

LUCIANO KIYOSHI ARAKI

**VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE
ESCOAMENTOS REATIVOS EM MOTORES-FOGUETE**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Ciências no Curso de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia da Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi.

CURITIBA

2007

Araki, Luciano Kiyoshi

Verificação de soluções numéricas de escoamentos reativos em motores-foguete / Luciano Kiyoshi Araki. – Curitiba, 2007. 222 f. : il., grafs., tabs.

Orientador: Carlos Henrique Marchi

Tese (Doutorado) – Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, Curso de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia.

Inclui Bibliografia.

1. Dinâmica dos fluidos. 2. Método dos volumes finitos. 3. Análise de erros (Matemática). 4. Escoamento. I. Marchi, Carlos Henrique. II. Título. III. Universidade Federal do Paraná.

CDD 532.05

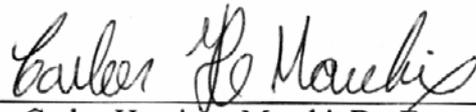
TERMO DE APROVAÇÃO

LUCIANO KIYOSHI ARAKI

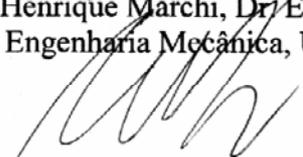
**VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE
ESCOAMENTOS REATIVOS EM MOTORES-FOGUETE**

Tese aprovada como requisito parcial para a obtenção do grau de Doutor em Ciências, na área de concentração de Mecânica Computacional do Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia da Universidade Federal do Paraná, pela seguinte banca examinadora:

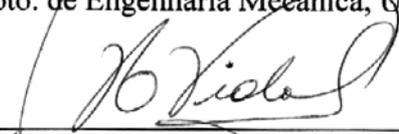
Orientador:



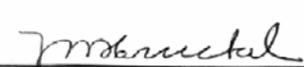
Carlos Henrique Marchi, Dr. Eng.
Depto. de Engenharia Mecânica, UFPR



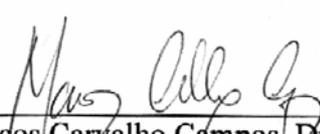
António Fábio Carvalho da Silva, Dr. Eng.
Depto. de Engenharia Mecânica, UFSC



Humberto Ricardo Vidal Gutiérrez, Dr. Eng.
Depto. de Ing. Mecánica, Universidad de Magallanes, Chile



José Nivaldo Hinckel, PhD
INPE



Marcos Carvalho Campos, Dr. Eng.
Depto. de Engenharia Mecânica, UFPR

Curitiba, 10 de agosto de 2007.

A Deus, por tudo.

*Aos meus pais, irmã, outros
familiares e amigos .*

RESUMO

O enfoque deste trabalho é a determinação de estimativas de erros numéricos em simulações de escoamento uni e bidimensional reativo (ou não) no interior de tubearias, empregando-se como par propelente oxigênio e hidrogênio (LOX/LH₂). Cinco diferentes modelos físicos são estudados: dois envolvendo escoamento monoespécie (com propriedades constantes e com propriedades variáveis) e três modelos de escoamento multiespécie reativo (escoamento congelado, em equilíbrio químico local e desequilíbrio químico). Diferentes modelos de reações químicas são considerados para os casos de escoamento multiespécie, apresentando desde o caso ideal (com apenas três espécies químicas e sem reações de dissociação) até modelos de oito espécies químicas (com dezoito reações de dissociação). São feitas análises de erros, obtendo-se a ordem aparente e a estimativa de erro baseada no estimador GCI e, quando possível, também a ordem efetiva e o erro numérico verdadeiro. Apesar de serem problemas de grande interesse prático, não existem muitos trabalhos que envolvam a análise de erros para problemas do tipo hiperbólico, em especial quando são estudados escoamentos reativos. Como resultado principal, foram obtidas soluções de referência, incluindo suas respectivas incertezas numéricas, para escoamentos uni e bidimensionais reativos (ou não) em motores-foguete. Verificou-se que os modelos de seis espécies são os mais adequados à utilização em modelos de escoamento reativo, por apresentarem menor tempo de CPU e resultados equivalentes a modelos químicos mais complexos. Observou-se, outrossim, que não são necessárias malhas muito refinadas, para que a ordem de grandeza da incerteza numérica seja equivalente à incerteza experimental. Desta forma, em aplicações práticas, cujo foco não seja o estudo de erros numéricos e/ou a implementação de novos modelos matemáticos, pode-se utilizar malhas relativamente grosseiras, com bons resultados.

