinação da localização de ondas de choque normal no interior da tubeira, citam-se dois possíveis métodos de solução: método direto e método iterativo. Para o método iterativo se assume o valor para a razão de áreas ( $A/A_t$ ) para o qual o choque ocorre. Obtém-se, então, o valor de  $(p_e/p_0)$ , verificando se o valor obtido é compatível com o valor especificado; se não for, uma nova posição do choque deve ser considerada.

Por sua vez, para o método direto, o primeiro passo é admitir a existência de uma onda de choque normal dentro da tubeira como ilustrado na Fig.16, além de se considerar que a pressão do gás em repouso seja igual à pressão de estagnação.

FIGURA 16 – CONDIÇÕES ASSOCIADAS AO CHOQUE NORMAL DENTRO DA TUBEIRA.



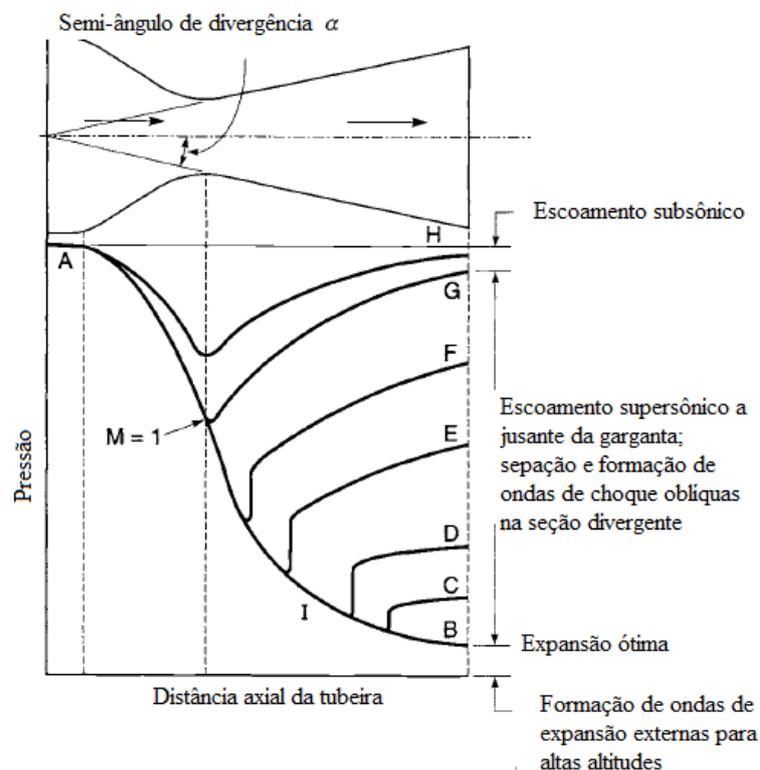
FONTE: ANDERSON (2003).

Se utilizando da Eq.(2.33) e das formulações alternativas, obtém a expressão que calcula o número de Mach na saída da tubeira. Após ter se estabelecido o número de Mach, alguns passos são necessários para se determinar a localização de uma dada onda de choque normal, que são:

- Obter a razão  $p_{0e}/p_e$  a partir do número de Mach na saída da tubeira.
- Calcular a razão entre as pressões de estagnação através do choque para na sequência se obter o valor do número de Mach antes do choque.
- Com o número de Mach antes do choque e conhecendo a área da garganta, determina-se a posição do choque dentro da tubeira.

Outro importante conceito envolvendo a teoria de escoamento quase unidimensional é o que se denomina por bocal subexpandido e bocal superexpandido. Tem-se um bocal subexpandido quando a pressão de saída no bocal for maior que a pressão externa ou ambiente havendo formação de onda de choque oblíqua após a saída do bocal. Por sua vez, tem-se um bocal superexpandido quando a pressão de saída no bocal é menor que a pressão externa ou ambiente, havendo formação de ondas de expansão após a saída do bocal.

FIGURA 17 – DISTRIBUIÇÃO DE PRESSÃO EM TUBEIRA CONVERGENTE-DIVERGENTE PARA DIFERENTES CONDIÇÕES DE ESCOAMENTO.

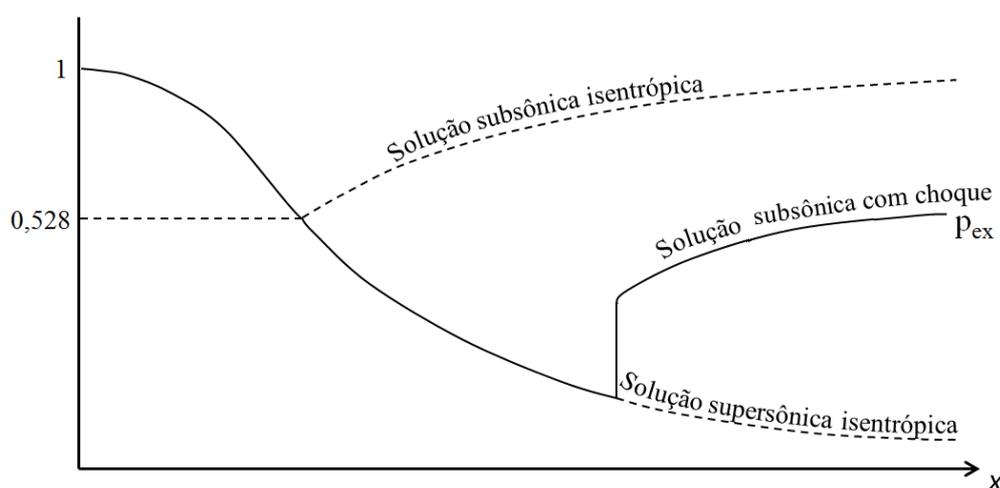


FONTE: Adaptado de SUTTON e BIBLARZ (2001).

Na Fig.17, pode-se verificar as possibilidades de comportamento do escoamento frente à distribuição de pressão. A curva de maior interesse é a curva AB quando se busca trabalhar com escoamento supersônico no divergente do bocal, pois a variação de pressão com a pressão de estagnação ótima corresponde à razão de área ideal, sendo esta utilizada na concepção de projeto do bocal. Para as demais curvas tem-se formação de ondas de choque oblíquas para escoamento bidimensional, exceto entre G e H onde se tem escoamento subsônico.

Ao se considerar o advento de discontinuidades para o caso unidimensional se deve considerar a Fig.18:

FIGURA 18 – SOLUÇÕES ISENTRÓPICAS E ONDA DE CHOQUE INTERNA.



FONTE: SILVA (2015)

A Fig.18 apresenta a razão de pressão pela distância ao longo do bocal. A curva que representa a solução supersônica isentrópica é verificada em um dos problemas propostos neste trabalho considerando os modelos de escoamento congelado e equilíbrio químico local, enquanto que a curva que representa a solução isentrópica com choque também é um problema proposto, contudo considerando escoamento com propriedades constantes.

## 2.5 DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL (CFD)

A dinâmica dos fluidos computacional pode ser definida como sendo a área da computação científica que estuda métodos computacionais para simulação de fenômenos que envolvem fluidos em movimento com ou sem troca de calor (FORTUNA, 2000).

Segundo Versteeg e Malalasekera (2007), dinâmica dos fluidos computacional ou CFD é a análise de sistemas envolvendo escoamento de fluidos, transferência de calor e fenômenos associados, tais como reações químicas por meio de simulação baseadas em computador. Trata-se de uma técnica muito poderosa e se estende por uma ampla gama de áreas de aplicação industrial e não industrial.

O uso de técnicas numéricas para a solução de problemas complexos da engenharia e da física é hoje uma realidade, graças ao vertiginoso desenvolvimento de computadores de alta velocidade e de grande capacidade de armazenamento. Em função dessa disponibilidade computacional, que cresce exponencialmente, o desenvolvimento de algoritmos para a solução dos mais diversos problemas tem recebido enorme atenção dos analistas numéricos e engenheiros, fazendo aumentar, também em taxas acentuadas, o número de pesquisadores e usuários da simulação numérica (MALISKA, 2004).

De um modo geral, a ferramenta computacional se mostra bastante útil e prática devido à possibilidade de se analisar os mais diferentes tipos de modelos físicos existentes. Devido ao constante desenvolvimento de computadores de alta velocidade, a acurácia do valor numérico em relação à solução analítica aumentou através da utilização de malhas ainda mais refinadas. Outra vantagem da utilização da ferramenta computacional é o baixo custo ao se comparar com a montagem de bancada de testes.

Para que a ferramenta computacional seja adequadamente utilizada e de modo concomitante represente com fidelidade um dado fenômeno físico, ou seja, se obtenha uma solução numérica confiável, certos passos devem ser seguidos, que são:

- 1) Definição do problema: nesta etapa deve-se tratar do modelo matemático (equações, condições de contorno e iniciais), geometria do domínio de cálculo e das propriedades dos meios envolvidos no problema.
- 2) Definição do modelo numérico: nesta etapa deve-se tratar do tipo de malha utilizada, do método numérico empregado, tipos de aproximações numéricas, variáveis de interesse, o método de solução do sistema de equações (*solver*), critério de convergência do processo iterativo e também de estimadores de erros numéricos.
- 3) Discretização do domínio de cálculo: trata-se da geração da malha na qual a solução numérica é obtida.
- 4) Discretização do modelo matemático: nesta etapa os termos das equações do modelo matemático (bem como condições de contorno e iniciais) são

aproximados através de um método numérico obtendo-se assim, um sistema de equações algébricas discretizadas.

- 5) Obtenção da solução numérica: utiliza-se de um método (*solver*) direto ou iterativo para a solução do sistema de equações algébricas discretizadas obtidas no passo anterior.
- 6) Visualização e análise de resultados: esta etapa ocorre através de gráficos bi e tridimensionais, vetores e estimativas de erros de modelagem e numéricos.

Os passos anteriormente mencionados são utilizados por métodos numéricos, como: diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos. Tradicionalmente problemas ligados a dinâmica dos fluidos computacional são resolvidos por diferenças finitas ou volumes finitos.

De um modo geral, o método numérico de diferenças finitas é o mais antigo método utilizado na solução numérica de equações diferenciais parciais (EDP's), tratando as equações de conservação na forma diferencial, não sendo um método conservativo em nível discreto. Além disso, em cada ponto da malha as derivadas parciais da equação original são substituídas por aproximações baseadas na expansão da série de Taylor (MALISKA, 2004).

Por sua vez, o método de volumes finitos é baseado na forma integral das equações de conservação, logo no domínio discreto também será conservativo. Neste método, a divisão do domínio ocorre através de volumes de controle e não mais em pontos da malha como em diferenças finitas. Atualmente é um método numérico largamente utilizado por ser de fundamental importância satisfazer os princípios da conservação em nível discreto. Como consequência da premissa do método, o mesmo pode ser conferido para qualquer tamanho de malha, mesmo que grosseira, poupando tempo computacional.

Segundo Maliska (2004), o método de volumes finitos, ainda se destaca dos demais métodos pela capacidade de tratar adequadamente as não linearidades presentes em diversos fenômenos.

## 2.6 FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO

Segundo Marchi (1993), a função de interpolação é uma relação utilizada para expressar os valores das incógnitas do problema e de sua derivada normal nas faces dos volumes de controle.

As funções de interpolação se subdividem em dois grupos: as utilizadas nos termos advectivos e nos termos difusivos. Em princípio, nada impede que se utilizem tais funções de

interpolação em ambos os termos, contudo, pela teoria desenvolvida, verificam-se quais esquemas de interpolação são mais adequados para cada um dos termos.

Segundo Maliska (2004), o termo advectivo tem como característica física a transmissão de perturbações apenas no sentido da velocidade. Matematicamente isto se comprova por ser um termo parabólico. Para tal termo, geralmente se utilizam os seguintes esquemas de interpolação: UDS, QUICK e TVD.

Esquemas que são de primeira como o UDS (*Upstream Difference Scheme*), não produzem dispersão numérica, contudo apresentam elevados níveis de difusão numérica. Para os esquemas de segunda ordem ou de mais alta ordem, notam-se menores níveis de difusão numérica, entretanto, dependendo do escoamento em questão, todos provocam oscilações numéricas ocasionando em um caso extremo, a perda de significado físico.

O esquema UDS é o mais simples e estável de todos (MARCHI, 1993). Tal aproximação satisfaz incondicionalmente um critério conhecido como *boundedness condition* que afirma que, na ausência de termos fontes, os valores nodais internos de determinada variável de interesse, devem estar entre os valores mínimos e máximos das condições de contorno. Outra imposição desta condição é que todos os coeficientes das equações discretizadas tenham o mesmo sinal (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2005). As relações que descrevem tal esquema são:

$$\phi_w = \phi_W \quad \phi_e = \phi_P \quad u \geq 0 \quad (2.35)$$

$$\phi_w = \phi_P \quad \phi_e = \phi_E \quad u \leq 0 \quad (2.36)$$

onde  $\phi$  simboliza a solução numérica da variável dependente para a aproximação UDS, bem como para as aproximações a seguir.

Por sua vez, o esquema QUICK (*Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics*) criado por Leonard é bastante difundido. A ideia desta função de interpolação é aumentar a ordem de aproximação da mesma. As relações que definem as variáveis nas faces para  $u$  positivo e negativo respectivamente são:

$$\phi_e = -\frac{1}{8}\phi_W + \frac{6}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_E \quad (2.37)$$

$$\phi_w = -\frac{1}{8}\phi_{WW} + \frac{6}{8}\phi_W + \frac{3}{8}\phi_P \quad (2.38)$$



Min-Mod	$\psi(r) = \begin{cases} \min(r; 1), & \text{if } r > 0 \\ 0, & \text{if } r \leq 0 \end{cases}$	Roe (1985)
SUPERBEE	$\max [0, \min(2r; 1), \min(r; 2)]$	Roe (1985)
Sweby	$\max [0, \min(1,5r; 1), \min(r; 1,5)]$	Sweby (1984)
QUICK	$\max [0, \min \left( 2r; \frac{3+r}{4}; 2 \right)]$	Leonard (1988)
UMIST	$\max [0, \min \left( 2r; \frac{1+3r}{4}; \frac{3+r}{4}; 2 \right)]$	Lien e Leschziner (1993)
Chakravarthy & Osher	$\max[0; \min(r_e; 2)]$	Chakravarthy e Osher (1983)
Smart	$\max [0; \min (2r_e; \alpha_e r_e + 1 - \alpha_e; (1 - \alpha_e)r_e + \alpha_e; 2)]$	Smart (1994)

FONTE: Adaptado VERSTEEG e MALALASEKERA (2007).

Dentre as opções apresentadas pela Tab.3, trabalhou-se com Min-Mod, Superbee e Sweby, Chakravarthy e Osher (1983) e Smart (1994), respectivamente apresentados abaixo:

$$\psi_e = \begin{cases} \min(r_e; 1), & r_e > 0 \\ 0, & r_e \leq 0 \end{cases} \quad (2.39)$$

$$\psi_e = \max [0, \min(2r_e; 1), \min(r_e; 2)] \quad (2.40)$$

$$\psi_e = \max [0, \min(1,5r_e; 1), \min(r_e; 1,5)] \quad (2.41)$$

$$\psi_e = \max [0; \min(r_e; 2)] \quad (2.42)$$

$$\psi_e = \max [0; \min(2r_e; \alpha_e r_e + 1 - \alpha; (1 - \alpha)r_e + \alpha; 2)] \quad (\alpha = \frac{3}{4}) \quad (2.43)$$

O número de Peclet representa a razão entre os efeitos advectivos e difusivos no escoamento. Se  $P_e > 1$ , tem-se um escoamento com advecção dominante; caso contrário, a difusão é dominante. Para  $P_e > 0$ ,

$$r_e = \frac{\phi_P - \phi_W}{\phi_E - \phi_P} \quad (2.44)$$

$$\alpha_e = \frac{1}{2}(1 - \psi_e) \quad (2.45)$$

Assim:

$$\psi_e = \begin{cases} 0, & \text{então } \alpha_e = \frac{1}{2} & (UDS) \\ 1, & \text{então } \alpha_e = 0 & (CDS) \\ 2, & \text{então } \alpha_e = -\frac{1}{2} & (DDS) \end{cases} \quad (2.46)$$

Um ponto importante a se ressaltar sobre os esquemas TVD é que embora o problema seja linear, o TVD torna a solução numérica não linear.

Atualmente se encontra em ascensão o uso de mais uma função de interpolação denominada ENO (*Essentially Non-Oscillatory*) que tem como propósito alcançar uniformemente uma alta acurácia evitando falsas oscilações nas descontinuidades de choques conhecido como fenômeno de Gibbs. Para tal, é utilizada reconstrução polinomial por partes baseado na matriz estêncil. Tal matriz é escolhida de acordo com a suavidade local do fluxo variável.

Os esquemas ENO são especialmente adequados para os problemas que contêm choques e estruturas de fluxo suaves mais complicadas, tais como os que ocorrem em interações de choque com um fluxo turbulento e interação de choques com os vórtices. As relações que definem uma dada propriedade nas respectivas face oeste e leste para ordem de acurácia 1 são:

$$\phi_e = C_W^e \phi_W + C_P^e \phi_P + C_E^e \phi_E \quad (2.47)$$

$$\phi_w = C_W^w \phi_W + C_P^w \phi_P + C_E^w \phi_E \quad (2.48)$$

Para segunda ordem de acurácia têm-se,

$$\phi_e = C_{WW}^e \phi_{WW} + C_W^e \phi_W + C_P^e \phi_P + C_E^e \phi_E + C_{EE}^e \phi_{EE} \quad (2.49)$$

$$\phi_w = C_{WW}^w \phi_{WW} + C_W^w \phi_W + C_P^w \phi_P + C_E^w \phi_E + C_{EE}^w \phi_{EE} \quad (2.50)$$

Sendo as constantes calculadas por,

$$c_{rj} = \left( \sum_{m=j+1}^k \frac{\sum_{l=0}^k \prod_{q=0, q \neq m, l}^k \left( x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-r+q-\frac{1}{2}} \right)}{\prod_{l=0, l \neq m}^k \left( x_{i-r+m-\frac{1}{2}} - x_{i-r+l-\frac{1}{2}} \right)} \right) \Delta x_{i-r+j} \quad (2.51)$$

$$\tilde{c}_{rj} = c_{r-1,j} \quad (2.52)$$

A utilização das Eqs. (3.33) e (3.34) dependem se o volume analisado se encontra à esquerda ou a direita do estêncil, definido por:

$$S(i) \equiv \{I_{i-r}, \dots, I_{i+s}\} \quad (2.53)$$

onde,  $I_i$  é a localização volume;  $r$  são os volumes à esquerda;  $s$  os volumes à direita,  $k$  a ordem de acurácia ( $r + s + 1 = k$ );  $\Delta x$  – tamanho do volume de controle e  $j, m, l$  são os respectivos contadores.

Por sua vez o termo difusivo, segundo Maliska (2004), é representado matematicamente como um termo elíptico, conseqüentemente, esse termo apresentará efeitos de perturbação que serão difundidos em todas as direções. Para tal termo geralmente se utilizam os seguintes esquemas de interpolação: CDS-2, CDS-2 com correção adiada e CDS-4.

O esquema CDS-2 é uma função de interpolação de 2ª ordem apenas entre dois pontos nodais. Como vantagem do esquema CDS-2 pode-se ressaltar sua simplicidade. Tal vantagem tornou o esquema bastante difundido, onde sua formulação é a seguinte em cada face:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x_e} \quad (2.54)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_w = \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x_w} \quad (2.55)$$

onde  $\Delta x_e$  e  $\Delta x_w$  são os tamanhos dos elementos de malha que envolvem o nó  $E$  e o nó  $W$ , respectivamente.

### 2.6.1 Justificativa de seleção de funções de interpolação

Como este trabalho visa estudar diferentes funções de interpolação para a resolução da equação de Euler unidimensional, seja na presença de descontinuidades ou não, buscou-se aprofundar os estudos em esquemas numéricos de maior ordem de acurácia. Assumida tal premissa, optou-se por trabalhar com os esquemas UDS e CDS comparando seus comportamentos e nuances com os esquemas: QUICK, TVD conforme Tab.3 e ENO.

Diversas funções de interpolação ao serem implementadas para o problema proposto divergiram, como: QUICK, Van Leer, Van Albada e UMIST. Quanto ao esquema ENO, diversas adaptações foram testadas, contudo a linguagem não se adaptou ao programa computacional utilizado para as demais funções de interpolação.

### 3 METODOLOGIA

Neste trabalho, as seguintes ferramentas serão abordadas: método dos volumes finitos, funções de interpolação como TVD e CDS, o código computacional Mach1D como também procedimentos de verificação e validação do problema tratado. A ferramenta que engloba alguns dos pontos tratados é justamente o programa Mach1D que utiliza do método de volumes finitos, de funções de interpolação e atende o requisito de resolver os escoamentos estudados (escoamento congelado, escoamento em equilíbrio químico e escoamento com taxa finita de reação) com a teoria de escoamento quase unidimensional, obtendo na sequência, os campos das variáveis de interesse. Posterior à obtenção dos campos das variáveis de interesse, realiza-se o processo de verificação e validação do problema.

#### 3.1 MODELO MATEMÁTICO

Levando-se em conta Marchi *et al.*(2004), Silva (2015) bem como o programa Mach1D, que tem por função a resolução de escoamento quase unidimensional de gases no interior do motor foguete, as equações de conservação de massa, da quantidade de movimento linear, da energia e de estado mostradas respectivamente abaixo se fazem presentes:

$$\frac{d}{dx}(\rho u A) = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{d}{dx}(\rho u A u) = -A \frac{dP}{dx} \quad (3.2)$$

$$c_p \frac{d}{dx}(\rho u A T) + \frac{d}{dx}\left(\rho u A \frac{u^2}{2}\right) = S_{eq} \quad (3.3)$$

$$P = \rho R T \quad (3.4)$$

onde:  $\rho$ ,  $u$ ,  $P$  e  $T$  são as quatro variáveis de interesse, representando massa específica, velocidade, pressão e temperatura, respectivamente;  $x$  representa a coordenada axial da tubeira;  $A$  a área da seção transversal ao longo do eixo longitudinal da tubeira;  $R$  a constante de mistura de gases no interior da tubeira e  $c_p$  o calor específico a pressão constante da respectiva mistura;  $S_{eq}$  representa o termo fonte químico reativo definido por

$$S_{eq} = - \sum_{i=1}^N h_i \frac{d}{dx}(\rho u A Y_i) \quad (3.5)$$

Em que  $h_i$  representa a entalpia da espécie química  $i$ ,  $Y_i$  é a fração mássica da espécie da espécie química  $i$  e  $N$  é o número total de espécies químicas.

Ao analisar as equações 3.1 a 3.5, se nota a presença de variações temporais das variáveis de interesse (massa específica, velocidade, temperatura e pressão), sendo este utilizado apenas como parâmetro de relaxação (falso transiente) para a obtenção da solução numérica.

### 3.2 MÉTODO DE VOLUMES FINITOS

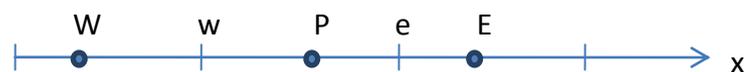
O método de volumes finitos (MFV) é um dos possíveis meios para a resolução de uma ou mais equações diferenciais. Tal método constitui na obtenção de equações aproximadas satisfazendo a condição de conservação das propriedades em nível de volumes elementares (MALISKA, 2004).

Existem duas maneiras de se obter equações aproximadas, sendo a primeira delas a realização de balanços da propriedade em questão nos volumes elementares e uma segunda forma é integrar sobre o volume elementar, no espaço e no tempo, as equações na forma conservativa. Na segunda maneira os fluxos estão dentro do sinal da derivada da equação diferencial, por sua vez, ao se integrar tal equação, aparecem os fluxos nas fronteiras do volume elementar.

A maneira de utilização do método dos volumes finitos será baseada na segunda maneira, para a qual existem quatro passos:

- Discretização do domínio de cálculo com volumes de controle, utilizando-se, por exemplo, a malha unidimensional da Fig.19:

FIGURA 20 - MALHA UNIDIMENSIONAL NÃO UNIFORME DE FACES CENTRADAS ENTRE NÓS



FONTE: O autor (2016)

onde: P é o volume de controle sobre qual o modelo matemático é discretizado; W, E são os volumes de controle vizinhos a P, à esquerda e à direita, respectivamente; w, e são faces do volume de P, à esquerda e à direita, respectivamente.

- Integração do modelo matemático sobre cada volume de controle (VC).
- Aplicação do teorema de Gauss.

- Aplicação de funções de interpolação conectando o nó  $P$  a seus vizinhos, após o procedimento de integração do sistema de equações.

As equações (3.1) a (3.3) apresentadas na seção anterior foram discretizadas do método de volumes finitos, através de uma formulação segregada para malha não uniforme de faces centradas entre nós (Fig.19) e um sistema de variáveis co-localizadas (ou seja, todas as variáveis são solucionadas no interior do volume de controle, em uma malha única).

Com a integração das equações (3.1) a (3.3) em um volume de controle, surgem variáveis que devem ser avaliadas nas faces, assim faz-se presente aproximações que são realizadas através de funções de interpolação que serão vistas na próxima seção.

Considerando o sistema de equações (3.1) a (3.3) e que se utiliza a formulação segregada onde este é um processo requer que cada variável tenha uma equação evolutiva, dois procedimentos de acoplamento serão necessários: o acoplamento pressão-velocidade e o acoplamento pressão-densidade. Como método de tratamento do acoplamento pressão-velocidade, o método SIMPLEC será adotado.

Em se tratando do acoplamento pressão-velocidade, o objetivo do mesmo é transformar a equação de conservação de massa em uma equação para a pressão. Para a realização do acoplamento duas formulações podem ser levadas em consideração, que são: formulação compressível e formulação incompressível. Entende-se aqui por compressível, do ponto de vista numérico, o escoamento em que  $\rho$  varia fortemente com a pressão, enquanto que a formulação incompressível é utilizada quando  $\rho$  varia apenas com a temperatura. Os passos pertinentes a cada uma das formulações são mencionados em Maliska (2004), respectivamente. O desafio é basicamente determinar um campo de pressões que, quando inserido nas equações do movimento, origine um campo de velocidades que satisfaça a equação de conservação da massa.

O método SIMPLEC utilizado para o acoplamento pressão-velocidade é originado do método SIMPLE, onde a sua diferença é no fato de não desprezar a diferença  $u - u^*$  para o caso unidimensional, onde  $u^*$  a melhor estimativa para a velocidade  $u$ . O método SIMPLE e consequentemente o SIMPLEC são métodos baseados nas ideias de Chorin. Nesses procedimentos a pressão é escrita como a soma da melhor estimativa da pressão disponível,  $P^{ant}$ , mais uma correção  $P'$ , que é calculada de maneira a satisfazer a equação da continuidade, ou seja,  $P = P^{ant} + P'$ .

Segundo Maliska (2004), praticamente em todos os métodos para tratamento do acoplamento pressão-velocidade, a sequência de cálculo envolve dois passos distintos, já

presentes no método de Chorin: no primeiro, as velocidades são corrigidas de maneira a satisfazer a equação de conservação de massa; no segundo, as pressões são avançadas para completar o ciclo iterativo.

Considerando a formulação para escoamentos incompressíveis, o procedimento para determinar uma equação para  $P$  ou  $P'$  é substituir as velocidades ou a velocidade em casos unidimensionais através das equações de correção em função da pressão (ou correção da pressão) na equação da conservação da massa, parece lógico que, caso se deseje manter a massa específica igualmente ativa, basta substituí-la, também, como uma função da pressão (acoplamento pressão-massa específica). Assim, a equação de conservação da massa se transforma em uma equação para a pressão que carrega os efeitos desta sobre a velocidade e sobre a massa específica. A linearização para este procedimento é necessária caso se deseje um sistema de equações algébricas lineares.

De modo similar quando se utiliza SIMPLEC para o acoplamento pressão-velocidade e busca-se corrigir a velocidade em função de  $P'$  e recorre-se a equação do movimento, ao se utilizar o SIMPLEC para o acoplamento pressão-massa específica se recorre à equação de estado, onde a mesma é linearizada da seguinte forma:

$$\rho = C^{\rho} + B^{\rho} \quad (3.16)$$

onde  $C$  e  $B$  são constantes. Na sequência se busca por expressões para a correção da massa específica.

### 3.3 CONTEXTUALIZAÇÃO DAS FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO

Devido às restrições mencionadas na seção 2.6.1, faz-se presente as seguintes funções de interpolação, que de fato serão consideradas no próximo capítulo:

TABELA 4 - FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO SIMULADAS

Ordem de acurácia	Nome
1 <sup>a</sup>	UDS
2 <sup>a</sup>	CDS
	TVD Chakravarthy & Osher
	TVD Min-Mod
	TVD Smart
	TVD Superbee
	TVD Sweby

FONTE: O autor (2017)



se, no entanto, que os resultados das soluções numéricas devem ser uma representação acurada da realidade, assegurando a confiabilidade necessária ao programador e/ou usuário do código (ROY, 2005).

Com o intuito de se obter confiabilidade nas soluções numéricas, recorre-se usualmente a duas ferramentas: a validação e a verificação (ROY, 2005). A validação relaciona-se com o grau de fidelidade que um determinado modelo apresenta ao representar certo fenômeno físico. Realiza-se esta análise, em geral, comparando-se sistematicamente os valores obtidos com resultados experimentais (METHA, 1996; AIAA, 1998; ROACHE, 1998; FORTUNA, 2000; ROY, 2005). A verificação, por sua vez, relaciona-se com o grau de correção de um modelo implementado, isto é, deve-se confirmar que a implementação de um modelo (representada por equações, parâmetros e métodos numéricos adotados) representa sua descrição conceitual (METHA, 1996; AIAA, 1998; ROACHE, 1998; FORTUNA, 2000).

Existem dois aspectos fundamentais ligados à verificação: a verificação do código e a verificação da solução. A verificação do código constitui-se na asserção, tanto quanto possível, de que não existem erros ou inconsistências no algoritmo implementado. A verificação da solução, por outro lado, consiste no processo de quantificação dos erros (numéricos) decorrentes de toda e qualquer simulação numérica.

De um modo geral, a solução numérica de problemas de escoamento de fluidos (e de transferência de calor) origina, somente, soluções aproximadas. Desta forma, surge uma diferença entre a solução numérica ( $\phi$ ) e a analítica exata ( $\Phi$ ), para qualquer variável de interesse, sendo tal diferença denominada de erro da solução numérica ou, simplesmente, erro numérico –  $E(\phi)$  (FERZIGER e PERIĆ, 2001):

$$E(\phi) = \Phi - \phi \quad (3.19)$$

Este erro pode ser ocasionado por diversas fontes, sendo classificado em (MARCHI, 2001): erros de truncamento, erros de iteração, erros de arredondamento e erros de programação.

A magnitude aceitável para o erro numérico depende, entre outros fatores, da finalidade da solução numérica, dos recursos financeiros envolvidos, do tempo permitido para realizar as simulações e dos recursos computacionais disponíveis. Sabendo-se que as soluções numéricas contêm erros, é importante estimá-los pelos seguintes motivos (MARCHI, 2001):

- quando o erro é maior que o aceitável, compromete-se a confiabilidade do uso da solução numérica;

- quando o erro é menor que o necessário, há desperdício de recursos computacionais (tempo de processamento e quantidade de memória);
- para validar e desenvolver modelos matemáticos que visem explicar modelos físico-químicos ainda não modelados adequadamente e cujas soluções analíticas são desconhecidas (como exemplo, cita-se a modelagem de escoamentos turbulentos);
- para otimizar o uso da malha, isto é, adaptá-la visando homogeneizar o nível de erro no domínio de cálculo;
- para evitar interpretações equivocadas.

O erro numérico independe dos resultados experimentais, sendo avaliado, entretanto, somente quando a solução analítica do problema é conhecida. Deste modo, para a grande maioria dos problemas práticos, cuja solução analítica é desconhecida, o erro numérico não pode ser obtido. Deve-se, então, estimar o valor da solução analítica, calculando-se, nesse caso, um erro estimado, também denominado incerteza ( $U$ ) da solução numérica (METHA, 1996) ou estimativa do erro, conforme convenção adotada neste trabalho. Desta forma, a incerteza da solução numérica de uma variável de interesse qualquer é avaliada através da diferença entre sua solução analítica estimada ( $\phi_{\infty}$ ) e a própria solução numérica, ou seja,

$$U(\phi) = \phi_{\infty} - \phi \quad (3.20)$$

Alguns conhecidos estimadores podem ser utilizados para esses casos como: estimador de Richardson, GCI (*Grid Convergence Index*), delta, bicoeficiente, tricoeficiente, multicoeficientes. Para o presente trabalho será utilizado o estimador GCI, onde a incerteza de uma solução numérica é calculada segundo Roache(1998):

$$U_{GCI}(\phi_1) = F_S \frac{|\phi_1 - \phi_2|}{(q^{p_L} - 1)} \quad (3.21)$$

onde  $F_S$  é um fator de segurança com valor igual a três para aplicações em geral,  $p_L$  a ordem assintótica do erro,  $\phi_1$  representa a solução numérica da malha mais fina e  $\phi_2$  representa a solução numérica da malha mais grossa

A solução numérica de um modo geral é representada da seguinte forma:

$$\phi = \phi_1 \pm U \quad (3.22)$$

sendo,  $\emptyset_1$  a solução numérica da malha mais refinada e  $U$  a estimativa do erro.

Além da análise de erro, em um processo de verificação se faz necessário a análise das ordens a priori e a posteriori como também de compará-las. Uma possível forma de análise a priori é a obtenção das ordens verdadeiras e assintótica do erro de truncamento. O erro de truncamento ( $\varepsilon$ ) de uma equação diferencial ou de uma aproximação numérica qualquer pode ser representado genericamente por (FERZIGER e PERIC, 1999)

$$\varepsilon(\emptyset) = c_1 h^{p_L} + c_2 h^{p_2} + c_3 h^{p_3} + c_4 h^{p_4} + \dots \quad (3.23)$$

onde os coeficientes  $c_i$  podem assumir tanto valores positivos como negativos e pode ser função da variável dependente ( $\Lambda$ ) e de suas derivadas, logo o coeficiente pode variar com a coordenada  $x$ , contudo independe do tamanho( $h$ ) do elemento de malha.

Por definição, os coeficientes não nulos da equação do erro de truncamento são denominados como sendo as ordens verdadeiras( $p_V$ ), sendo estas  $p_L, p_2, p_3, p_4$ . As ordens verdadeiras seguem a relação  $p_L < p_2 < p_3 < p_4 < \dots$ . De um modo geral, as ordens verdadeiras são números inteiros e positivos onde a diferença entre as ordens é constante.

Por sua vez, define-se ordem assintótica ( $p_L$ ) da equação do erro de truncamento como sendo o menor expoente de  $h$  na Eq.(3.23). De um modo geral, é um número inteiro e positivo que respeita a condição  $p_L \geq 1$ . Quando o tamanho  $h$  dos elementos da malha tende a zero, ou seja,  $h \rightarrow 0$ , o primeiro termo do erro de truncamento é o principal componente, isto é, ele domina o valor total de  $\varepsilon$ . Neste caso, em gráficos logarítmicos de  $\varepsilon$  versus  $h$  a inclinação em relação ao eixo das abcissas da curva de  $\varepsilon$  para  $h \rightarrow 0$  tende ao valor da ordem assintótica (MARCHI, 2001).

Para a realização de análises a posteriori, dois novos conceitos são bastante importantes, que são os conceitos de ordem efetiva e ordem aparente. A ordem efetiva ( $p_E$ ) é definida como sendo a inclinação local da curva do erro de discretização ( $E$ ) da solução numérica( $\emptyset$ ) versus o tamanho ( $h$ ) dos elementos da malha num gráfico logarítmico. Segundo Marchi (2001), o cálculo da ordem efetiva permite verificar na prática, isto é, a posteriori das soluções numéricas, se à medida que  $h$  é reduzido, a ordem do erro de discretização das soluções numéricas tende a ordem assintótica dos erros de truncamento, ordem esta que é um resultado teórico, obtido a priori das soluções numéricas. Matematicamente, a ordem efetiva( $p_E$ ) pode ser obtida por

$$C_E h^{p_E} = E(\emptyset) \quad (3.24)$$

sendo que,  $C_E$  é assumido como sendo um coeficiente independente do tamanho( $h$ ) de elemento de malha. Basicamente existem duas formas de obtenção da ordem efetiva, a primeira deles é obtendo o erro de discretização que é fornecido pela Eq.(3.19), sendo necessário se ter duas soluções numéricas. Para este primeiro caso pode se utilizar a Eq.(3.25) para a obtenção de  $p_E$

$$p_E = \frac{\log\left[\frac{E(\emptyset_2)}{E(\emptyset_1)}\right]}{\log(q)} \quad (3.25)$$

sendo  $q$  a razão de refino de malha definido por

$$q = \frac{h_2}{h_1} \quad (3.26)$$

A segunda forma de obtenção de  $p_E$ , é através da Eq.(3.27):

$$E(\emptyset) = C_1 h^{p_L} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + C_4 h^{p_4} + \dots \quad (3.27)$$

onde a mesma se baseia em apenas uma única solução numérica. Para este segundo modo à fórmula de obtenção de  $p_E$  será

$$p_E = \frac{\log(\psi_E)}{\log(q)} \quad (3.28)$$

sendo  $\psi_E$  denominado por razão de redução do erro de discretização e definido por

$$\psi_E = \frac{E(\emptyset_2)}{E(\emptyset_1)} \quad (3.29)$$

O segundo importante conceito é de ordem aparente que é definido em Marchi (2001) como sendo a inclinação local da curva da incerteza ( $U$ ) da solução numérica ( $\emptyset$ ) *versus* o tamanho ( $h$ ) dos elementos da malha em um gráfico logarítmico. Seu cálculo permite verificar na prática, isto é, a posteriori das soluções numéricas, se a medida que  $h$  é reduzido, a ordem da incerteza das soluções numéricas tende à ordem assintótica dos

erros de truncamento, ordem esta que é um resultado teórico, obtido a priori das soluções numéricas. Matematicamente, a ordem aparente ( $p_U$ ) é definida por

$$K_U h^{p_U} = U(\phi) \quad (3.30)$$

onde  $K_U$  é um coeficiente que é admitido como sendo independente de  $h$ . Por sua vez a incerteza ( $U$ ) é definida como

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi \quad (3.31)$$

Assim,

$$K_U h^{p_U} = \phi_\infty - \phi \quad (3.32)$$

Para a obtenção da ordem aparente deve-se utilizar a Eq.(3.32) para três soluções numéricas ( $\phi_1, \phi_2, \phi_3$ ), obtidas em três malhas diferentes ( $h_1, h_2, h_3$ ) onde as incógnitas serão  $\phi_\infty, K_U$  e  $p_U$ . Resolvendo o sistema chega-se a

$$p_U = \frac{\log \left[ \psi_U \frac{(q_{21}^{p_U} - 1)}{(q_{32}^{p_U} - 1)} \right]}{\log(q_{21})} \quad (3.33)$$

assumindo que a razão de uma solução para outra seja diferente, contudo se a razão de refino for a mesma obtém-se

$$p_U = \frac{\log(\psi_U)}{\log(q)} \quad (3.34)$$

onde  $\psi_U$  é denominado por razão de convergência da solução numérica para a analítica e definida por,

$$\psi_U = \frac{(\phi_2 - \phi_3)}{(\phi_1 - \phi_2)} \quad (3.35)$$

### 3.5 PROGRAMA MACH1D

O programa Mach1D tem como objetivos: a obtenção das propriedades termoquímicas locais da mistura gasosa de combustão, dos parâmetros de desempenho como a velocidade de exaustão dos gases e o coeficiente de descarga, como também de captura de

descontinuidades (choques). O código computacional é escrito em linguagem Fortran 95 e apresenta seis modelos físicos (e matemáticos) distintos, que são:

- a) solução analítica de escoamento monoespécie com propriedades constantes;
- b) solução numérica de escoamento monoespécie com propriedades constantes;
- c) solução numérica de escoamento monoespécie com propriedades variáveis;
- d) solução numérica de escoamento congelado;
- e) solução numérica de escoamento em equilíbrio químico local;
- f) solução numérica de escoamento com taxa finita de reação.

Segundo mencionado no Relatório técnico 3 do projeto CFD-5/UFPR (2007), a solução analítica (isentrópica) é calculada qualquer que seja o modelo físico adotado. Isto se deve ao de que seus resultados são utilizados como estimativa inicial para os demais modelos físicos. Nos três primeiros modelos físicos, não são utilizados modelos de reações químicas por se tratar de escoamento monoespécie. A presença desses modelos só é observada para os modelos que de mistura de gases, uma vez que para tais modelos há a necessidade do conhecimento da composição química da mistura gasosa para a determinação de suas propriedades termodinâmicas.

Dentre os modelos físicos apresentados nesta seção, considerou-se para a resolução da equação de Euler unidimensional, o primeiro, segundo, quarto e quinto modelos. O primeiro modelo é utilizado para os demais no intuito de se calcular o erro numérico em relação à solução numérica obtida. Para tal, é necessário introduzir a teoria pertinente aos modelos físicos, suas particularidades quanto ao equacionamento como também o algoritmo implementado no programa Mach1D.

### 3.5.1. Solução analítica de escoamento monoespécie com propriedades constantes

Retomando as Eqs.(3.1) a (3.4), e considerando que se trata de um modelo de escoamento monoespécie as Eqs.(3.1), (3.2) e (3.4) se mantém inalteradas enquanto a Eq.(3.3) é simplificada pela ausência do termo fonte químico reativo  $S_{eq}$ , conforme segue:

$$c_p \frac{d}{dx}(\rho u A T) = - \frac{d}{dx} \left( \rho u A \frac{u^2}{2} \right) \quad (3.36)$$

Através da solução analítica das Eqs.(3.1),(3.2),(3.3) e (3.36), obtém-se as relações gasodinâmicas para as propriedades de estagnação, considerando o escoamento em tubearas, como um escoamento isentrópico unidimensional:

$$P = P_0 \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)^{-\gamma/(\gamma-1)} \quad (3.37)$$

$$T = T_0 \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)^{-1} \quad (3.38)$$

$$\rho = \rho_0 \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)^{-1/(\gamma-1)} \quad (3.39)$$

$$u = M \sqrt{\gamma R T_0 \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)^{-1}} \quad (3.40)$$

Por fim, para a determinação do número de Mach local, faça-se necessário o conhecimento da geometria do bocal convergente-divergente, incluindo a região da garganta, também denominada por área crítica:

$$\frac{A}{A^*} = \frac{1}{M} \left[ \frac{2}{\gamma+1} \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right) \right]^{(\gamma+1)/[2(\gamma-1)]} \quad (3.41)$$

sendo:  $A^*$  a área crítica em  $m^2$ ,  $\gamma$  a relação de calores específicos e  $R$  a constante universal dos gases. A Eq.(3.41), pode ser solucionada numericamente, através de técnicas de solução para equações não-lineares como, por exemplo, o método de Newton.

### 3.5.2. Solução numérica de escoamento monoespécie com propriedades constantes

A modelagem matemática para escoamento monoespécie com propriedades constantes é bastante similar em relação às equações governantes da seção 3.1, sendo alterado apenas a Eq.(3.3) pela Eq.(3.36), conforme segue:

$$\frac{d}{dx} (\rho u A) = 0 \quad (3.42)$$

$$\frac{d}{dx} (\rho u A u) = -S \frac{dP}{dx} \quad (3.43)$$

$$c_p \frac{d}{dx} (\rho u A T) = - \frac{d}{dx} \left( \rho u A \frac{u^2}{2} \right) \quad (3.44)$$

$$P = \rho RT \quad (3.45)$$

sendo, respectivamente, as equações de conservação de massa, da quantidade de movimento linear, da energia e de estado.

Dentre os modelos de escoamentos estudados neste trabalho, o mostrado pela presente seção, representa o modelo mais simplificado ao se considerar o evento da simulação numérica, uma vez que não se tem reações químicas.

É apresentado, na sequência, o algoritmo utilizado pelo programa Mach1D para a solução de escoamento monoespécie com propriedades constantes já considerando as Eqs.(3.42) a (3.44) discretizadas, bem como a Eq.(3.45), referente a equação de estado para gases perfeitos:

1. Inicialização dos campos no instante de tempo  $t$ , utilizando a solução analítica – Eqs.(3.37) a (3.40).
2. Estimativa dos campos para o tempo  $t + \Delta t$ .
3. Estimativa da pressão de entrada da câmara ( $P_{in}$ ), através da Eq.(3.37). O número de Mach na entrada é calculado pela relação

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} \quad (3.46)$$

sendo a velocidade de entrada ( $u_{in}$ ) uma velocidade média, obtida pela teoria SIMPLEC mostrada na seção 3.2 e implementada pela Eq.(3.47):

$$u_e = u_e^{ant} - d_e(P'_E - P'_P) \quad (3.47)$$

onde  $u_e$  e  $u_e^{ant}$  representam a velocidade a ser calculada e velocidade anterior referente a face leste, respectivamente. Por sua vez,  $P'_E$  e  $P'_P$ , representam as correções de pressão para os volumes  $E$  e  $P$ . Por fim,  $d_e$  é um fator advindo do acoplamento pressão-velocidade, sendo este calculado por:

$$d_e = \frac{1}{2}(d_P + d_E) \quad (3.48)$$

onde  $d_P$  e  $d_E$ , relacionam a área do respectivo volume e os coeficientes de velocidade dos respectivos vizinhos, conforme segue:

$$d_p = \frac{S_p}{a_W^u + a_p^u + a_E^u} \quad (3.49)$$

4. Cálculo dos coeficientes da velocidade ( $u_p$ ) (para mais detalhes consultar capítulo 3 do Relatório técnico 3 do projeto CFD-5/UFPR (2007)).
5. Solução da velocidade ( $u_p$ ), através do método TDMA.
6. Cálculo dos coeficientes do método SIMPLER – Eqs.(3.48) e (3.49).
7. Cálculo das velocidades nas faces dos volumes ( $u_e$ ) (para mais detalhes consultar capítulo 3 do Relatório técnico 3 do projeto CFD-5/UFPR (2007)).
8. Estimativa da temperatura na entrada da câmara ( $T_{in}$ ), através da seguinte expressão:

$$T_{in} = T_0 - \frac{1}{2}(\gamma - 1) \left( \frac{u_{in}^2}{\gamma R} \right) \quad (3.50)$$

9. Cálculo dos coeficientes e termos fontes da temperatura ( $T_p$ ) (para mais detalhes consultar capítulo 3 do Relatório técnico 3 do projeto CFD-5/UFPR (2007)).
10. Solução da temperatura ( $T_p$ ), através do método TDMA.
11. Cálculo da massa específica ( $\rho_p$ ), através das Eq.(3.51), inclusive para volumes fictícios:

$$\rho_p = \frac{P_p}{RT_p} \quad (3.51)$$

12. Cálculo da massa específica nas faces dos volumes ( $\rho_e$ ), através da Eq.(3.52)

$$\rho_e = \rho_p + \frac{\beta}{2}(\rho_E - \rho_p) \quad (3.52)$$

A Eq.(3.52) é utilizada para se estimar a massa específica nas faces de todos os volumes, exceto para o último fictício. Para tal estimativa, se considera o fator  $\beta$  que varia entre 0 e 2. Quando se trabalha com  $\beta = 0$ , trata-se de UDS, enquanto que para  $\beta = 1$  (CDS) e para  $\beta \geq 1$  (TVD).

13. Cálculo dos coeficientes e dos termos fontes da correção da pressão ( $P'_p$ ) (para mais detalhes consultar capítulo 3 do Relatório técnico 3 do projeto CFD-5/UFPR (2007)).
14. Solução da correção de pressão ( $P'_p$ ), utilizando TDMA.

15. Correção dos valores da pressão ( $P_p$ ), da massa específica ( $\rho_p$ ), da velocidade nas faces dos volumes ( $u_e$ ) e da velocidade no centro dos volumes ( $u_p$ ), utilizando os valores da correção da pressão ( $P'_p$ ), através das Eqs.(3.47), (3.53),(3.54) e (3.55):

$$u_p = u_p^{ant} - d_p \frac{(P'_E - P'_W)}{2} \quad (3.53)$$

$$P = P^{ant} + P' \quad (3.54)$$

$$\rho = \rho^{ant} + \frac{P'}{RT} \quad (3.55)$$

16. Correção da massa específica nas faces dos volumes ( $\rho_e$ ).

17. Retornar ao item 2, até atingir o número desejado de iterações.

18. Pós-processamento.

### 3.5.3. Solução numérica de escoamento congelado

Com relação ao modelo físico adotado nesta seção, o mesmo difere do apresentado na seção anterior fundamentalmente pelo fato de aqui ser considerada uma mistura de gases, onde se tem uma reação química de dissociação e as espécies envolvidas são:  $H_2O$ ,  $O_2$  e  $H_2$ . No escoamento congelado supõe-se que a composição química dos gases de combustão seja a mesma, desde a câmara de combustão até a exaustão da tubeira. Pelo fato da composição ser a mesma dentro do trecho mencionado anteriormente, somente se tem a composição calculada uma única vez na determinação da mistura homogênea dos gases no processo de combustão. Esta combustão é modelada através de um modelo ideal, onde o mesmo não leva em consideração fenômenos como mudança de fase da mistura combustível-oxidante ou parâmetros como o tamanho das gotas de combustível. Considera-se ainda uma mistura perfeitamente homogênea.

O modelo matemático apresentado na seção na seção anterior é mantido, contudo, deve-se atentar que as variáveis como o calor específico a pressão constante ( $c_p$ ) e a massa específica ( $\rho$ ) são calculados para uma mistura de gases e não mais para uma única espécie gasosa. Assim, é primordial levar em consideração as frações mássicas ( $Y_i$ ) de cada espécie química  $i$  presente na mistura, através da relação:

$$\Theta = \sum_{i=1}^N Y_i \Theta_i \quad (3.56)$$

onde  $\Theta$  é a propriedade (média) da mistura de gases e  $\Theta_i$  é a propriedade para a espécie química  $i$ .