Palavras-chave: Dinâmica dos Fluidos Computacional, Método dos Volumes Finitos, Motores-Foguete, Escoamentos Reativos, Estimativas de Erro Numérico.

ABSTRACT

This work is focused on the determination of numerical uncertainties of one- and two-dimensional (non-) reactive flows simulations in rocket engines, using as propellants the pair liquid oxygen and liquid hydrogen (LOX/LH₂). Five different physical models are studied: two involving one-species flow (with constant properties and with variable properties) and the other three for reactive multi-species flow (frozen, local equilibrium and non-equilibrium flows). Different chemical reaction schemes are considered for the multi-species flow cases, presenting from the ideal case (with only three chemical species and without dissociation reactions) to eight species models (with eighteen dissociation reactions). Error analyses are made, obtaining the apparent order and the numerical uncertainty based on GCI estimator; when it was possible, also the effective order and the true numerical error were calculated. Despite the importance in practical applications, there are only few works where the error analyses are made for hyperbolic problems, especially for reactive flows. Reference solutions, including their respective numerical uncertainties, for one- and two-dimensional (non-) reactive flows in rocket engines were obtained as the main result. It was verified that the six species models were the most adequate for the use on reactive flow models, because of their higher performance on CPU time and the equivalence between their results and the other ones obtained with more complex chemical models. It was also observed that it is not necessary very refined grids to the numerical uncertainties achieve the same magnitude of experimental ones. Based on this, for practical applications, whose focus is not the numerical error study and/or new mathematical models implementation, not so refined grids can be used, with good results.

Keywords: Computational Fluid Dynamics, Finite Volumes Method, Rocket Engines, Reactive Flows, Numerical Error Estimates.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a meu orientador, professor Carlos Henrique Marchi, por sua paciência e orientação nesta tese, bem como por todo o conhecimento por ele me transmitido.

Agradeço, também, a meus familiares e amigos, em especial àqueles do Lena, estando eles fisicamente próximos ou não, mas que me apóiam, colaboram com este trabalho e/ou ajudam-me a enfrentar esta jornada.

Meus sinceros agradecimentos, também, a todos meus professores, pois não seria possível realizar este empreendimento sem os conhecimentos por eles me fornecidos. Gostaria, também, de agradecer à Maristela, por seu empenho na secretaria do curso de pós-graduação e por seu empenho, sempre que algo me foi necessário.

Gostaria de agradecer, também, à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e à Agência Espacial Brasileira (AEB) pelo suporte financeiro, seja na forma de bolsa, seja na forma de equipamentos. E também à Universidade Federal do Paraná (UFPR), através do Departamento de Engenharia Mecânica (DEMEC) e do Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia (PPGMNE), pela disponibilidade de espaço físico e equipamentos e afins.

Por último, mas não menos importante, agradeço aos membros da banca, Dr. José Nivaldo Hinckel, Dr. Antônio Fábio Carvalho da Silva, Dr. Marcos Carvalho Campos e Dr. Humberto Vidal, por todo o tempo dispendido, sugestões e críticas apontadas para este trabalho.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Tipos de tubeiras: (a) cônico, com semi-ângulo de 15°; (b) tipo sino; (c) tipo sino modificado (parabólico) [adaptado de Sutton e Biblarz (2001)].	34
Figura 2.2: Tubeiras do tipo cônico e do tipo sino (modificado) [adaptado de Sutton e Biblarz (2001)].	35
Figura 3.1: Condições de contorno para o escoamento 1D na tubeira.	70
Figura 3.2: Condições de contorno aplicadas à tubeira 2D.	77
Figura 4.1: Parâmetros geométricos do motor-foguete. Fonte: Marchi <i>et al.</i> (2000; 2004).	88
Figura 4.2: Malha unidimensional com 80 volumes de controle (geometria cossenoidal).	88
Figura 4.3: Comportamento do coeficiente de descarga x número de iterações para malhas de: (a) 10 e (b) 1280 volumes de controle.	91
Figura 4.4: Ordens assintótica, aparente e efetiva para o coeficiente de descarga.	94
Figura 4.5: Ordens assintótica, aparente e efetiva para o empuxo dinâmico adimensional.	94
Figura 4.6: Ordens assintótica, aparente e efetiva para a pressão na saída da tubeira.	94
Figura 4.7: Ordens assintótica, aparente e efetiva para a temperatura na saída da tubeira.	95
Figura 4.8: Ordens assintótica, aparente e efetiva para a velocidade na saída da tubeira.	95
Figura 4.9: Ordens assintótica, aparente e efetiva para o número de Mach na saída da tubeira.	95
Figura 4.10: Efetividade para o coeficiente de descarga (C_d).	97
Figura 4.11: Efetividade para o empuxo dinâmico adimensional (F^*).	97
Figura 4.12: Efetividade para a pressão na saída da tubeira (P_{ex}).	98
Figura 4.13: Efetividade para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}).	98
Figura 4.14: Efetividade para a velocidade na saída da tubeira (u_{ex}).	98
Figura 4.15: Efetividade para o número de Mach na saída da tubeira (M_{ex}).	99
Figura 4.16: Comparação entre os logaritmos decimais do erro verdadeiro (E) e das estimativas de erro (U) para o coeficiente de descarga (C_d).	100
Figura 4.17: Comparação entre os logaritmos decimais do erro verdadeiro (E) e das estimativas de erro (U) para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}).	101
Figura 4.18: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para C_d), para uma malha de 80 volumes de controle.	110