Em relação ao algoritmo apresentado na seção 3.5.2 para o escoamento monogás a propriedades constantes, existem duas alterações ao se considerar o escoamento congelado e por consequência uma mistura de gases:

- No passo 1, há a necessidade da inicialização dos campos de viscosidade absoluta ( $\mu$ ), da condutividade térmica ( $k$ ), do calor específico a pressão constante ( $c_p$ ) e da temperatura na parede ( $T_{wall}$ ).
- No passo 3, há a necessidade do cálculo para cada volume de controle  $P$ : do calor específico  $[(c_p)_P]$ , através de polinômios interpoladores do trabalho de McBride *et al.*(1993); da razão entre calores específicos ( $\gamma_P$ ), através da Eq.(3.57); do número de Reynolds  $Re_P$  e do número de Prandtl ( $Pr_P$ ).

$$\gamma = \frac{c_p}{c_p - R} \quad (3.57)$$

#### 3.5.4. Solução numérica de escoamento em equilíbrio químico local

Com relação ao modelo físico adotado nesta seção, o mesmo difere do apresentado na seção anterior fundamentalmente pelo fato de que aqui a composição química deve ser avaliada para cada seção transversal ao escoamento, ao invés de ser mantida uma única composição ao longo de toda a tubeira. Novamente aqui, tem-se uma única reação química de dissociação e são utilizadas as espécies:  $H_2O$ ,  $O_2$  e  $H_2$ . O escoamento em equilíbrio químico local é um modelo onde se supõe que há tempo suficiente para que a composição química atinja o equilíbrio químico em todas as seções transversais ao escoamento. Deste modo, deve-se determinar a composição química para cada um dos volumes finitos em um dado domínio.

Em relação ao modelo matemático apresentado na seção anterior, tem-se agora o acréscimo de um termo na equação da energia, sendo as demais as mesmas e por tal fato não sendo aqui repetidas novamente.

$$c_p \frac{d}{dx} (\rho u A T) + \frac{d}{dx} \left( \rho u A \frac{u^2}{2} \right) = S_{eq} \quad (3.58)$$

sendo  $N$  o número de espécies químicas,  $h_i$  a entalpia da espécie química  $i$  e  $Y_i$  a fração mássica da espécie química  $i$ . Sendo assim, o modelo matemático para este tipo de escoamento fica constituído pelas Eqs.(3.1) a (3.4).

Por sua vez, a solução numérica de escoamento em equilíbrio químico local foi inserida no programa Mach1D, através do seguinte algoritmo:

1. Inicialização dos campos no instante de tempo  $t$ , utilizando a solução analítica – Eqs.(3.37) a (3.40). Deve-se ainda realizar a inicialização dos campos de viscosidade absoluta ( $\mu$ ), da condutividade térmica ( $k$ ), do calor específico a pressão constante ( $c_p$ ) e da temperatura na parede ( $T_{wall}$ ), assim como a estimativa inicial da composição química da mistura de gases de combustão.
2. Estimativa dos campos para o tempo  $t + \Delta t$ .
3. Estimativa da pressão na entrada da câmara ( $P_{in}$ ), através da Eq.(3.37). O número de Mach na entrada é calculado pela Eq.(3.46), sendo a velocidade de entrada ( $u_{in}$ ) uma velocidade média, obtida através da Eq.(3.47).
4. Estimativa da composição química de equilíbrio para cada volume de controle do domínio através da metodologia apresentada no capítulo 2 do Relatório Técnico 1 do projeto CFD-5/UFPR (2005).
5. Cálculo da razão entre calores específicos efetiva ( $\gamma_e$ ) a partir das Eqs.(3.59) a (3.63):

$$\gamma_e = c_\gamma \gamma_f \quad (3.59)$$

$$c_\gamma = \frac{1}{1 + \frac{P}{M} \sum_{i=1}^N \left[ \left( \frac{\partial X_i}{\partial P} \right)_T M_i \right]} \quad (3.60)$$

$$\gamma_f = \frac{(c_p)_f}{(c_p)_f - R} \quad (3.61)$$

$$(c_p)_f = \sum_{i=1}^N [Y_i (c_p)_{fi}] \quad (3.62)$$

$$R = \sum_{i=1}^N Y_i R_i \quad (3.63)$$

sendo  $X_i$  a fração molar da espécie  $i$ ,  $(c_p)_{fi}$  o calor específico para cada espécie química  $i$  onde se admite que a composição química seja constante para esse volume e  $R$  é a constante da mistura dos gases.

6. Cálculo do calor específico a pressão constante ( $c_p$ ) através da Eq.(3.62).
7. Cálculo para cada volume de controle  $P$  do número de Reynolds ( $Re_p$ ) e do número de Prandtl ( $Pr_p$ ).

8. Cálculo dos coeficientes da velocidade ( $u_p$ ) (para mais detalhes consultar capítulo 3 do Relatório técnico 3 do projeto CFD-5/UFPR (2007)).
9. Solução da velocidade ( $u_p$ ), através do método TDMA.
10. Cálculo dos coeficientes do método SIMPLEC – Eqs.(3.48) e (3.49).
11. Cálculo das velocidades nas faces dos volumes ( $u_e$ ) (para mais detalhes consultar capítulo 3 do Relatório técnico 3 do projeto CFD-5/UFPR (2007)).
12. Estimativa da temperatura na entrada da câmara ( $T_{in}$ ) através da Eq.(3.50).
13. Cálculo dos coeficientes e termos fontes da temperatura ( $T_p$ ) (para mais detalhes consultar capítulo 3 do Relatório técnico 3 do projeto CFD-5/UFPR (2007)).
14. Solução da temperatura ( $T_p$ ), através do método TDMA.
15. Cálculo da massa específica ( $\rho_p$ ) com a Eq.(3.51).
16. Cálculo da massa específica ( $\rho_e$ ) com a Eq.(3.52).
17. Cálculo dos coeficientes e dos termos fontes da correção da pressão ( $P'_p$ ) (para mais detalhes consultar capítulo 3 do Relatório técnico 3 do projeto CFD-5/UFPR (2007)).
18. Solução da correção de pressão ( $P'_p$ ), utilizando TDMA.
19. Correção dos valores da pressão ( $P_p$ ), da massa específica ( $\rho_p$ ), da velocidade nas faces dos volumes ( $u_e$ ) e da velocidade no centro dos volumes ( $u_p$ ), utilizando os valores da correção da pressão ( $P'_p$ ), através das Eqs.(3.47), (3.53),(3.54) e (3.55).
20. Correção da massa específica nas faces dos volumes ( $\rho_e$ ).
21. Retornar ao item 2, até atingir o número desejado de iterações.
22. Pós-processamento.

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Este capítulo possui como objetivo apresentar os resultados relativos aos problemas propostos na seção 1.2, como também as devidas discussões pertinentes. Quanto à estrutura, o capítulo juntamente com sua introdução, consta das seguintes subseções: Euler unidimensional sem choque, Euler unidimensional com choque e discussões.

Levando-se em consideração a equação de Euler unidimensional, diferentes modelos de escoamento foram utilizados. Sem o advento de descontinuidades, tratou-se dos modelos em escoamento congelado e escoamento em equilíbrio químico local. Ao se considerar descontinuidades, o modelo de escoamento tratado foi o de propriedades constantes.

Para todos os casos tratados a malha utilizada é estruturada, não uniforme de faces centradas, formulação segregada, sistema de variáveis co-localizado. Quanto à quantidade de malhas testadas, para Euler unidimensional com choque, nove diferentes malhas foram utilizadas com refino constante igual a dois ( $q = 2$ ). Entretanto, para o caso o qual desconsidera o advento do choque e leva em consideração o modelo de escoamento em equilíbrio químico local, apenas seis malhas foram testadas com a mesma razão de refino. A quantidade reduzida de malhas é atribuída ao fato da instabilidade da solução para as funções de interpolação empregadas. Ainda pertinente ao procedimento computacional, o critério de convergência adotado para todas as simulações foi uma quantidade definida de iterações a ponto de atingir o mínimo de 10 algarismos significativos por pelo menos 30% da quantidade de iterações. Por fim, fazendo ainda referência a todas as simulações o solver utilizado foi o TDMA.

Referente às diferentes funções de interpolações possíveis, as selecionadas para este trabalho foram: UDS, CDS, TVD Chakravarthy e Osher, TVD Min-Mod, TVD Smart, TVD Superbee e TVD Sweby. Nas simulações onde se considera descontinuidades os esquemas CDS, TVD Chakravarthy e Osher e TVD Superbee não apresentaram convergência, fato este, que será analisado posteriormente.

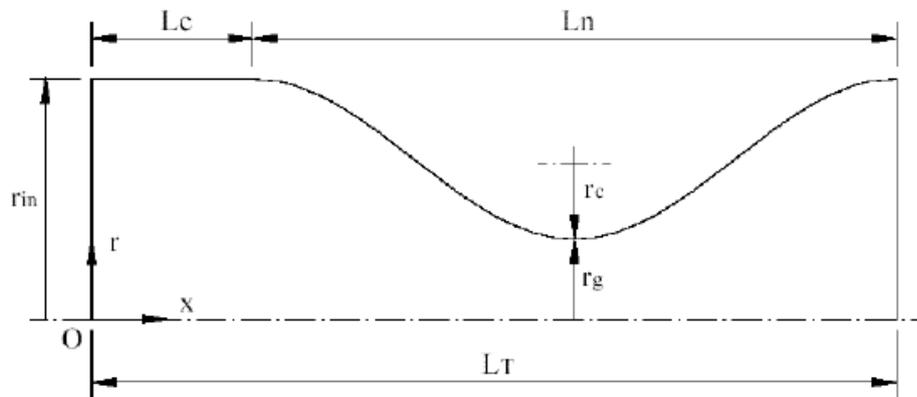
Outro fator comum aos problemas estudados é referente à geometria do motor foguete, tendo a mesma sido utilizada em Marchi *et al.* (2000; 2004) e Araki e Marchi (2006), que consiste em uma seção cilíndrica, denominada por câmara de combustão (com raio  $r_{in}$  e comprimento  $L_C$ ) acoplado a tubeira, onde a seção longitudinal é definida por uma curva cossenoidal (com raio de garganta  $r_g$  e comprimento  $L_n$ ). O raio  $r$ , para  $x > L_C$ , onde  $x$  corresponde a posição em que o raio é avaliado, é expresso pela seguinte equação:

$$r = r_g + \frac{(r_{in} - r_g)}{2} \left\{ 1 + \cos \left[ 2\pi \frac{(x - L_c)}{L_n} \right] \right\} \quad (4.1)$$

onde  $r_g$  representa o raio da garganta,  $r_{in}$  o raio de entrada tubeira,  $L_c$  o comprimento da câmara e por fim,  $L_n$  é o comprimento da tubeira. O raio de curvatura ( $r_c$ ), mostrado na figura 20 e valor apresentado na Tab.5, é expresso pela Eq.(4.2):

$$r_c = \frac{L_n^2}{2\pi^2(r_{in} - r_g)} \quad (4.2)$$

FIGURA 21 – PARÂMETROS GEOMÉTRICOS DO MOTOR-FOGUETE.



FONTE: MARCHI *et al.*(2000).

TABELA 5 – PARÂMETROS FÍSICOS DA TUBEIRA

Parâmetros geométricos (câmara e tubeira)	
Comprimento da câmara ( $L_c$ )	0,100 m
Comprimento da tubeira ( $L_n$ )	0,400 m
Comprimento total ( $L_T$ )	0,500 m
Raio de entrada da tubeira ( $r_{in}$ )	0,300 m
Raio na garganta da tubeira ( $r_g$ )	0,100 m
Raio da curvatura ( $r_c$ )	0,1273 m
Razão de áreas ( $r_c/r_g$ )	1,273

FONTE: O autor (2017).

Definida a geometria de tubeira,faça-se necessário saber quais são as condições de contorno empregadas para escoamento em tubeira de modo a embasar os resultados obtidos, sendo estes mostrados nas seções subsequentes. Vale ressaltar as condições para  $Y_i$  tanto na entrada como na saída são apenas consideradas para modelos com reação química.

TABELA 6 – CONDIÇÕES DE CONTORNO PARA ESCOAMENTOS EM TUBEIRA

Condições de entrada		Condições de saída	
$T = f(T_0)$	$P = f(P_0)$	$\frac{d^2T}{dx^2} = 0$	$\frac{d^2P}{dx^2} = 0$
$Y_i = f(T, P)$	$\frac{d^2u}{dx^2} = 0$	$\frac{d^2u}{dx^2} = 0$	$\frac{d^2Y_i}{dx^2} = 0$

FONTE: O autor (2017).

É de grande valia ainda, fazer breve menção das variáveis de interesse estudadas:

1. Coeficiente de descarga ( $C_d$ ): define-se como sendo a razão entre o fluxo de massa numérico ( $\dot{m}_{num}$ ) e teórico ( $\dot{m}_{th}$ ), obtido a partir da solução analítica isentrópica:

$$C_d = \frac{\dot{m}_{num}}{\dot{m}_{th}} \quad (4.2)$$

2. Empuxo adimensional ( $F^*$ ): define-se como sendo a razão entre empuxos numérico e teórico ( $F_{num}$  e  $F_{th}$ , nesta ordem):

$$F^* = \frac{F_{num}}{F_{th}} \quad (4.3)$$

onde  $F$  corresponde aos valores de empuxo e pode ser obtido pela relação entre o fluxo de massa ( $\dot{m}$ ) e velocidade de saída ( $u_{ex}$ ):

$$F = \dot{m} \cdot u_{ex} + (P_{ex} - P_{amb})A_{ex} \quad (4.4)$$

sendo  $P_{ex}$  a pressão na saída da tubeira [ $Pa$ ],  $P_{amb}$  a pressão ambiente [ $Pa$ ] e  $A_{ex}$  a área na saída da tubeira [ $m^2$ ]

3. Pressão ( $P_{ex}$ ), temperatura ( $T_{ex}$ ), massa específica ( $\rho_{ex}$ ), velocidade ( $u_{ex}$ ) e número de Mach ( $M_{ex}$ ) na saída do bocal.

Os parâmetros físicos utilizados para obtenção das variáveis de interesse citadas serão especificados nas subseções correspondentes ao problema analisado. Todos os problemas avaliados foram simulados no mesmo computador possibilitando assim comparações quanto ao tempo de processamento malha a malha.

TABELA 7 – DADOS DE SOFTWARE E HARDWARE DO COMPUTADOR UTILIZADO.

Sistema Operacional	Windows 7 64 bits
Compilador	Microsoft Visual Studio 2008
Linguagem	Fortran 95
Processador	Intel Core i5 3,2/3,2 GHz
Memória	4 GB

FONTE: O autor (2017).

#### 4.1 EULER UNIDIMENSIONAL SEM DESCONTINUIDADES

O primeiro problema tratado nesta dissertação abrange o estudo de diferentes funções de interpolação para distintos modelos de escoamento sem o advento de descontinuidades. Referente a tais modelos, as seguintes simplificações se fazem presentes em seus modelos físicos:

- Desprezam-se os efeitos viscosos;
- Escoamento monogás (analítica) ou não (escoamento congelado e escoamento em equilíbrio químico local), compressível, de gás perfeito;
- As propriedades do gás ou da mistura de gases são constantes (analítica e escoamento congelado, respectivamente) ou não (escoamento em equilíbrio químico local);
- Não existem efeitos de radiação térmica;
- Escoamento interno reativo (escoamento congelado e escoamento em equilíbrio químico local) ou não (analítica);
- Escoamento quase-unidimensional (escoamento unidimensional, considerando-se a variação da área da seção transversal);
- Regime permanente;
- As paredes da tubeira são adiabáticas;
- Desprezam-se os efeitos de radiação térmica.

Para ambos os modelos de escoamento estudados neste problema, tem-se os seguintes parâmetros físicos:

TABELA 8 – PARÂMETROS FÍSICOS UTILIZADOS PARA OS MODELOS DE ESCOAMENTO PROPOSTOS.

Parâmetros Físicos	
Temperatura de Estagnação ( $T_0$ )	3420,33 K
Pressão de estagnação ( $P_0$ )	20 MPa
Razão entre calores específicos ( $\gamma$ )	1,1956
Constante do gás ( $R$ )	526,97 J/kg.K
Razão em massa oxidante/combustível ( $OF$ )	7,936682739
Temperatura na parede da tubeira ( $T_{wall}$ )	600 K

FONTE: O autor (2017).

Os modelos de escoamento utilizados para o primeiro problema proposto são: escoamento congelado e escoamento em equilíbrio químico local. Basicamente a diferença durante o procedimento numérico de ambos os modelos é a quantidade de malhas simuladas.

No primeiro modelo de escoamento mencionado, nove diferentes malhas foram utilizadas, enquanto que para o último apenas seis malhas foram possíveis devido à instabilidade da solução para malhas mais finas. A malha mais grossa utilizada foi de 50 volumes, enquanto que a mais fina possui 12800 volumes sem a inclusão dos volumes fictícios.

A primeira possível comparação entre os modelos propostos é relativo ao tempo de processamento computacional apresentada pelas tabelas 9 e 10. Verifica-se que o tempo de processamento computacional é dependente do tipo de função de interpolação escolhida, sendo que o esquema numérico mais rápido vem a ser na maioria das malhas o TVD Smart. Para o escoamento congelado, tal função de interpolação se mostrou de solução mais rápida nas malhas 50 a 400 volumes, enquanto que para a malha mais refinada (12800 volumes), a função de interpolação mais rápida foi o TVD Superbee. Vale ressaltar ainda que o UDS apresentou menores tempos computacionais para as malhas de 1600, 3200 e 6400 volumes, contudo vale lembrar que se trata de um esquema numérico de primeira ordem de acurácia, onde se espera um erro numérico maior.

Por sua vez, para o escoamento em equilíbrio químico local, os esquemas numéricos que apresentaram os menores tempos computacionais também foram o TVD Smart e o TVD Min-Mod, contudo para a malha mais fina agora quem apresentou o menor tempo foi o UDS, contudo deve-se ponderar uma vez que se trata de um esquema numérico de primeira ordem. Dentre os métodos TVD, o que apresentou o menor tempo computacional para a malha mais fina foi o TVD Smart juntamente com o TVD Chakravarthy e Osher e TVD Sweby.

Comparando o tempo de processamento computacional observado para modelo de escoamento em equilíbrio químico local em relação ao modelo de escoamento congelado, nota-se que para todos os esquemas o maior tempo ocorre para o primeiro modelo de escoamento relatado. Tal fato ocorre devido aos conceitos decorrentes da simulação numérica de cada um dos modelos citados anteriormente.

TABELA 9 – TEMPO DE PROCESSAMENTO COMPUTACIONAL PARA ESCOAMENTO CONGELADO [EM SEGUNDOS].

continua

Malha / Esquema	$\Delta t$	UDS	CDS	TVD Min-Mod	TVD Superbee	TVD Ch&Osher	TVD Smart	TVD Sweby
50	1,0d-6	2,06x10 <sup>0</sup>	2,25x10 <sup>0</sup>	4,18x10 <sup>0</sup>	4,13x10 <sup>0</sup>	8,89x10 <sup>-1</sup>	8,58x10 <sup>-1</sup>	4,18x10 <sup>0</sup>
100	1,0d-6	6,40x10 <sup>0</sup>	7,04x10 <sup>0</sup>	1,55x10 <sup>1</sup>	1,24x10 <sup>1</sup>	3,20x10 <sup>0</sup>	3,14x10 <sup>0</sup>	1,57x10 <sup>1</sup>
200	1,0d-7	1,98x10 <sup>1</sup>	2,17x10 <sup>1</sup>	5,98x10 <sup>1</sup>	1,19x10 <sup>2</sup>	1,23x10 <sup>1</sup>	1,21x10 <sup>1</sup>	5,98x10 <sup>1</sup>
400	1,0d-7	4,87x10 <sup>1</sup>	5,34x10 <sup>1</sup>	2,36x10 <sup>2</sup>	3,50x10 <sup>2</sup>	4,84x10 <sup>1</sup>	4,77x10 <sup>1</sup>	1,77x10 <sup>2</sup>
800	1,0d-7	1,91x10 <sup>2</sup>	2,11x10 <sup>2</sup>	4,66x10 <sup>2</sup>	9,49x10 <sup>2</sup>	1,87x10 <sup>2</sup>	1,88x10 <sup>2</sup>	4,65x10 <sup>2</sup>
1600	1,0d-7	5,78x10 <sup>2</sup>	1,06x10 <sup>3</sup>	1,87x10 <sup>3</sup>	2,81x10 <sup>3</sup>	7,66x10 <sup>2</sup>	5,90x10 <sup>2</sup>	1,40x10 <sup>3</sup>

TABELA 9 – TEMPO DE PROCESSAMENTO COMPUTACIONAL PARA ESCOAMENTO CONGELADO [EM SEGUNDOS].

Malha / Esquema	$\Delta t$	UDS	CDS	TVD Min-Mod	TVD Superbee	TVD Ch&Osher	TVD Smart	conclusão
								TVD Sweby
3200	1,0d-8	1,49x10 <sup>3</sup>	4,13x10 <sup>3</sup>	1,37x10 <sup>4</sup>	9,35x10 <sup>3</sup>	2,40x10 <sup>3</sup>	2,32x10 <sup>3</sup>	3,72x10 <sup>3</sup>
6400	1,0d-8	3,06x10 <sup>3</sup>	1,68x10 <sup>4</sup>	7,32x10 <sup>4</sup>	2,81x10 <sup>4</sup>	9,51x10 <sup>3</sup>	9,29x10 <sup>3</sup>	1,39x10 <sup>4</sup>
12800	1,0d-8	2,79x10 <sup>4</sup>	8,29x10 <sup>4</sup>	1,86x10 <sup>4</sup>	9,41x10 <sup>3</sup>	3,78x10 <sup>4</sup>	3,75x10 <sup>4</sup>	1,13x10 <sup>4</sup>

FONTE: O autor (2017).

TABELA 10 – TEMPO DE PROCESSAMENTO COMPUTACIONAL PARA ESCOAMENTO EM EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL [EM SEGUNDOS].

Malha/ Esquema	$\Delta t$	UDS	CDS	TVD Min-Mod	TVD Superbee	TVD Ch&Osher	TVD Smart	TVD Sweby
50	1,0d-6	3,78x10 <sup>1</sup>	2,40x10 <sup>1</sup>	7,83x10 <sup>0</sup>	8,14x10 <sup>0</sup>	7,88x10 <sup>0</sup>	7,91x10 <sup>0</sup>	7,86x10 <sup>0</sup>
100	1,0d-6	7,18x10 <sup>1</sup>	7,29x10 <sup>1</sup>	2,93x10 <sup>1</sup>	2,93x10 <sup>1</sup>	2,93x10 <sup>1</sup>	2,91x10 <sup>1</sup>	2,94x10 <sup>1</sup>
200	1,0d-7	1,96x10 <sup>2</sup>	1,99x10 <sup>2</sup>	1,13x10 <sup>2</sup>	1,71x10 <sup>2</sup>	1,16x10 <sup>2</sup>	1,13x10 <sup>2</sup>	1,16x10 <sup>2</sup>
400	1,0d-7	5,61x10 <sup>2</sup>	5,67x10 <sup>2</sup>	4,60x10 <sup>2</sup>	5,71x10 <sup>2</sup>	4,60x10 <sup>2</sup>	4,58x10 <sup>2</sup>	4,62x10 <sup>2</sup>
800	1,0d-7	2,52x10 <sup>3</sup>	2,53x10 <sup>3</sup>	2,02x10 <sup>3</sup>	3,80x10 <sup>3</sup>	2,06x10 <sup>3</sup>	2,04x10 <sup>3</sup>	2,05x10 <sup>3</sup>
1600	1,0d-8	6,80x10 <sup>3</sup>	1,32x10 <sup>4</sup>	1,10x10 <sup>4</sup>	2,00x10 <sup>4</sup>	1,08x10 <sup>4</sup>	1,08x10 <sup>4</sup>	1,08x10 <sup>4</sup>

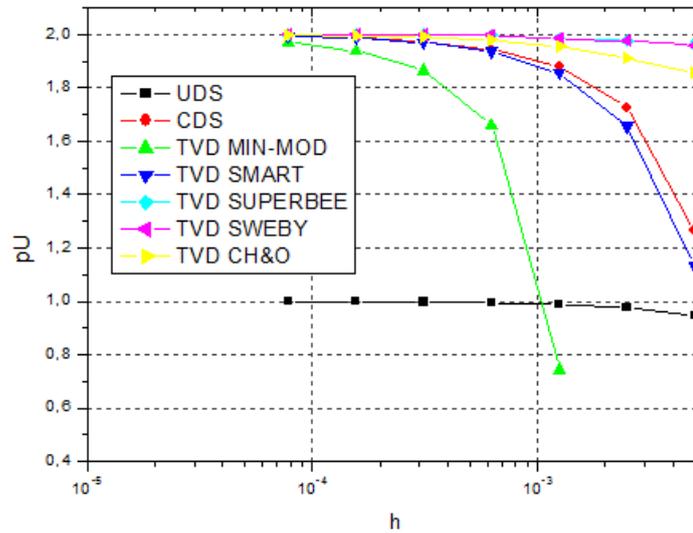
FONTE: O autor (2017).

Os esquemas apresentados se diferem, de modo geral, quanto à ordem de acurácia onde, UDS apresenta primeira ordem enquanto que os demais esquemas teoricamente são de segunda ordem.

Para verificar se os esquemas citados nas tabelas convergem para a ordem esperada para ambos os modelos de escoamento, foi realizada análise de ordem aparente para cada uma das variáveis de interesse citadas na introdução deste capítulo, sendo elas:  $C_d$ ,  $F^*$ ,  $P_{ex}$ ,  $T_{ex}$ ,  $\rho_{ex}$ ,  $u_{ex}$  e  $M_{ex}$ . Vale ressaltar que o subíndice “ex” representa o valor da propriedade na saída do bocal.

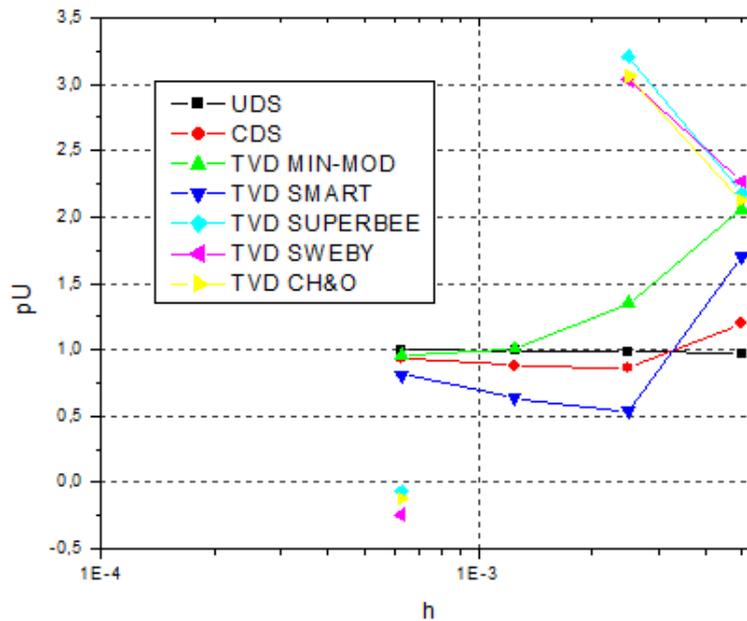
Devido a grande quantidade de gráficos e variáveis de interesse analisadas para dois diferentes modelos de escoamento, foi selecionada uma única variável para ser apresentada nesta seção ( $P_{ex}$ ), enquanto que os gráficos das demais variáveis se encontram no apêndice.

FIGURA 22 – ORDEM APARENTE ( $p_U$ ) DA PRESSÃO ( $P_{ex}$ ) PARA ESCOAMENTO CONGELADO.



FONTE: O autor (2016).

FIGURA 23 – ORDEM APARENTE ( $p_U$ ) DA PRESSÃO ( $P_{ex}$ ) PARA EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL.



FONTE: O autor (2016).

Analisando primeiramente o gráfico da Fig.22, observa-se que para pressão na saída do bocal atingiu-se as ordens aparentes esperadas, ou seja, UDS tendeu a primeira ordem, enquanto que os demais tenderam para segunda ordem de acurácia. Por sua vez, na Fig.23 o mesmo não ocorre, pois a maioria dos esquemas tendeu a ordem unitária enquanto que os demais (TVD SUPERBEE, TVD SWEBY e TVD CHAKRAVARTHY & OSHER) não tiveram uma tendência conclusiva. De modo geral, pode-se atribuir a ocorrência deste

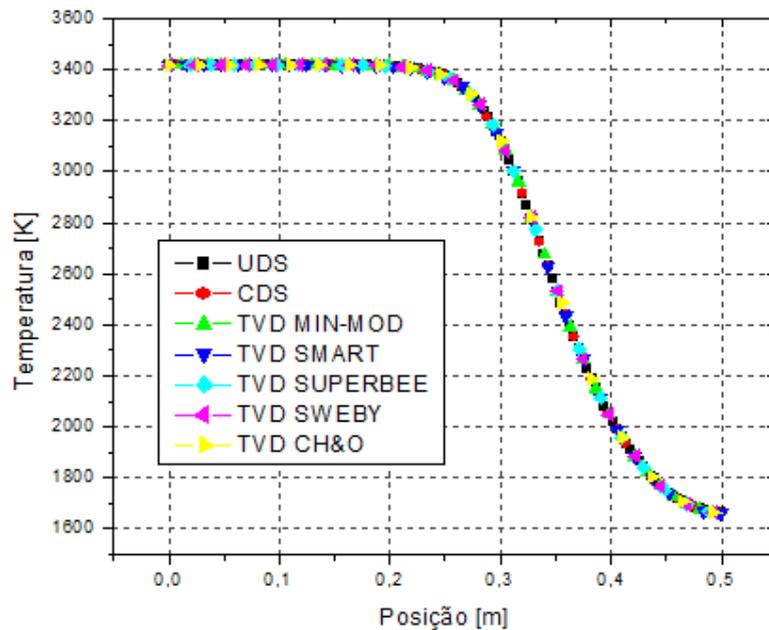
resultado ao termo fonte químico reativo  $S_{eq}$  avaliado pela Eq.(3.5). Tal fato será discutido em maior detalhe na seção 4.3.

Outro importante estudo comparativo entre as funções de interpolações propostas parte do pressuposto de analisar o perfil das mais diversas variáveis de interesse no intuito de verificar aquele que mais representa com fidelidade o fenômeno estudado. Com essa premissa, uma das ferramentas utilizadas foi o comparativo gráfico entre os esquemas numéricos para uma dada variável de interesse. De modo adicional, podem-se comparar os dois modelos de escoamento propostos no início desta seção. Com o objetivo de varrer as diferentes variáveis ou propriedades físicas do escoamento, a variável de interesse verificada é a temperatura dada em Kelvin.

Para o gráfico apresentado na Fig.24, considerou-se malha com 12800 volumes, enquanto que para a segunda malha com 1600 volumes devido à instabilidade da solução numérica para malhas mais finas. Por fim, na Fig.26, tem-se um comparativo de perfis de temperatura onde se considerou malha com 1600 volumes.

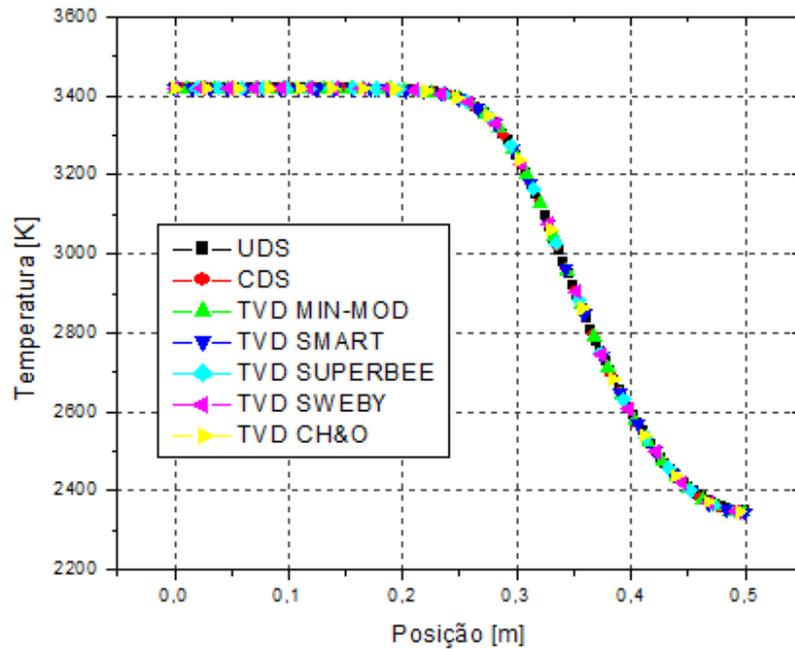
Para os dois primeiros gráficos, nota-se que todos os esquemas propostos atingiram graficamente a mesma solução diferindo levemente o perfil de temperatura na saída do bocal.

FIGURA 24 – PERFIL DE TEMPERATURA PARA ESCOAMENTO CONGELADO.



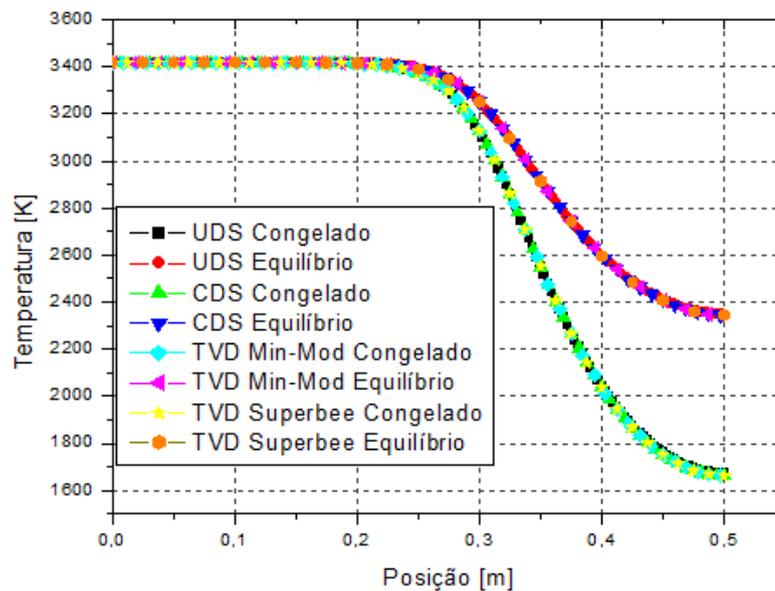
FONTE: O autor (2016).

FIGURA 25 – PERFIL DE TEMPERATURA PARA EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL.



FONTE: O autor (2016).

FIGURA 26 – COMPARATIVO DE MODELOS DE ESCOAMENTO.



FONTE: O autor (2016).

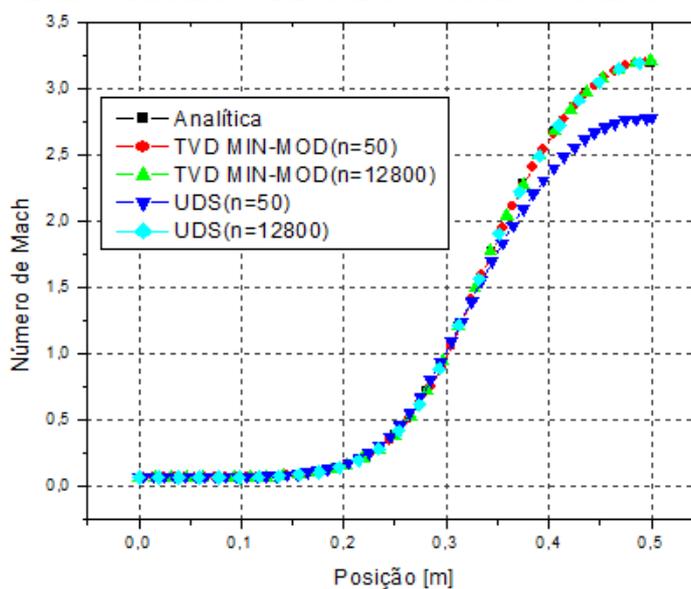
Através da Fig.26 nota-se a diferença entre os modelos de escoamento para praticamente a totalidade do comprimento da tubeira gerando menores diferenças para posições abaixo de 0,2m. Tal comparação se torna relevante uma vez que ao se comparar esquemas numéricos dentro de um mesmo modelo de escoamento a diferença entre esquemas é visualmente pequena.

De modo a enriquecer ainda mais o estudo de diferentes funções de interpolação, é de grande importância verificar o comportamento de um dado esquema numérico com o advento do refino de malha. Assim, optou-se por utilizar um esquema numérico de segunda ordem que dentre as simulações atingiu um bom desempenho (TVD MIN-MOD) em comparação com UDS por possuir primeira ordem e a respectiva solução analítica. As comparações com os demais esquemas TVD seguindo a mesma metodologia se encontram no apêndice.

Os gráficos apresentados pelas Fig.27 e Fig.28 permitem diferentes vertentes de análise. Uma das possíveis vertentes seria o de comparar o método TVD MIN-MOD na malha mais grossa ( $n= 50$  volumes) com a malha mais fina com 12800 volumes para o modelo de escoamento congelado e 1600 volumes para equilíbrio químico local. Em um segundo momento pode-se comparar visualmente o erro numérico inerente a cada tipo de função de interpolação em relação à solução analítica. E por fim, pode-se comparar o comportamento destas funções para dois diferentes modelos de escoamento.

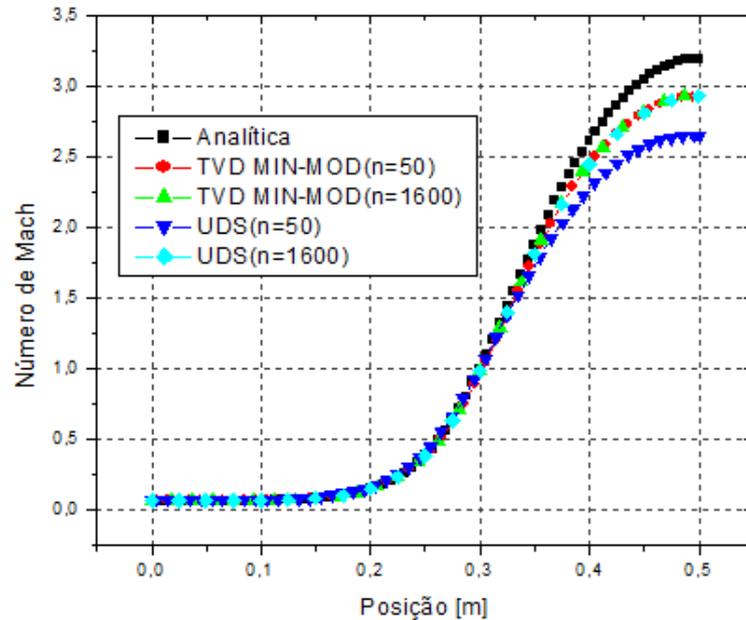
Ao comparar os resultados para TVD MIN-MOD, para ambos os modelos, verifica-se que o esquema possui uma alta convergência visto que com a malha mais grossa já representa com fidelidade o fenômeno considerando escoamento congelado. Entretanto, ao se considerar equilíbrio químico local apenas se verifica a semelhança entre as demais funções de interpolação de malha mais fina.

FIGURA 27 – EFEITO DE REFINO DE MALHA PARA ESCOAMENTO CONGELADO.



FONTE: O autor (2016).

FIGURA 28 – EFEITO DE REFINO DE MALHA PARA EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL.



FONTE: O autor (2016).

Ao se comparar os diferentes modelos de escoamento, notam-se diferentes comportamentos em se tratando das diferentes funções de interpolação inseridas nas Fig.27 e Fig.28. Nesta figura, três patamares ficam bem definidos, onde o primeiro desses patamares é representado pela função UDS (n=50), o segundo patamar fica caracterizado pelas funções TVD MIN (n=50), TVD MIN-MOD (n = 12800) e UDS (n= 12800), enquanto que o terceiro patamar fica identificado pela solução analítica. Por sua vez, na Fig.27, apenas dois patamares são caracterizados, pois as soluções propostas por TVD MIN-MOD (n=50), TVD MIN-MOD (n = 12800) e UDS (n= 12800) são bem próximas da solução analítica. Tal fato pode ser atribuído ao modo como a composição é avaliada numericamente, pois para o modelo congelado a composição é calculada uma única vez assumindo que não há tempo para que composição química reaja, contudo para o modelo em equilíbrio químico local a composição é recalculada a cada iteração o que pela metodologia do programa Mach1D é representado pelo termo fonte químico reativo  $S_{eq}$ . Os gráficos pertinentes aos demais esquemas TVD quanto à influência do refinamento de malha se encontram no apêndice.

Analisando as variáveis de interesse num viés numérico, foi utilizado o estimador GCI no intuito de se obter as incertezas atreladas a cada variável, considerando cada função de interpolação implementada bem como os modelos de escoamento pertinentes. Devido à quantidade de variáveis analisadas, optou-se por apresentar parte dessas variáveis na Tab.10 e as demais em apêndice.

TABELA 11 – VARIÁVEIS DE INTERESSE E SUAS RESPECTIVAS INCERTEZAS NUMÉRICAS AVALIADAS PELO ESTIMADOR GCI.

Esquema	Variável	Escoamento Congelado	Equilíbrio Químico Local
UDS	$C_d$ [-]	$1,0207 \pm 9,1 \times 10^{-3}$	$1,0014 \pm 8,4 \times 10^{-3}$
	$F^*$ [-]	$1,0006 \pm 1,1 \times 10^{-3}$	$1,01093 \pm 5,6 \times 10^{-4}$
	$T_{ex}$ [K]	$1673 \pm 29$	$2349 \pm 13$
	$M_{ex}$ [-]	$3,188 \pm 5,0 \times 10^{-2}$	$2,929 \pm 3,2 \times 10^{-2}$
CDS	$C_d$ [-]	$1,0176636 \pm 1,4 \times 10^{-6}$	$0,99867 \pm 2,1 \times 10^{-4}$
	$F^*$ [-]	$1,0001922 \pm 3,7 \times 10^{-6}$	$1,010752 \pm 2,8 \times 10^{-5}$
	$T_{ex}$ [K]	$1662,941 \pm 2,0 \times 10^{-2}$	$2344,40 \pm 4,1 \times 10^{-1}$
	$M_{ex}$ [-]	$3,205359 \pm 3,4 \times 10^{-5}$	$2,93905 \pm 8,6 \times 10^{-4}$
TVD Min-Mod	$C_d$ [-]	$1,0176616 \pm 6,8 \times 10^{-6}$	$0,99867 \pm 2,0 \times 10^{-4}$
	$F^*$ [-]	$1,0001890 \pm 5,6 \times 10^{-6}$	$1,010749 \pm 1,1 \times 10^{-5}$
	$T_{ex}$ [K]	$1662,2884 \pm 5,1 \times 10^{-3}$	$2344,40 \pm 4,2 \times 10^{-1}$
	$M_{ex}$ [-]	$3,2053507 \pm 8,1 \times 10^{-6}$	$2,93904 \pm 9,0 \times 10^{-4}$
TVD Superbee	$C_d$ [-]	$1,0176636 \pm 1,4 \times 10^{-6}$	$0,99867 \pm 2,1 \times 10^{-4}$
	$F^*$ [-]	$1,000203 \pm 3,5 \times 10^{-5}$	$1,01076 \pm 1,1 \times 10^{-4}$
	$T_{ex}$ [K]	$1662,88 \pm 1,4 \times 10^{-1}$	$2344,37 \pm 2,3 \times 10^{-1}$
	$M_{ex}$ [-]	$3,20543 \pm 2,5 \times 10^{-4}$	$2,93909 \pm 4,4 \times 10^{-4}$
TVD Chakravarthy&Osher	$C_d$ [-]	$1,0176615 \pm 6,8 \times 10^{-6}$	$0,99867 \pm 2,0 \times 10^{-4}$
	$F^*$ [-]	$1,0001996 \pm 2,6 \times 10^{-5}$	$1,01076 \pm 9,0 \times 10^{-5}$
	$T_{ex}$ [K]	$1662,88 \pm 1,3 \times 10^{-1}$	$2344,37 \pm 2,2 \times 10^{-1}$
	$M_{ex}$ [-]	$3,205421 \pm 2,2 \times 10^{-4}$	$2,93909 \pm 4,7 \times 10^{-4}$
TVD Smart	$C_d$ [-]	$1,0176620 \pm 5,4 \times 10^{-6}$	$0,99867 \pm 2,0 \times 10^{-4}$
	$F^*$ [-]	$1,0001924 \pm 4,7 \times 10^{-6}$	$1,01075 \pm 9,0 \times 10^{-5}$
	$T_{ex}$ [K]	$1662,92 \pm 4,0 \times 10^{-2}$	$2344,39 \pm 3,7 \times 10^{-1}$
	$M_{ex}$ [-]	$3,2053705 \pm 6,8 \times 10^{-5}$	$2,93909 \pm 7,8 \times 10^{-4}$
TVD Sweby	$C_d$ [-]	$1,0176635 \pm 1,4 \times 10^{-6}$	$0,99867 \pm 2,1 \times 10^{-4}$
	$F^*$ [-]	$1,0002029 \pm 3,6 \times 10^{-5}$	$1,01076 \pm 1,2 \times 10^{-4}$
	$T_{ex}$ [K]	$1662,88 \pm 1,4 \times 10^{-1}$	$2344,37 \pm 2,0 \times 10^{-1}$
	$M_{ex}$ [-]	$3,2054299 \pm 2,5 \times 10^{-4}$	$2,93909 \pm 4,2 \times 10^{-4}$
CEA (Glenn Research Center, 2005)	$C_d$ [-]	1,000580	0,977372
	$F^*$ [-]	0,998992	1,011553
	$T_{ex}$ [K]	1607,91	2462,41
	$M_{ex}$ [-]	3,231	2,986

FONTE: O autor (2017).

## 4.2 EULER UNIDIMENSIONAL COM DESCONTINUIDADES

O segundo problema tratado nesta dissertação abrange o estudo de diferentes funções de interpolação para duas diferentes configurações quanto aos parâmetros físicos de entrada no motor foguete de modo a avaliar o comportamento tanto dos parâmetros físicos na saída da tubeira como o advento do choque. As configurações adotadas para a simulação numérica seguem abaixo:

TABELA 12 – PARÂMETROS FÍSICOS UTILIZADOS PARA CADA CONFIGURAÇÃO.

Parâmetros físicos	Unidade	Configuração 1	Configuração 2
Razão entre calores específicos ( $\gamma$ )	-	1,35	1,1956
Constante do gás ( $R$ )	$J/kg.K$	286,9	526,97
Pressão de estagnação ( $P_0$ )	$Pa$	$310,9535407 \times 10^3$	$55 \times 10^4$
Temperatura de estagnação ( $T_0$ )	$K$	833,3333333	3420,33
Temperatura da parede ( $T_{wall}$ )	$K$	600	600
Razão em massa oxidante/combustível ( $OF$ )	-	7,936682739	7,936682739

FONTE: O autor (2017).

O modelo de escoamento utilizado para este segundo problema é o de propriedades constantes. Referente a tal modelo, as seguintes simplificações se fazem presentes em seu modelo físico:

- Gás monoespécie, compressível, de propriedades constantes;
- Desprezam-se os efeitos viscosos;
- Inexistência de efeitos de troca de calor;
- Inexistência de efeitos de dissipação viscosa;
- Escoamento interno, não reativo;
- Escoamento quase-unidimensional;
- Regime permanente;
- Paredes adiabáticas (tubeira);
- Inexistência de efeitos de radiação térmica.

A diferença básica entre os modelos de escoamento do problema anterior com o modelo adotado para este problema é que ambos têm por premissa considerar a reação química, ou seja, o presente modelo é mais simplificado que os demais. O modelo de escoamento com propriedades constantes devido a sua simplificação possibilita o estudo de descontinuidades (ou ondas de choque) permitindo maior variabilidade de funções de interpolação.

No que tange as funções de interpolação, diversos testes foram realizados considerando todas as funções de interpolação até aqui apresentadas e outras pesquisadas,

contudo algumas funções tiveram instabilidades em suas soluções e não estão consideradas na presente seção. Assim, os esquemas numéricos utilizados são: UDS, TVD MIN-MOD, TVD SMART e TVD SWEBY.

As configurações apresentadas na Tab.12 foram escolhidas no intuito de proporcionar comparação e enriquecer o estado da arte. A configuração 1 possui grandes semelhanças com a configuração 3 apresentada na seção 4.2 de Silva (2015) diferindo apenas em 0,05 do valor da razão entre calores específicos ( $\gamma$ ). Por sua vez, a configuração 2 é similar a configuração utilizada no problema tratado na seção 4.1, com a diferença no valor de  $P_0$ , uma vez que com a pressão de 20 MPa não há formação de choque normal dentro do bocal.

Considerando o presente modelo de escoamento e as funções de interpolação selecionadas para este problema, utilizou-se malha estruturada, não uniforme de faces centradas, formulação segregada com sistema de variáveis co-localizado, onde a malha mais grossa apresenta 50 volumes e a mais fina 12800 volumes, desconsiderando volumes fictícios e com refino de malha igual a 2 ( $q = 2$ ). Ainda pertinente ao procedimento computacional, o critério de convergência adotado para todas as simulações foi uma quantidade definida de iterações a ponto de atingir o mínimo de 10 algarismos significativos por pelo menos 30% da quantidade de iterações. Por fim, fazendo ainda referência a todas as simulações o solver utilizado foi o TDMA.

Seguindo mesma metodologia de comparação utilizada na seção 4.1, a primeira possível comparação pode ser realizada ao se analisar o tempo de processamento computacional, no intuito de verificar qual função de interpolação foi ou não mais rápida para o problema proposto.

TABELA 13 – TEMPO DE PROCESSAMENTO COMPUTACIONAL PARA PROPRIEDADES CONSTANTES (CONFIGURAÇÃO 1) [EM SEGUNDOS].

Malha / Esquema	$\Delta t$	UDS	TVD Min-Mod	TVD Smart	TVD Sweby
50	1,0d-6	$7,02 \times 10^{-1}$	$8,27 \times 10^{-1}$	$8,27 \times 10^{-1}$	$8,27 \times 10^{-1}$
100	1,0d-6	$2,56 \times 10^0$	$3,07 \times 10^0$	$3,17 \times 10^0$	$6,22 \times 10^0$
200	1,0d-6	$7,47 \times 10^0$	$2,41 \times 10^1$	$1,21 \times 10^1$	$2,39 \times 10^1$
400	1,0d-6	$1,94 \times 10^1$	$8,77 \times 10^1$	$4,75 \times 10^1$	$9,39 \times 10^1$
800	1,0d-6	$4,80 \times 10^1$	$3,48 \times 10^2$	$1,18 \times 10^2$	$7,41 \times 10^2$
1600	1,0d-7	$1,34 \times 10^2$	$1,38 \times 10^3$	$4,71 \times 10^2$	$3,00 \times 10^3$
3200	1,0d-7	$5,74 \times 10^2$	$1,11 \times 10^3$	$1,89 \times 10^3$	$1,17 \times 10^4$
6400	1,0d-7	$2,29 \times 10^3$	$5,55 \times 10^3$	$5,64 \times 10^3$	$2,70 \times 10^4$
12800	1,0d-8	$9,23 \times 10^3$	$3,79 \times 10^4$	$1,16 \times 10^4$	$1,88 \times 10^4$

FONTE: O autor (2017).

TABELA 14 – TEMPO DE PROCESSAMENTO COMPUTACIONAL PARA PROPRIEDADES CONSTANTES (CONFIGURAÇÃO 2) [EM SEGUNDOS].

Malha / Esquema	$\Delta t$	UDS	TVD Min-Mod	TVD Smart	TVD Sweby
50	1,0d-6	$6,24 \times 10^{-2}$	$4,06 \times 10^{-1}$	$4,37 \times 10^{-1}$	$8,11 \times 10^{-1}$
100	1,0d-6	$1,25 \times 10^{-1}$	$1,56 \times 10^0$	$1,12 \times 10^0$	$3,12 \times 10^0$
200	1,0d-6	$7,64 \times 10^{-1}$	$6,04 \times 10^0$	$3,04 \times 10^0$	$1,19 \times 10^1$
400	1,0d-6	$2,95 \times 10^0$	$1,75 \times 10^1$	$1,19 \times 10^1$	$3,51 \times 10^1$
800	1,0d-7	$9,61 \times 10^0$	$5,81 \times 10^1$	$4,74 \times 10^1$	$9,34 \times 10^1$
1600	1,0d-7	$9,57 \times 10^1$	$1,85 \times 10^2$	$1,41 \times 10^2$	$2,31 \times 10^2$
3200	1,0d-7	$3,83 \times 10^2$	$5,53 \times 10^2$	$4,66 \times 10^2$	$9,29 \times 10^2$
6400	1,0d-8	$1,53 \times 10^3$	$1,85 \times 10^3$	$3,69 \times 10^3$	$2,78 \times 10^3$
12800	1,0d-8	$7,87 \times 10^3$	$5,76 \times 10^3$	$1,51 \times 10^4$	$1,12 \times 10^4$

FONTE: O autor (2017).

Comparando o tempo de processamento e considerando o mesmo modelo de escoamento, observa-se que de um modo geral os tempos de processamento da configuração 2 são menores que o tempo de processamento resultantes da configuração 1 ao se considerar o mesmo modelo de escoamento, apenas com diferentes configurações, em princípio, a maioria dos tempos para cada função de interpolação deveriam ser próximas. Tal fato deve ser pesquisado mais afundo para verificar se a posição onde o choque ocorre influencia no tempo de processamento computacional para a obtenção da solução numérica de cada esquema.

Por sua vez, ao se comparar os esquemas numéricos primeiramente para a configuração 1, nota-se que na presença de choque o UDS é o método mais rápido, contudo como é de primeira ordem está dentro do que se espera. Ao se comparar os métodos de segunda ordem, verifica-se que o esquema TVD SMART é o mais rápido na maioria dos casos, seguido pelo TVD MIN-MOD e por fim, TVD SWEBY. De modo adicional, ao analisar a Tab.14 verifica-se novamente o mesmo comportamento para a configuração 2. Entretanto, o esquema que apresentou o menor tempo computacional para a malha mais fina foi o TVD Min-Mod.

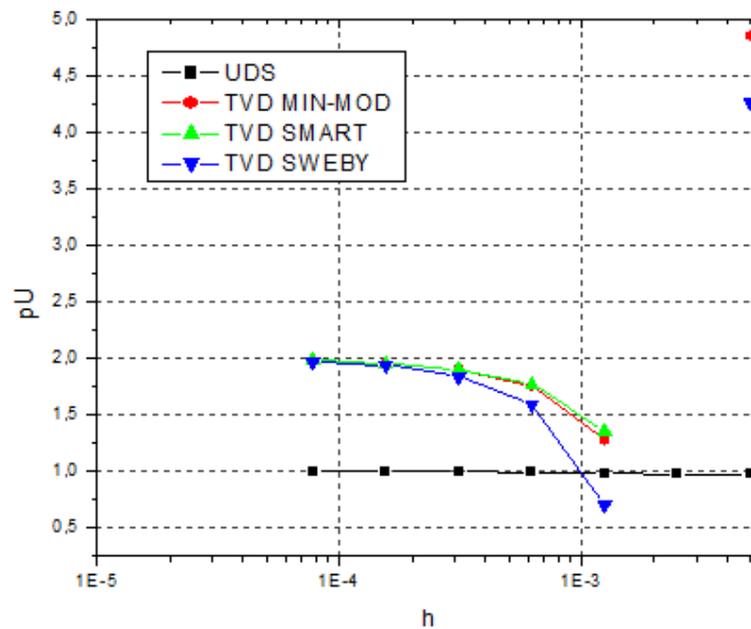
Os esquemas apresentados se diferem, de modo geral, quanto à ordem de acurácia onde UDS apresenta primeira ordem enquanto que os demais esquemas são de segunda ordem. Deste modo, para verificar se os esquemas citados nas tabelas convergem para a ordem esperada para ambas as configurações, foi realizada análise de ordem aparente para cada uma das variáveis de interesse, sendo elas:  $C_d$ ,  $F^*$ ,  $P_{ex}$ ,  $T_{ex}$ ,  $\rho_{ex}$ ,  $u_{ex}$  e  $M_{ex}$ . Vale ressaltar que o subíndice “ex” representa o valor da propriedade na saída do bocal.

Devido a grande quantidade de gráficos e variáveis de interesse analisadas para duas diferentes configurações, foi selecionada uma única variável para ser apresentada nesta seção ( $C_d$ ), enquanto que os gráficos das demais variáveis se encontram no apêndice.

Ao analisar os gráficos das Fig.29 e Fig.30, observa-se que para o coeficiente de descarga atingiu-se as ordens aparentes esperadas, ou seja, UDS tendeu a primeira ordem, enquanto que os demais tenderam para segunda ordem de acurácia.

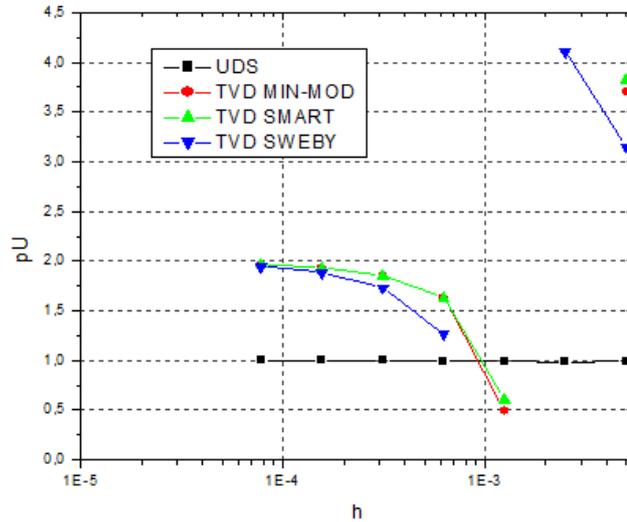
De modo realizar uma análise completa da ordem aparente para as variáveis de interesse, nota-se que ao haver discontinuidades (ou ondas de choque), as funções de interpolação apresentam uma certa dificuldade de obter um comportamento monotônico até a ordem aparente esperada. Tal fato fica evidenciado pelos pontos distantes da curva de tendência o que dependendo da variável de interesse analisada se quer podemos afirmar ter uma tendência clara da ordem aparente.

FIGURA 29 – ORDEM APARENTE ( $p_U$ ) DO COEFICIENTE DE DESCARGA ( $C_d$ ) PARA A CONFIGURAÇÃO 1.



FONTE: O autor (2016).

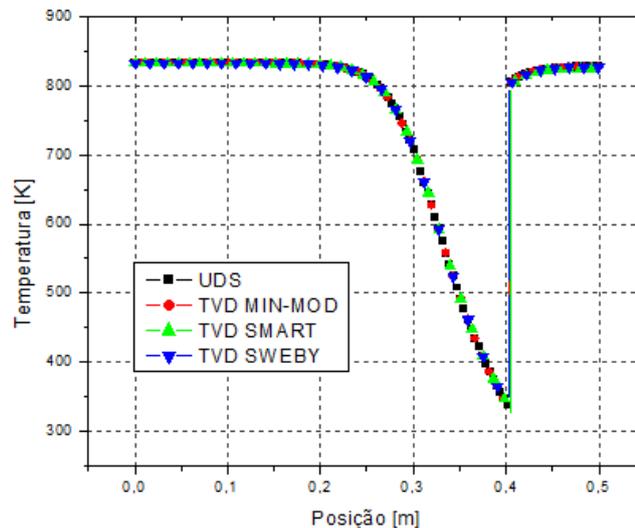
FIGURA 30 – ORDEM APARENTE ( $p_U$ ) DO COEFICIENTE DE DESCARGA ( $C_d$ ) PARA A CONFIGURAÇÃO 2.



FONTE: O autor (2016).

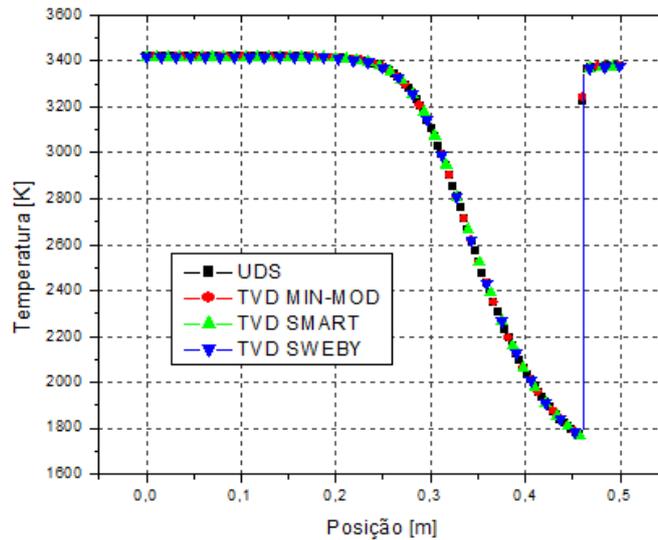
Outro importante estudo comparativo entre as funções de interpolações propostas parte do pressuposto de analisar o perfil das mais diversas variáveis de interesse no intuito de verificar aquele que mais representa com fidelidade o fenômeno estudado. Com essa premissa, uma das ferramentas utilizadas foi o comparativo gráfico entre os esquemas numéricos para uma dada variável de interesse. Com o objetivo de varrer as diferentes variáveis ou propriedades físicas do escoamento, a variável de interesse verificada é a temperatura dada em Kelvin. De modo aditivo, para os gráficos apresentados na Fig.31 e Fig.32, considerou-se malha com 12800 volumes. Os demais gráficos pertinentes se encontram no apêndice.

FIGURA 31 – PERFIL DE TEMPERATURA PARA PROPRIEDADES CONSTANTES (CONFIGURAÇÃO 1).



FONTE: O autor (2016).

FIGURA 32 – PERFIL DE TEMPERATURA PARA PROPRIEDADES CONSTANTES (CONFIGURAÇÃO 2).



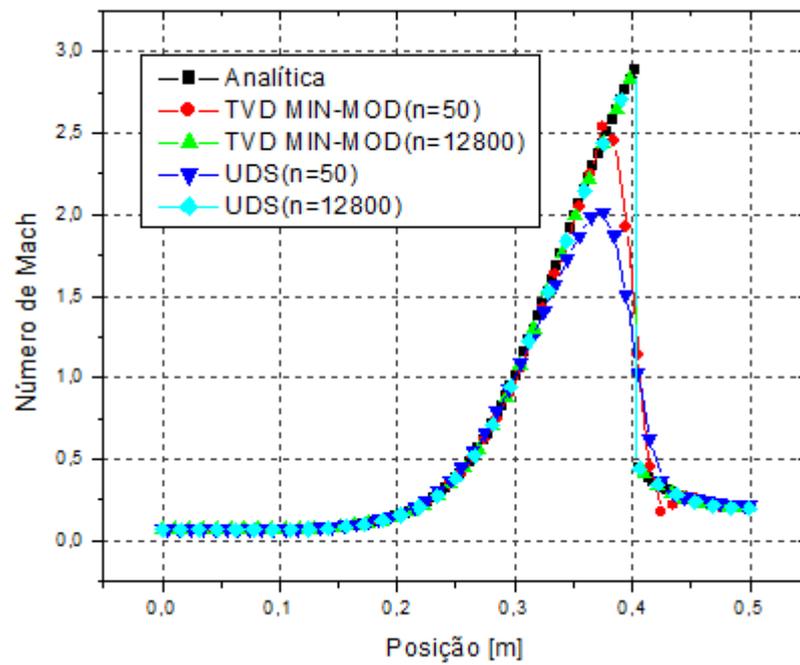
FONTE: O autor (2016).

A Fig.31 apresenta o gráfico do perfil de temperatura considerando propriedades com configuração 1 definida na Tab.11. Nota-se para este caso que o choque ocorre em uma posição próxima a 0,4 metros, apresentando uma solução numérica próxima para todas as funções de interpolação havendo oscilações em todo o percorrer do comprimento da tubeira.

Por sua vez, na Fig.32, o choque está próximo à posição 0,47 metros, bastante próxima à saída do bocal. Analisando as funções de interpolação presentes para este caso nota-se uma maior oscilação numérica como também difusão numérica para dois métodos: TVD MIN-MOD e UDS, respectivamente. Ao se utilizar UDS alguns casos podem apresentar tal fenômeno, contudo para esquema TVD MIN-MOD, atribui-se esse fato ao comportamento da função limitadora dentro do campo TVD, onde em dada região tal função se comporta como UDS.

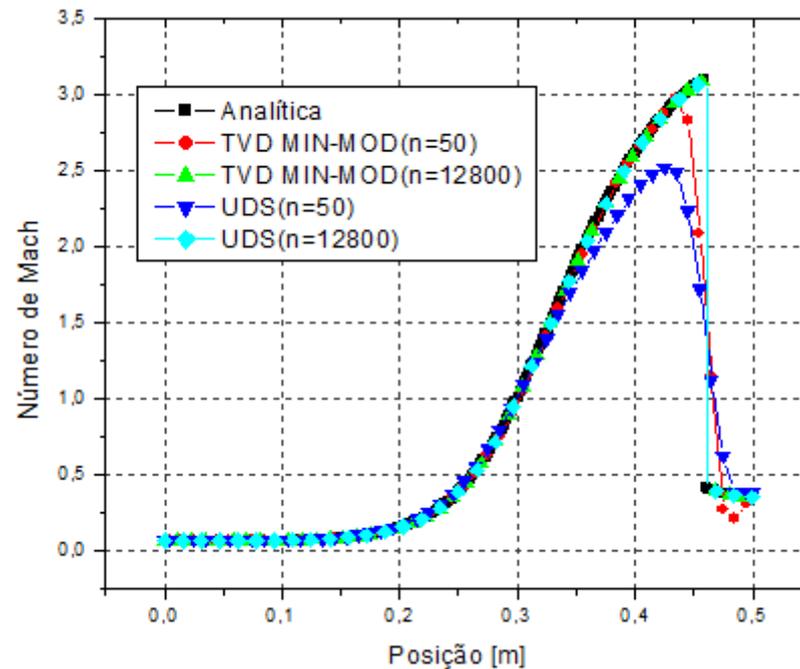
De modo a enriquecer ainda mais o estudo de diferentes funções de interpolação, é de grande importância verificar o comportamento de um dado esquema numérico com o advento do refino de malha. Assim, adotou-se a mesma metodologia utilizada na seção 4.1, onde se compara graficamente os esquemas UDS e TVD MIN-MOD com a respectiva solução analítica. Devido a grande quantidade de variáveis de interesse como também de funções de interpolação, optou-se por colocar os demais gráficos comparativos no apêndice.

FIGURA 33 – EFEITO DE REFINO DE MALHA PARA PROPRIEDADES CONSTANTES  
(CONFIGURAÇÃO 1).



FONTE: O autor (2016).

FIGURA 34 – EFEITO DE REFINO DE MALHA PARA PROPRIEDADES CONSTANTES  
(CONFIGURAÇÃO 2).



FONTE: O autor (2016).

Os gráficos apresentados pelas Fig.33 e Fig.34 permitem diferentes vertentes de análise. Uma das possíveis vertentes seria o de comparar o método TVD MIN-MOD na malha mais grossa ( $n= 50$  volumes) com a malha mais fina ( $n = 12800$  volumes). Em um segundo momento pode-se comparar visualmente o erro numérico inerente a cada tipo de função de interpolação em relação à solução analítica. E por fim, pode-se comparar o comportamento destas funções para as duas diferentes configurações propostas pela Tab.12.

Ao se comparar o esquema TVD MIN-MOD com 50 e 12800 volumes para ambas as configurações, nota-se uma maior oscilação numérica a jusante do choque e um maior erro numérico a montante do choque para a simulação com 50 volumes, contudo a mesma função de interpolação com 12800 volumes possui uma menor oscilação numérica e uma boa representação do fenômeno ao se considerar propriedades constantes.

Comparando visualmente o erro numérico inerente a cada função de interpolação nota-se que para as malhas mais finas tem-se uma boa representação do fenômeno físico, contudo para a malha mais grossa ( $n = 50$  volumes) tanto para UDS como TVD MIN-MOD encontra-se o fenômeno da oscilação numérica para o esquema TVD enquanto que para UDS destaca-se a difusão numérica ou falsa difusão. Por fim, ao se comparar os gráficos de ambas as configurações, verifica-se maior oscilação numérica para a solução numérica da configuração 2, deixando tal fato mais evidente para a representação dos esquemas com a malha mais grossa.

Analisando as variáveis de interesse de um ponto de vista numérico, foi utilizado o estimador GCI no intuito de se obter as incertezas atreladas a cada variável, considerando cada função de interpolação implementada bem como as configurações pertinentes.

TABELA 15– VARIÁVEIS DE INTERESSE E SUAS INCERTEZAS.

continua

Esquema	Variável	Configuração 1	Configuração 2
UDS	$C_d$ [-]	$1,0004 \pm 3,8 \times 10^{-4}$	$1,0004 \pm 1,1 \times 10^{-3}$
	$F^*$ [-]	$1,0007 \pm 7,6 \times 10^{-4}$	$1,00074 \pm 2,2 \times 10^{-3}$
	$T_{ex}$ [K]	$827,6647 \pm 4,3 \times 10^{-3}$	$3378,6416 \pm 9,1 \times 10^{-2}$
	$M_{ex}$ [-]	$0,198 \pm 7,6 \times 10^{-5}$	$0,355 \pm 3,9 \times 10^{-4}$
TVD Min-Mod	$C_d$ [-]	$0,9999999 \pm 6,4 \times 10^{-7}$	$0,99999 \pm 3,9 \times 10^{-7}$
	$F^*$ [-]	$0,9999999 \pm 1,3 \times 10^{-6}$	$0,9999999 \pm 7,9 \times 10^{-7}$
	$T_{ex}$ [K]	$827,6689 \pm 4,9 \times 10^{-7}$	$3378,6719 \pm 2,1 \times 10^{-5}$
	$M_{ex}$ [-]	$0,197755 \pm 8,8 \times 10^{-9}$	$0,35506 \pm 9,2 \times 10^{-8}$

TABELA 15– VARIÁVEIS DE INTERESSE E SUAS INCERTEZAS.

Esquema	Variável	conclusão	
		Configuração 1	Configuração 2
TVD Smart	$C_d$ [-]	$0,9999999 \pm 1,7 \times 10^{-7}$	$0,9999999 \pm 3,2 \times 10^{-7}$
	$F^*$ [-]	$0,9971848 \pm 2,9 \times 10^{-3}$	$0,9989815 \pm 6,4 \times 10^{-5}$
	$T_{ex}$ [K]	$825,3391 \pm 2,4 \times 10^0$	$3375,2312 \pm 2,2 \times 10^{-1}$
	$M_{ex}$ [-]	$0,1974768 \pm 2,9 \times 10^{-4}$	$0,3548835 \pm 1,1 \times 10^{-5}$
TVD Sweby	$C_d$ [-]	$0,9999999 \pm 5,4 \times 10^{-8}$	$0,9999999 \pm 8,7 \times 10^{-8}$
	$F^*$ [-]	$0,9999999 \pm 1,1 \times 10^{-7}$	$0,9999999 \pm 2,1 \times 10^{-7}$
	$T_{ex}$ [K]	$827,6689 \pm 2,2 \times 10^{-6}$	$3378,6719 \pm 5,6 \times 10^{-5}$
	$M_{ex}$ [-]	$0,197755 \pm 2,5 \times 10^{-8}$	$0,35506 \pm 1,6 \times 10^{-7}$

FONTE: O autor (2016).

### 4.3 DISCUSSÕES

A presente seção tem por função realçar os resultados apresentados, comentando possíveis divergências bem como aprofundar certos pontos tratados nas seções 4.1 e 4.2.

Num escopo geral esta dissertação teve o intuito de abranger dois grandes problemas: Euler unidimensional sem descontinuidades e Euler unidimensional com descontinuidades considerando como a aplicação o motor foguete.

Dentro da vertente que aborda a equação de Euler unidimensional sem descontinuidades, dois modelos de escoamento foram propostos: escoamento congelado e escoamento em equilíbrio químico local. Para o primeiro modelo de escoamento mencionado todas as variáveis de interesse atingiram os valores esperados de ordem aparente, ou seja, funções de interpolação de primeira ordem atingiu primeira ordem de acurácia e esquemas de segunda ordem atingiram segunda ordem de acurácia.

Quanto ao escoamento em equilíbrio químico local, as funções de interpolação que apresentam teoricamente segunda ordem de acurácia, tiveram suas ordens degeneradas para ordem unitária. Tal fato pode ser atribuído ao termo fonte químico reativo  $S_{eq}$  avaliado pela Eq.(3.5), uma vez que este termo insere instabilidades numéricas na equação da energia seja a equação de energia térmica alternativa trabalhada em Silva (2015) ou Marchi *et al.*(2004). Devido a tais instabilidades os procedimentos de discretização tendem a função de interpolação UDS, implicando na baixa ordem de acurácia de todos os esquemas testados. Ainda referente ao presente modelo de escoamento, verifica-se que para esquemas numéricos que possuem comportamento similar ao CDS em parte do campo TVD como ocorre para TVD SUPERBEE e TVD CHAKRAVARTHY & OSHER e até mesmo para TVD SWEBY

que trabalha na região intermediária do campo TVD, não possuem uma tendência clara de ordem aparente.

Tais limitações observadas através deste modelo de escoamento levanta um importante ponto, que vem a ser de uma sub-região dentro do campo TVD onde as soluções numéricas sejam mais estáveis e ainda próximo da linha  $\psi(r) = 2$  o que em princípio, aumenta a possibilidade de se atingir segunda ordem de acurácia.

Comparando ambos os modelos físicos de escoamento congelado e escoamento em equilíbrio químico local, nota-se que existem 3 patamares, o primeiro deles composto pela solução analítica, o segundo deles composto solução numérica de escoamento em equilíbrio químico local e por fim o terceiro patamar composto pela solução numérica de escoamento congelado. Tais patamares são esperados e estão de acordo com a literatura de CEA (Glenn Research Center,2005) conforme demonstrado na Tab.11. A justificativa para a ocorrência destes patamares é atribuído à complexidade dos modelos químicos, uma vez que para a solução analítica tem-se um escoamento monoespécie, para o escoamento congelado tem-se um mistura de gases com o cálculo da composição química sendo realizada apenas uma vez, pois se admite que essa mistura de gases é constante e por fim, o escoamento em equilíbrio químico local onde a composição é calculada para cada volume finito dentro do domínio de cálculo.

Por fim, ao se tratar de Euler unidimensional com descontinuidades e propriedades constantes alguns pontos devem ser realçados como o comportamento das ordens aparentes para cada função de interpolação. Observa-se que para posições intermediárias de choque normal mais esquemas numéricos atingiram a ordem esperada, com apenas TVD SMART tendo instabilidades para obtenção de ordem aparente para a maioria das variáveis de interesse.

Ao avaliar choque mais próximo da saída do bocal mais instabilidades os resultados sofrem e mais desafiador torna-se encontrar uma função de interpolação que obtenha segunda ordem para as soluções numéricas. Perante os esquemas numéricos de segunda ordem testados para Euler unidimensional com descontinuidades (TVD MIN-MOD, TVD SMART e TVD SWEBY) apenas TVD SWEBY obteve uma tendência de ordem aparente para todas as variáveis, ou seja, para o presente problema tratado recomenda-se trabalhar com esquemas próximos ao centro do campo TVD.

## 5 CONCLUSÃO

De modo geral dois diferentes tipos de problemas foram tratados nesta dissertação: solução da equação de Euler unidimensional sem e com descontinuidades. Para o primeiro problema proposto sete diferentes funções de interpolação foram utilizadas: UDS, CDS, TVD CHAKRAVARTHY & OSHER, TVD MIN-MOD, TVD SMART, TVD SUPERBEE e TVD SWEBY; dois diferentes modelos físicos (e matemáticos): escoamento congelado e escoamento em equilíbrio químico local. Enquanto que para o escoamento congelado todos os esquemas apresentaram a ordem de acurácia esperada para  $p_U$ , para o modelo de escoamento em equilíbrio químico local o mesmo não pôde ser verificado, pois todos os esquemas apresentaram tendência para ordem unitária. Este comportamento pode ser atribuído ao termo fonte químico reativo da equação da energia, uma vez que discretização deste termo tende ao esquema UDS.

Os valores atribuídos as variáveis de interesse são dependentes do modelo físico escolhido. Contudo essa dependência é maior para variáveis locais, como  $M_{ex}$  e  $T_{ex}$ , onde se atingem diferenças superiores a 10% do que para variáveis globais onde a diferença fica em torno de 1 a 2%.

Especialmente para o modelo físico de escoamento em equilíbrio químico local, TVD MIN-MOD obteve menor tempo de processamento computacional do que o CDS. Este fato pode ser associado pela razão de ambos os esquemas fornecem resultados numéricos de incerteza na mesma ordem e ordens equivalentes de acurácia. A partir disso, verifica-se que TVD MIN-MOD é uma boa opção para a discretização de modelos de escoamentos compressíveis reativos.

Para o segundo problema trabalhado, quatro diferentes esquemas numéricos foram testados: UDS, TVD MIN-MOD, TVD SMART e TVD SWEBY. Para o presente caso considerou-se o modelo físico (e matemático) de propriedades constantes para duas diferentes configurações, onde uma dessas configurações possui descontinuidade (choque) na porção inicial do divergente e a outra próxima a saída do bocal (final da seção divergente). Verificou-se que para ambos as configurações as funções de interpolação apresentaram ordem de acurácia esperada para  $p_U$ , contudo para a primeira configuração o esquema TVD SMART não obteve uma tendência clara da ordem de acurácia para a maioria das variáveis de interesse. De modo aditivo, para a configuração 2, a maioria das funções de interpolação não apresentaram tendências de ordem de acurácia para a maioria das variáveis de interesse. Neste

questo o esquema que obteve o melhor comportamento foi o TVD SWEBY, uma vez que foi identificado tendência de ordem de acurácia para todas as variáveis de interesse.

Comparando os esquemas TVD com o UDS, pode-se afirmar que o UDS possui vantagens em relação às demais funções de interpolação comparadas na presença de ondas de choque, como por exemplo, pelo fato do esquema UDS não apresentar oscilações a jusante do choque e possuir menor tempo de processamento computacional ao se considerar o evento de refinamento da malha. Entretanto, deve-se observar que esquemas numéricos de segunda ordem comumente apresentam menores erros numéricos.

Perante os problemas estudados no capítulo 4, conclui-se que a família de funções de interpolação TVD obtiveram resultados satisfatórios em sua maioria, com destaque para o TVD SMART ao se trabalhar com reações químicas e TVD SWEBY ao se considerar o advento do choque.

Como trabalhos futuros dentro desta temática, tem-se a intenção da inclusão do esquema numérico ENO no programa Mach1D através de adaptação da linguagem de programação, como também o aprofundamento do estudo das funções de interpolação TVD considerando também o escoamento com taxa finita de reação e modelos químicos mais complexos.

## REFERÊNCIAS

**AIAA. Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations.** AIAA G-077-1998.

ANDERSON Jr, J. D. **Modern Compressible Flow with Historical Perspective.** 3 ed. New York: McGraw-Hill HigherEducation, 2003.

BARROS, J. E. M.; ALVIM FILHO, G. F.; PAGLIONE, P. **Estudo de Escoamento Reativo em Desequilíbrio Químico através de Bocais Convergente-Divergente.** In: III Encontro Nacional de Ciências Térmicas. Anais, Itapema, 1990.

BONFIGLIOLI, A.; PACIORRI, R. **Hypersonic Flow Computations on Unstructured Grids: Shock Capturing vs. Shock-Fitting Approach.** In: 40<sup>th</sup> Fluid Dynamics Conference and Exhibit, 2010.

BROWN, C. D. **Spacecraft Propulsion.** Washington: AIAA Educational Series, 1996.

BURDEN, R. L.; FAIRES, D. **Análise Numérica.** São Paulo: Cengage Learning, 2008.

CASTRO, Marcos. **Esquemas Essencialmente Não-Oscilatórios de Alta Precisão para Leis de Conservação Hiperbólicas.** Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada). Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, 2009.

CHUNG, T.J., **Computational Fluid Dynamics.** Cambridge University Press, 2002.

DÉLERY, Jean; DUSSAUGE, Jean-Paul. **Some physical aspects of shock wave/boundary layer interactions.** Springer, 2009.

FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. **Computational Methods for Fluid Mechanics.** 3 ed. Berlin: Springer-Verlag, 2001.

FORTUNA, A. O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos.** São Paulo: Edusp, 2000.

FOX, R. W.; MCDONALD, A. T. **Introdução à mecânica dos fluidos.** 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.

FUJII, Kozo. **CFD contributions to high-speed shock-related problems.** Springer, 2009.

HABIBALLAH, M.; VINGERT, L.; VUILLERMONZ, P. **Research as a Key in the Design Methodology of liquid-Propellant Combustion Devices.** Journal of Propulsion and Power, v. 14, n. 5, pp. 782-788, 1998.

HANGEMANN, G.; ALTING, J.; PRECLI, D. **Scalability for Rocket nozzle Flows Based on Subscale and Full-Scale testing.** Journal of Propulsion and Power, v. 19, n. 3, pp. 321-331, 2003.

JOHN, J. E.; KEITH, T. G. **Gas Dynamics**. 3 ed, Upper Saddle River: Pearson Prentice Hall, 2006.

KEE, R. J.; GRGAR, J. F.; SMOOKE, M. D.; MILLER, J. A. **A Fortran Program for Modeling Steady Laminar One-Dimensional Premixed Flames**. SAND85-8240•UC-401. Albuquerque: Sandia National Laboratories, 1990.

LIEPMANN, H. W.; ROSHKO, A., **Elements of Gasdynamics**. Mineola: Dover Publications, 2001.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. 2° Ed. Rio de Janeiro: LTD Editora, 2004.

MARCHI, C. H. **Verificação de Soluções Numéricas Unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos**. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica). Universidade Federal de Santa Catarina. Florianópolis, SC, 2001.

\_\_\_\_\_. **Apostila de Dinâmica dos Fluidos Computacional**. Universidade Federal do Paraná, 2010.

MARCHI, C. H.; ARAKI, L. K. **Relatório Técnico 3 do Projeto CFD-5/UFPR: programa Mach1D 5.0**. Curitiba, 2007. Disponível em: <ftp://ftp.demec.ufpr.br/CFD/projetos/cfd5>.

MARCHI C. H.; HOBMEIR, M. A. **Numerical Solution of Staggered Circular Tubes in Two-Dimensional Laminar Forced Convection**. Journal of Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, v. 29, pp. 42-48, 2007.

MARCHI, C. H.; LAROCA, F.; SILVA, A. F. C.; HINCKEL, J. N. **Numerical Solution of Flows in Rocket Engines with Regenerative Cooling**. Numerical Heat Transfer, Part A, v. 45, pp. 699-717, 2004.

MARCHI, C. H.; MALISKA, C. R. **A Nonorthogonal Finite Volume Method for the Solution of all Speed Flows Using Co-located Variables**. Numerical Heat Transfer, Part B, v. 26, pp. 293-311, 1994.

METHA, U. B. **Guide to Credible Computer Simulations of Fluid Flows**. Journal of Propulsion and Power, v. 12, n. 5, pp. 940-948, 1996.

MOURA, A.F.; ROSA M.A.P. **A Computer Program for Calculating Normal and Oblique Shock Waves for Airflows in Chemical and Thermodynamic Equilibrium**. 22<sup>nd</sup> International Congress of Mechanical Engineering (COBEM 2013).

NARAGHI, M. H. N.; NUNES, E. M.; **Effects of Gas Radiation on the Thermal Characteristics of Regeneratively Cooled Rocket Engines**. In: IMECE 2002: 2002 ASME International Mechanical Engineering Congress. 2002.

PAUBEL, E.F.C. **Propulsão e Controle de Veículos Aeroespaciais: Uma Introdução**. Ed. da UFSC, 2002.

ROACHE, P. J. **Perspective: A Method for uniform Reporting of Grid Refinement Studies.** Journal of Fluids Engineering, v. 116, pp. 405-413, 1994.

\_\_\_\_\_. **Verification and Validation in Computational Science and Engineering.** Hermosa Publishers, 1998.

ROY, C. J. **Review of Code and Solution Verification Procedures for Computational Simulation.** Journal of Computational Physics, v. 205, pp. 131 – 156, 2005.

SILVA, N. D. P. **Aplicação de esquemas numéricos em escoamentos com ondas de Choque em bocais do tipo convergente-divergente.** Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Universidade Federal do Paraná. Curitiba,PR,2015.

SMITH, T. A.; PAVLI, A. J.; KACYNSKI, K. J. **Comparison of Theoretical and Experimental Thrust Performance of a 1030: 1 Area Ratio Rocket Nozzle at a Chamber Pressure of 2413 kN/m<sup>2</sup> (350 psia).** Nasa Technical Paper 2725, 1987.

SUTTON, G.P.; BIBLARZ, O. **Rocket Propulsion Elements.** 7° Ed. New York: John Wiley & Sons. Inc., 2001.

SVEHLA, R. A. **Thermodynamic and Transport Properties for the Hydrogen-Oxygen System.** NASA SP-3011. Cleveland: NASALewisResearchCenter, 1964.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method,** 2° Ed., Harlow: Pearson Educational Limited, 2007.

WANG, T. -S. **Multidimensional Unstructured-Grid Liquid Rocket Engine Nozzle Performance and Heat Transfer Analysis.** Journal of Propulsion and Power, v. 22, n. 1, pp. 78-84, 2006.

ZHANG, X., D.; PELLETIER, D.; TRÉPANIER, J. -Y.; CAMARERO, R. **Numerical Assessment of Error Estimators for Euler Equations.** AIAA Journal, v. 39, n. 9, pp. 1706-1715, 2001.

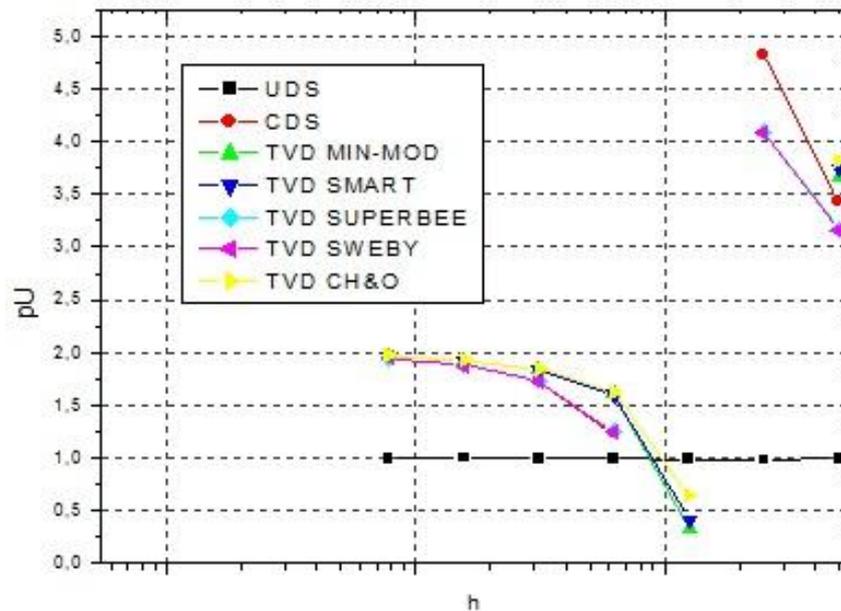
## APÊNDICES

### APÊNDICE A – RESULTADOS COMPLEMENTARES DA SEÇÃO 4.1

Considerando o escopo tratado pela seção 4.1, que vem a ser o uso de diferentes funções de interpolação para dois modelos físicos (e matemáticos) que são o escoamento congelado e o escoamento em equilíbrio químico local, complementa-se neste apêndice os resultados relativos à ordem aparente das demais variáveis, perfil de propriedades bem como o estudo do efeito de refino de malha para os esquemas numéricos envolvidos, respectivamente:

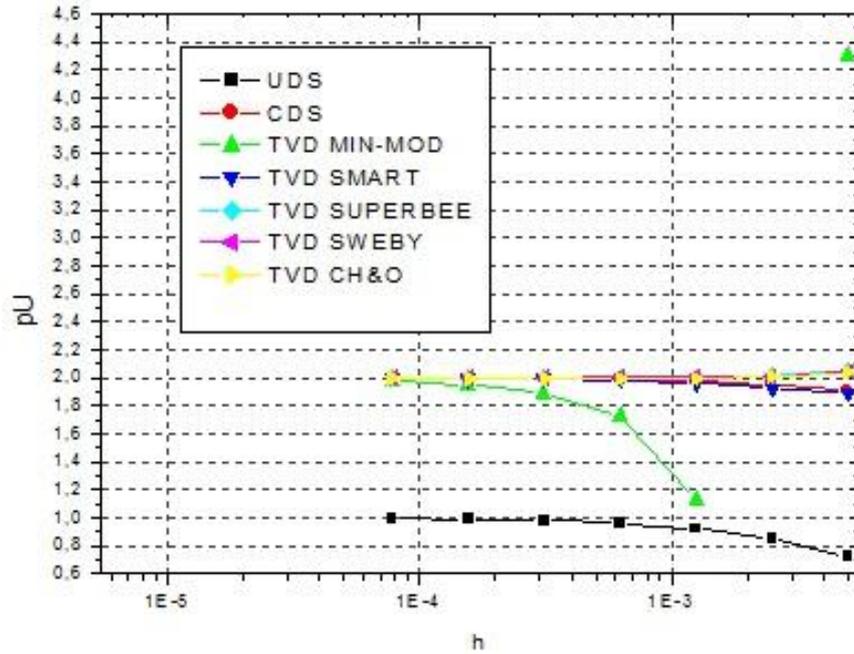
#### 1. Gráficos de ordem aparente:

Figura A.1 - Ordem aparente ( $p_U$ ) do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para escoamento congelado.



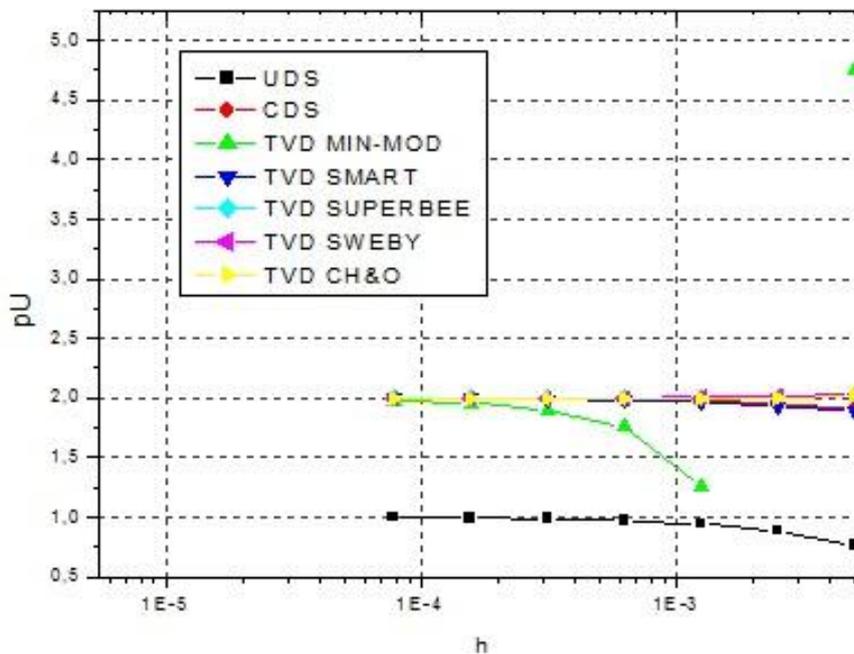
FONTE: O autor (2016).

Figura A.2 - Ordem aparente ( $p_U$ ) do número de Mach ( $M_{ex}$ ) para escoamento congelado.



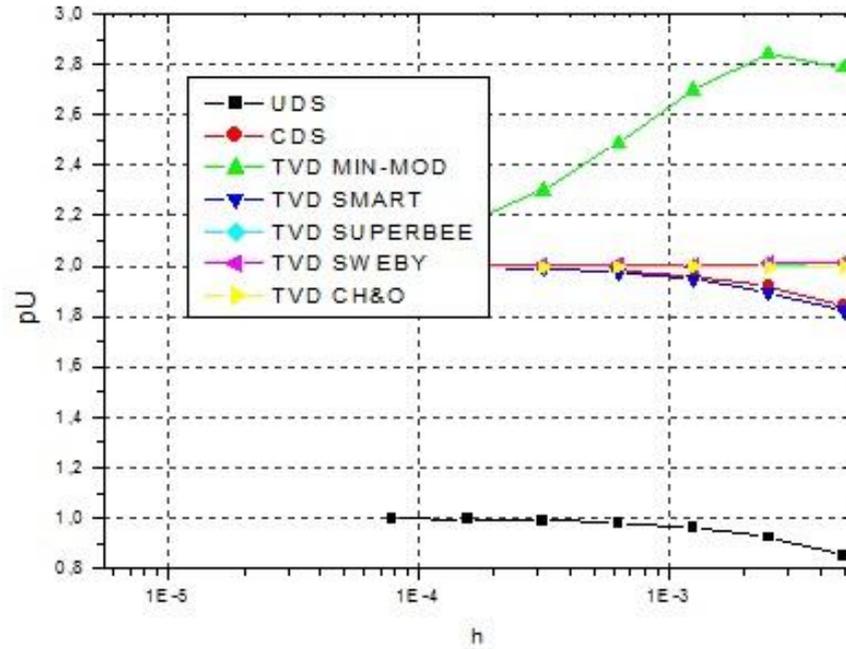
FONTE: O autor (2016).

Figura A.3 - Ordem aparente ( $p_U$ ) da temperatura ( $T_{ex}$ ) para escoamento congelado.



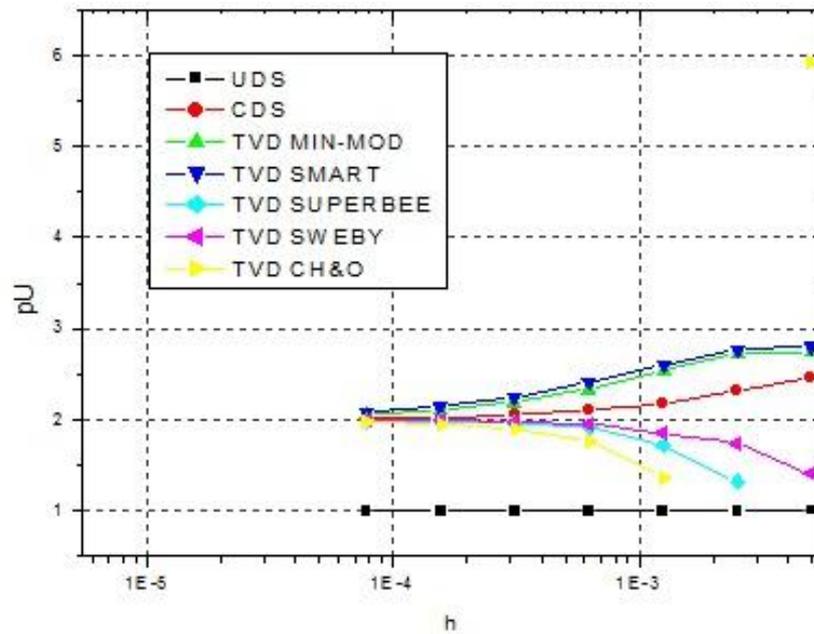
FONTE: O autor (2016).

Figura A.4 - Ordem aparente ( $p_U$ ) da velocidade nodal ( $\mathbf{u}_{ex}$ ) para escoamento congelado.



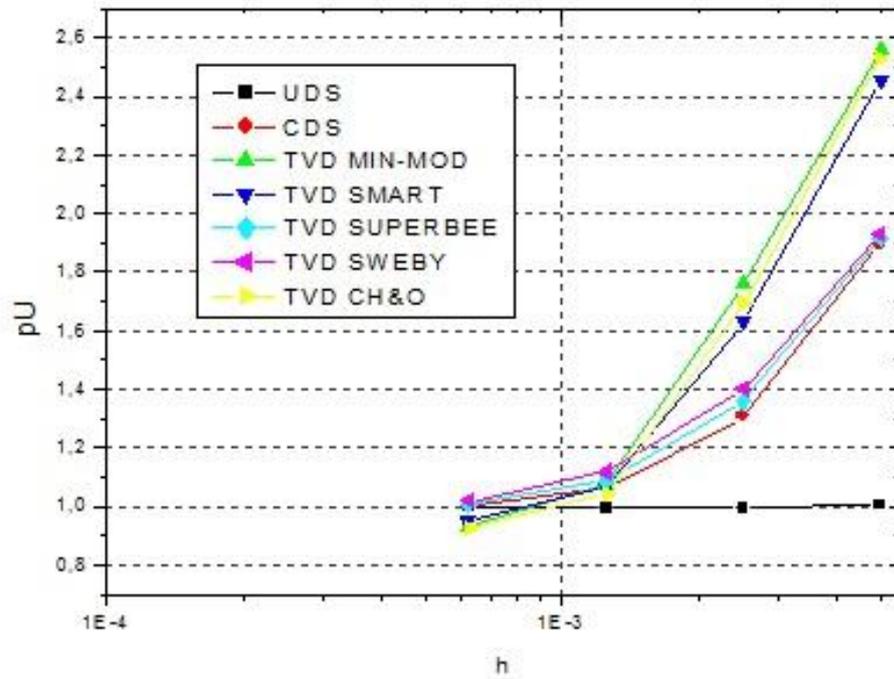
FONTE: O autor (2016).

Figura A.5 - Ordem aparente ( $p_U$ ) da massa específica ( $\rho_{ex}$ ) para escoamento congelado.



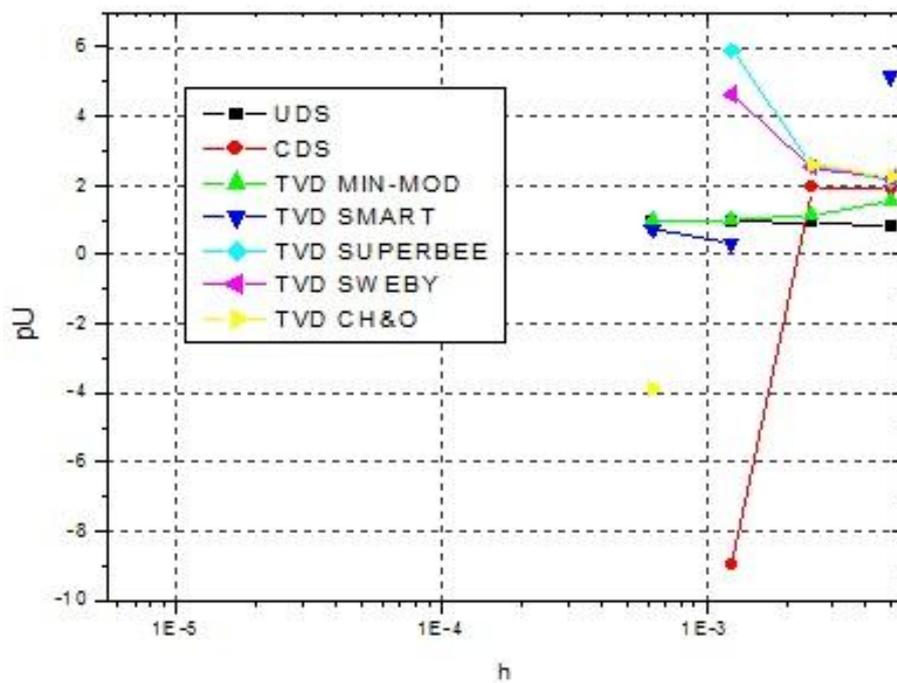
FONTE: O autor (2016).

Figura A.6 - Ordem aparente ( $p_U$ ) do coeficiente de descarga ( $C_d$ ) para equilíbrio químico local.