Figura 4.19: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para F^*), para uma malha de 80 volumes de controle.....	110
Figura 4.20: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para P_{ex}), para uma malha de 80 volumes de controle.....	111
Figura 4.21: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para T_{ex}), para uma malha de 80 volumes de controle.....	111
Figura 4.22: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para u_{ex}), para uma malha de 80 volumes de controle.....	111
Figura 4.23: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para M_{ex}), para uma malha de 80 volumes de controle.....	112
Figura 4.24: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para C_d), para malha de 80 volumes de controle.....	119
Figura 4.25: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para F^*), para malha de 80 volumes de controle.....	119
Figura 4.26: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para P_{ex}), para malha de 80 volumes de controle.....	120
Figura 4.27: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para T_{ex}), para malha de 80 volumes de controle.....	120
Figura 4.28: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para u_{ex}), para malha de 80 volumes de controle.....	120
Figura 4.29: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para M_{ex}), para malhas de 80 volumes de controle.....	121
Figura 4.30: Comportamento do coeficiente de descarga x número de iterações (malha de 80 volumes).....	123
Figura 5.1: Perfil de uma tubeira utilizada nas simulações 2D [Fonte: Back <i>et al.</i> (1965)].....	133
Figura 5.2: Perfil de uma tubeira parabólica, utilizada nas simulações 2D.....	134
Figura 5.3: Malha empregada na discretização da tubeira parabólica (malha de 20x6 volumes de controle).....	135
Figura 5.4: Distribuição da pressão ao longo da parede do motor-foguete – tubeira de Back <i>et al.</i> (1965), malha de 720x80 volumes de controle.....	138
Figura 5.5: Distribuição da pressão ao longo da parede do motor-foguete (modelos monoespécie) – tubeira de Back <i>et al.</i> (1965), malha de 720x80 volumes de controle.....	145

Figura 5.6: Estimativas de incerteza numérica (modelo químico 4), em módulo, para a temperatura na saída da tubeira parabólica (linha de simetria).....	151
Figura 5.7: Estimativas de incerteza numérica (modelo químico 4), em módulo, para o empuxo no vácuo (tubeira parabólica).....	152
Figura 5.8: Campo de temperaturas no interior da tubeira parabólica (malha de 80x24 volumes de controle, modelo químico 4, escoamento congelado).	154
Figura 5.9: Campo de pressão no interior da tubeira parabólica (malha de 80x24 volumes de controle, modelo químico 4, escoamento congelado).	154
Figura 5.10: Isolinhas para números de Mach no interior da tubeira parabólica (malha de 80x24 volumes de controle, modelo químico 4, escoamento congelado).	155
Figura 5.11: Vetores de velocidade e números de Mach no interior da tubeira parabólica (malha de 80x24 volumes de controle, modelo químico 4, escoamento congelado)....	155
Figura 5.12: Comportamento da ordem aparente para o coeficiente de descarga, o empuxo no vácuo e o impulso específico (modelo químico 4), empregando-se a tubeira parabólica e funções de interpolação: (a) UDS; e (b) CDS.	158
Figura 5.13: Comportamento da ordem aparente para a pressão, a temperatura e a velocidade axial na saída da tubeira (eixo de simetria, modelo químico 4), empregando-se a tubeira parabólica e funções de interpolação: (a) UDS; e (b) CDS.....	159
Figura 5.14: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para C_d), para malha de 80x24 volumes de controle.	162
Figura 5.15: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para F), para malha de 80x24 volumes de controle.....	163
Figura 5.16: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para I_{sp}), para malha de 80x24 volumes de controle.....	163
Figura 5.17: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para P_{ex}), para malha de 80x24 volumes de controle.	163
Figura 5.18: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para T_{ex}), para malha de 80x24 volumes de controle.....	164
Figura 5.19: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para u_{ex}), para malha de 80x24 volumes de controle.....	164
Figura 5.20: Campo de temperaturas ao longo da tubeira parabólica (escoamento em equilíbrio químico local, modelo químico 4, malha de 80x24 volumes).....	165

Figura 5.21: Campo de pressões ao longo da tubeira parabólica (escoamento em equilíbrio químico local, modelo químico 4, malha de 80x24 volumes de controle).....	165
Figura 5.22: Campo de frações mássicas de H ₂ O ao longo da tubeira parabólica (escoamento em equilíbrio químico local, modelo químico 4, malha de 80x24 volumes).....	166
Figura 5.23: Isolinhas de números de Mach ao longo da tubeira parabólica (escoamento em equilíbrio químico local, modelo químico 4, malha de 80x24 volumes).....	166
Figura 5.24: Vetores de velocidade e distribuição de números de Mach ao longo da tubeira parabólica (escoamento em equilíbrio químico local, modelo químico 4, malha de 80x24 volumes de controle).	166
Figura 5.25: Comportamento da ordem aparente para diversas variáveis de interesse (tubeira parabólica, modelo químico 31, função de interpolação UDS).....	169

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1: Modelos químicos adotados nos códigos uni e bidimensionais implementados (para os escoamentos congelado e em equilíbrio químico local).	51
Tabela 3.1: Modelos de reações químicas implementadas no programa Mach1D 5.0, para escoamento em desequilíbrio químico.	65
Tabela 3.2: Valores dos coeficientes para a equação transformada geral.	75
Tabela 4.1: Parâmetros geométricos, parâmetros físicos e microcomputador utilizados nos estudos efetuados.	88
Tabela 4.2: Resultados gerais das simulações realizadas com o modelo de escoamento monoespécie com propriedades constantes.	90
Tabela 4.3: Solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) [solução analítica: 1,0].	90
Tabela 4.4: Solução numérica para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}) [solução analítica: $1,712740923776014 \times 10^3$ K].	91
Tabela 4.5: Ordens práticas da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) [$p_L = 2$].	92
Tabela 4.6: Ordens práticas da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}) [$p_L = 2$].	93
Tabela 4.7: Efetividade para o coeficiente de descarga (C_d).	96
Tabela 4.8: Efetividade para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}).	96
Tabela 4.9: Resultados numéricos e seus erros estimados (com estimador GCI) para as variáveis de interesse.	100
Tabela 4.10: Resultados gerais das simulações realizadas com o modelo de escoamento monoespécie com propriedades variáveis.	102
Tabela 4.11: Ordens práticas da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) [$p_L = 2$] e estimativa U_{GCI} , utilizando $R \approx 461,53$ J/kgK.	102
Tabela 4.12: Ordens práticas da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}) [$p_L = 2$] e estimativa U_{GCI} , utilizando $R \approx 461,53$ J/kgK.	103
Tabela 4.13: Resultados e suas respectivas incertezas numéricas para as variáveis de interesse (malha de 80 volumes).	103
Tabela 4.14: Resultados e suas respectivas incertezas numéricas para as variáveis de interesse (malha de 2560 volumes).	104

Tabela 4.15: Resultados e suas respectivas incertezas numéricas para as variáveis de interesse (malha de 10240 volumes).....	104
Tabela 4.16: Resultados gerais das simulações realizadas com o modelo de escoamento congelado.	105
Tabela 4.17: Resultados de convergência para o escoamento congelado.	107
Tabela 4.18: Composição química para os diversos modelos químicos do escoamento congelado (resultados do código CEA utilizados como referência).....	107
Tabela 4.19: Ordens práticas da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) [p _L : 2] e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo 5).....	108
Tabela 4.20: Ordens práticas da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}) [p _L : 2] e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo 5).	108
Tabela 4.21: Modelos físicos apresentados nas Figuras 4.18 a 4.23.....	109
Tabela 4.22: Resultados gerais das simulações realizadas com o modelo de escoamento em equilíbrio químico local.	113
Tabela 4.23: Resultados gerais de convergência (modelos 0, 1 e 2).....	115
Tabela 4.24: Resultados gerais de convergência (modelos 3, 4, 5, 7, 9 e 10).....	116
Tabela 4.25: Ordem aparente da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) [p _L : 1] e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo 3).....	117
Tabela 4.26: Ordem aparente da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}) [p _L : 1] e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo 3).	118
Tabela 4.27: Modelos físicos apresentados nas Figuras 4.24 a 4.29.....	119
Tabela 4.28: Dados gerais das simulações realizadas com o modelo de desequilíbrio químico.....	122
Tabela 4.29: Dados gerais de convergência (modelos 31 e 32).	124
Tabela 4.30: Dados gerais de convergência (modelos 5, 7 e 10).	124
Tabela 4.31: Ordem aparente da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) [p _L : 1] e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo 31).....	125
Tabela 4.32: Ordem aparente da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}) [p _L : 1] e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo 31).	125
Tabela 4.33: Quadro comparativo de modelos adotados para o coeficiente de descarga, empuxo dinâmico adimensional e pressão na saída da tubeira, incluindo erros numéricos estimados (malhas de 80 volumes).....	126