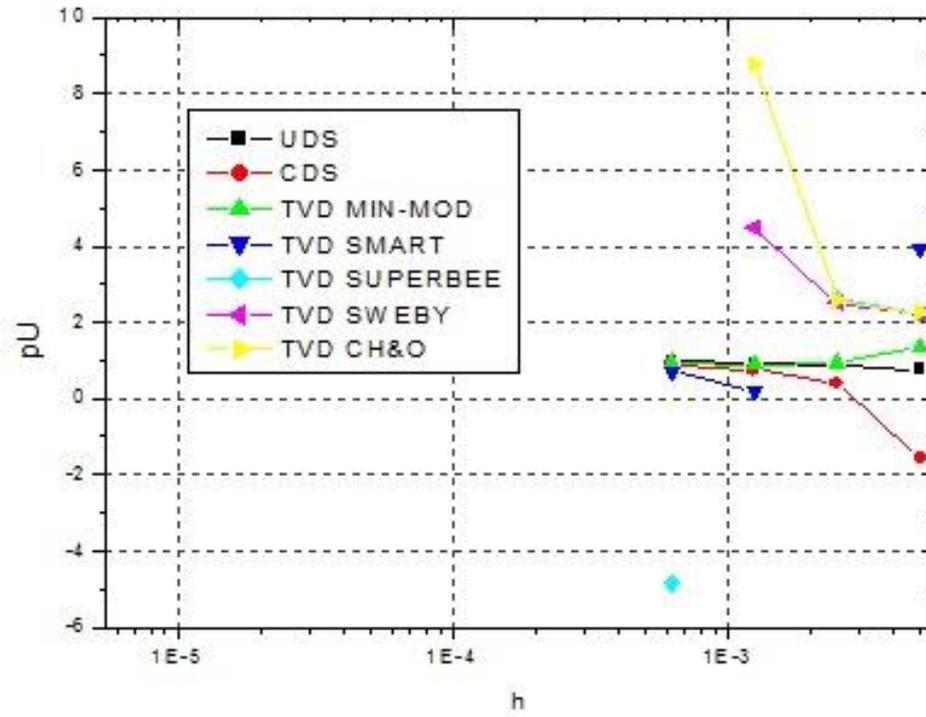
FONTE: O autor (2016).

Figura A.7 - Ordem aparente ( $p_U$ ) do número de Mach ( $M_{ex}$ ) para equilíbrio químico local.



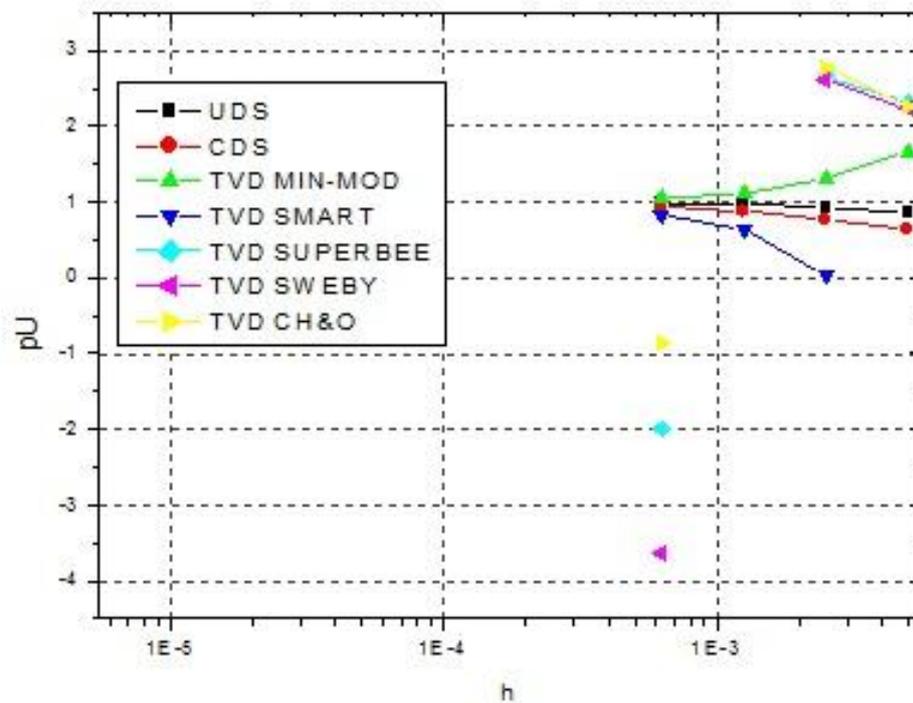
FONTE: O autor (2016).

Figura A.8 - Ordem aparente ( $p_U$ ) da temperatura ( $T_{ex}$ ) para equilíbrio químico local.



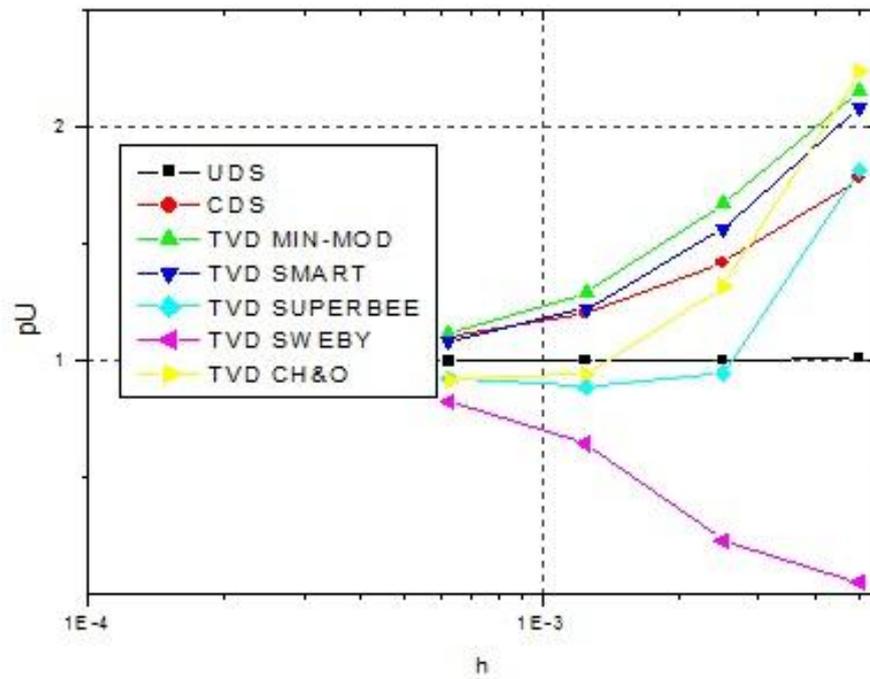
FONTE: O autor (2016).

Figura A.9 - Ordem aparente ( $p_U$ ) da velocidade nodal ( $u_{ex}$ ) para equilíbrio químico local.



FONTE: O autor (2016).

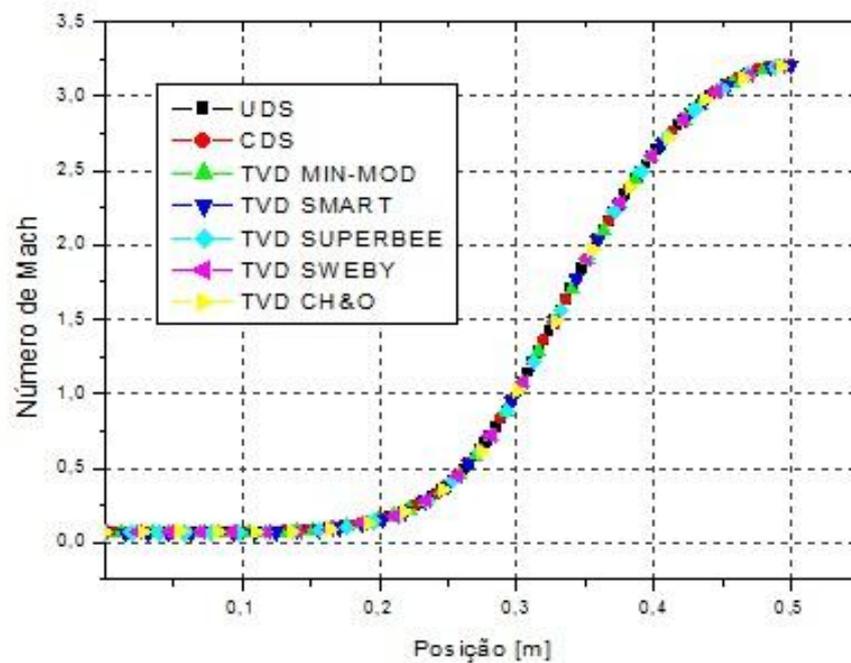
Figura A.10 - Ordem aparente ( $p_U$ ) da massa específica ( $\rho_{ex}$ ) para equilíbrio químico local.



FONTE: O autor (2016).

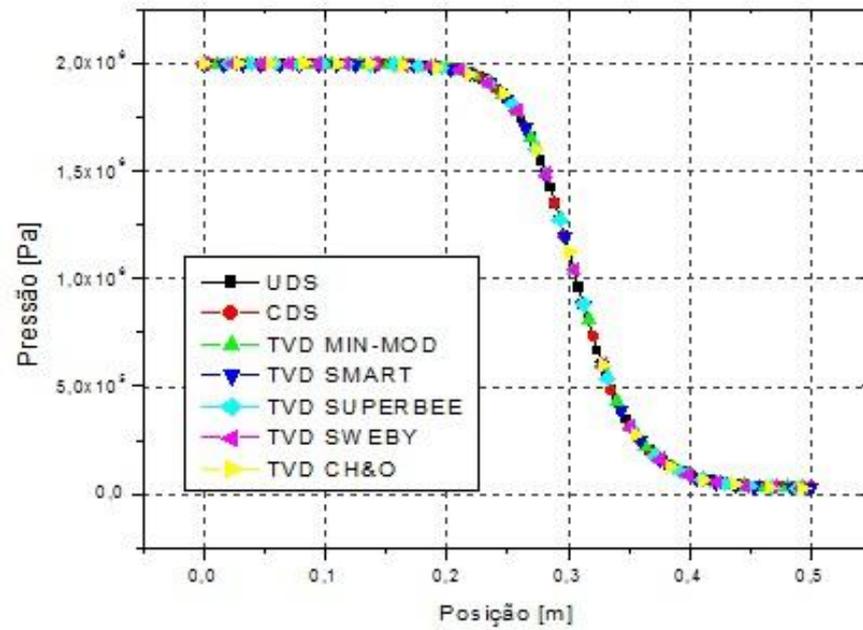
## 2. Gráficos de perfil de propriedade:

Figura A.11 – Perfil do número de Mach para escoamento congelado.



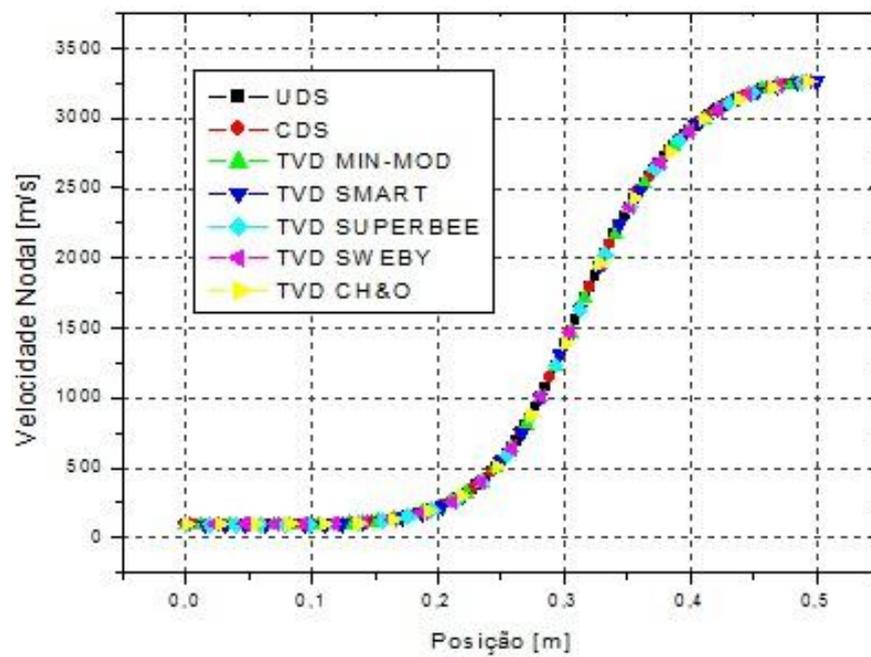
FONTE: O autor (2016).

Figura A.12 – Perfil de pressão para escoamento congelado.



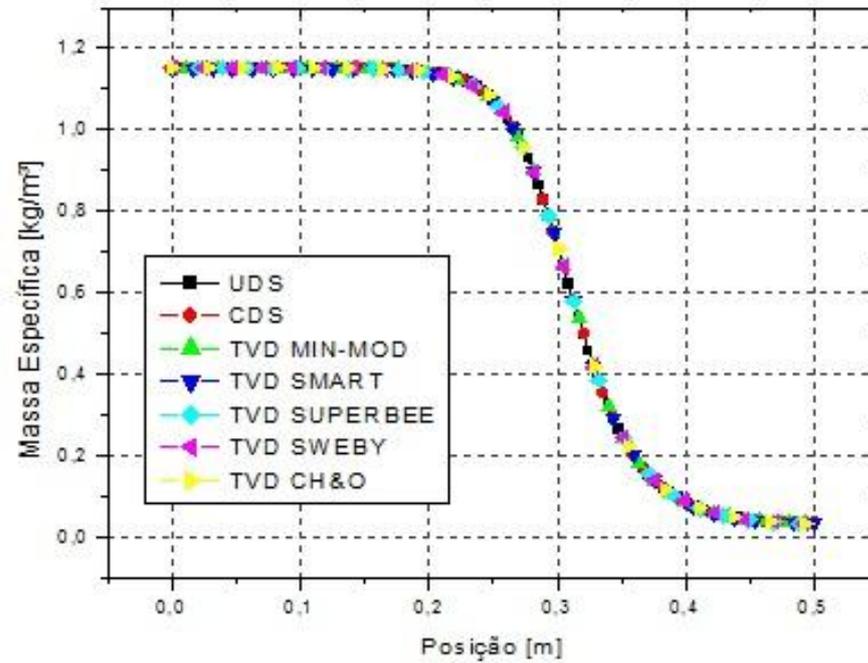
FONTE: O autor (2016).

Figura A.13 – Perfil de velocidade nodal para escoamento congelado.



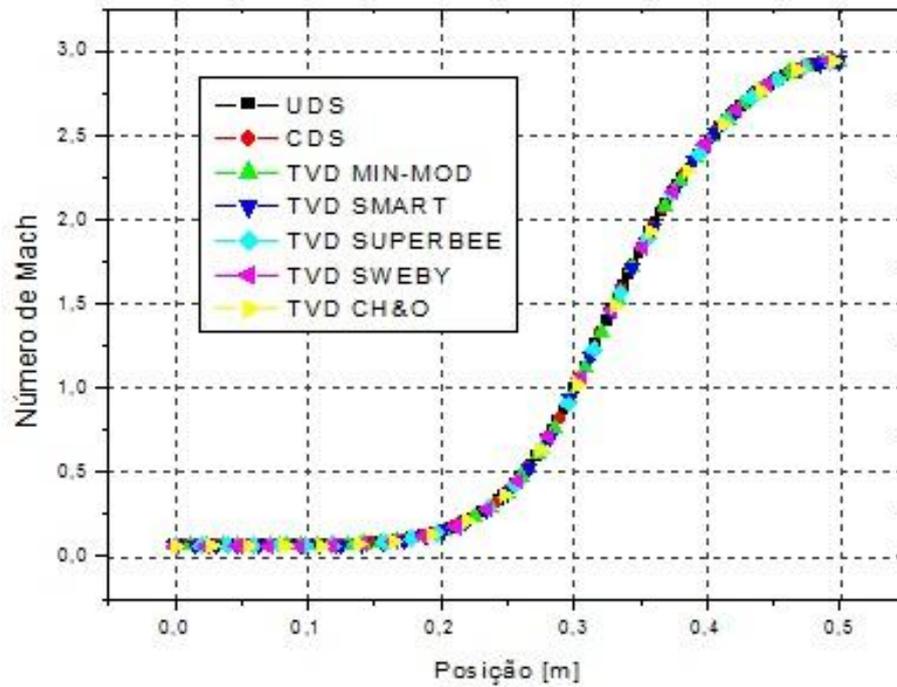
FONTE: O autor (2016).

Figura A.14 – Perfil de massa específica para escoamento congelado.



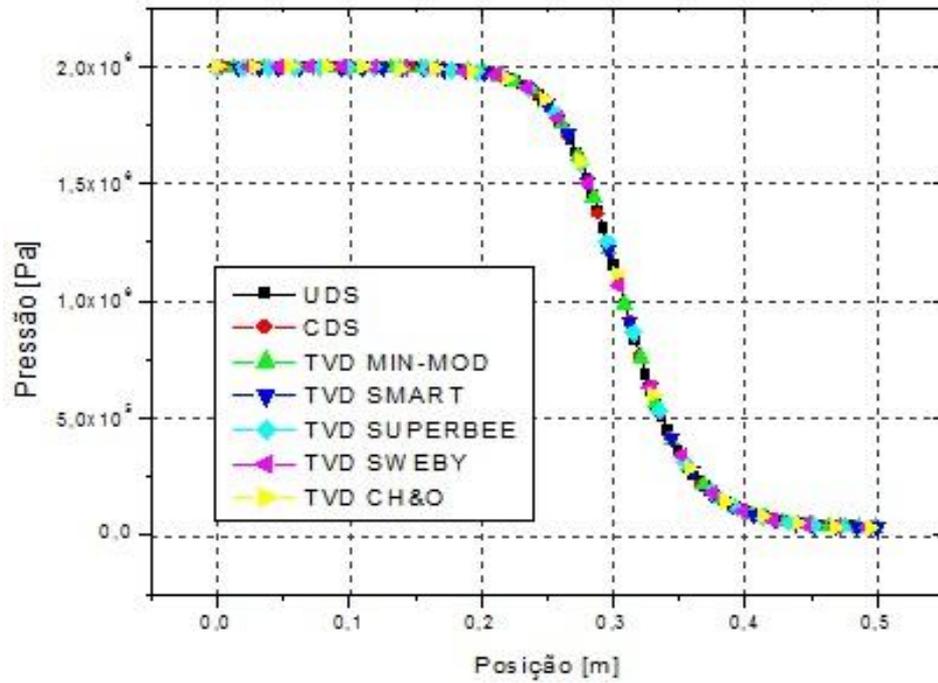
FONTE: O autor (2016).

Figura A.15 – Perfil do número de Mach para equilíbrio químico local.



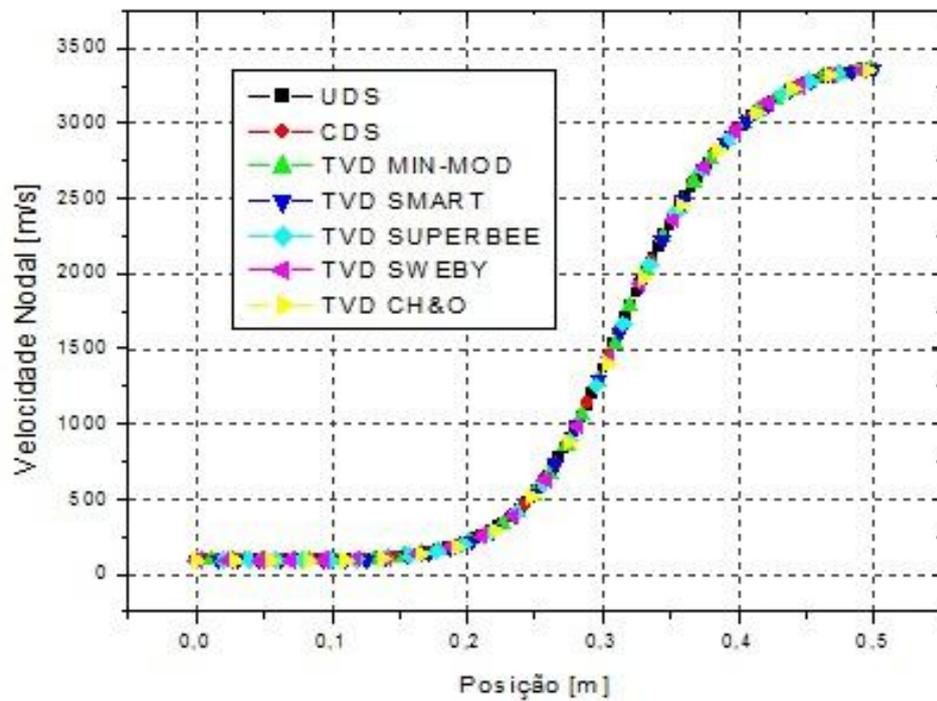
FONTE: O autor (2016).

Figura A.16 – Perfil de pressão para equilíbrio químico local.



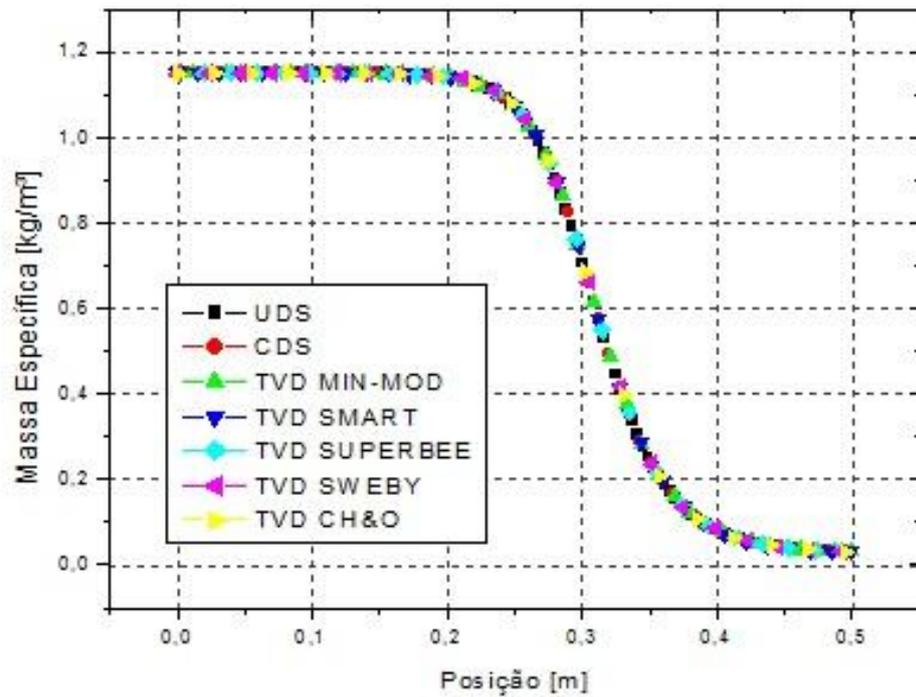
FONTE: O autor (2016).

Figura A.17 – Perfil de velocidade nodal para equilíbrio químico local.



FONTE: O autor (2016).

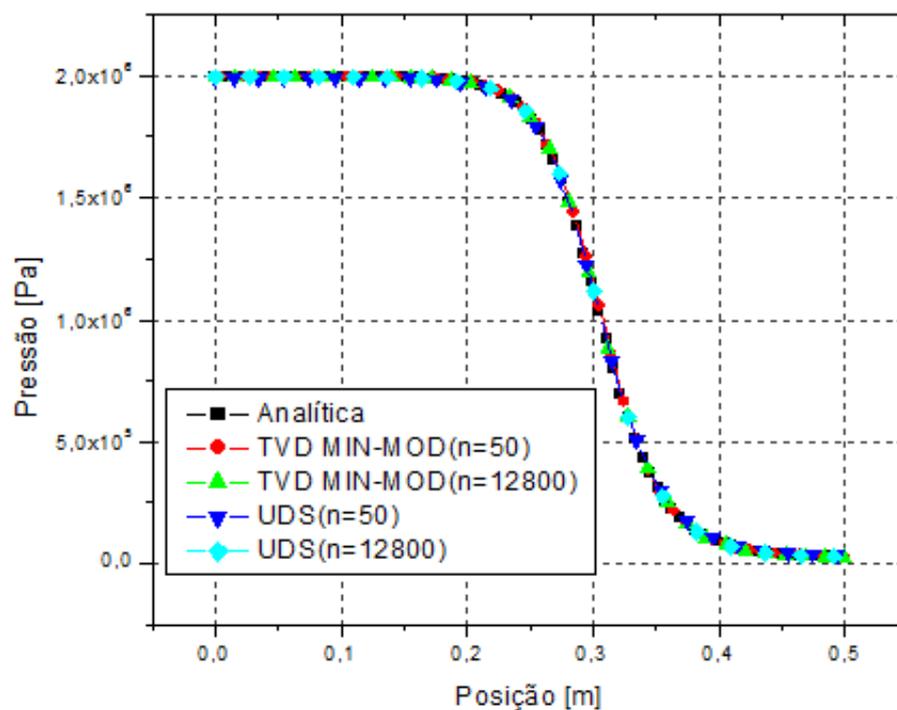
Figura A.18 – Perfil de massa específica para equilíbrio químico local.



FONTE: O autor (2016).

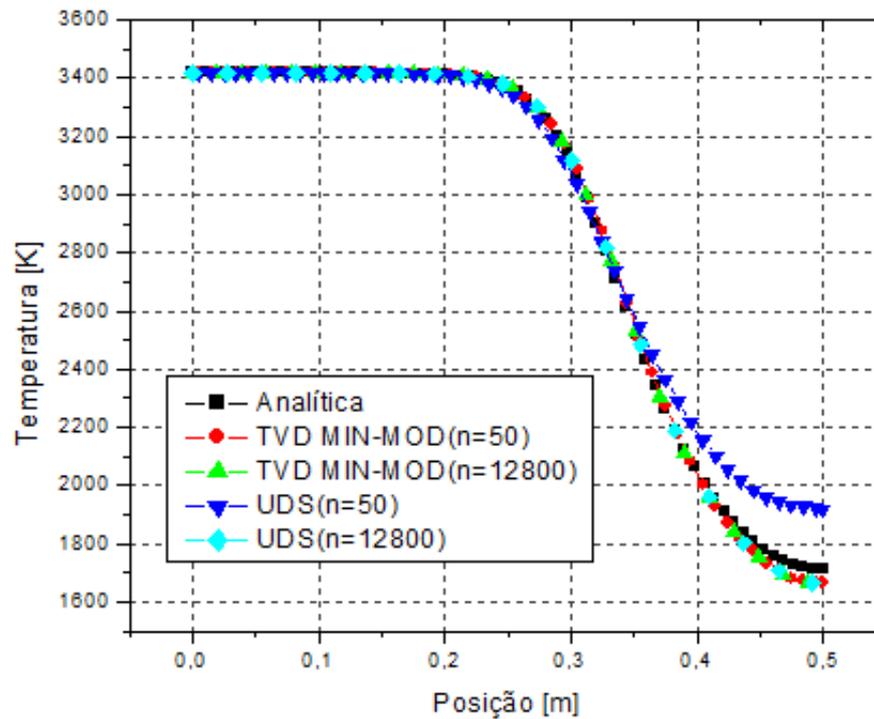
### 3. Gráficos de efeito de refino de malha para escoamento congelado:

Figura A.19 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para pressão (escoamento congelado).



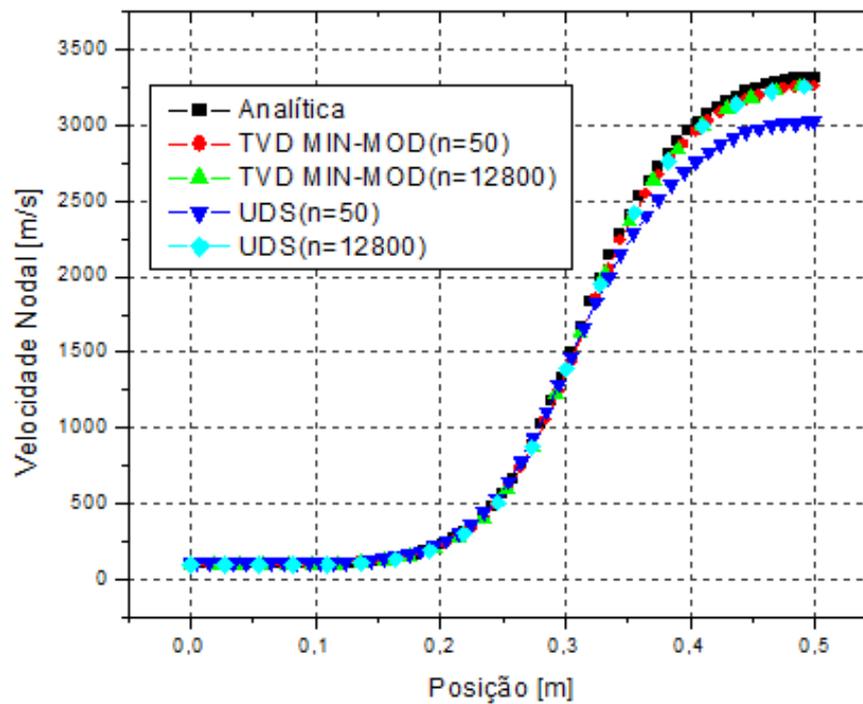
FONTE: O autor (2016).

Figura A.20 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para temperatura (escoamento congelado).



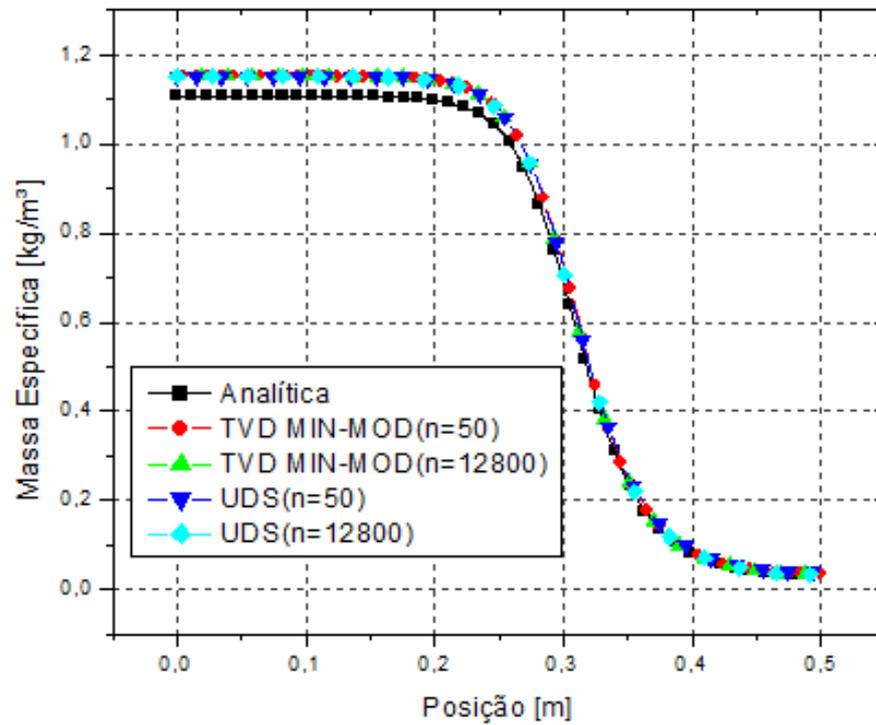
FONTE: O autor (2016).

Figura A.21 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para velocidade nodal (escoamento congelado).



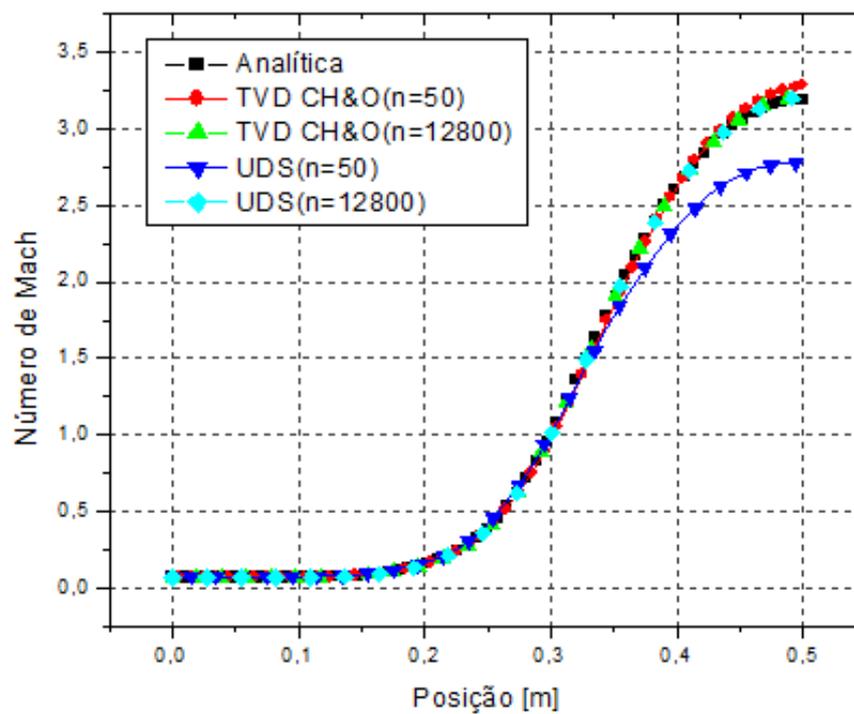
FONTE: O autor (2016).

Figura A.22 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para massa específica (escoamento congelado).



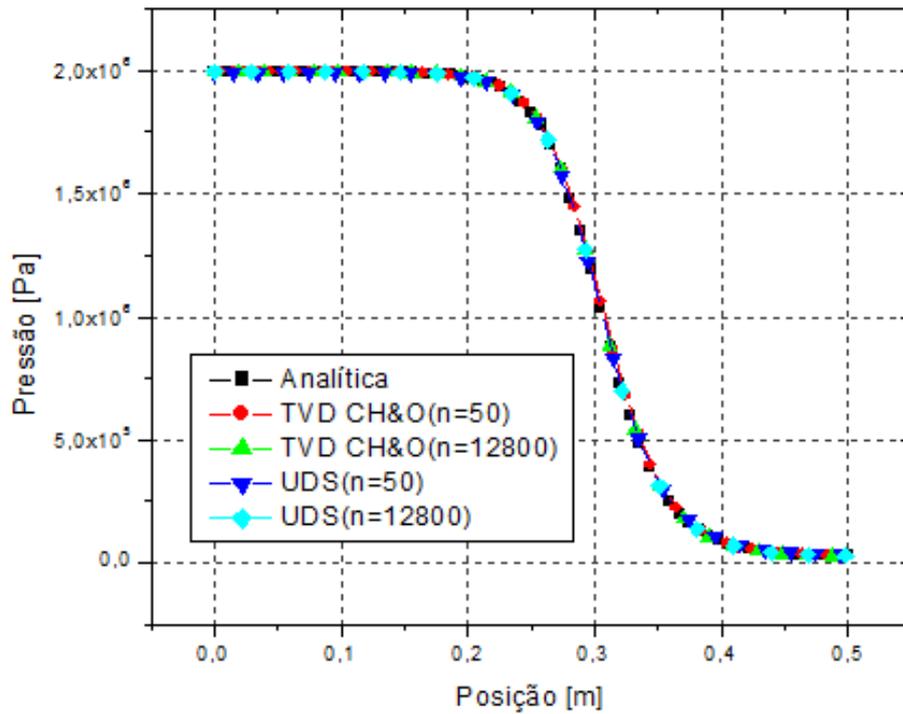
FONTE: O autor (2016).

Figura A.23 – Efeito de malha para TVD Chakravarthy & Osher para número de Mach (escoamento congelado).



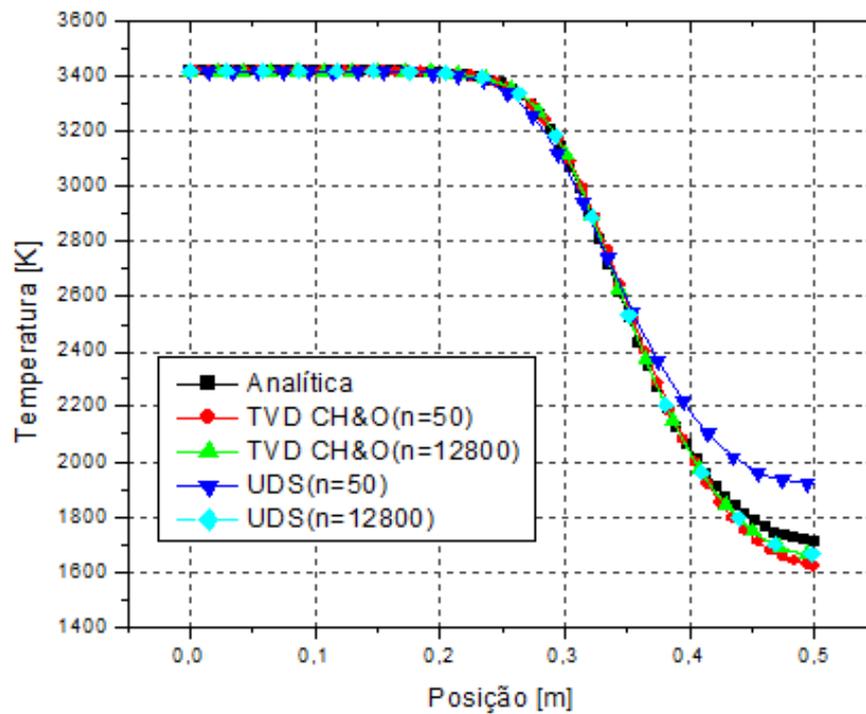
FONTE: O autor (2016).

Figura A.24 – Efeito de malha para TVD Chakravarthy & Osher para pressão (escoamento congelado).



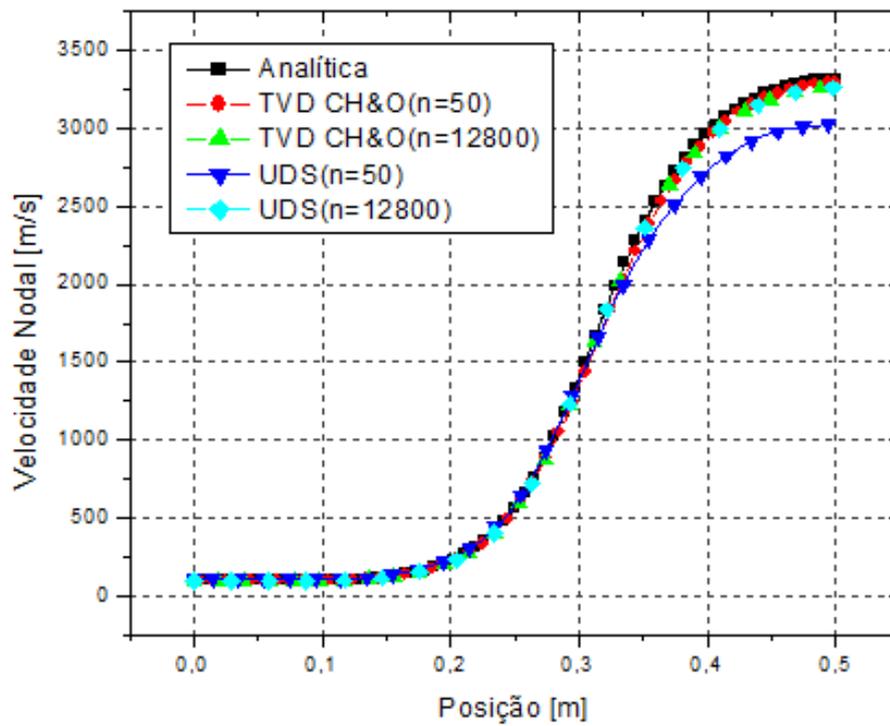
FONTE: O autor (2016).

Figura A.25 – Efeito de malha para TVD Chakravarthy & Osher para temperatura (escoamento congelado).



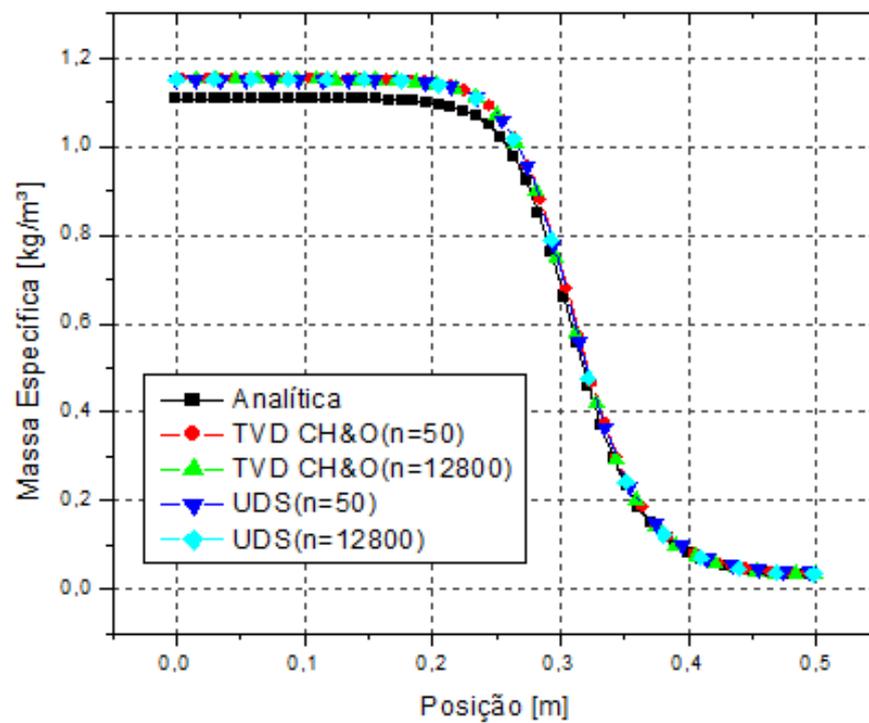
FONTE: O autor (2016).

Figura A.26 – Efeito de malha para TVD Chakravarthy & Osher para velocidade nodal (escoamento congelado).



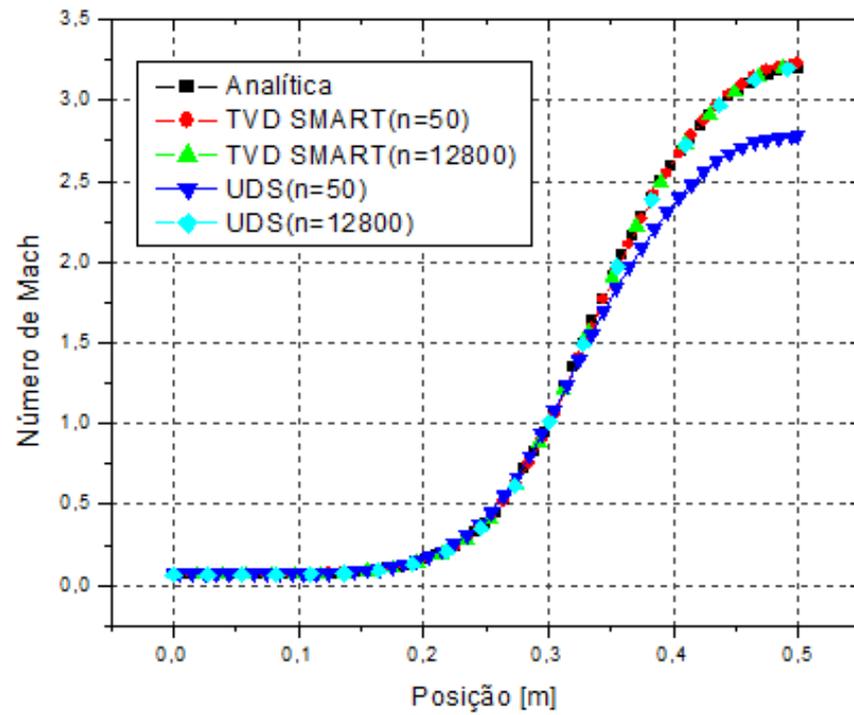
FONTE: O autor (2016).

Figura A.27 – Efeito de malha para TVD Chakravarthy & Osher para massa específica (escoamento congelado).



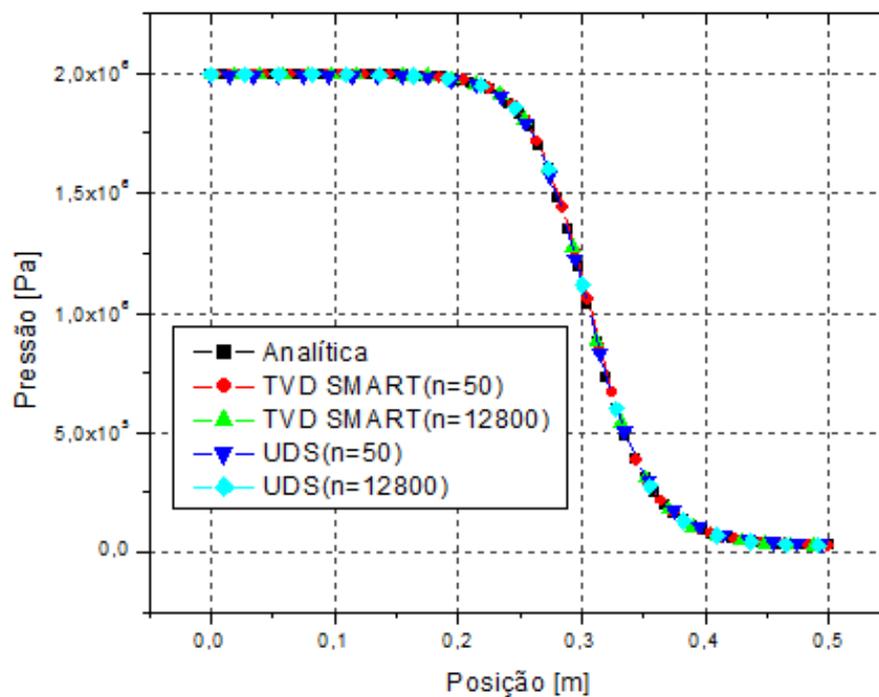
FONTE: O autor (2016).

Figura A.28 – Efeito de malha para TVD Smart para número de Mach (escoamento congelado).



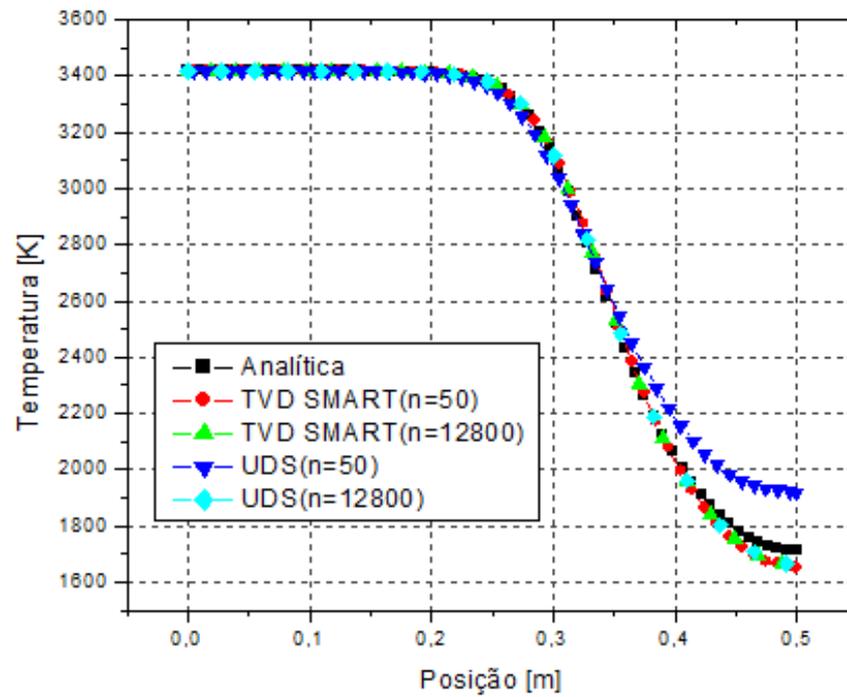
FONTE: O autor (2016).

Figura A.29 – Efeito de malha para TVD Smart para pressão (escoamento congelado).



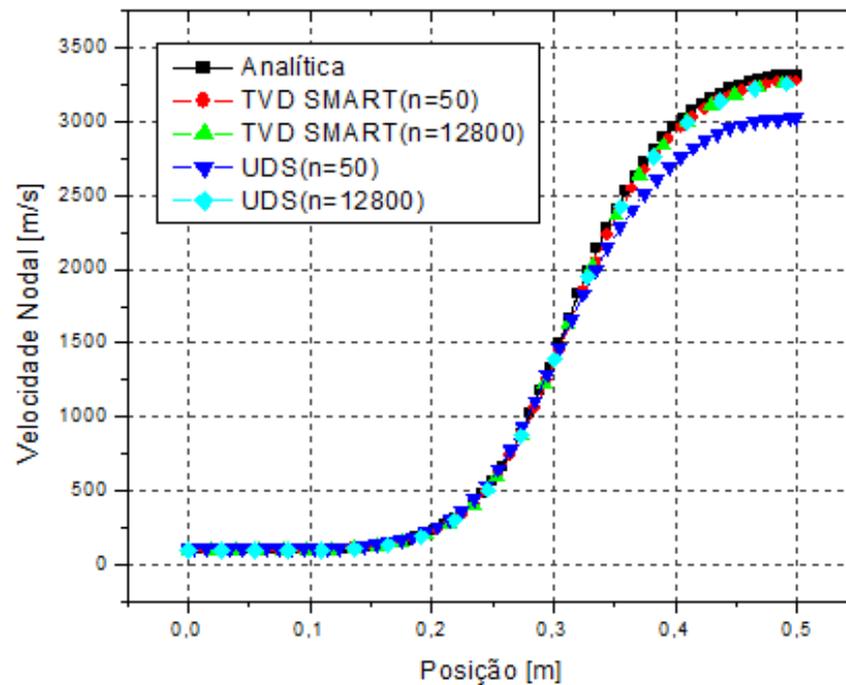
FONTE: O autor (2016).

Figura A.30 – Efeito de malha para TVD Smart para temperatura (escoamento congelado).



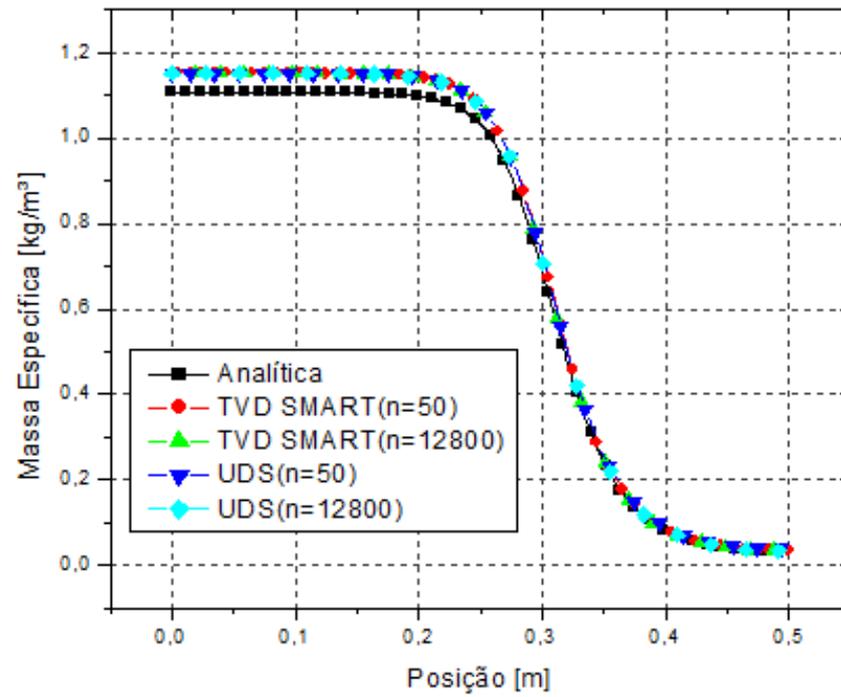
FONTE: O autor (2016).

Figura A.31 – Efeito de malha para TVD Smart para velocidade nodal (escoamento congelado).



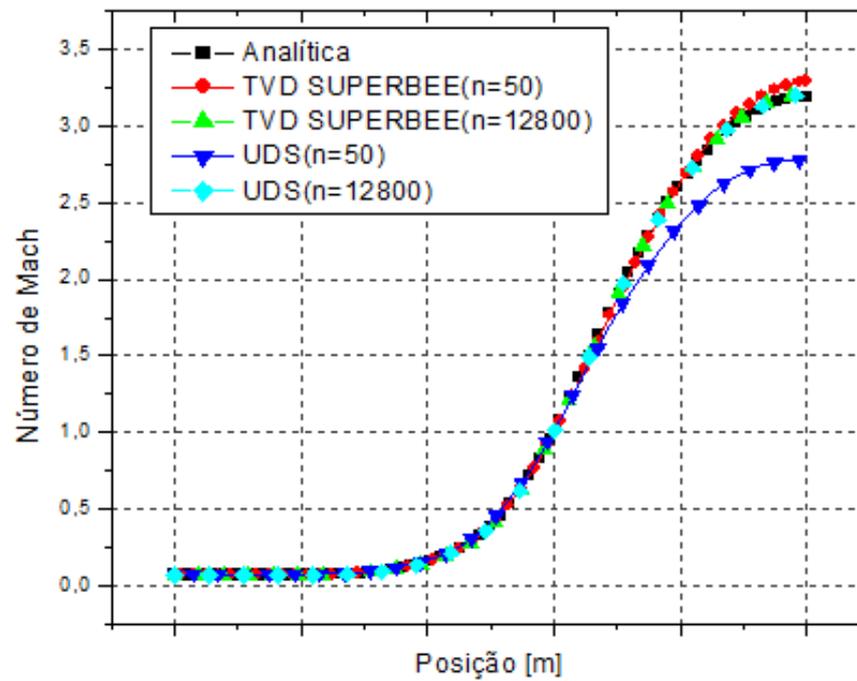
FONTE: O autor (2016).

Figura A.32 – Efeito de malha para TVD Smart para massa específica (escoamento congelado).



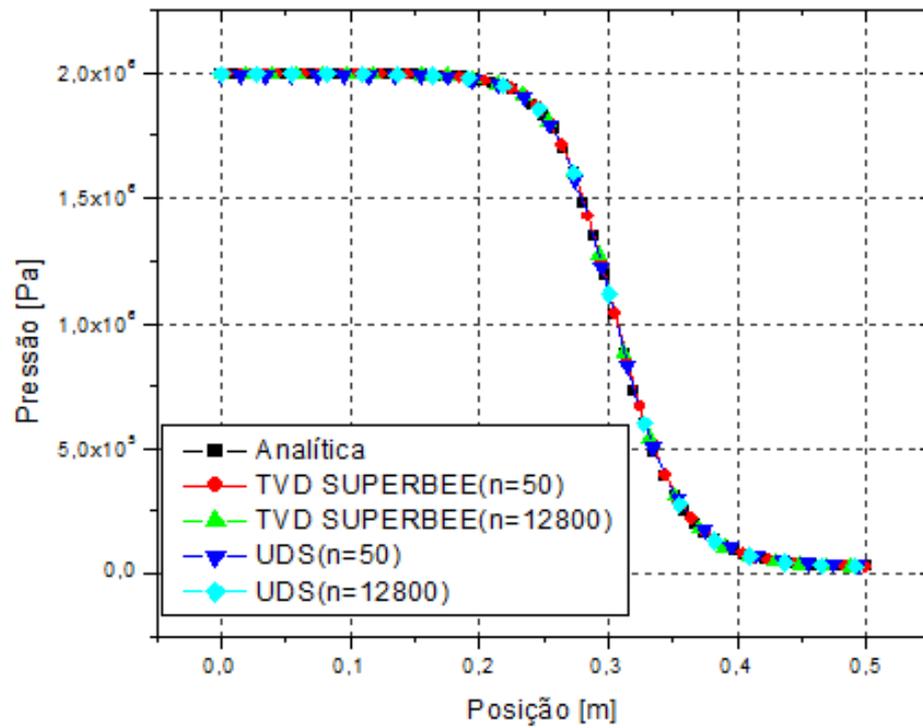
FONTE: O autor (2016).

Figura A.33 – Efeito de malha para TVD Superbee para número de Mach (escoamento congelado).



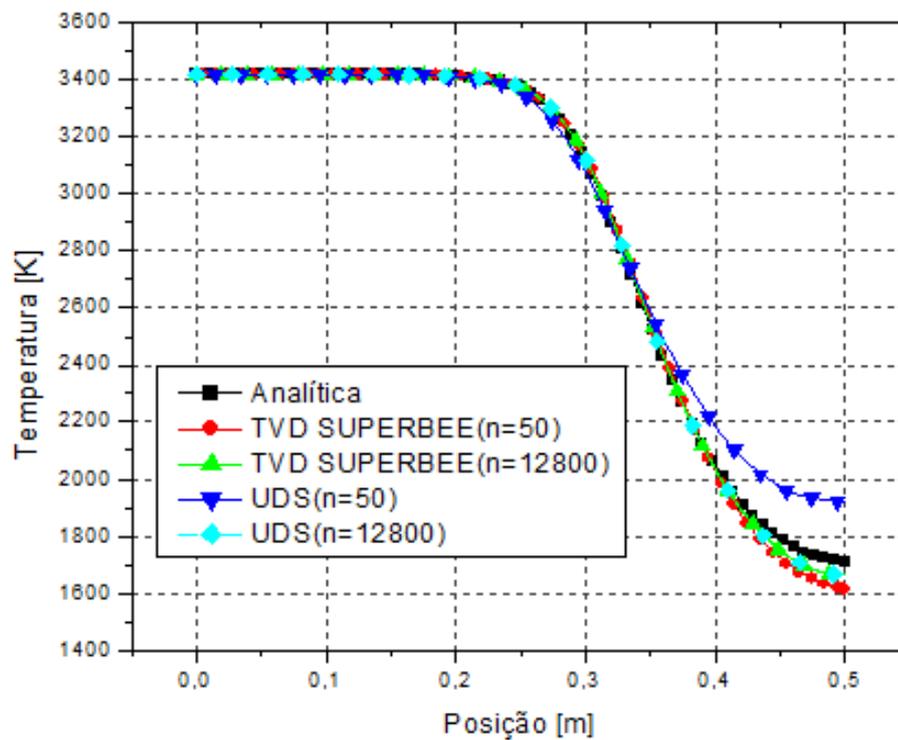
FONTE: O autor (2016).

Figura A.34 – Efeito de malha para TVD Superbee para pressão (escoamento congelado).



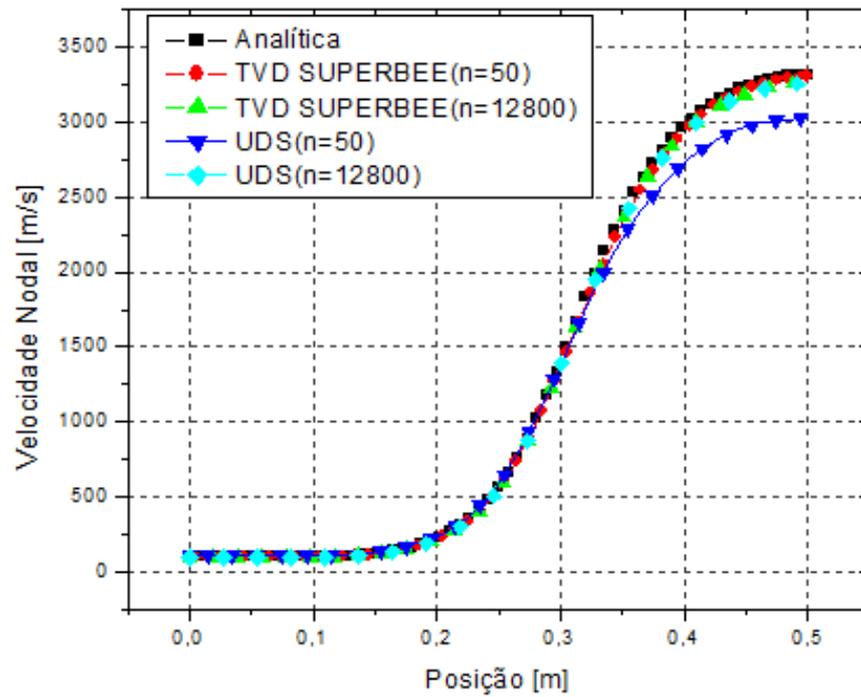
FONTE: O autor (2016).

Figura A.35 – Efeito de malha para TVD Superbee para temperatura (escoamento congelado).



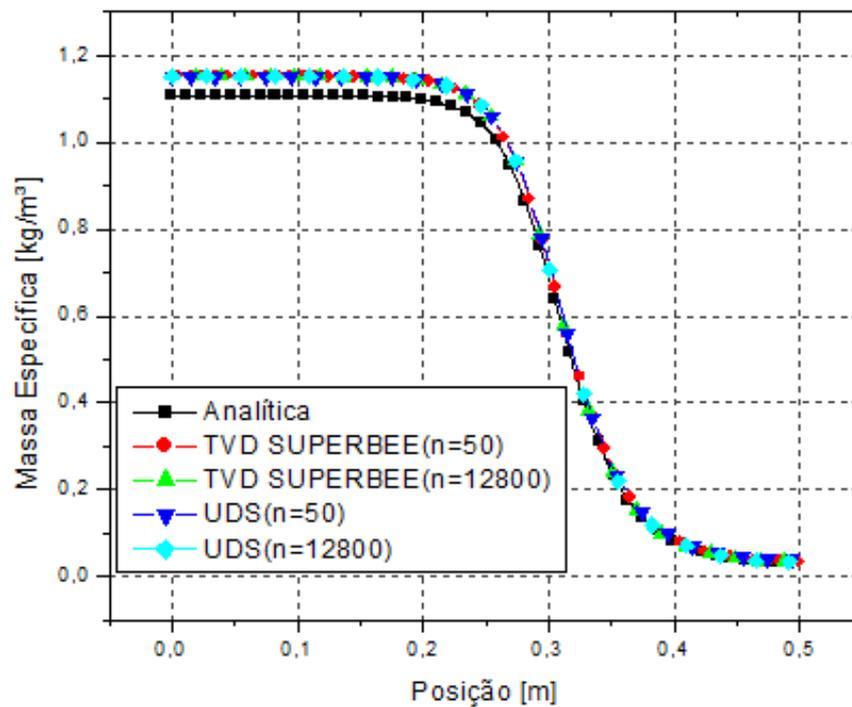
FONTE: O autor (2016).

Figura A.36 – Efeito de malha para TVD Superbee para velocidade nodal (escoamento congelado).



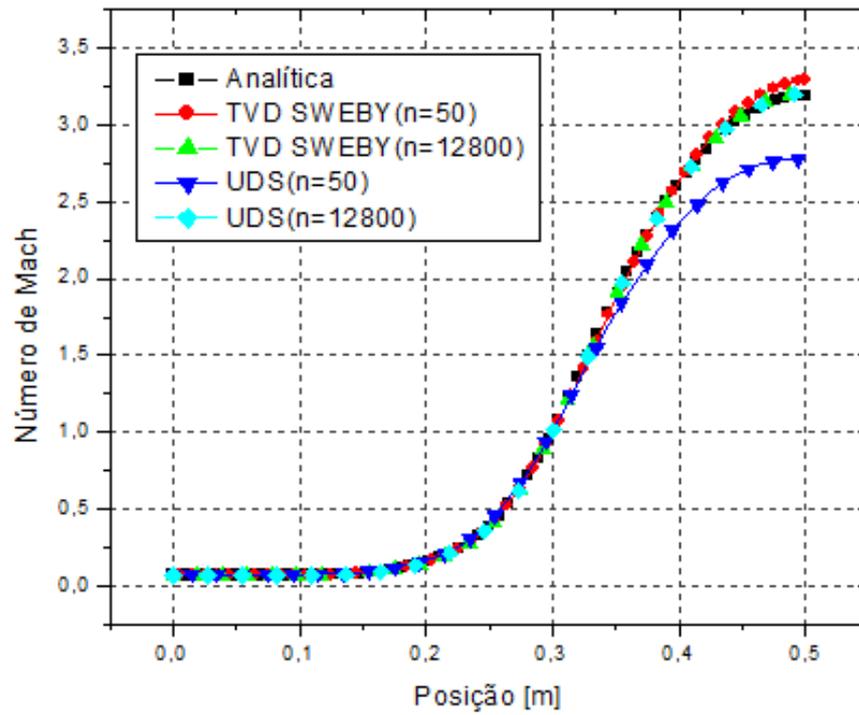
FONTE: O autor (2016).

Figura A.37 - Efeito de malha para TVD Superbee para massa específica (escoamento congelado).



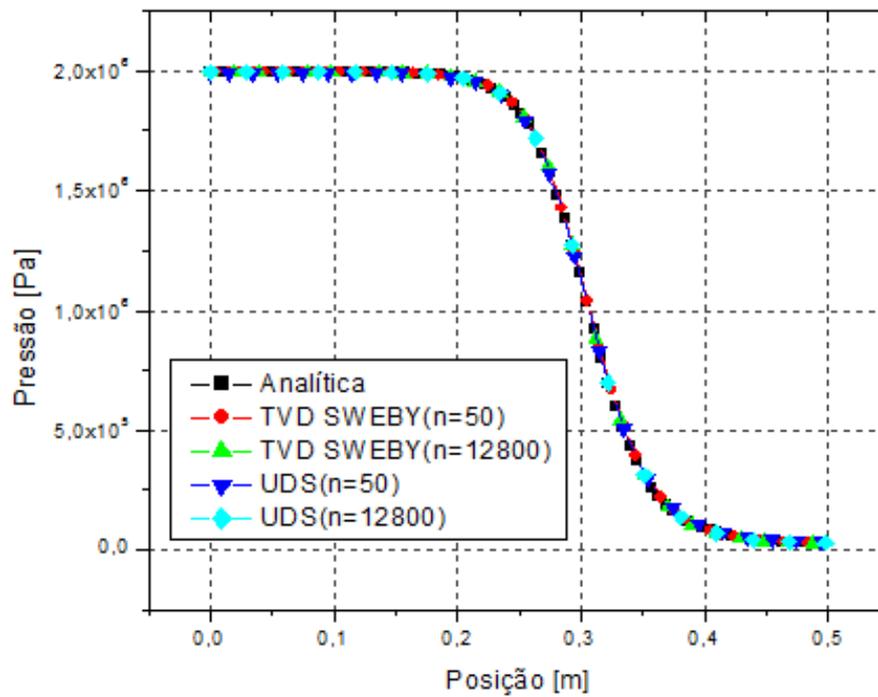
FONTE: O autor (2016).

Figura A.38 - Efeito de malha para TVD Sweby para número de Mach (escoamento congelado).



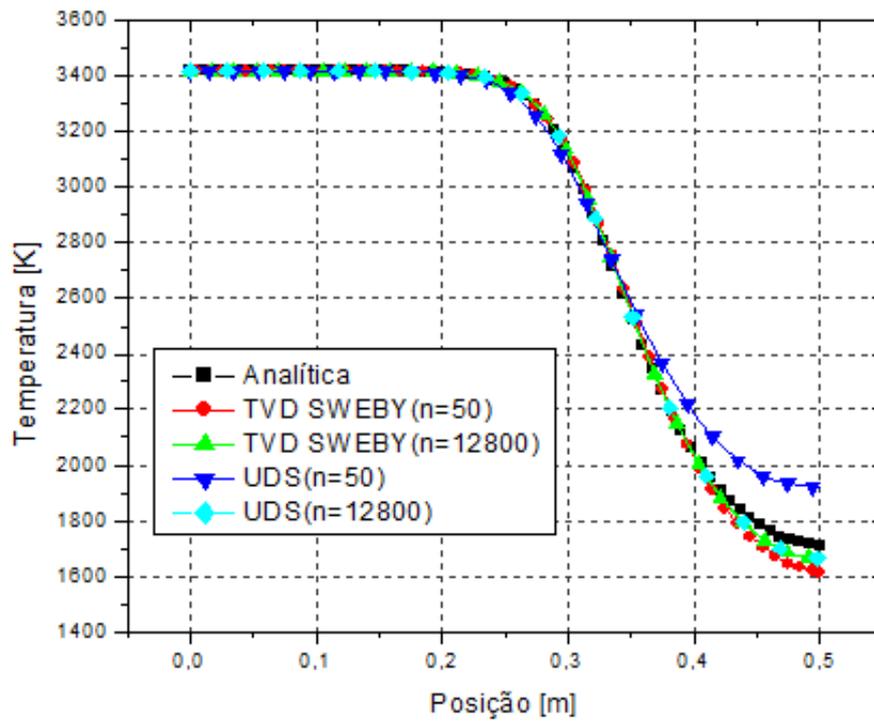
FONTE: O autor (2016).

Figura A.39 - Efeito de malha para TVD Sweby para pressão (escoamento congelado).



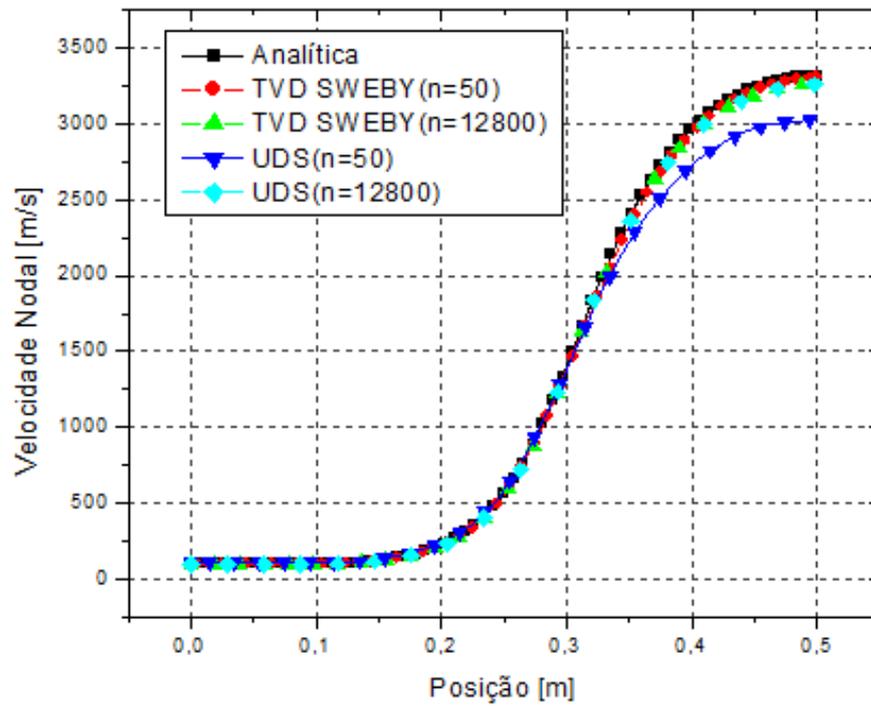
FONTE: O autor (2016).

Figura A.40 - Efeito de malha para TVD Sweby para temperatura (escoamento congelado).



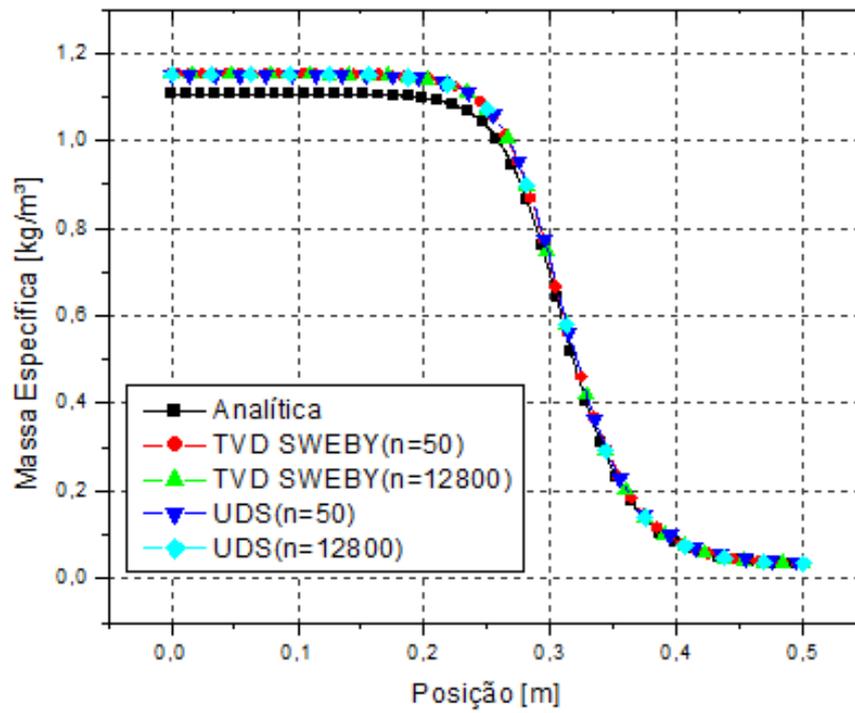
FONTE: O autor (2016).

Figura A.41 - Efeito de malha para TVD Sweby para velocidade nodal (escoamento congelado).



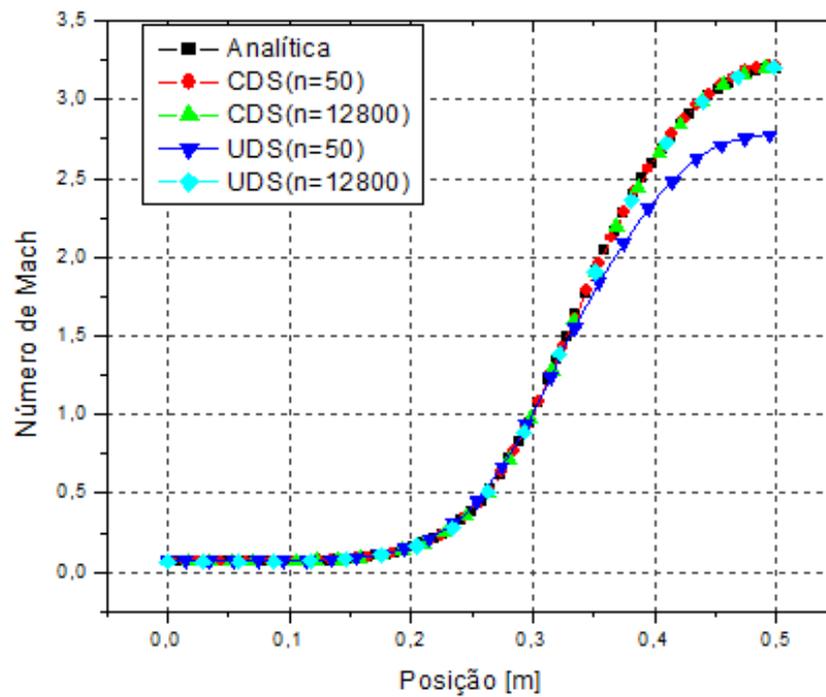
FONTE: O autor (2016).

Figura A.42 - Efeito de malha para TVD Sweby para massa específica (escoamento congelado).



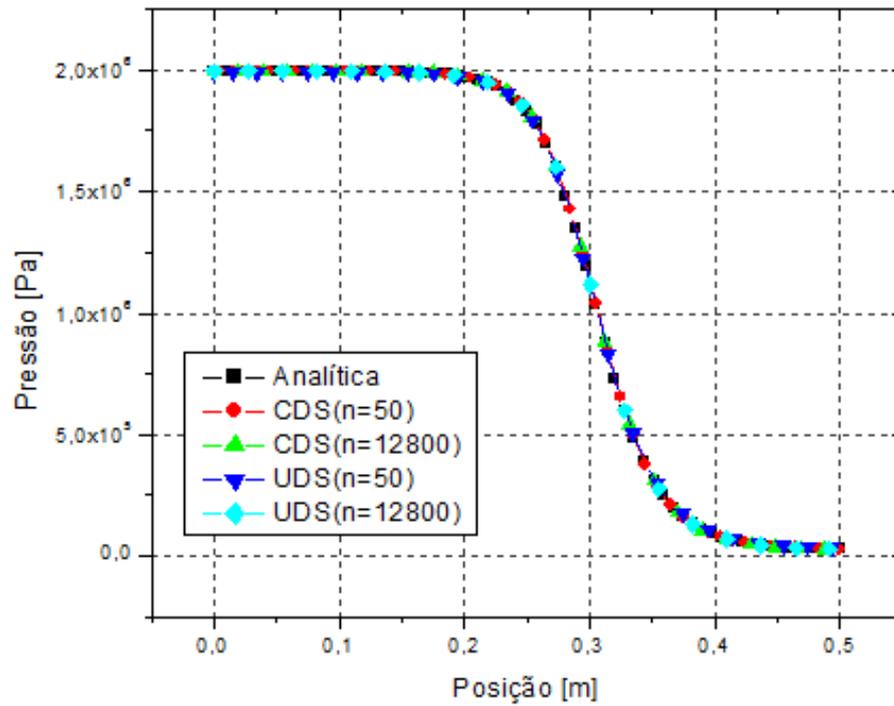
FONTE: O autor (2016).

Figura A.43 - Efeito de malha para CDS para número de Mach (escoamento congelado).



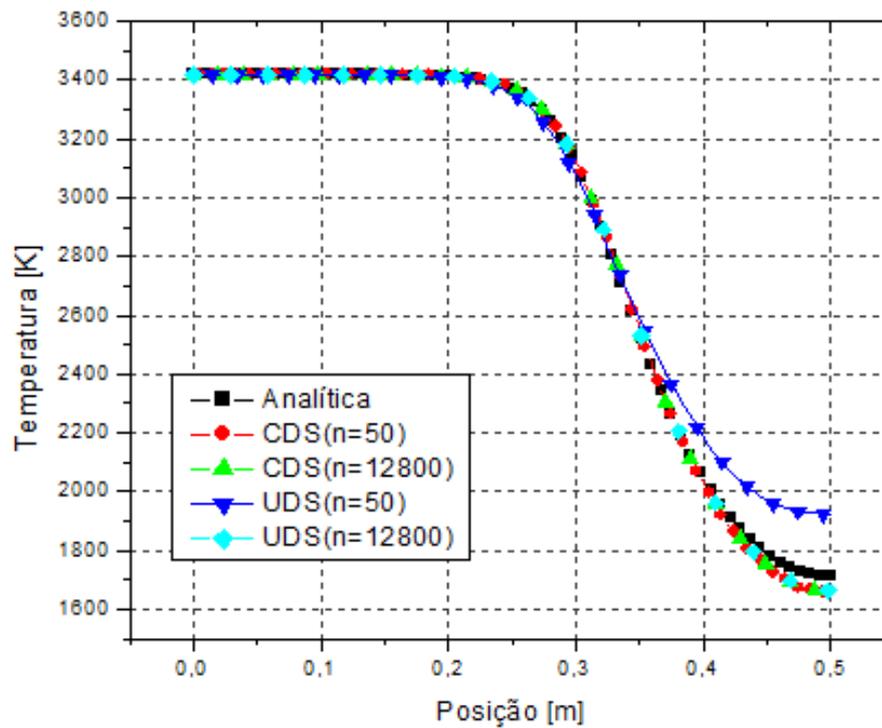
FONTE: O autor (2016).

Figura A.44 - Efeito de malha para CDS para pressão (escoamento congelado).



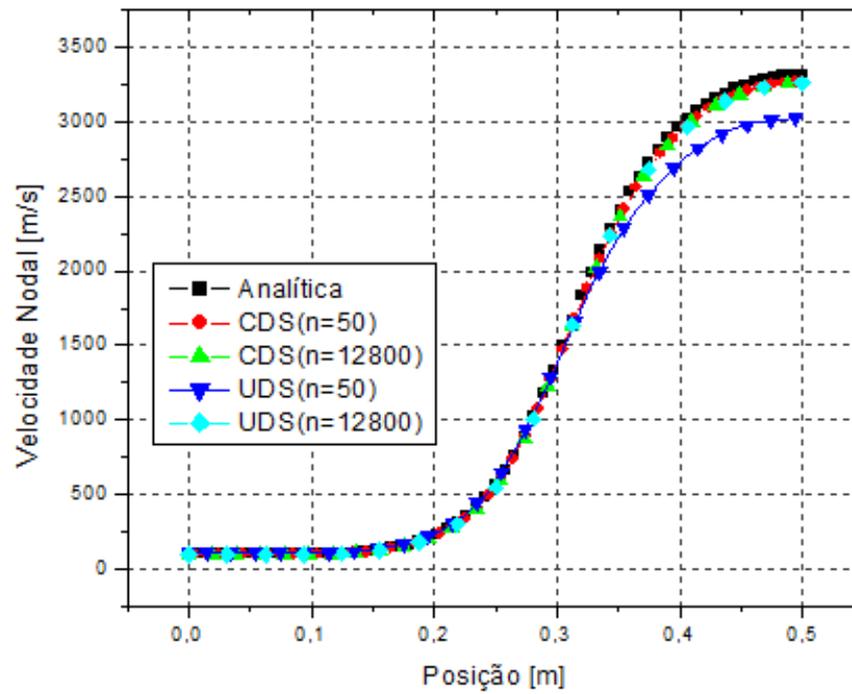
FONTE: O autor (2016).

Figura A.45 - Efeito de malha para CDS para temperatura (escoamento congelado).



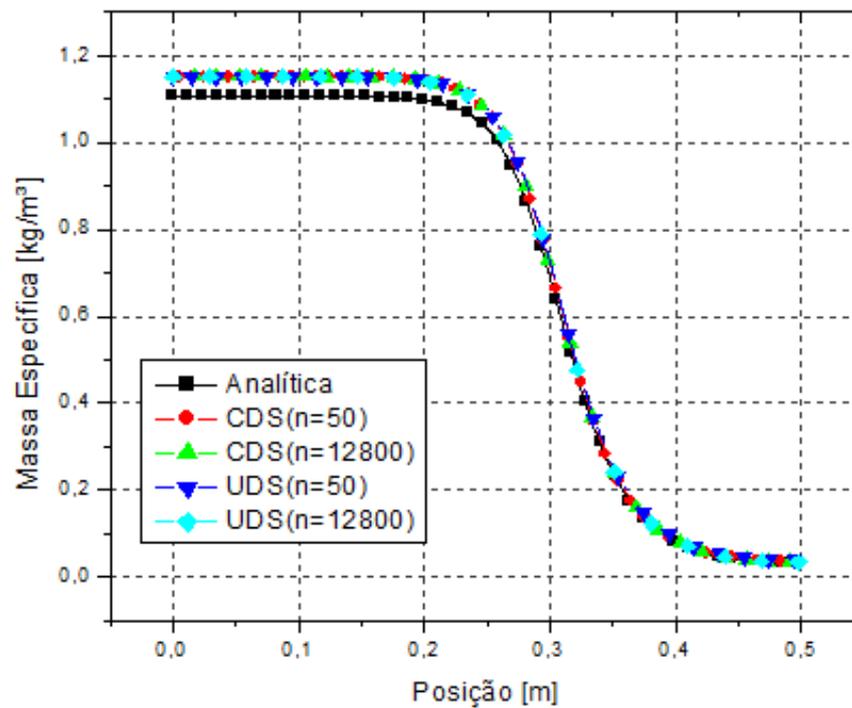
FONTE: O autor (2016).

Figura A.45 - Efeito de malha para CDS para velocidade nodal (escoamento congelado).



FONTE: O autor (2016).

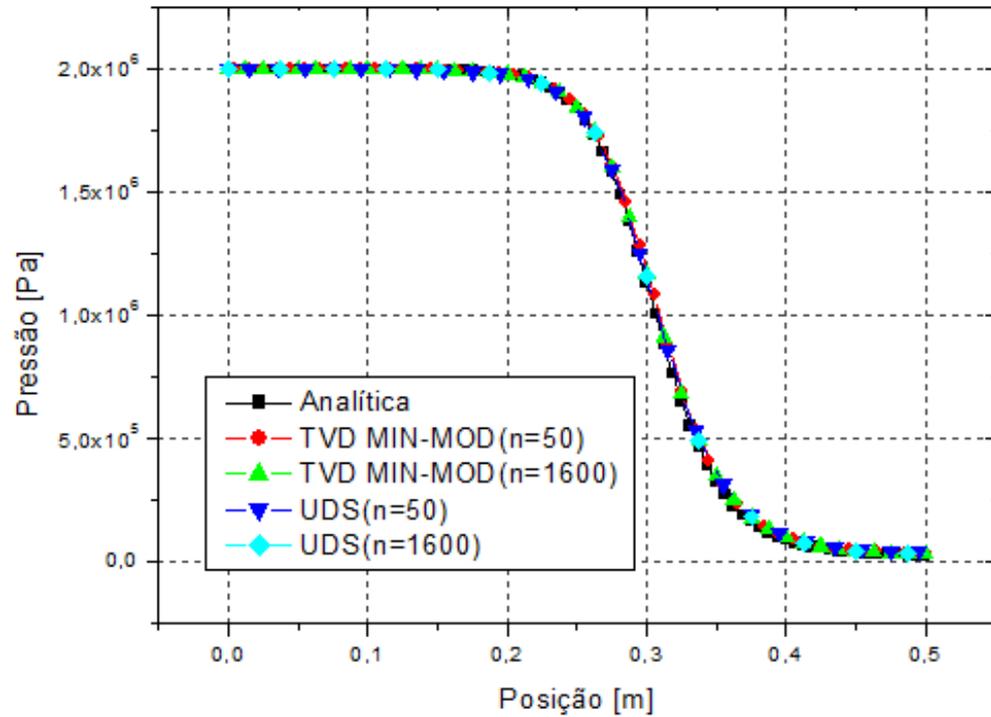
Figura A.46 - Efeito de malha para CDS para massa específica (escoamento congelado).



FONTE: O autor (2016).

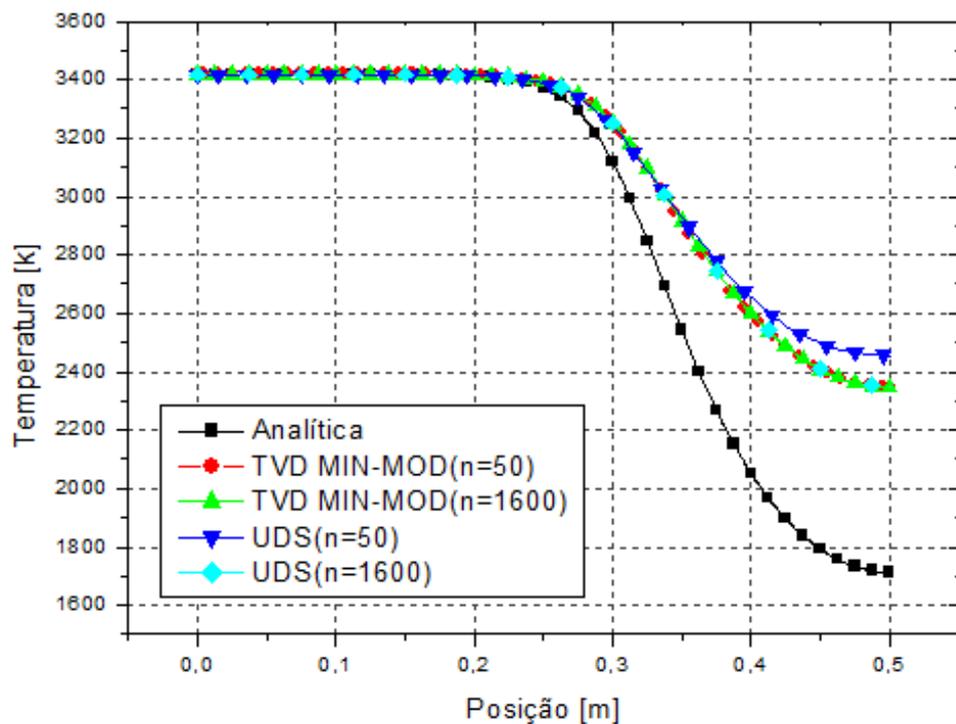
## 4. Gráficos de efeito de refino de malha para equilíbrio químico local:

Figura A.47 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para pressão (equilíbrio químico local).



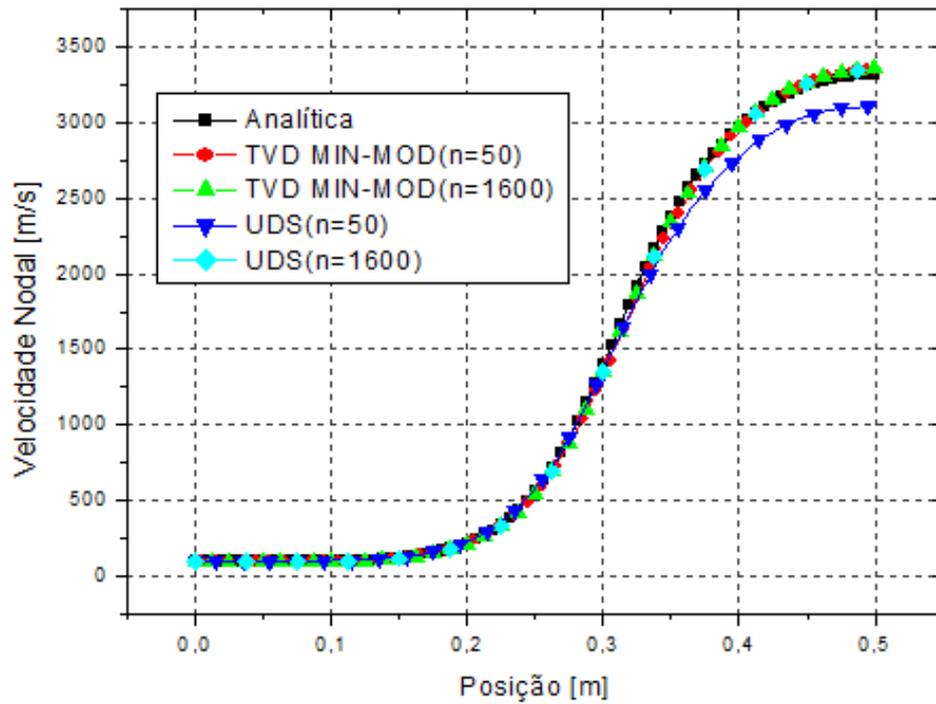
FONTE: O autor (2016).

Figura A.48 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para temperatura (equilíbrio químico local).



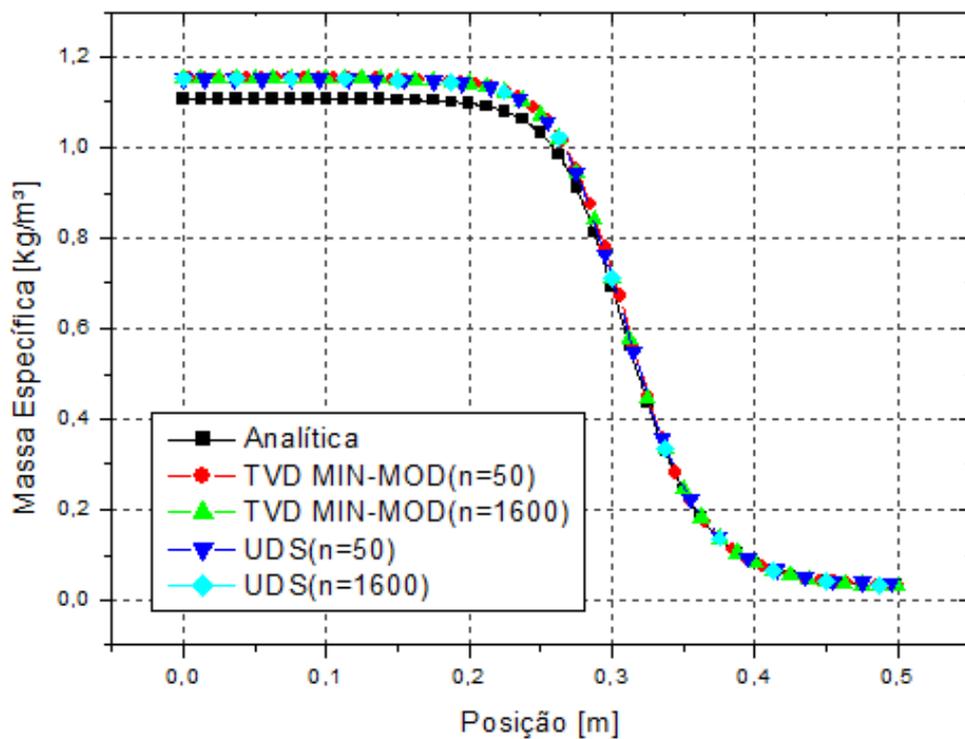
FONTE: O autor (2016).

Figura A.49 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para velocidade nodal (equilíbrio químico local).



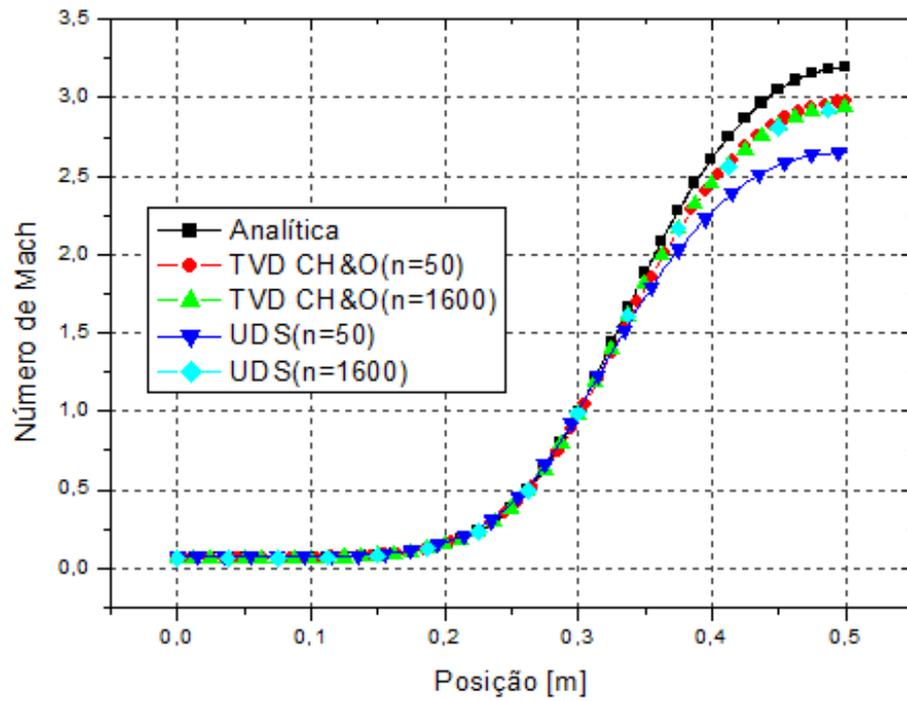
FONTE: O autor (2016).

Figura A.50 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para massa específica (equilíbrio químico local).



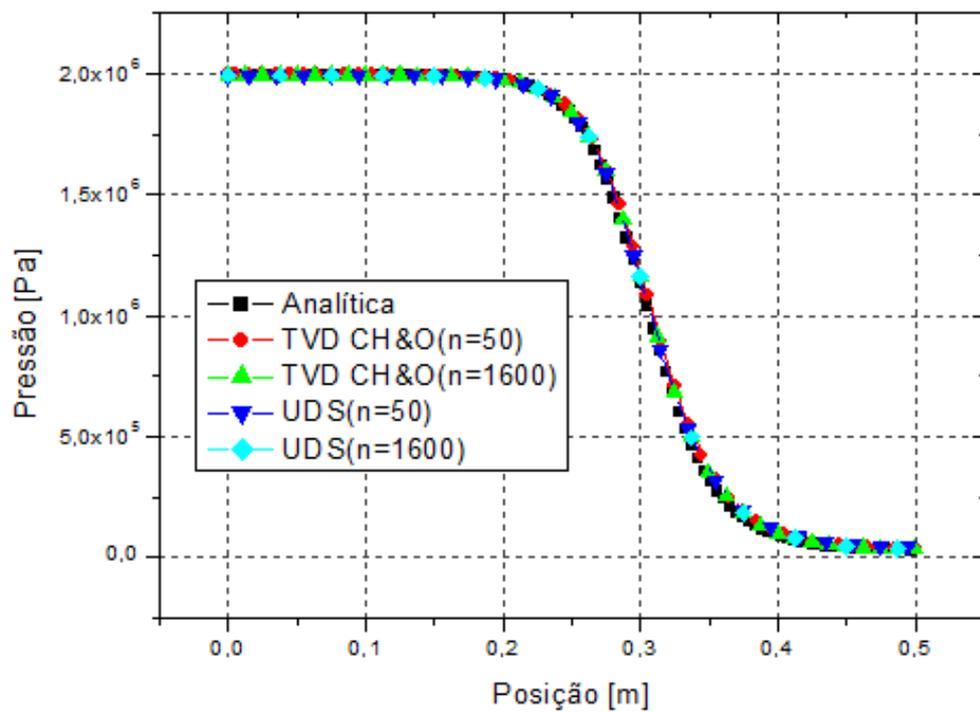
FONTE: O autor (2016).

Figura A.51 – Efeito de malha para TVD Chakravarthy & Osher para número de Mach (equilíbrio químico local).



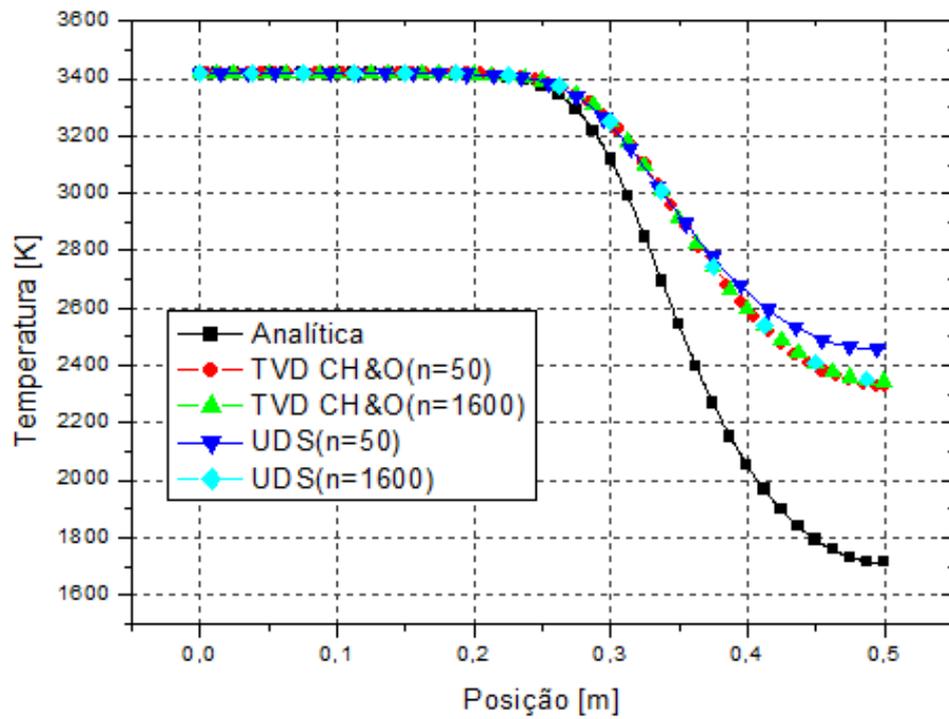
FONTE: O autor (2016).

Figura A.52 – Efeito de malha para TVD Chakravarthy & Osher para pressão (equilíbrio químico local).



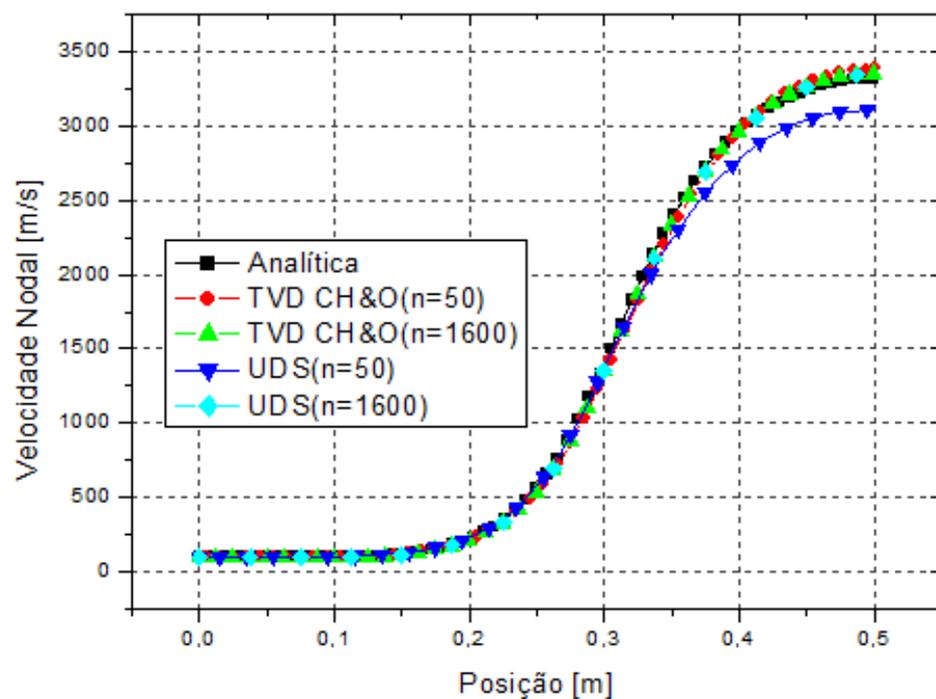
FONTE: O autor (2016).

Figura A.53 – Efeito de malha para TVD Chakravarthy & Osher para temperatura (equilíbrio químico local).



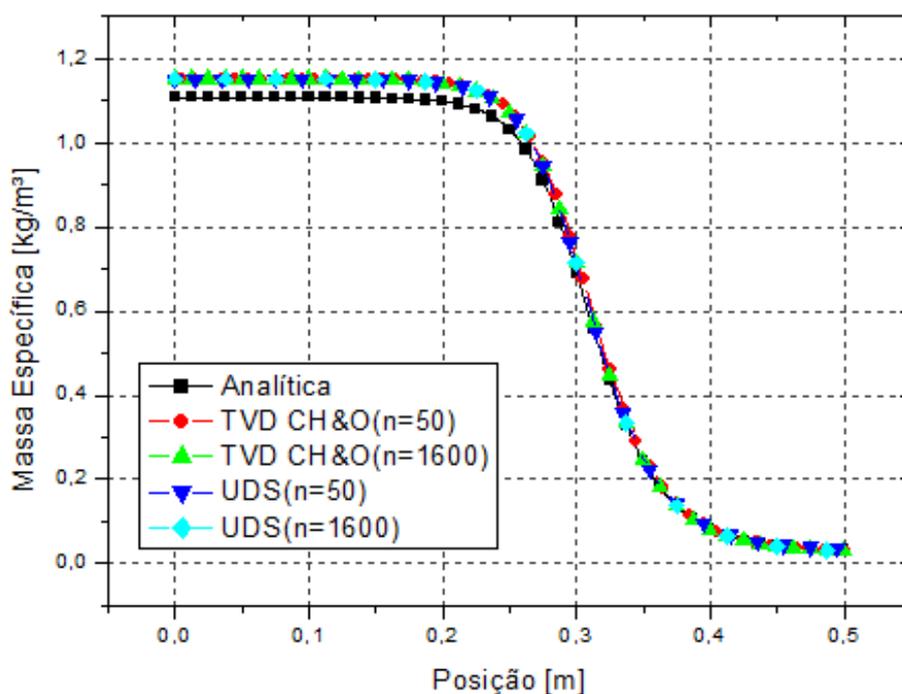
FONTE: O autor (2016).

Figura A.54 – Efeito de malha para TVD Chakravarthy & Osher para velocidade nodal (equilíbrio químico local).



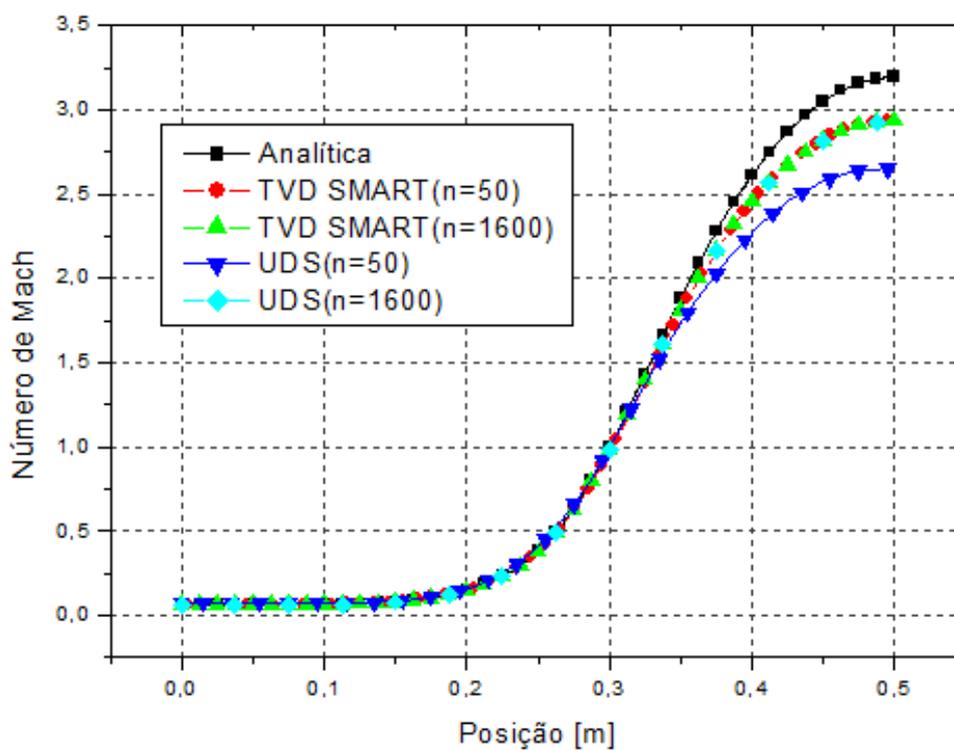
FONTE: O autor (2016).

Figura A.55 – Efeito de malha para TVD Chakravarthy & Osher para massa específica (equilíbrio químico local).



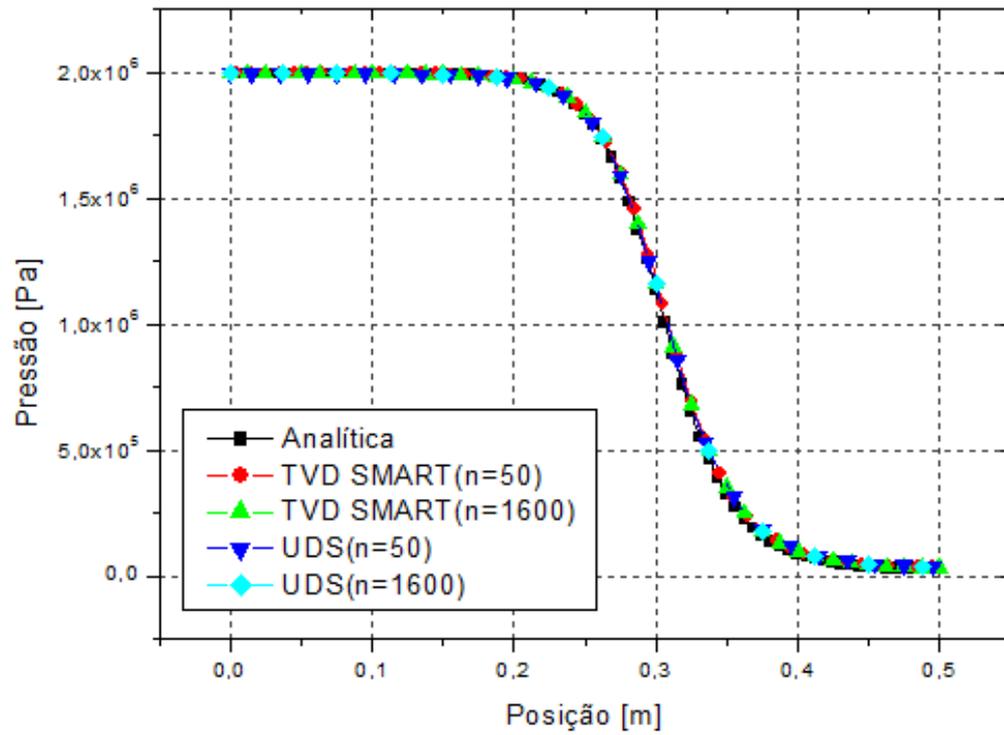
FONTE: O autor (2016).

Figura A.56 – Efeito de malha para TVD Smart para número de Mach (equilíbrio químico local).



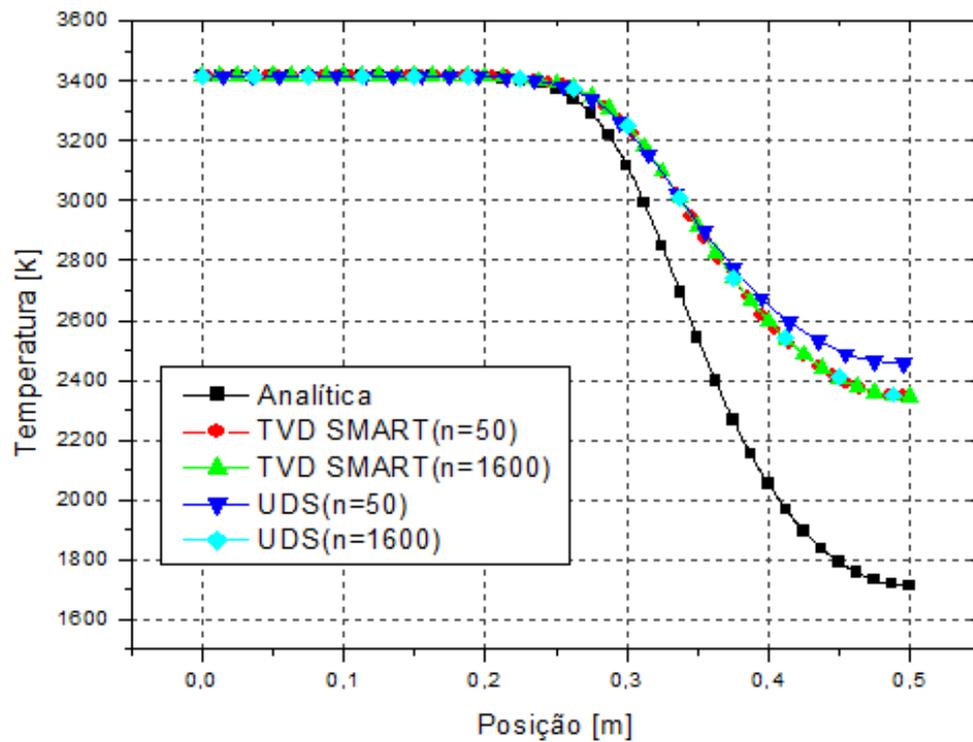
FONTE: O autor (2016).

Figura A.57 – Efeito de malha para TVD Smart para pressão (equilíbrio químico local).



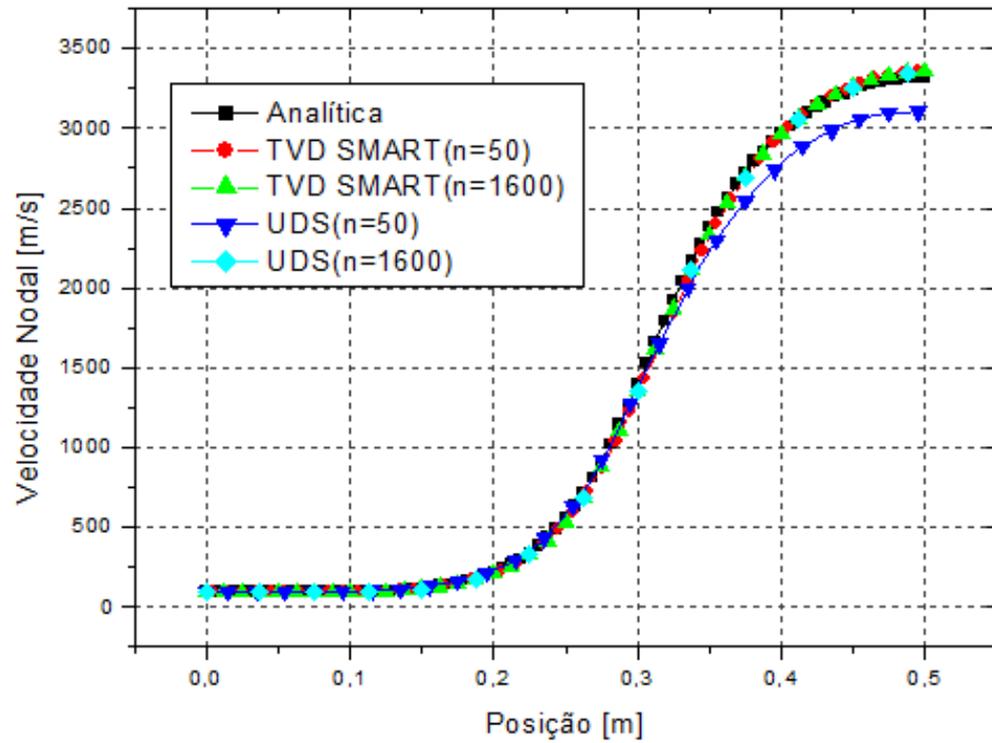
FONTE: O autor (2016).

Figura A.58 – Efeito de malha para TVD Smart para temperatura (equilíbrio químico local).



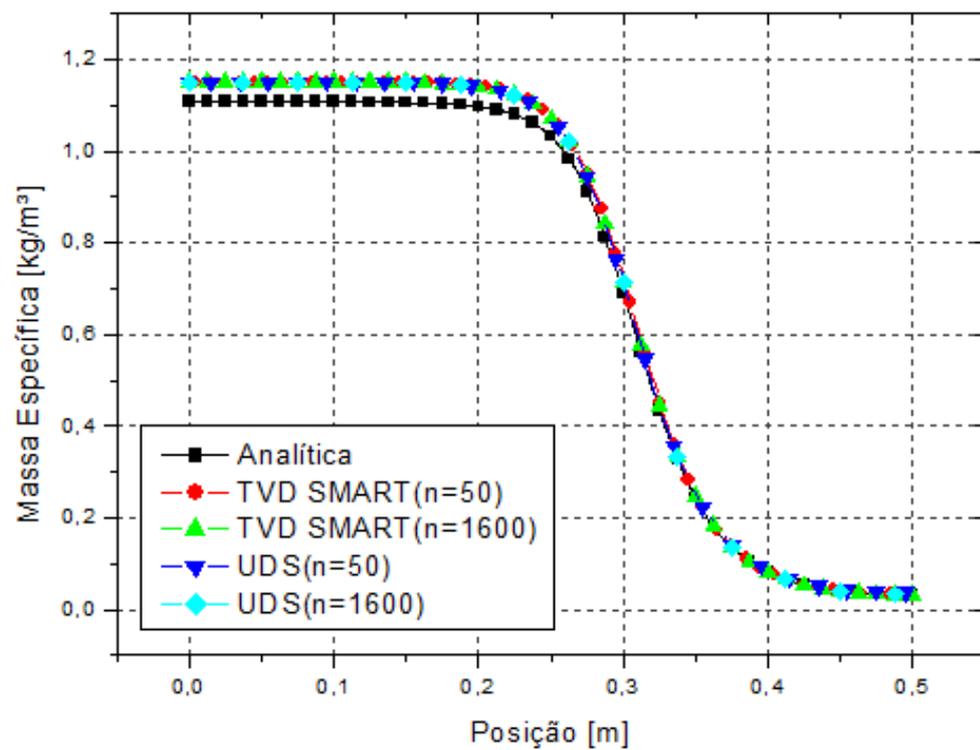
FONTE: O autor (2016).

Figura A.59 – Efeito de malha para TVD Smart para velocidade nodal (equilíbrio químico local).



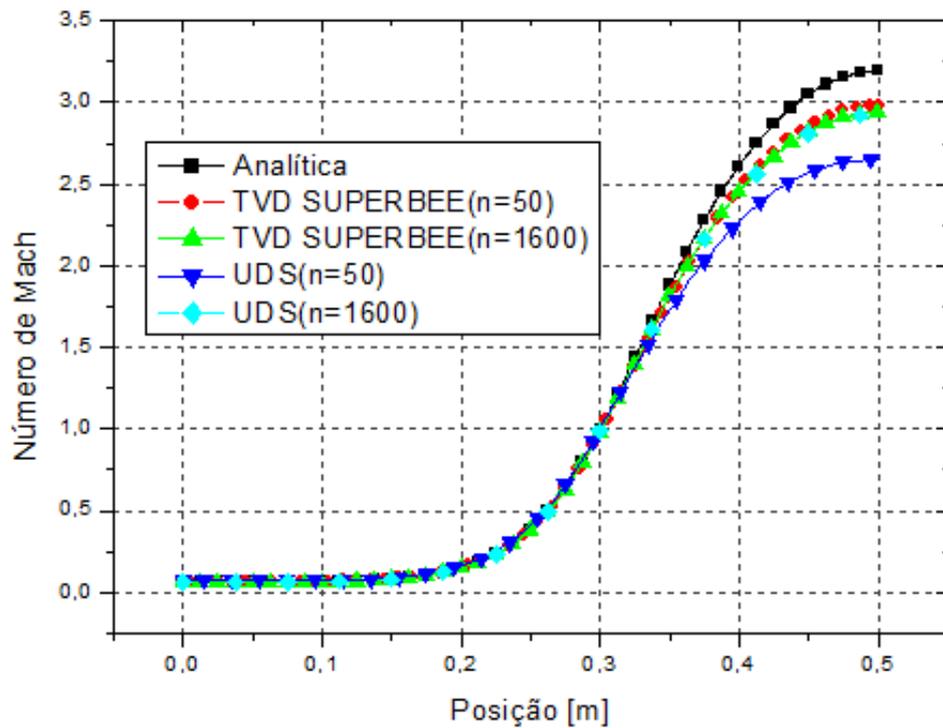
FONTE: O autor (2016).

Figura A.60 – Efeito de malha para TVD Smart para massa específica (equilíbrio químico local).



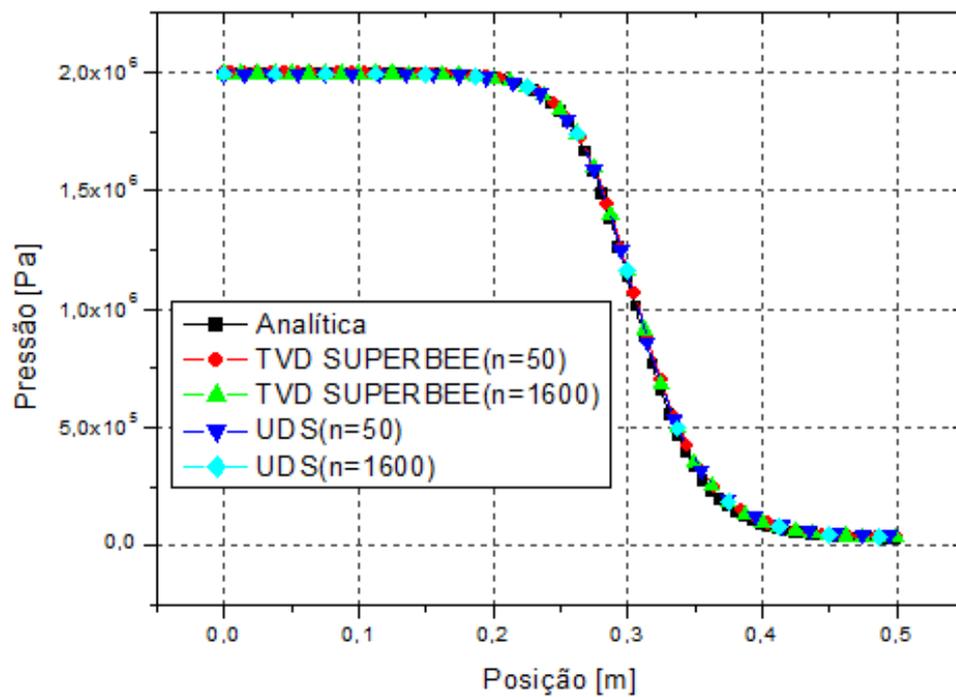
FONTE: O autor (2016).

Figura A.61 – Efeito de malha para TVD Superbee para número de Mach (equilíbrio químico local).



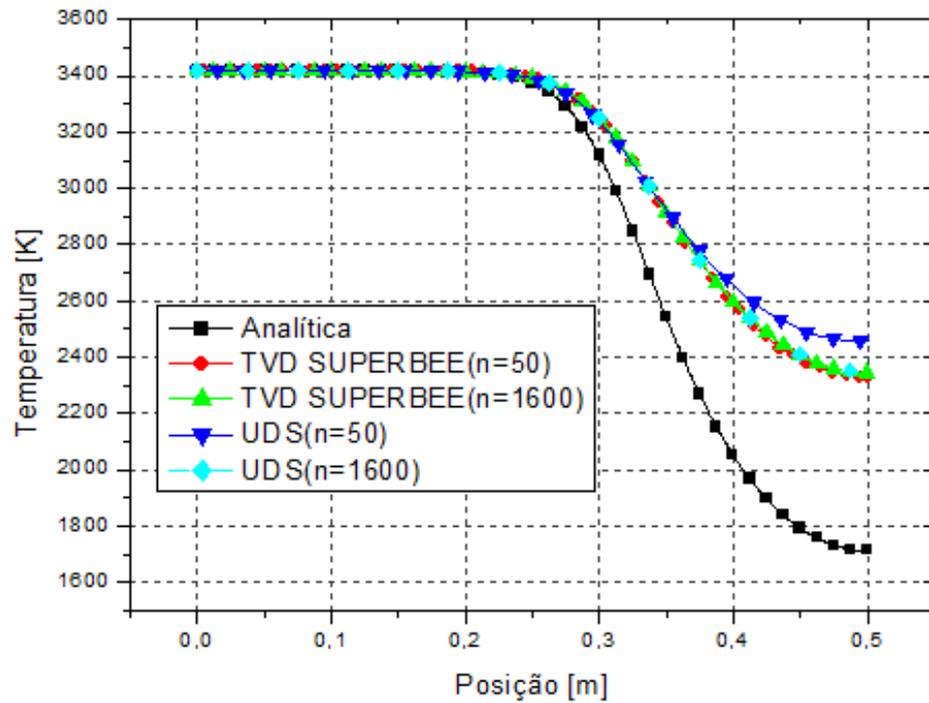
FONTE: O autor (2016).

Figura A.62 – Efeito de malha para TVD Superbee para pressão (equilíbrio químico local).



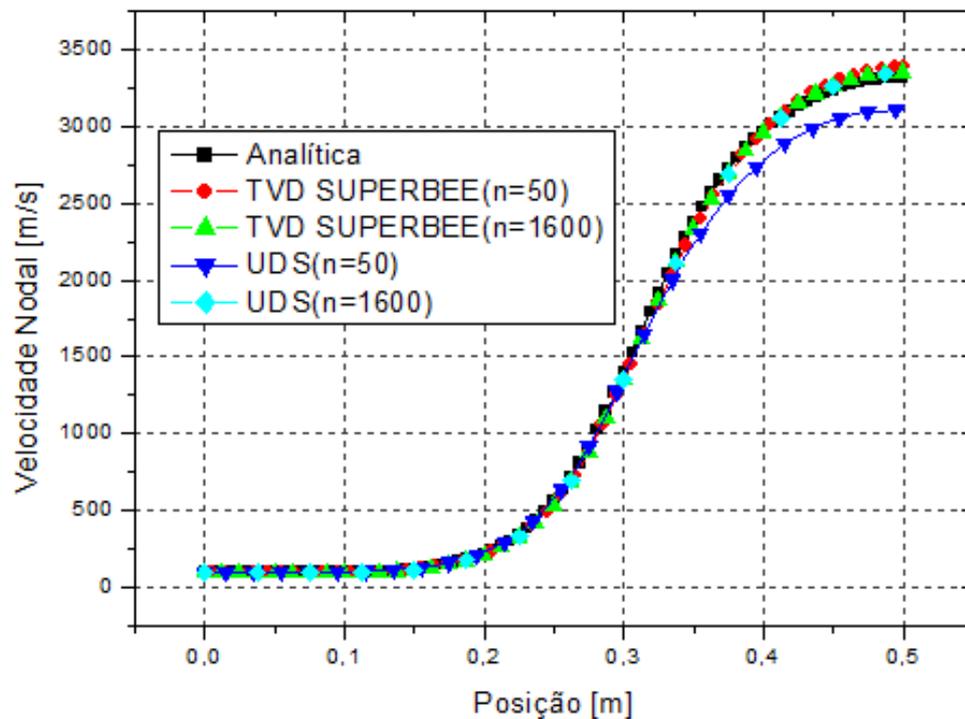
FONTE: O autor (2016).

Figura A.63 – Efeito de malha para TVD Superbee para temperatura (equilíbrio químico local).



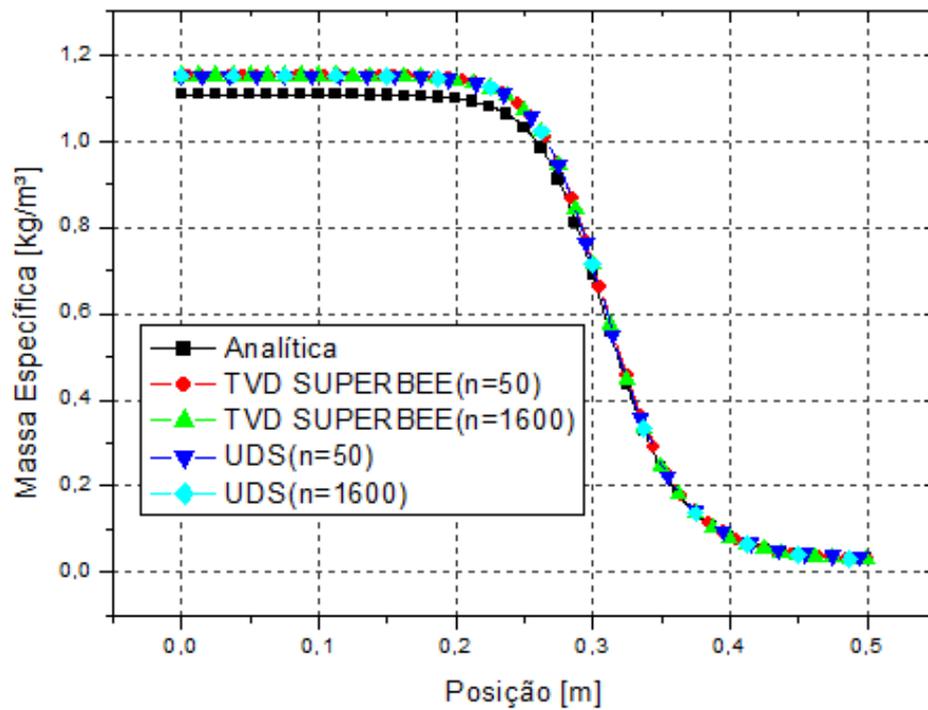
FONTE: O autor (2016).

Figura A.64 – Efeito de malha para TVD Superbee para velocidade nodal (equilíbrio químico local).



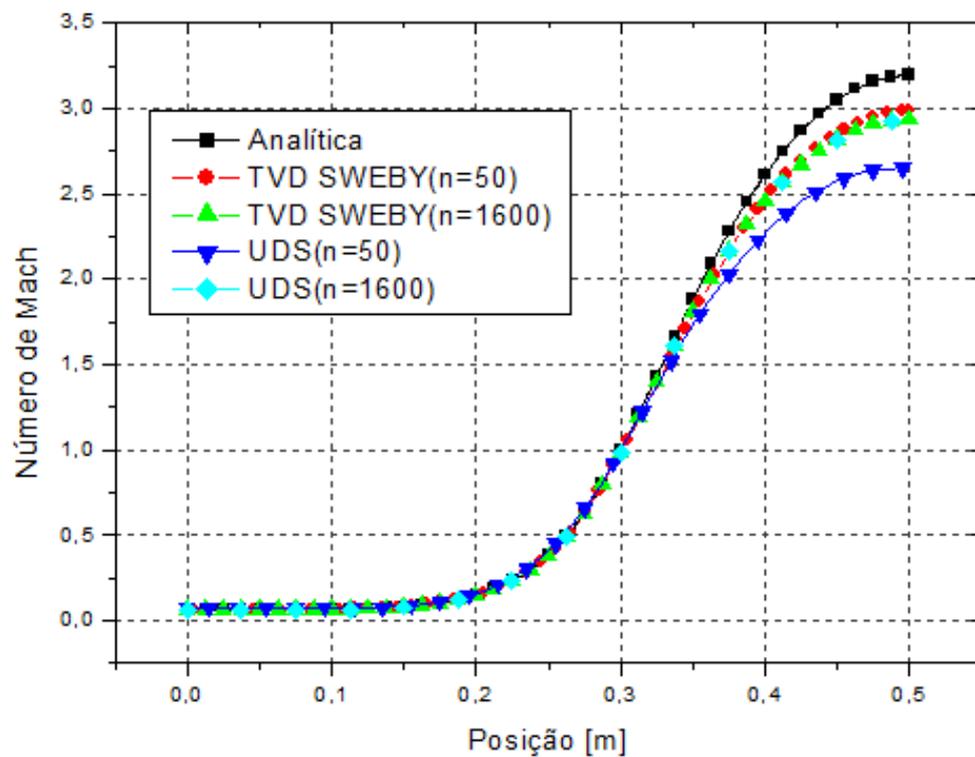
FONTE: O autor (2016).

Figura A.65 - Efeito de malha para TVD Superbee para massa específica (equilíbrio químico local).



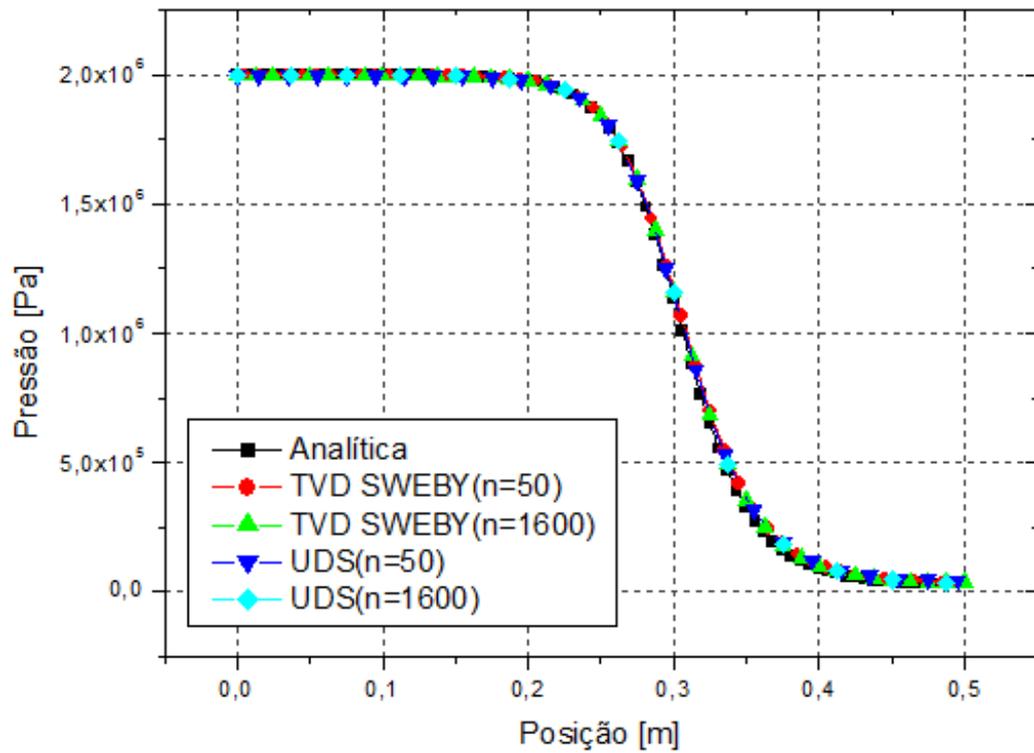
FONTE: O autor (2016).

Figura A.66 - Efeito de malha para TVD Sweby para número de Mach (equilíbrio químico local).



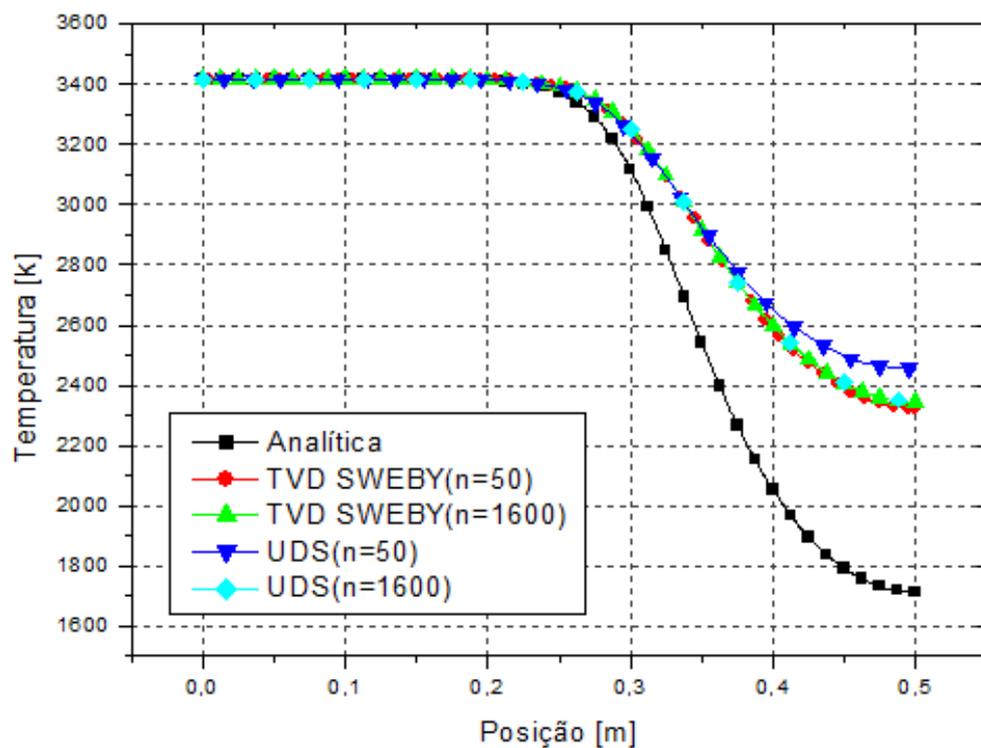
FONTE: O autor (2016).

Figura A.67 - Efeito de malha para TVD Sweby para pressão (equilíbrio químico local).



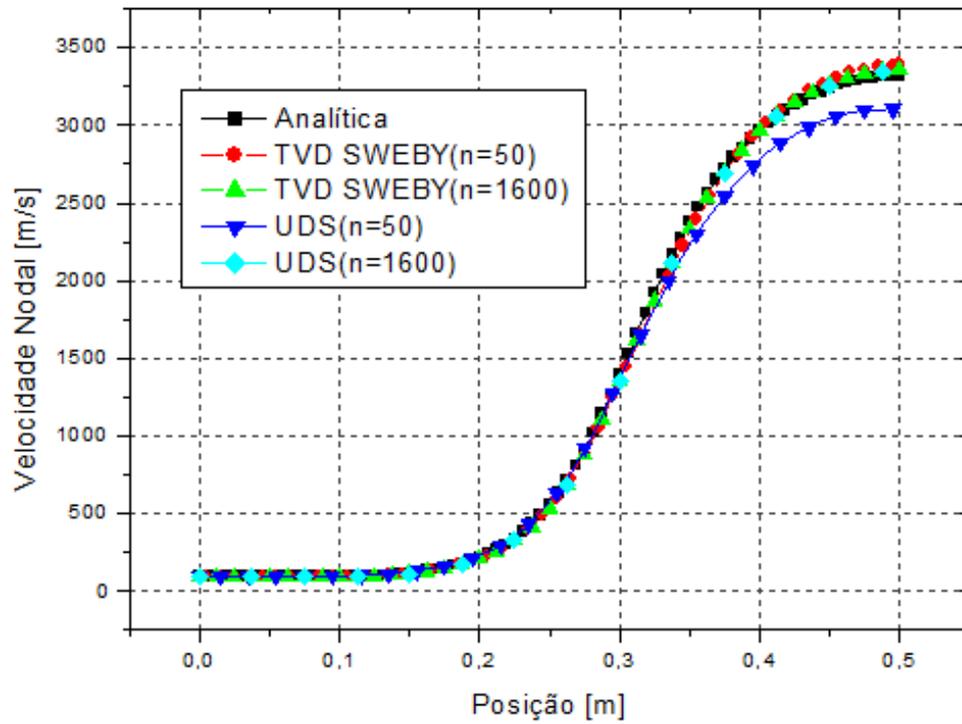
FONTE: O autor (2016).

Figura A.68 - Efeito de malha para TVD Sweby para temperatura (equilíbrio químico local).



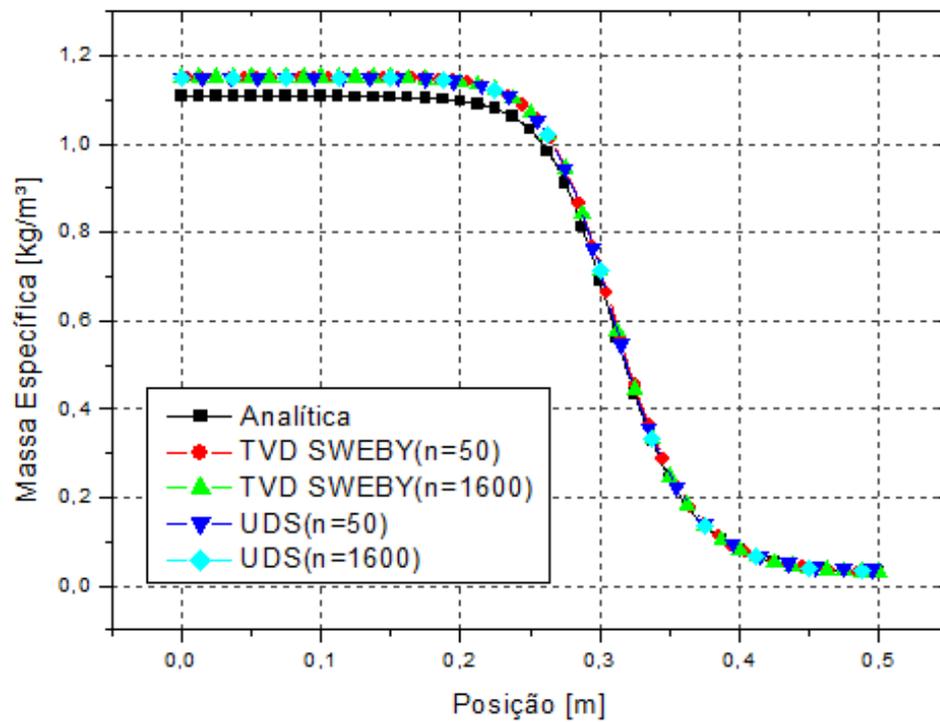
FONTE: O autor (2016).

Figura A.69 - Efeito de malha para TVD Sweby para velocidade nodal (equilíbrio químico local).



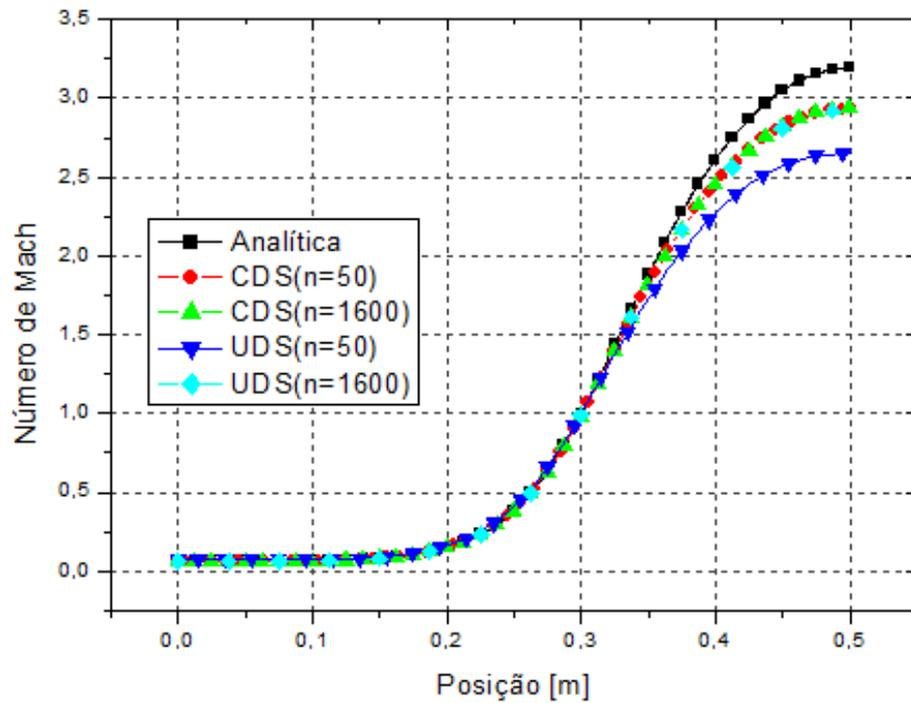
FONTE: O autor (2016).

Figura A.70 - Efeito de malha para TVD Sweby para massa específica (equilíbrio químico local).



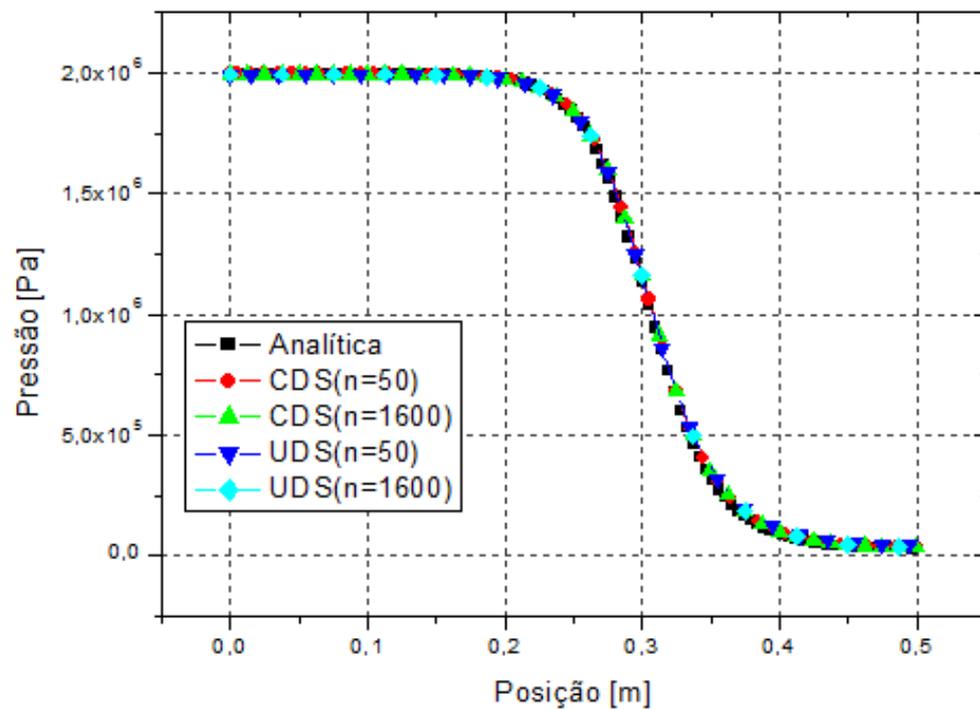
FONTE: O autor (2016).

Figura A.71 - Efeito de malha para CDS para número de Mach (equilíbrio químico local).



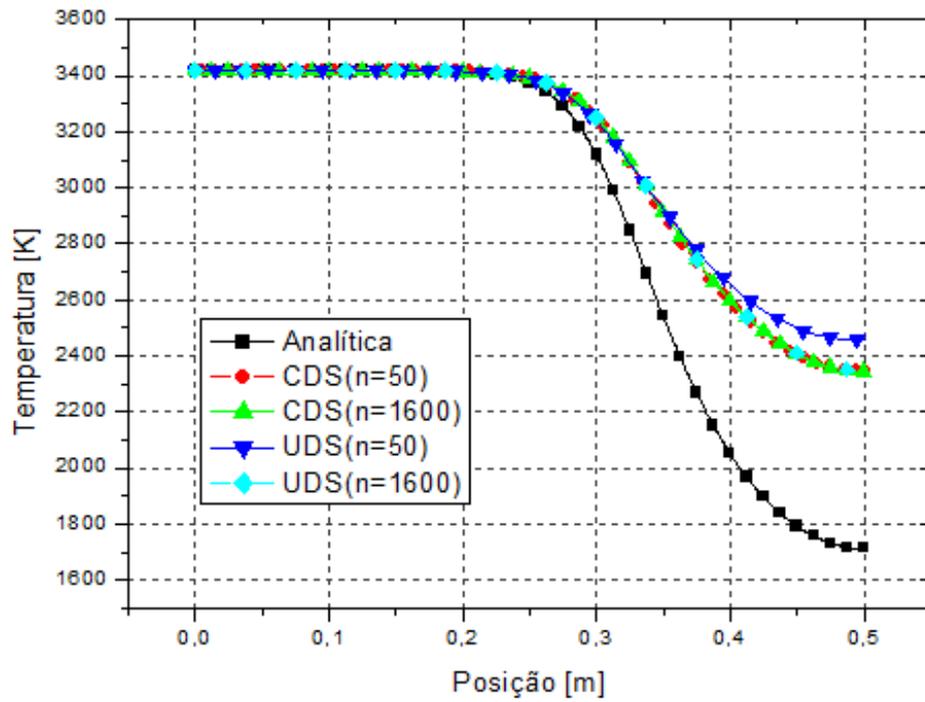
FONTE: O autor (2016).

Figura A.72 - Efeito de malha para CDS para pressão (equilíbrio químico local).



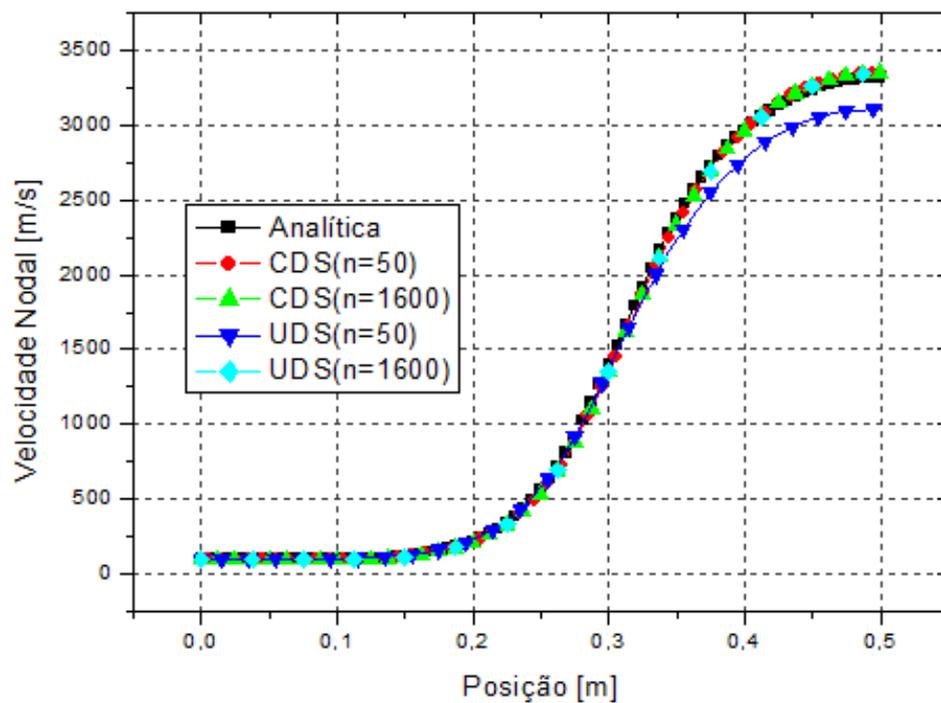
FONTE: O autor (2016).

Figura A.73 - Efeito de malha para CDS para temperatura (equilíbrio químico local).



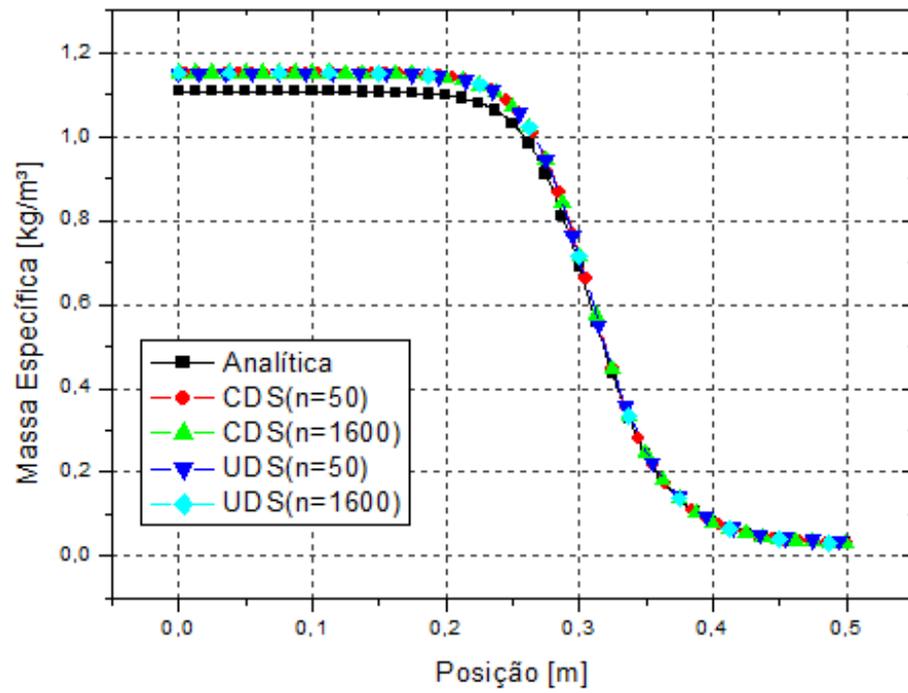
FONTE: O autor (2016).

Figura A.74 - Efeito de malha para CDS para velocidade nodal (equilíbrio químico local).



FONTE: O autor (2016).

Figura A.75 - Efeito de malha para CDS para massa específica (equilíbrio químico local).



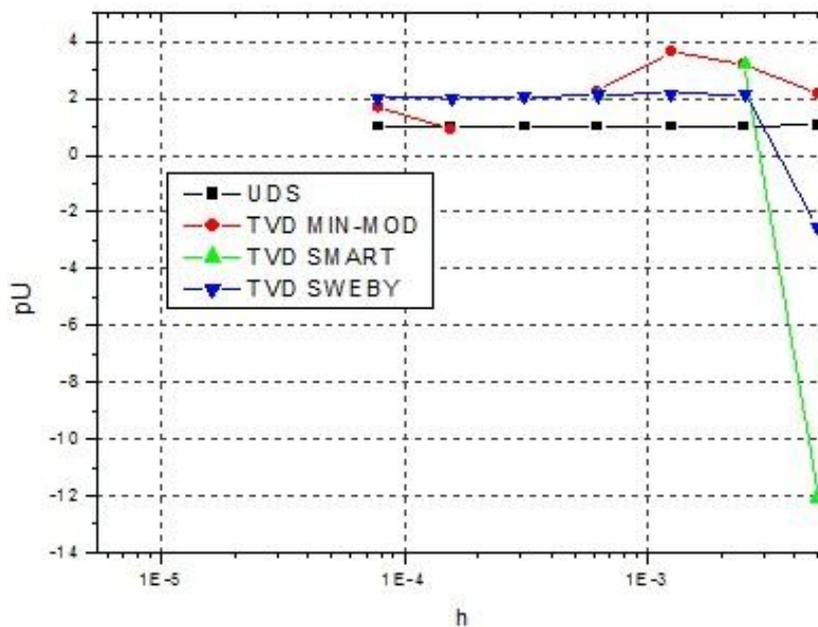
FONTE: O autor (2016).

## APÊNDICE B – RESULTADOS COMPLEMENTARES DA SEÇÃO 4.2

Considerando o escopo tratado pela seção 4.2, que vem a ser o uso de diferentes funções de interpolação para duas configurações de parâmetros físicos para o modelo físico de propriedades constantes considerando descontinuidade (choque), complementa-se neste apêndice os resultados relativos à ordem aparente das demais variáveis, perfil de propriedades bem como o estudo do efeito de refino de malha para os esquemas numéricos envolvidos, respectivamente:

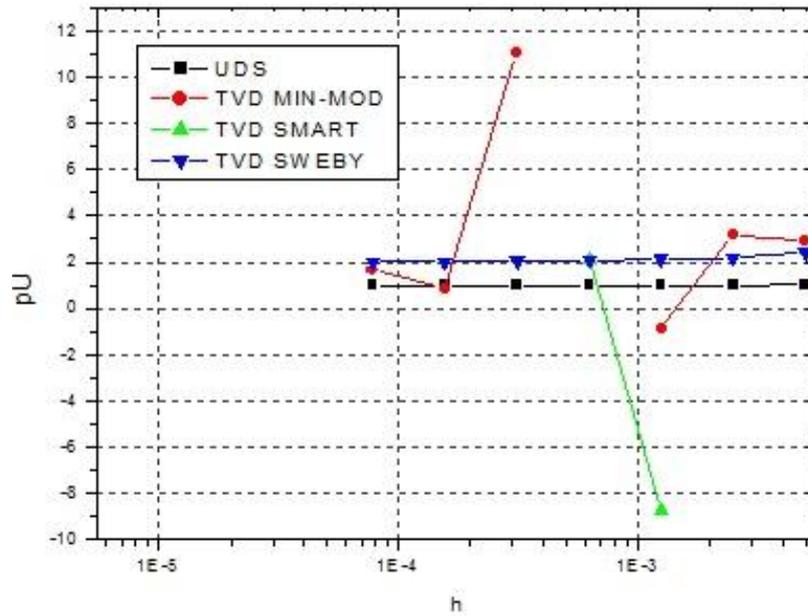
### 1. Gráficos de ordem aparente para configuração 1:

Figura B.1 – Ordem aparente ( $p_U$ ) do número de Mach ( $M_{ex}$ ) para a configuração 1.



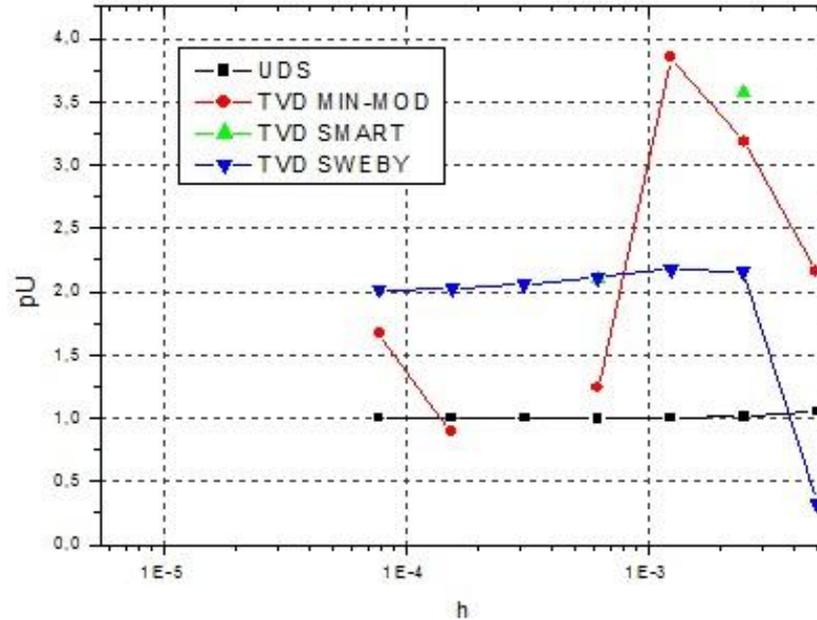
FONTE: O autor (2016).

Figura B.2 – Ordem aparente ( $p_U$ ) da temperatura ( $T_{ex}$ ) para a configuração 1.



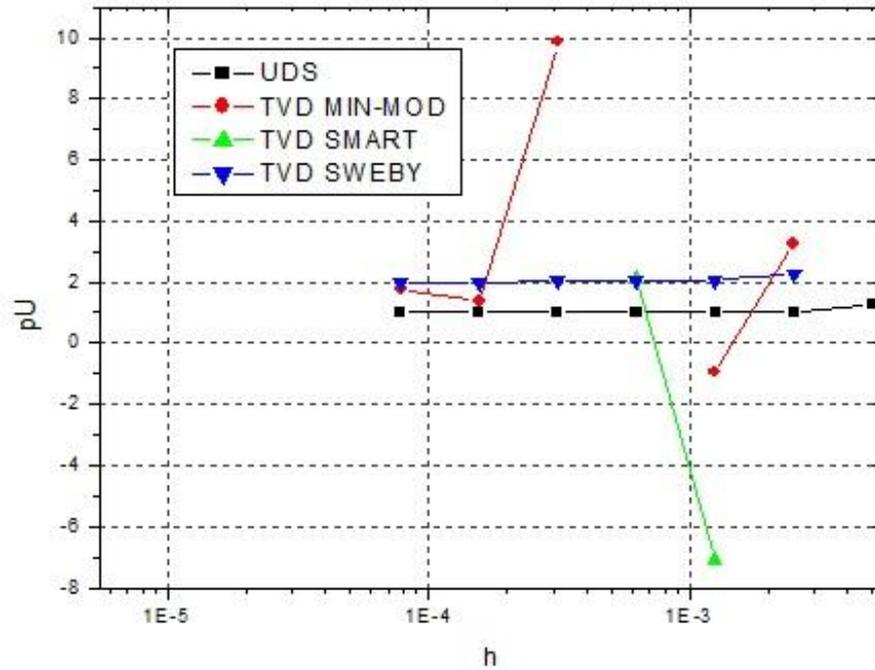
FONTE: O autor (2016).

Figura B.3 – Ordem aparente ( $p_U$ ) da velocidade nodal ( $u_{ex}$ ) para a configuração 1.



FONTE: O autor (2016).

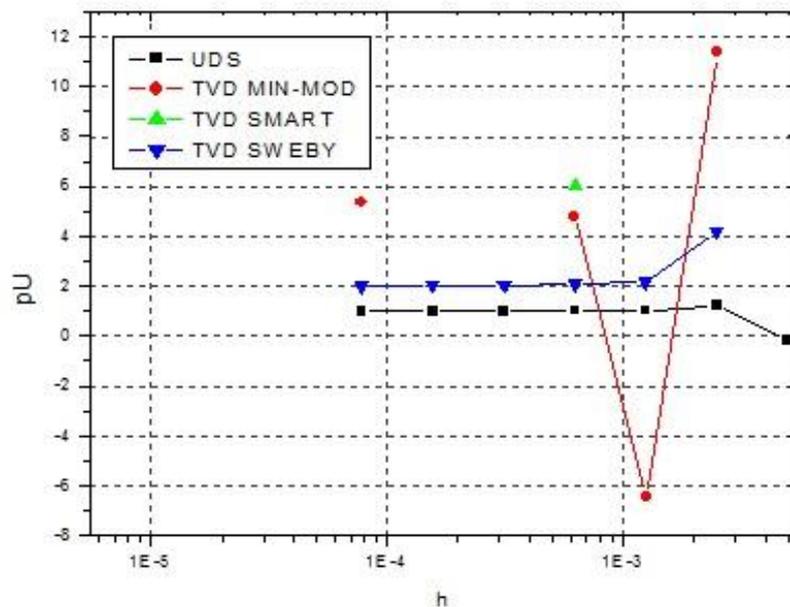
Figura B.4 – Ordem aparente ( $p_U$ ) da massa específica ( $\rho_{ex}$ ) para a configuração 1.



FONTE: O autor (2016).

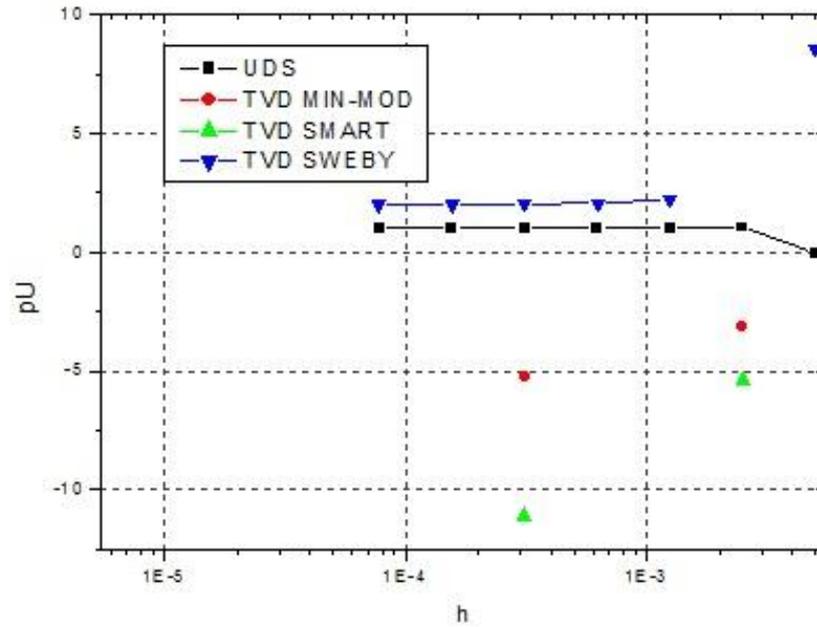
## 2. Gráficos de ordem aparente para configuração 2:

Figura B.5 – Ordem aparente ( $p_U$ ) do número de Mach ( $M_{ex}$ ) para a configuração 2.



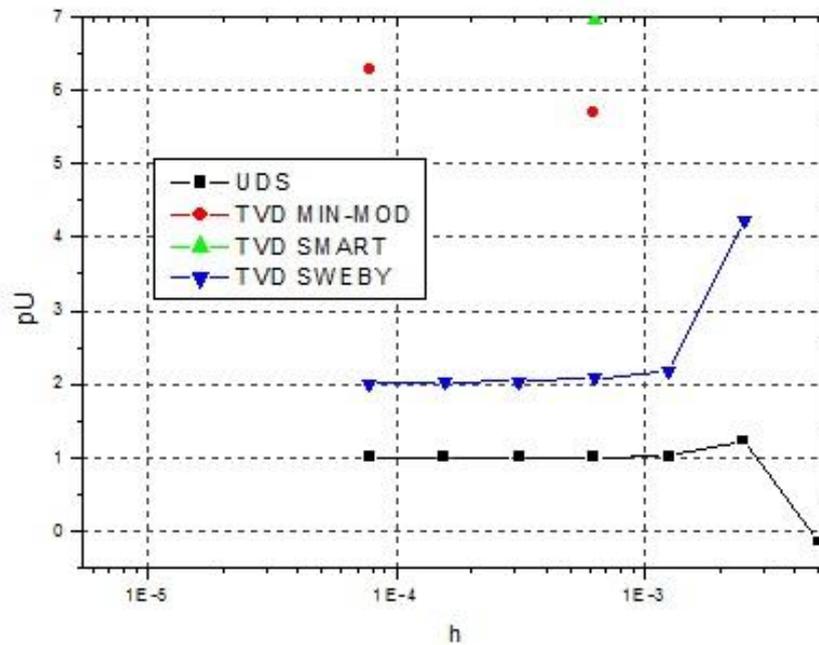
FONTE: O autor (2016).

Figura B.6 – Ordem aparente ( $p_U$ ) da temperatura ( $T_{ex}$ ) para a configuração 2.



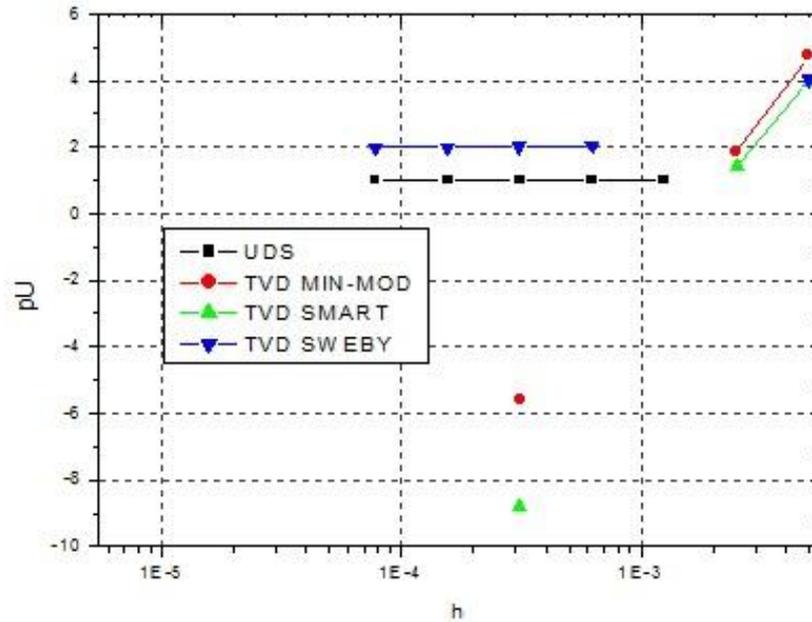
FONTE: O autor (2016).

Figura B.7 – Ordem aparente ( $p_U$ ) da velocidade nodal ( $u_{ex}$ ) para a configuração 2.



FONTE: O autor (2016).

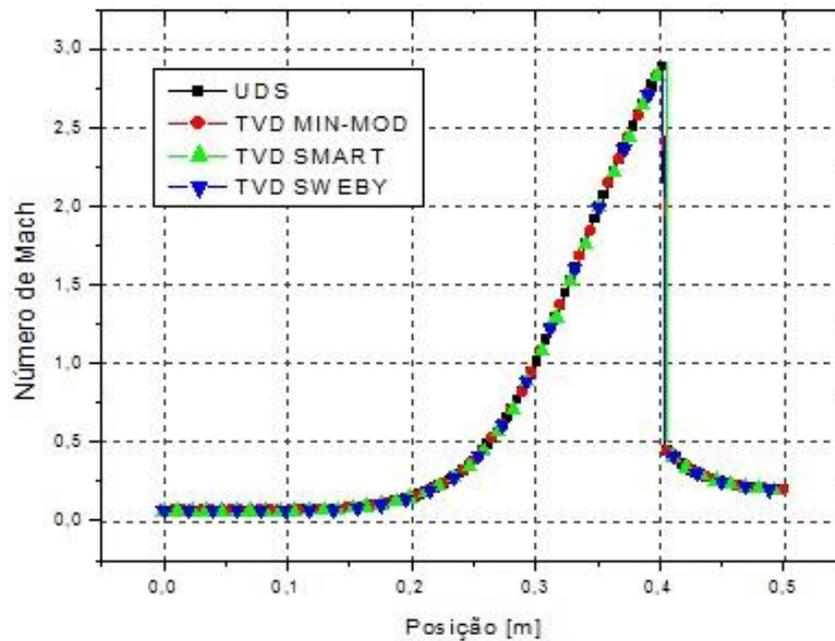
Figura B.8 – Ordem aparente ( $p_U$ ) da massa específica ( $\rho_{ex}$ ) para a configuração 2.



FONTE: O autor (2016).

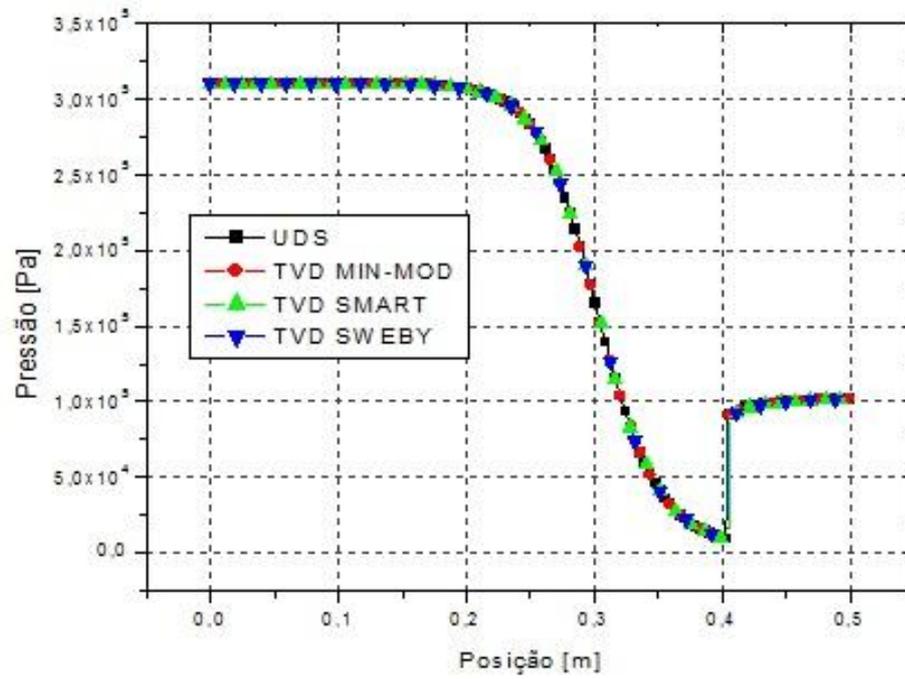
### 3. Gráficos de perfil de propriedade para configuração 1:

Figura B.9 – Perfil de número de Mach para configuração 1.



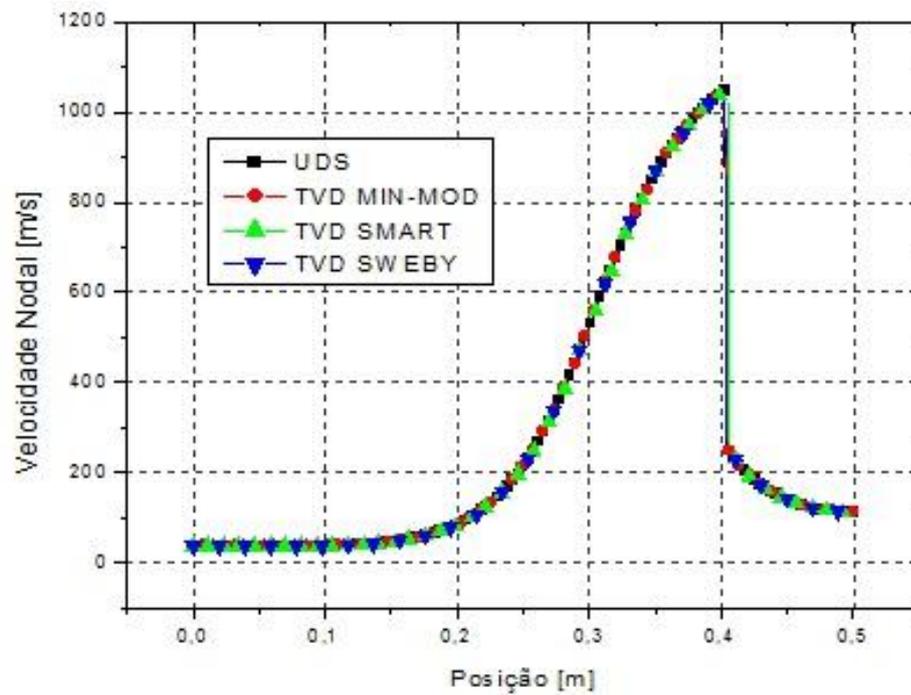
FONTE: O autor (2016).

Figura B.10 – Perfil de pressão para configuração 1.



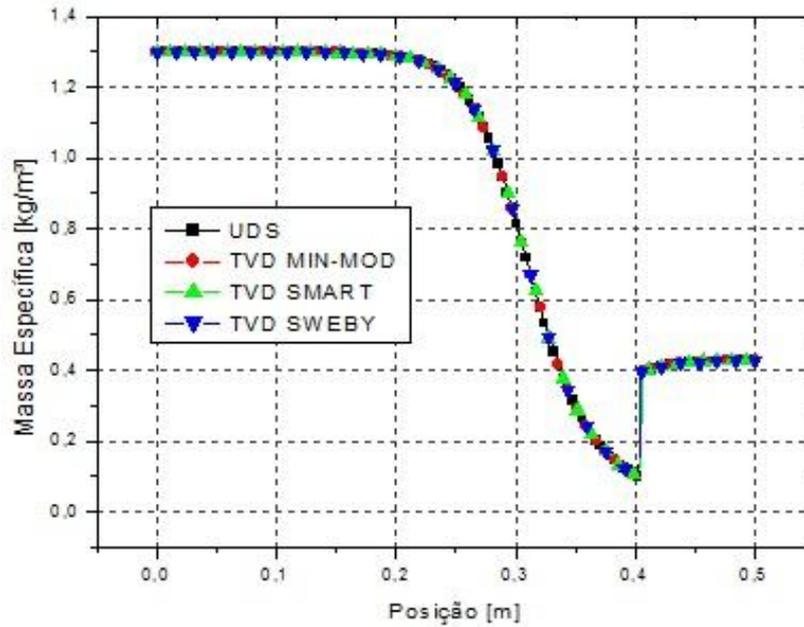
FONTE: O autor (2016).

Figura B.11 – Perfil de velocidade nodal para configuração 1.



FONTE: O autor (2016).

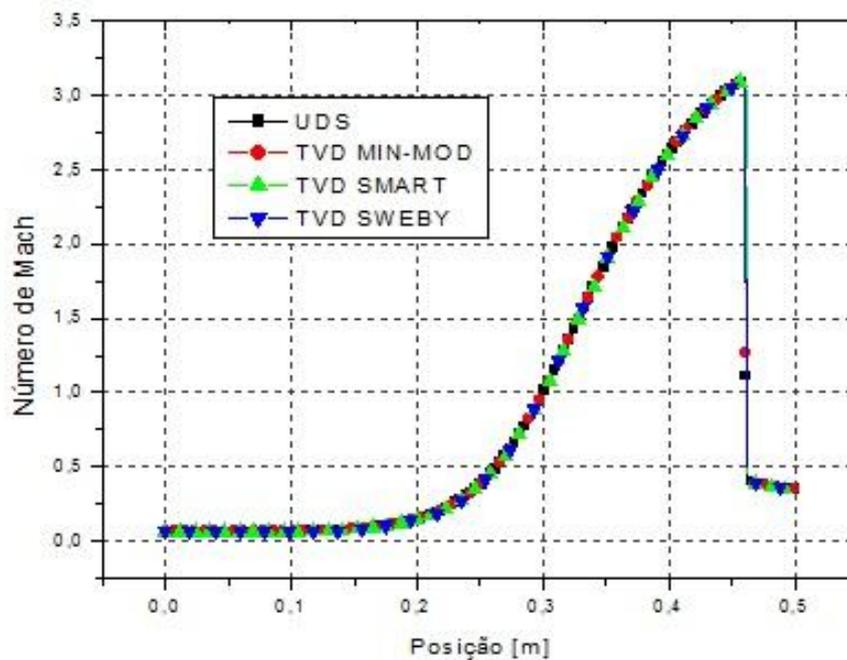
Figura B.12 – Perfil de massa específica para configuração 1.



FONTE: O autor (2016).

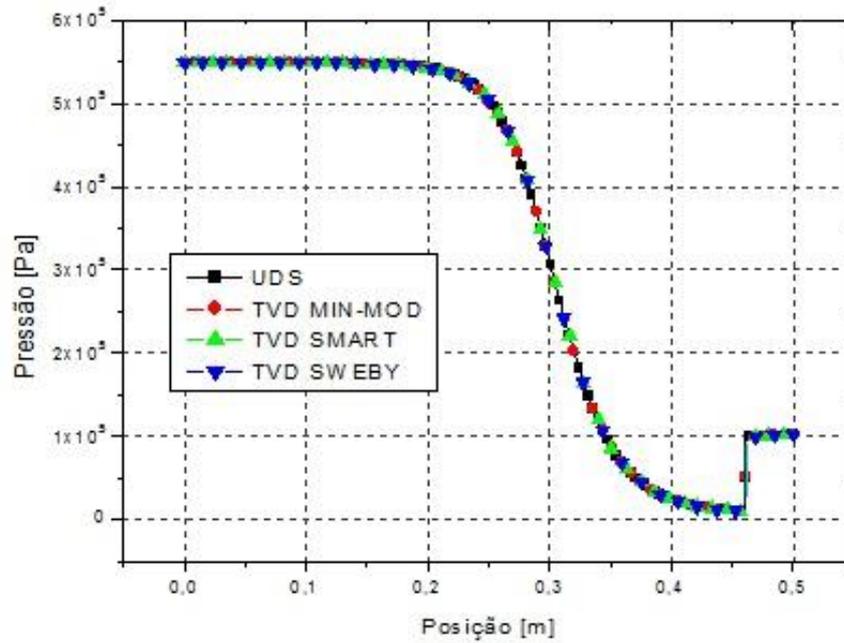
## 4. Gráficos de perfil de propriedade para configuração 2:

Figura B.13 – Perfil de número de Mach para configuração 2.



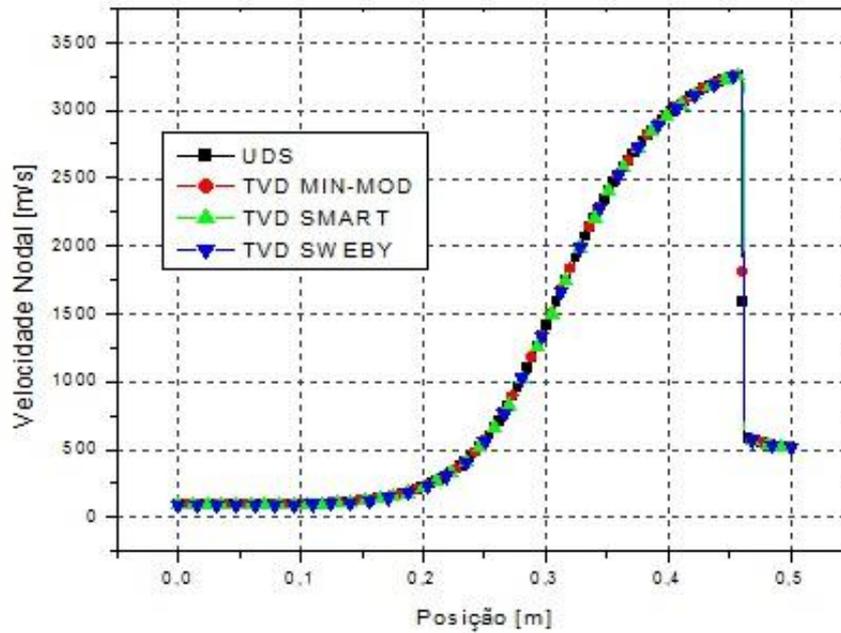
FONTE: O autor (2016).

Figura B.14 – Perfil de pressão para configuração 2.



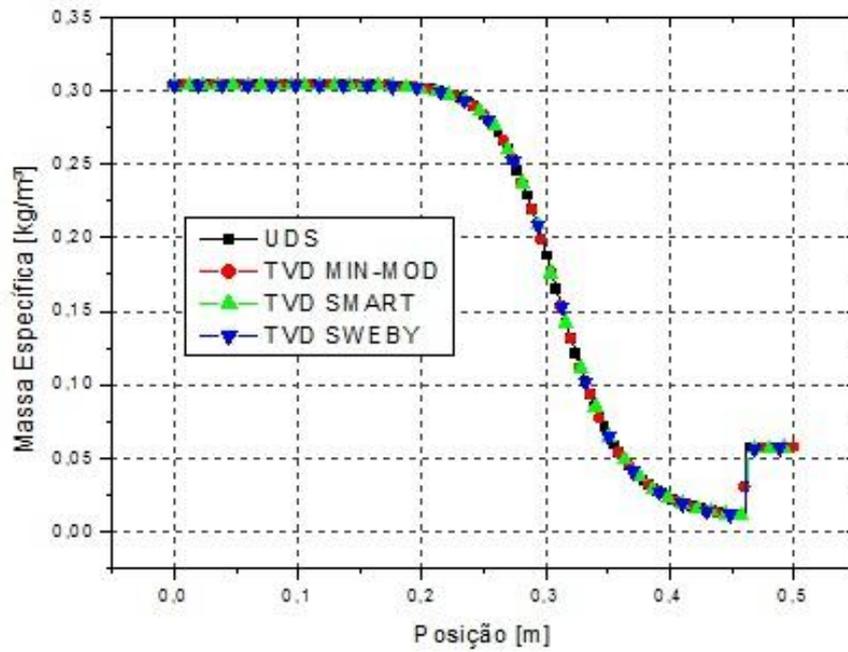
FONTE: O autor (2016).

Figura B.15 – Perfil de velocidade nodal para configuração 2.



FONTE: O autor (2016).

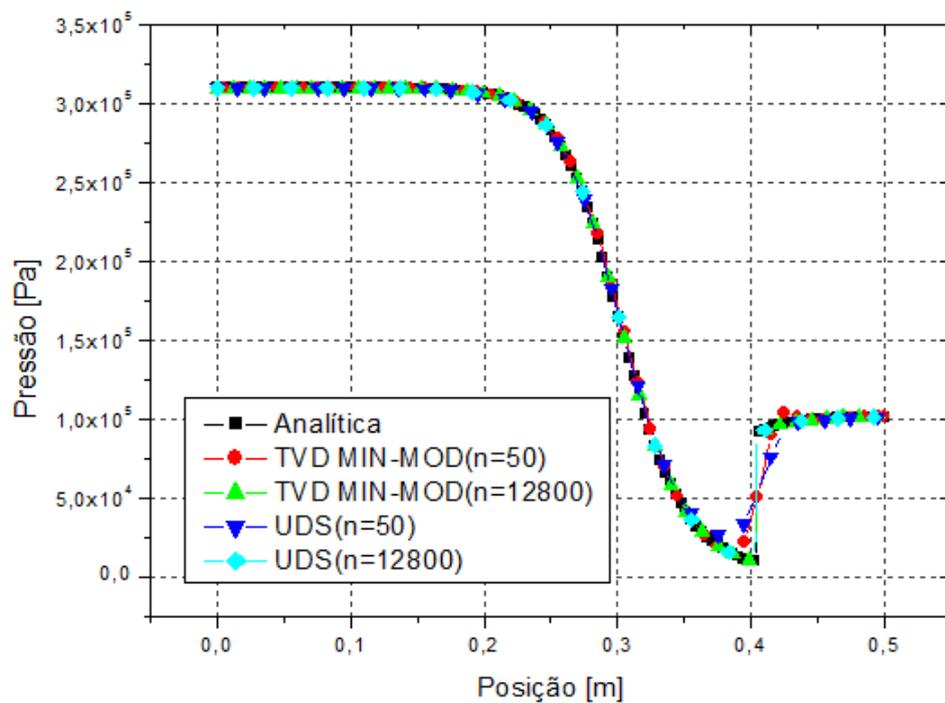
Figura B.16 – Perfil de massa específica para configuração 2.



FONTE: O autor (2016).

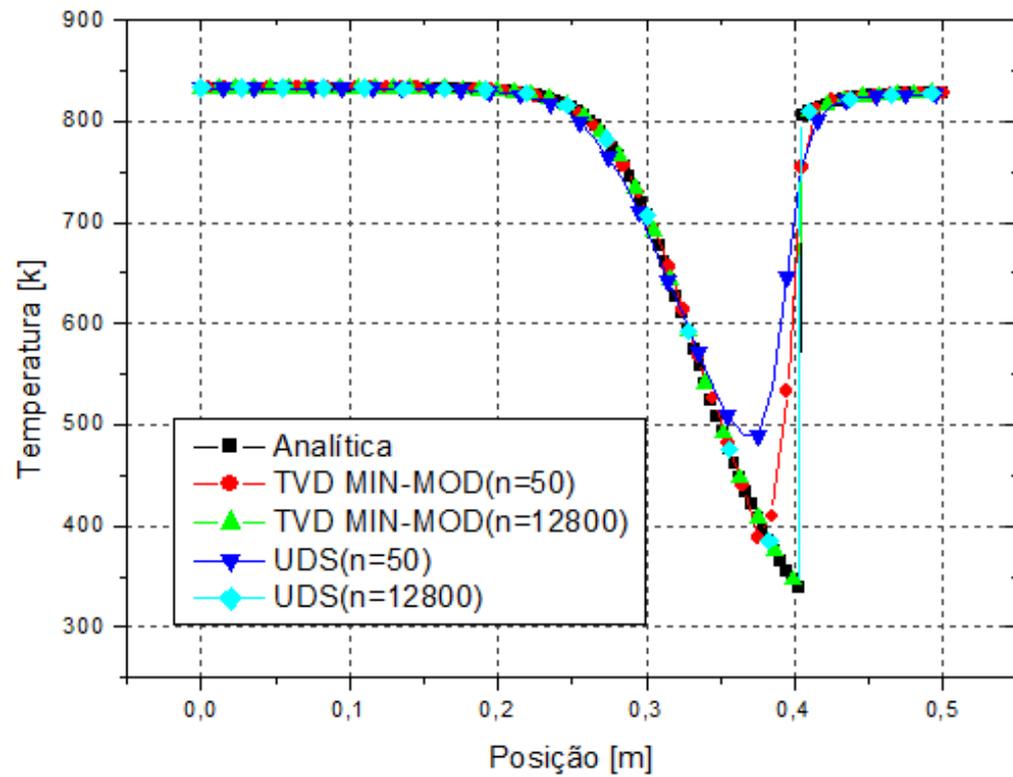
#### 4. Gráficos de efeito de refino de malha para configuração 1:

Figura B.17 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para pressão (configuração 1).



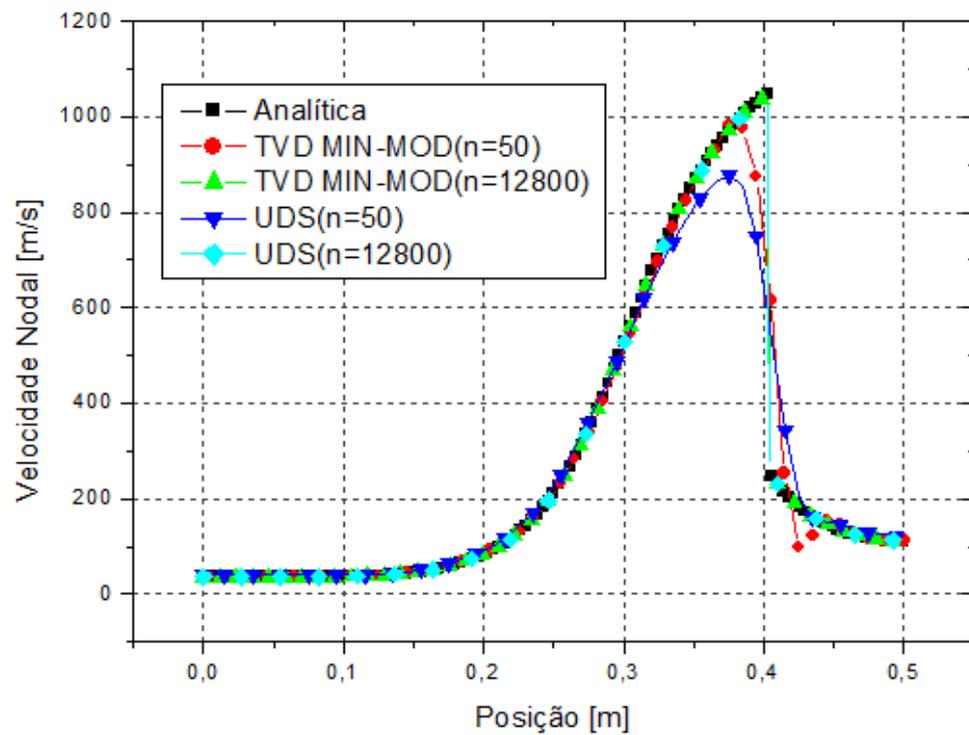
FONTE: O autor (2016).

Figura B.18 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para temperatura (configuração 1).



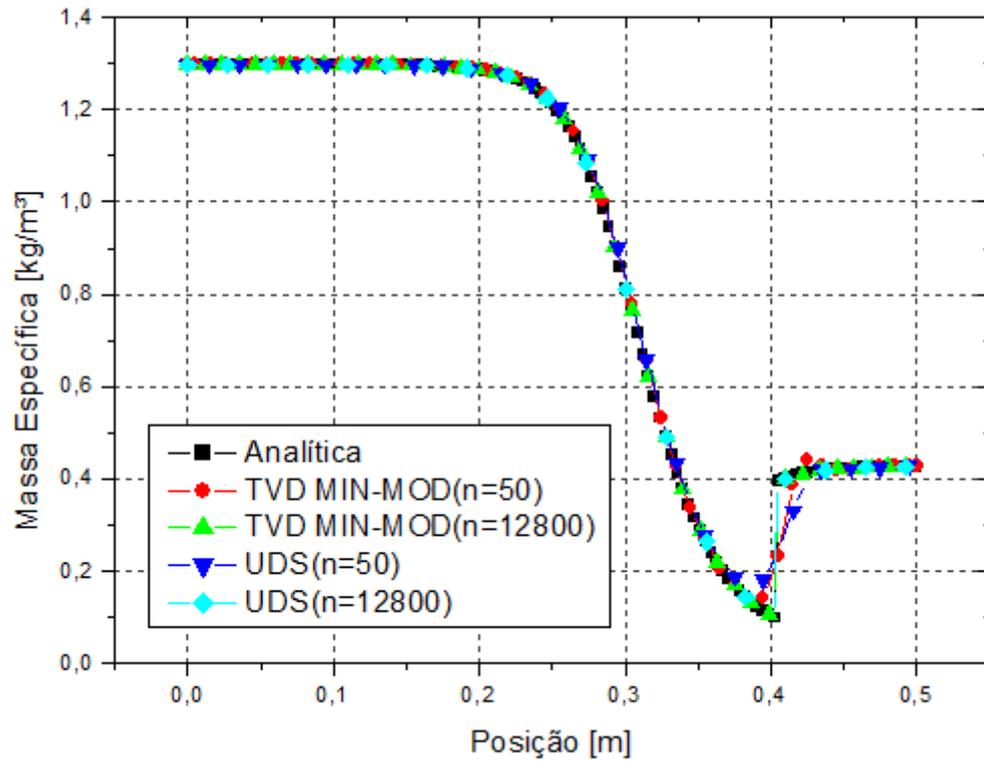
FONTE: O autor (2016).

Figura B.19 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para velocidade nodal (configuração 1).



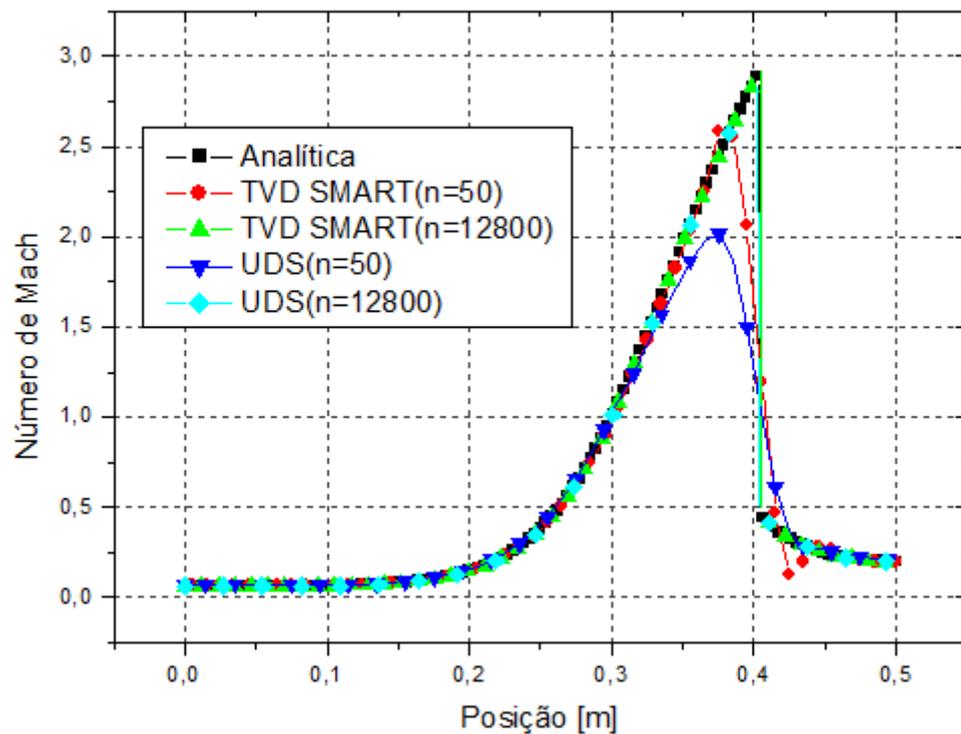
FONTE: O autor (2016).

Figura B.20 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para massa específica (configuração 1).



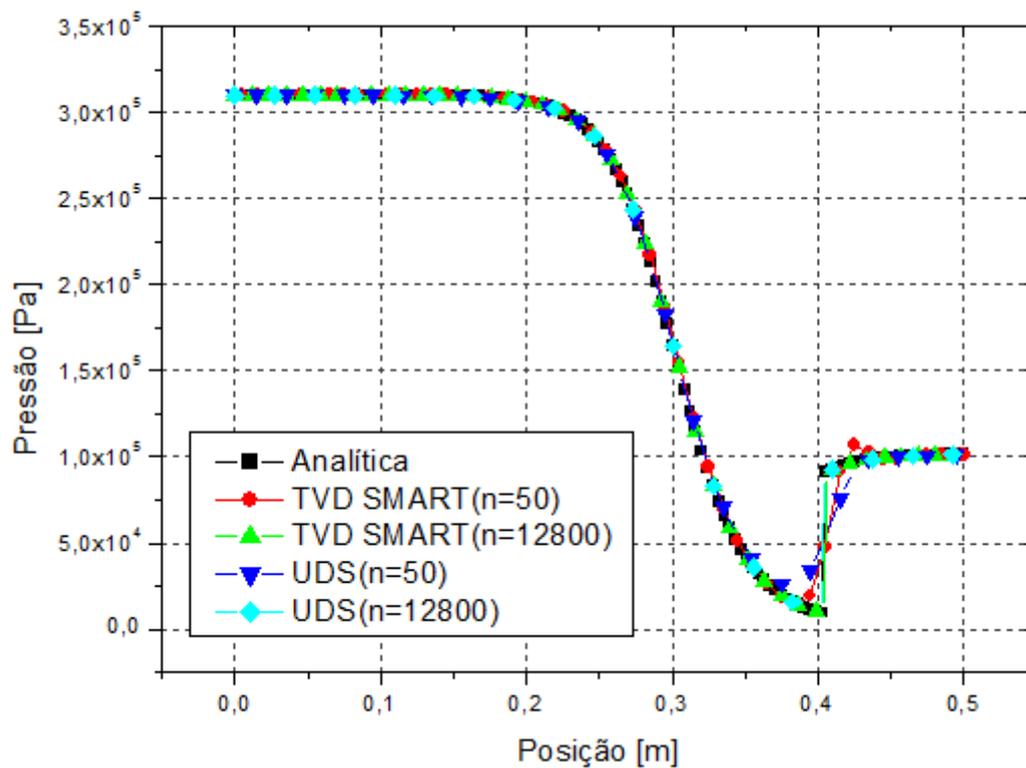
FONTE: O autor (2016).

Figura B.21 – Efeito de malha para TVD Smart para número de Mach (configuração 1).



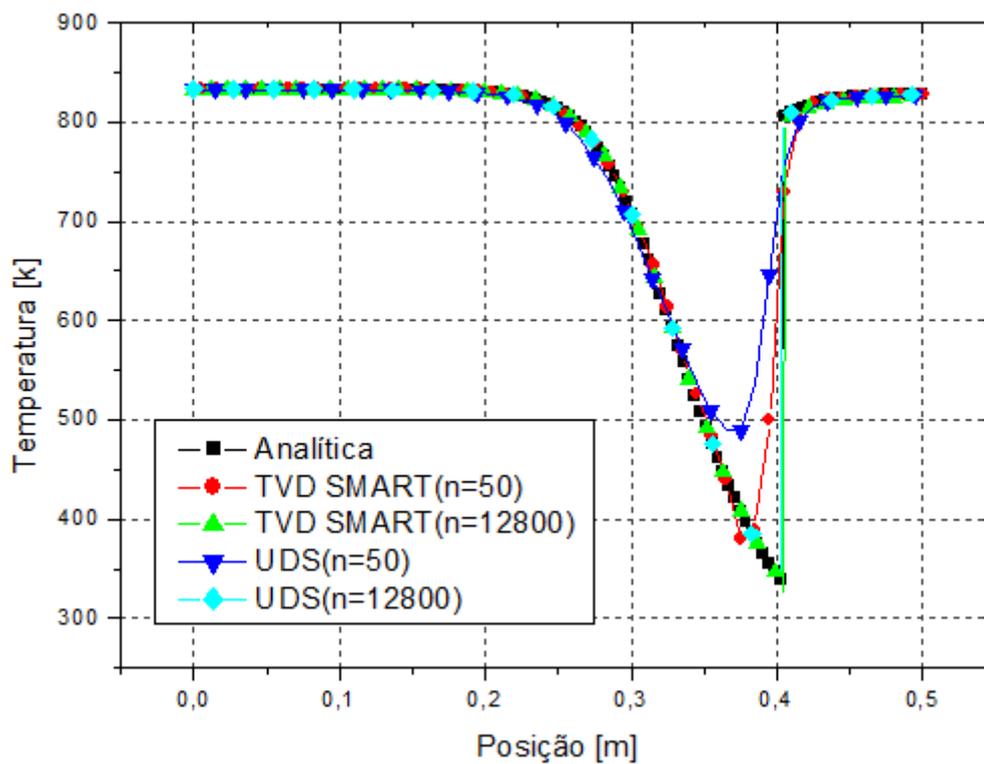
FONTE: O autor (2016).

Figura B.22 – Efeito de malha para TVD Smart para pressão (configuração 1).



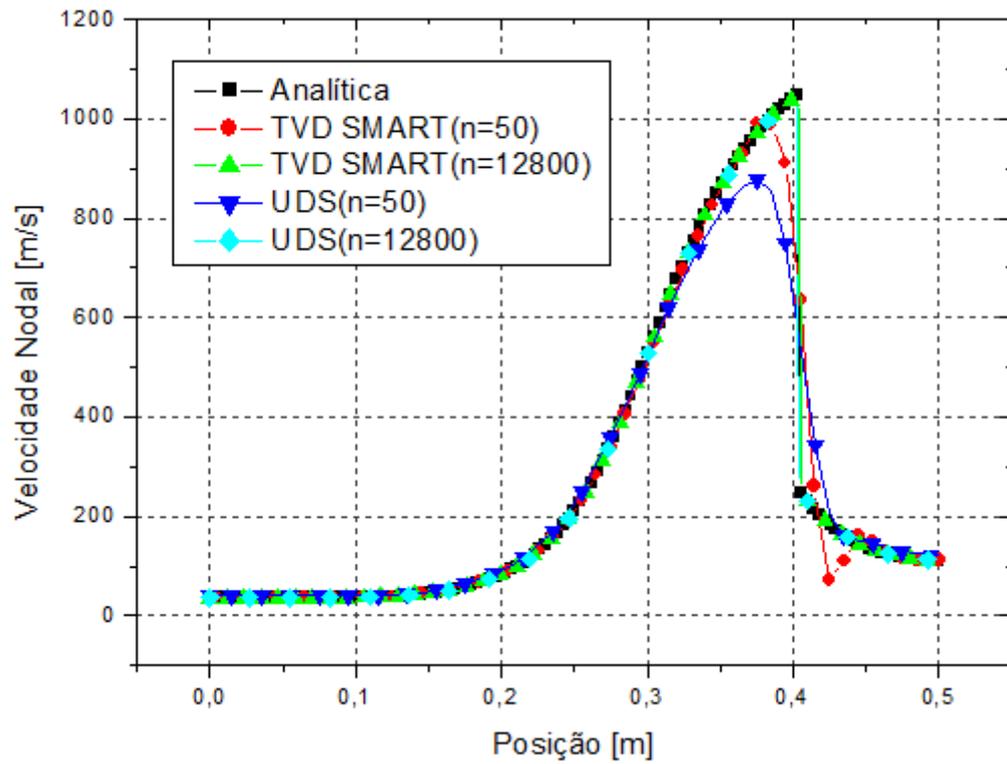
FONTE: O autor (2016).

Figura B.23 – Efeito de malha para TVD Smart para temperatura (configuração 1).



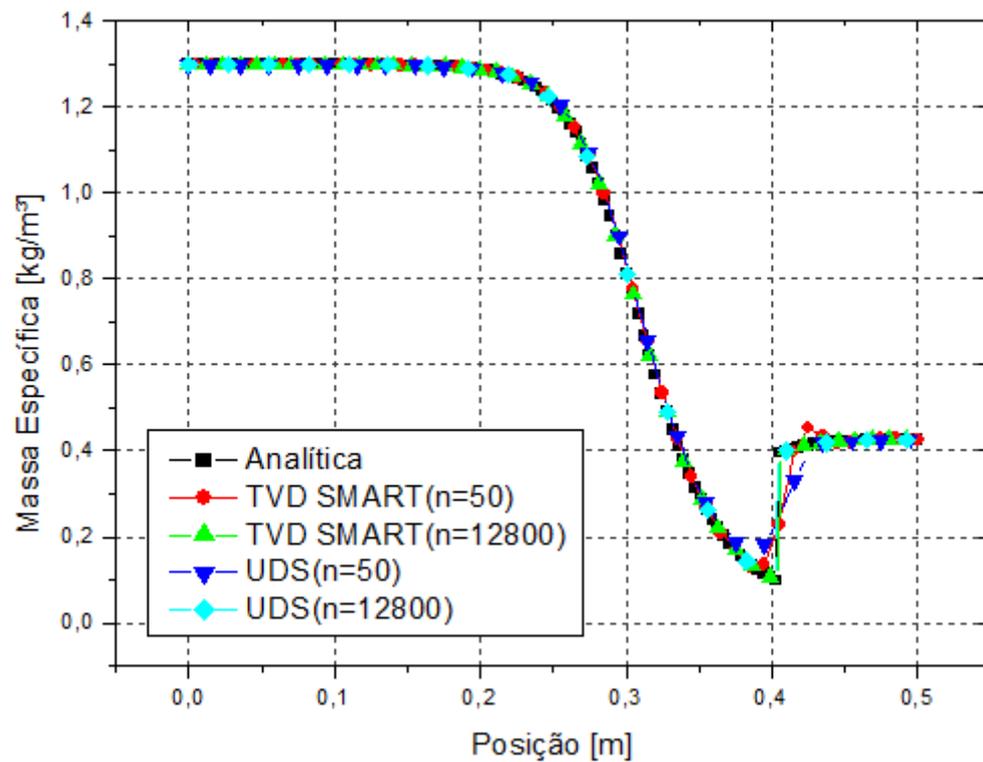
FONTE: O autor (2016).

Figura B.24 – Efeito de malha para TVD Smart para velocidade nodal (configuração 1).



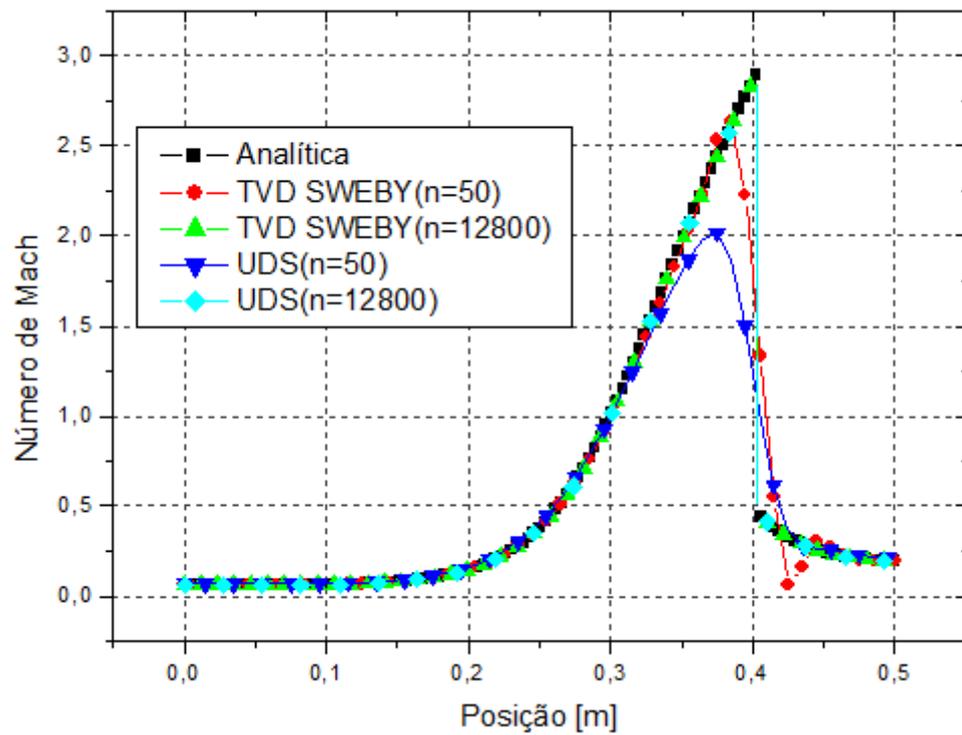
FONTE: O autor (2016).

Figura B.25 – Efeito de malha para TVD Smart para massa específica (configuração 1).



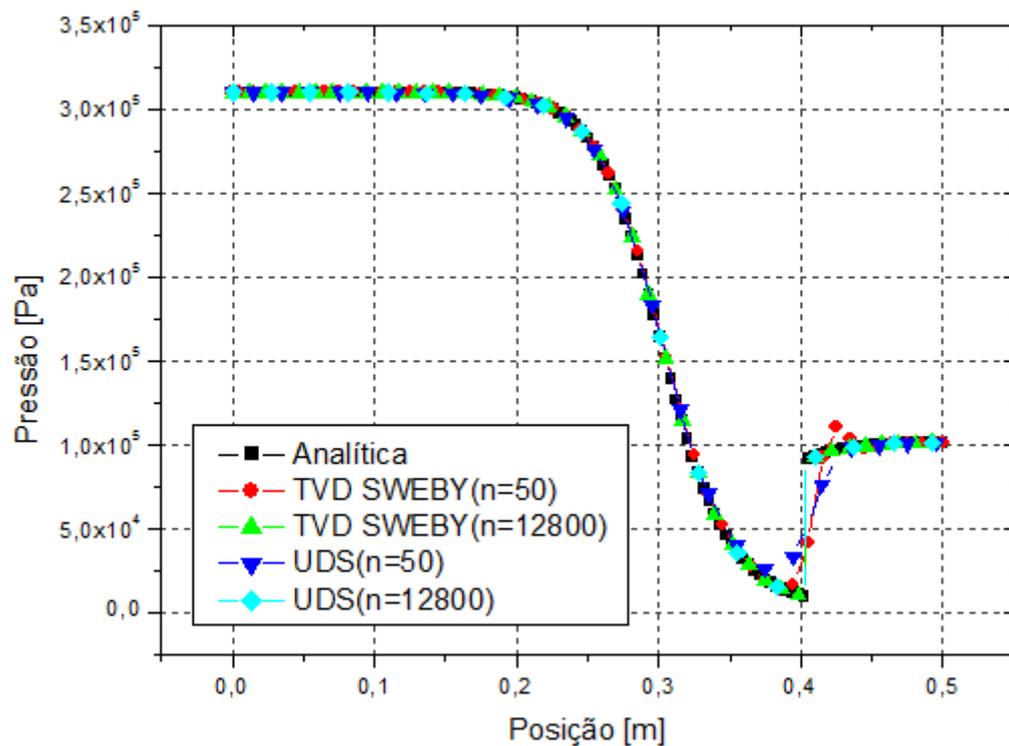
FONTE: O autor (2016).

Figura B.26 - Efeito de malha para TVD Sweby para número de Mach (configuração 1).



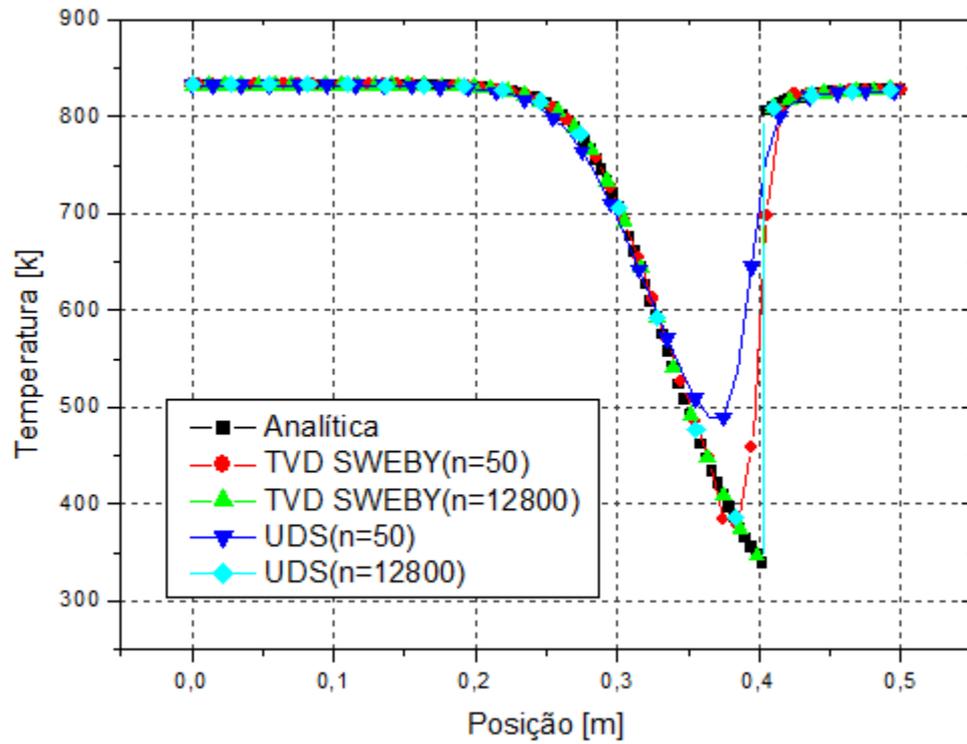
FONTE: O autor (2016).

Figura B.27 - Efeito de malha para TVD Sweby para pressão (configuração 1).



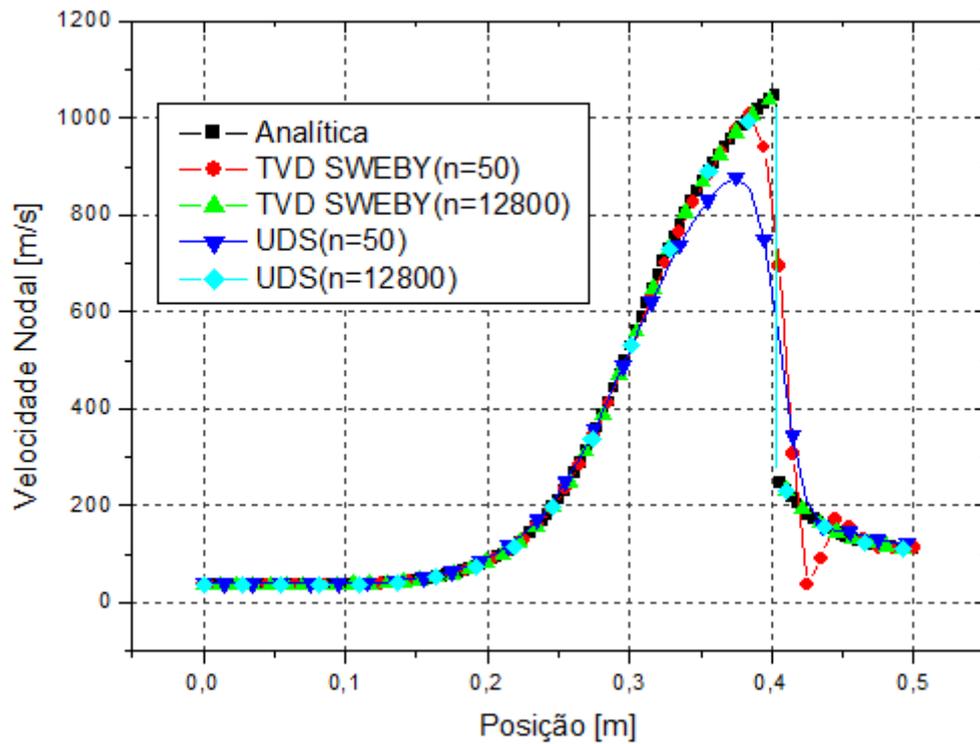
FONTE: O autor (2016).

Figura B.28 - Efeito de malha para TVD Sweby para temperatura (configuração 1).



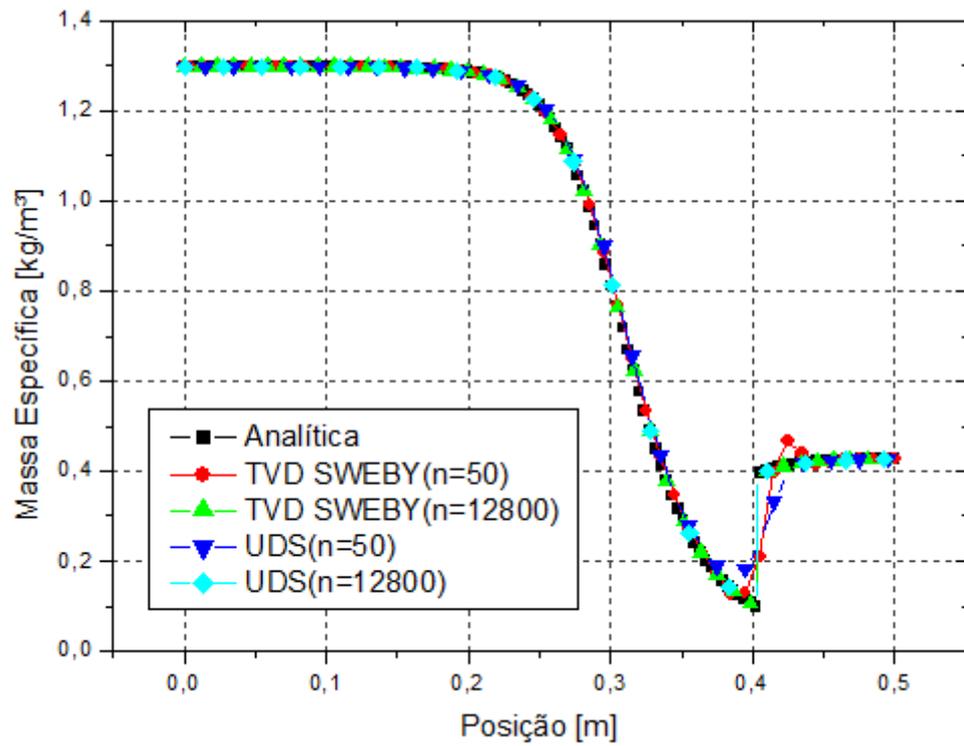
FONTE: O autor (2016).

Figura B.29 - Efeito de malha para TVD Sweby para velocidade nodal (configuração 1).



FONTE: O autor (2016).

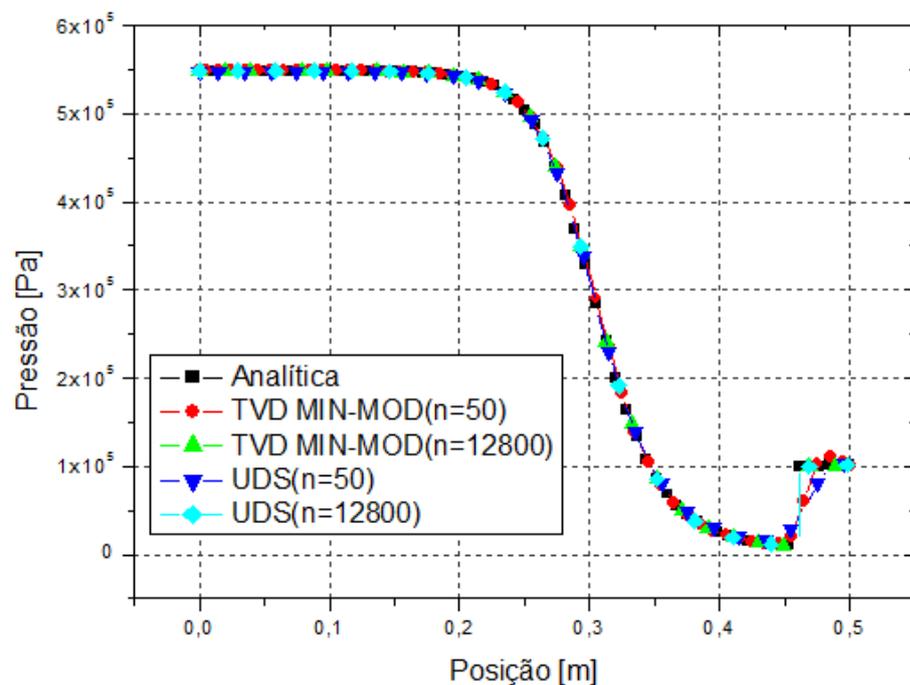
Figura B.30 - Efeito de malha para TVD Sweby para massa específica (configuração 1).



FONTE: O autor (2016).

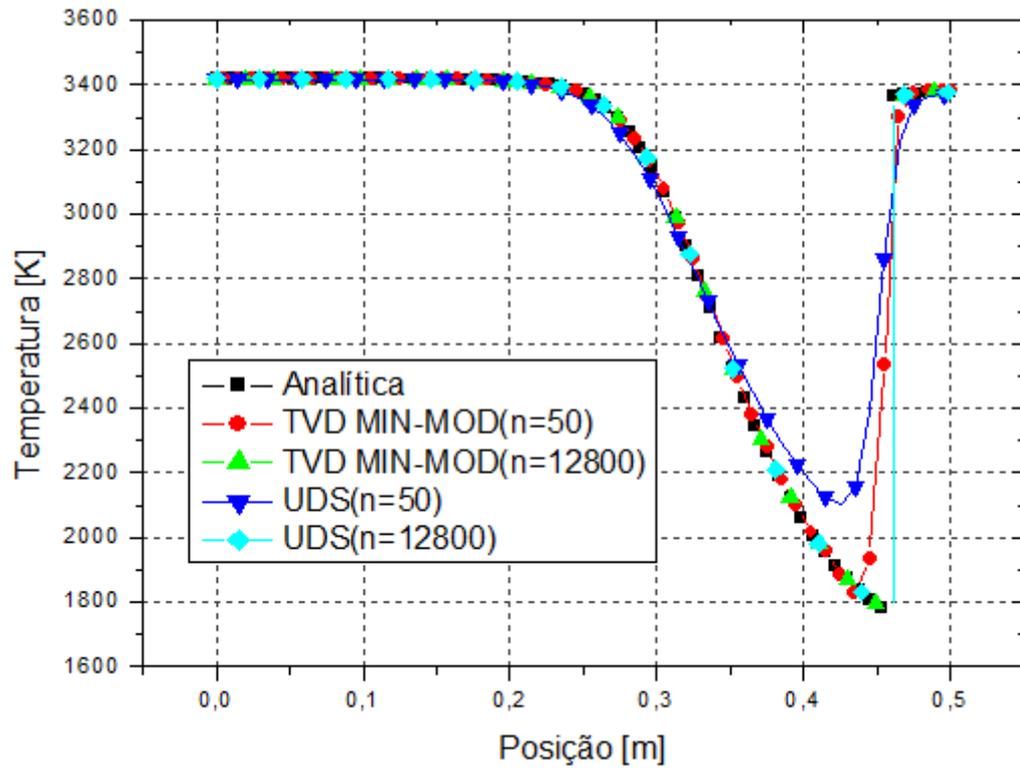
## 5. Gráficos de efeito de refino de malha para configuração 2:

Figura B.31 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para pressão (configuração 2).



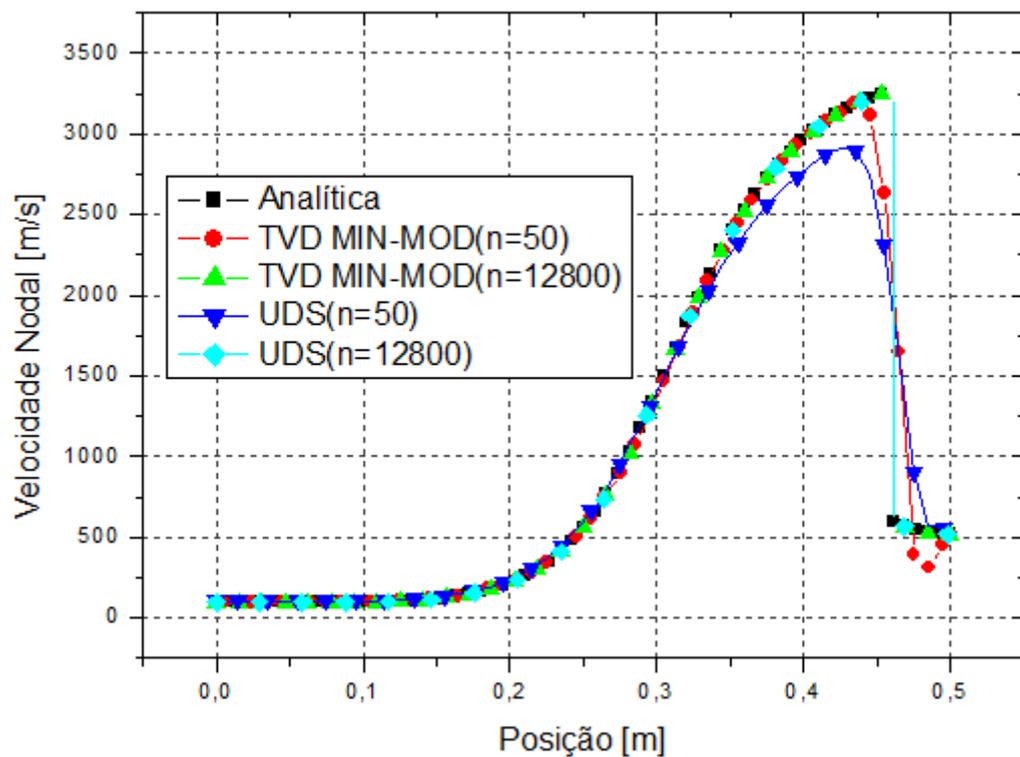
FONTE: O autor (2016).

Figura B.32 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para temperatura (configuração 2).



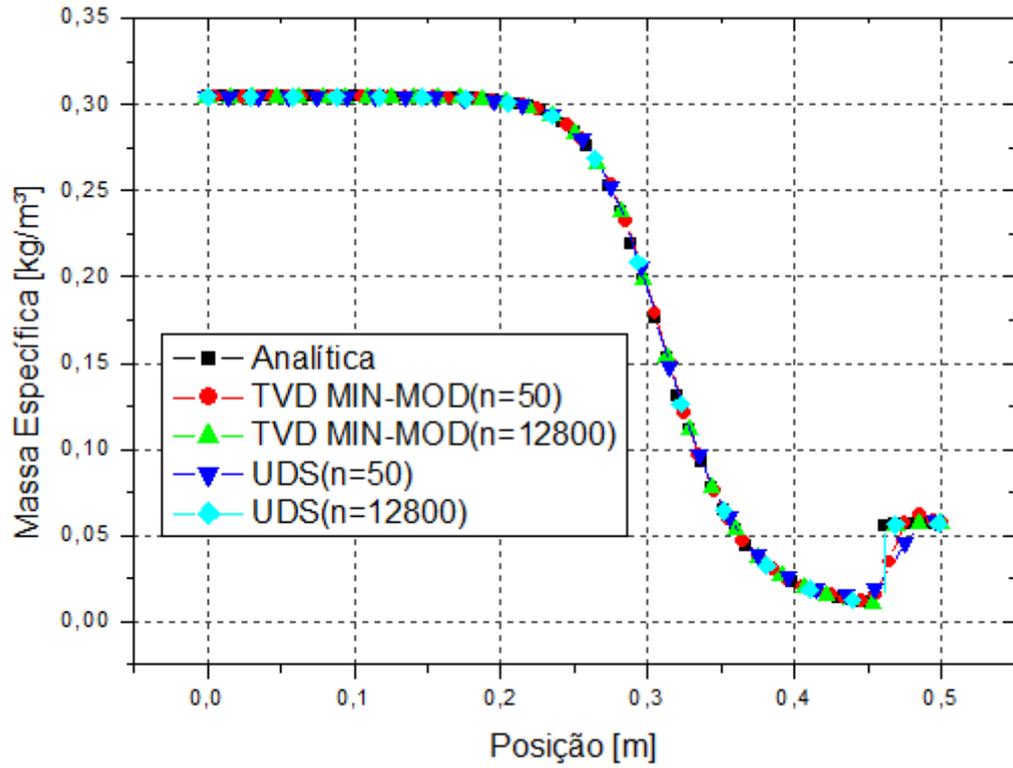
FONTE: O autor (2016).

Figura B.33 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para velocidade nodal (configuração 2).



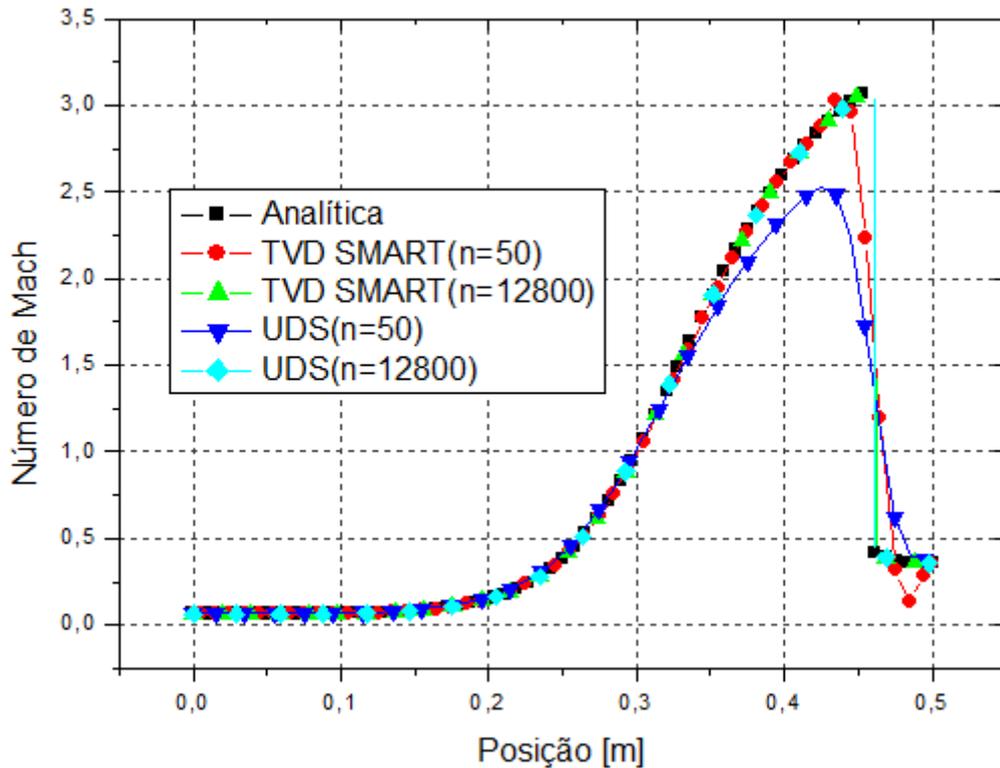
FONTE: O autor (2016).

Figura B.34 – Efeito de malha para TVD Min-Mod para massa específica (configuração 2).



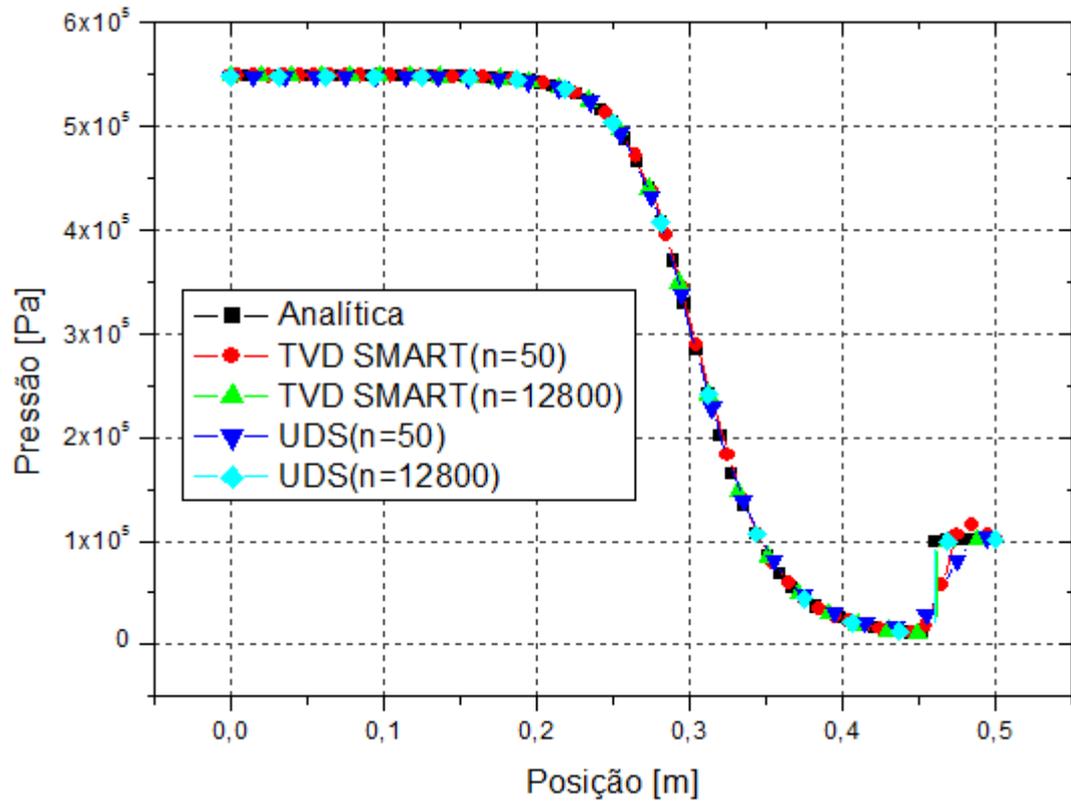
FONTE: O autor (2016).

Figura B.35 – Efeito de malha para TVD Smart para número de Mach (configuração 2) .



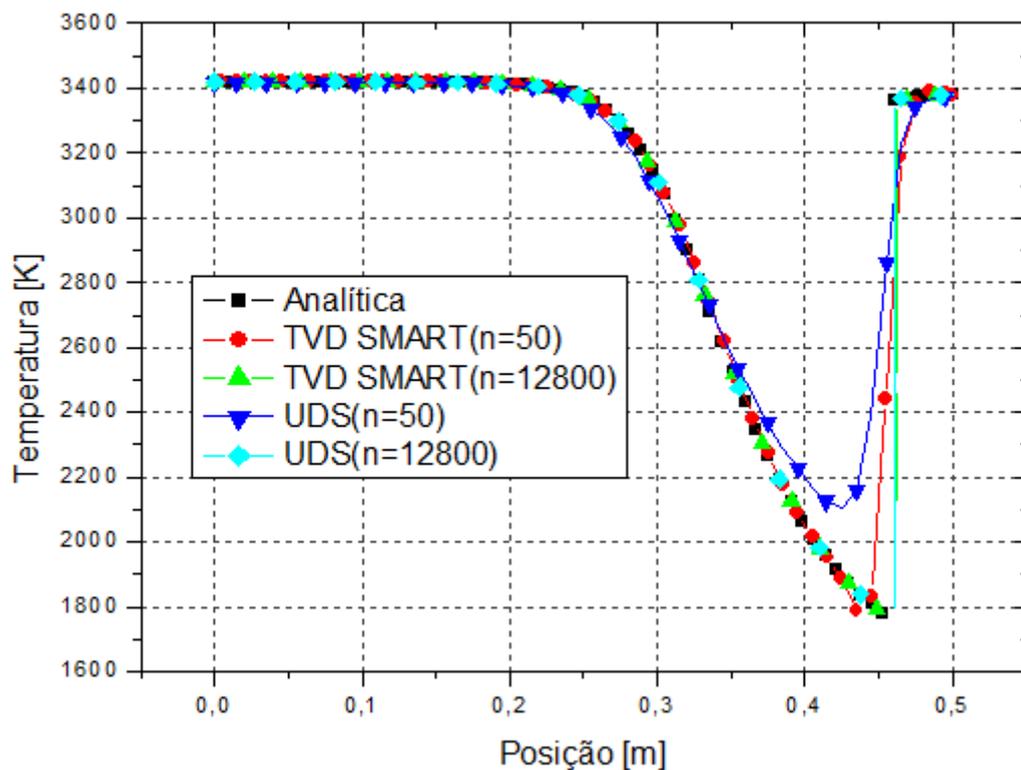
FONTE: O autor (2016).

Figura B.36 – Efeito de malha para TVD Smart para pressão (configuração 2).



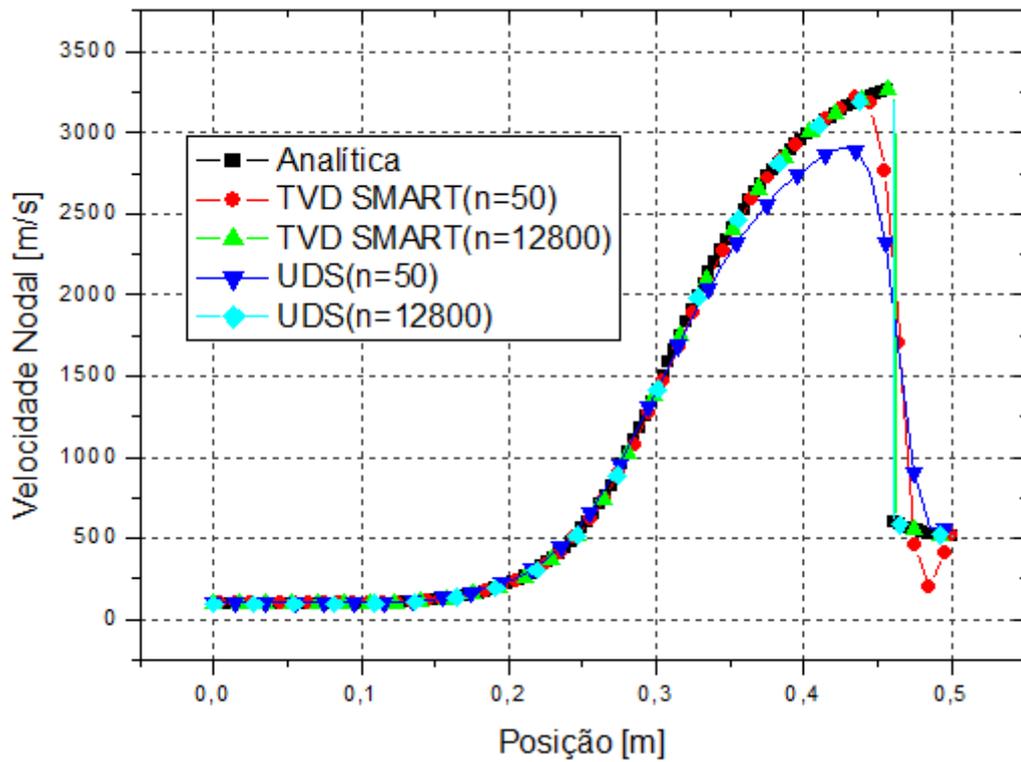
FONTE: O autor (2016).

Figura B.37 – Efeito de malha para TVD Smart para temperatura (configuração 2).



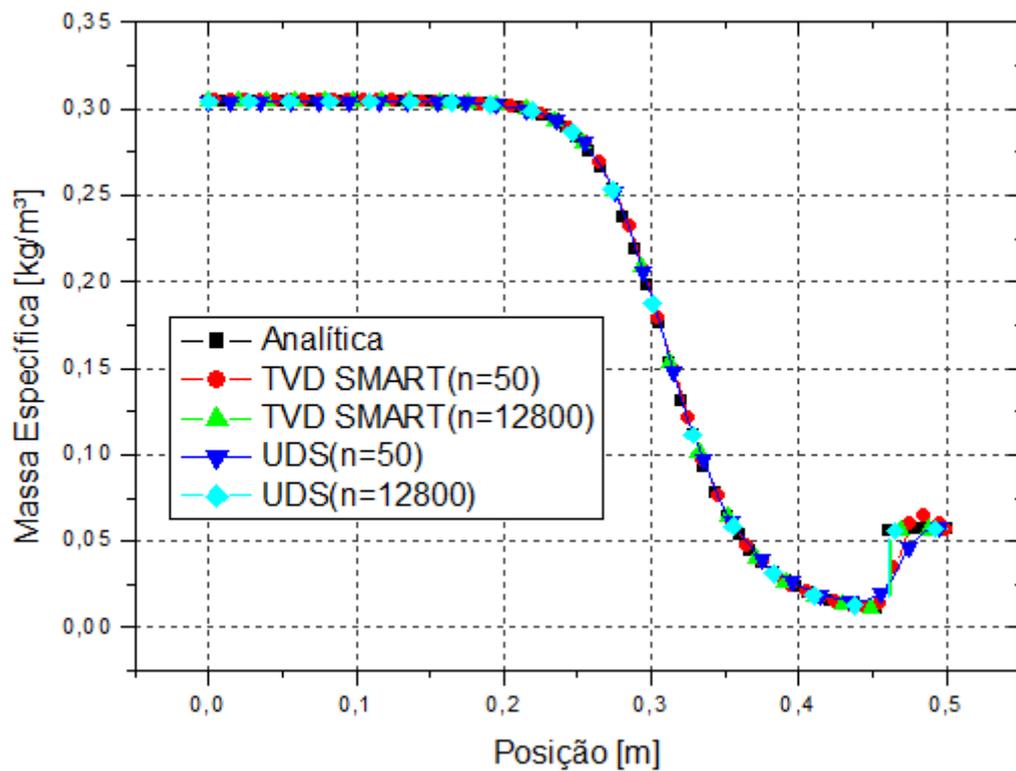
FONTE: O autor (2016).

Figura B.38 – Efeito de malha para TVD Smart para velocidade nodal (configuração 2).



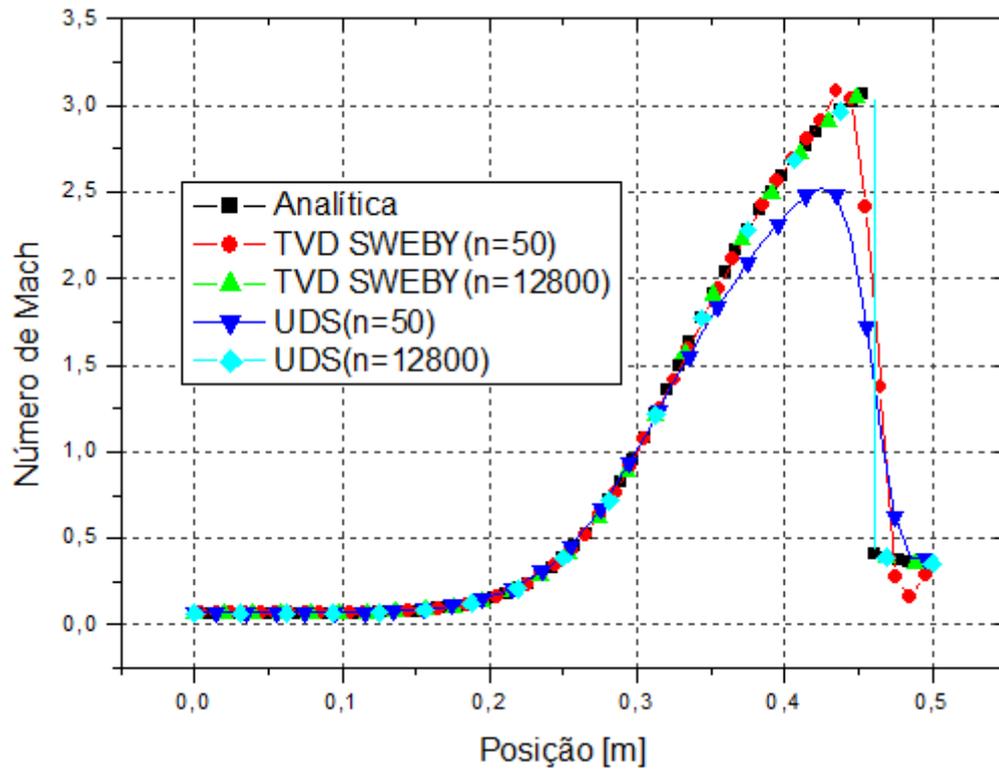
FONTE: O autor (2016).

Figura B.39 – Efeito de malha para TVD Smart para massa específica (configuração 2).



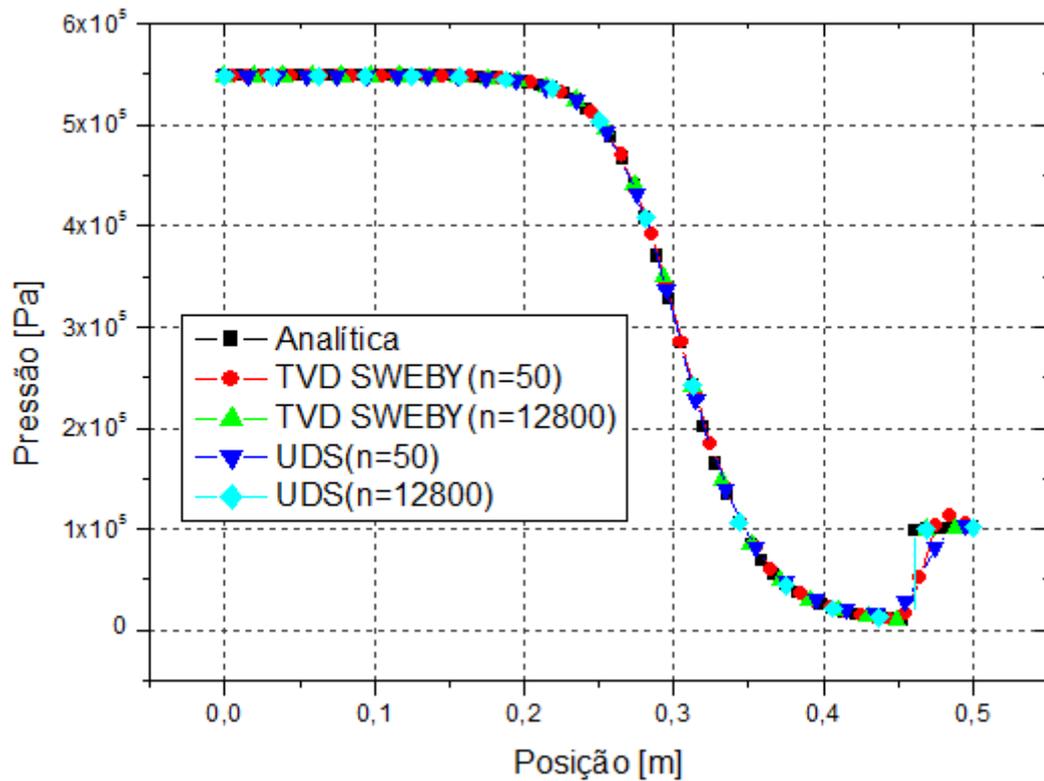
FONTE: O autor (2016).

Figura B.40 - Efeito de malha para TVD Sweby para número de Mach (configuração 2).



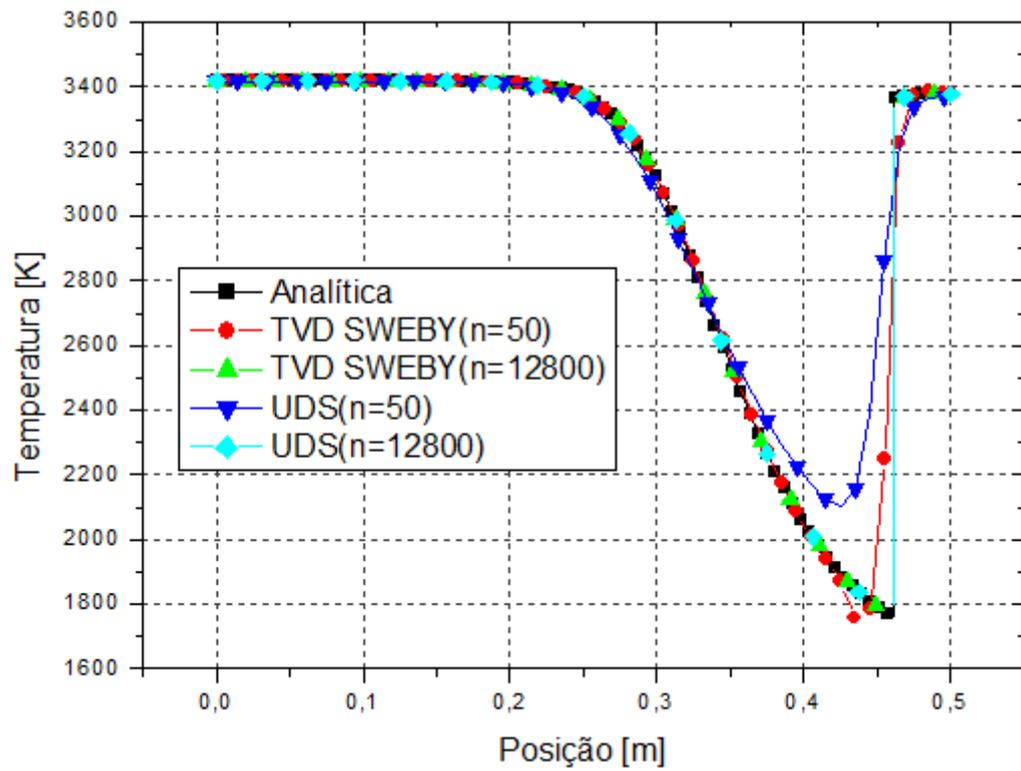
FONTE: O autor (2016).

Figura B.41 - Efeito de malha para TVD Sweby para pressão (configuração 2).



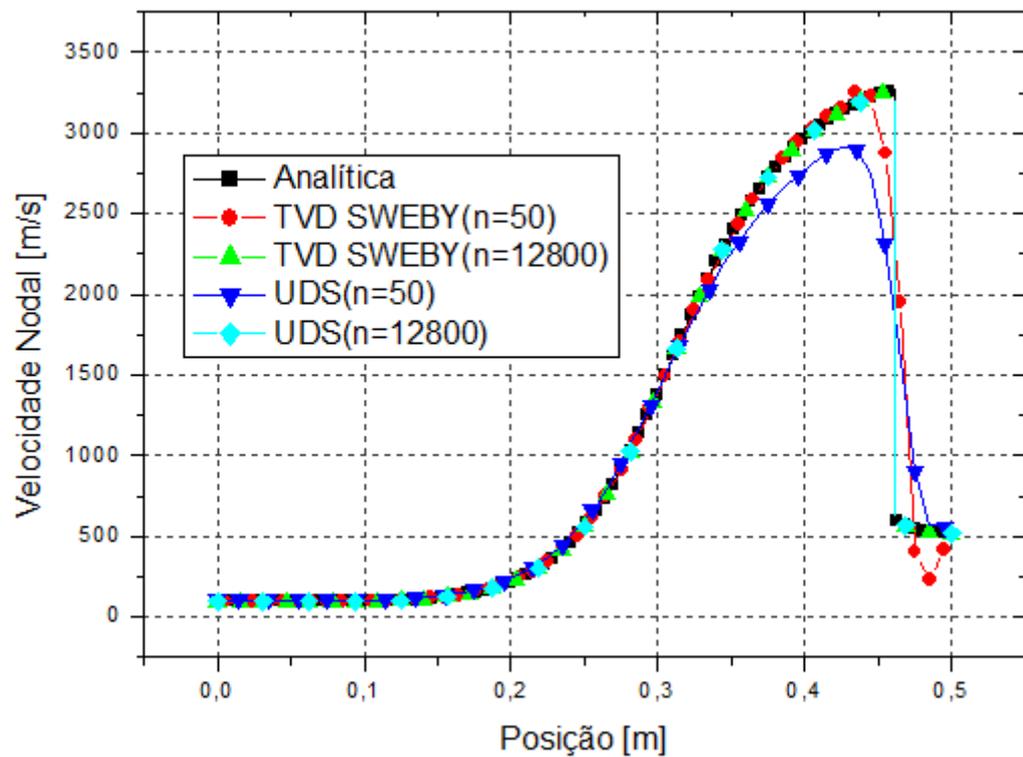
FONTE: O autor (2016).

Figura B.42 - Efeito de malha para TVD Sweby para temperatura (configuração 2).



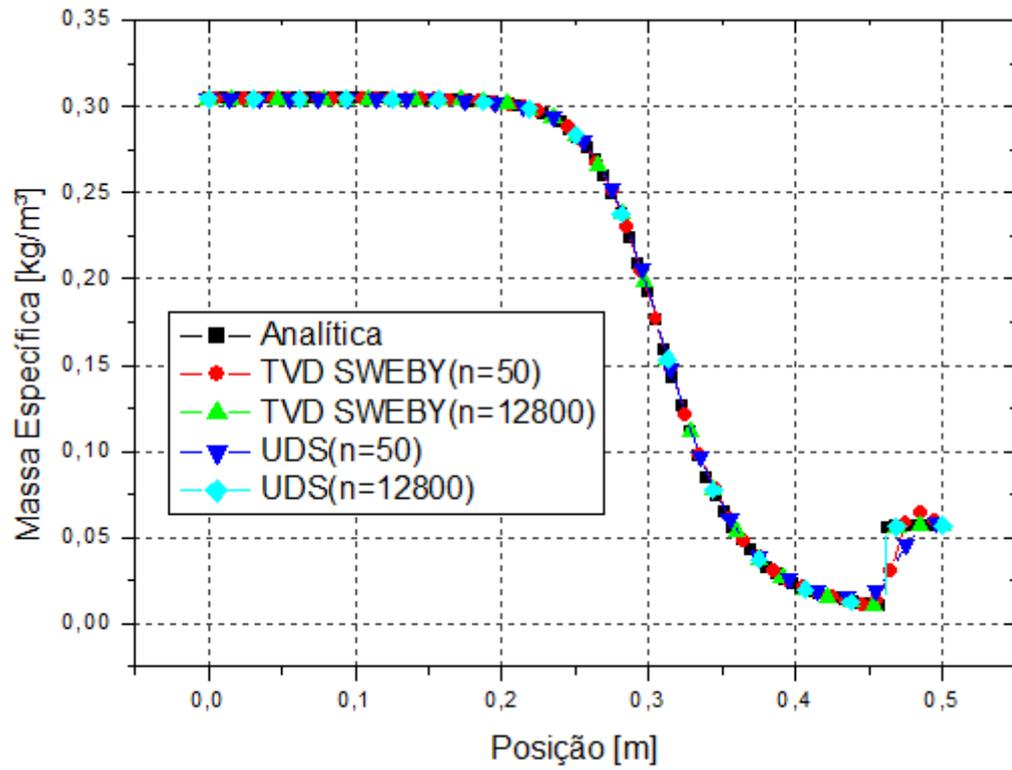
FONTE: O autor (2016).

Figura B.43 - Efeito de malha para TVD Sweby para velocidade nodal (configuração 2).



FONTE: O autor (2016).

Figura B.44 – Efeito de malha para TVD Sweby para massa específica (configuração 2).



FONTE: O autor (2016).