Tabela 4.34: Quadro comparativo de modelos adotados para a temperatura, a velocidade e o número de Mach (todos na saída da tubeira), incluindo erros numéricos estimados (malha de 80 volumes).....	127
Tabela 4.35: Quadro comparativo de modelos adotados para o coeficiente de descarga, empuxo dinâmico adimensional e pressão na saída da tubeira, incluindo erros numéricos estimados (malhas de 2560 volumes).....	128
Tabela 4.36: Quadro comparativo de modelos adotados para a temperatura, a velocidade e o número de Mach (todos na saída da tubeira), incluindo erros numéricos estimados (malha de 2560 volumes).....	129
Tabela 4.37: Comparação entre tempos de CPU para diversos modelos físicos, empregando-se diferentes malhas.	129
Tabela 5.1: Parâmetros geométricos, físicos e numéricos e microcomputador utilizados nos estudos empregando-se a tubeira de Back <i>et al.</i> (1965).	134
Tabela 5.2: Parâmetros geométricos, físicos e microcomputador utilizados nos estudos empregando-se a geometria parabólica.....	135
Tabela 5.3: Resultados gerais das simulações realizadas para o escoamento 2D monoespécie (ar) com propriedades constantes – tubeira de Back <i>et al.</i> (1965) e tolerância de 10^{-10} para o resíduo.....	138
Tabela 5.4: Resultados gerais das simulações realizadas para o escoamento 2D monoespécie (H ₂ O) com propriedades constantes - tubeira parabólica.....	139
Tabela 5.5: Solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) [solução analítica: $9,998768484976 \times 10^{-1}$] - tubeira parabólica.....	140
Tabela 5.6: Ordens práticas da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) – tubeira parabólica.....	141
Tabela 5.7: Efetividade para o coeficiente de descarga (C_d) – tubeira parabólica.....	141
Tabela 5.8: Ordem aparente da solução numérica para o impulso específico (I_{sp}), e estimativa U_{GCI} (escoamento monoespécie com propriedades constantes) – tubeira parabólica.....	142
Tabela 5.9: Resultados numéricos e seus erros estimados (com estimador GCI) para as variáveis de interesse – tubeira parabólica.....	143
Tabela 5.10: Resultados gerais das simulações com o modelo de escoamento 2D monoespécie (H ₂ O) com propriedades variáveis – tubeira parabólica.....	144

Tabela 5.11: Resultados gerais das simulações realizadas para o escoamento 2D monoespécie (ar) com propriedades variáveis – tubeira de Back <i>et al.</i> (1965) e tolerância de 10^{-10} para o resíduo.....	145
Tabela 5.12: Ordem aparente da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico – tubeira parabólica.....	146
Tabela 5.13: Ordem aparente da solução numérica para o impulso específico no vácuo (I_{sp}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico – tubeira parabólica.	147
Tabela 5.14: Resultados numéricos e seus erros estimados (com estimador GCI) para as variáveis de interesse (escoamento monoespécie com propriedades variáveis) – tubeira parabólica.....	148
Tabela 5.15: Resultados gerais das simulações com o modelo de escoamento congelado 2D empregando-se a geometria parabólica.....	149
Tabela 5.16: Ordem aparente da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo químico 4) – tubeira parabólica.....	150
Tabela 5.17: Ordem aparente da solução numérica para o impulso específico no vácuo (I_{sp}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo químico 4) – tubeira parabólica.....	150
Tabela 5.18: Resultados e respectivas incertezas numéricas para o coeficiente de descarga, o empuxo no vácuo e o impulso específico (no vácuo), para malha de 320x96 volumes – tubeira parabólica.	153
Tabela 5.19: Resultados e respectivas incertezas numéricas para a pressão, a temperatura, a velocidade axial e a fração mássica de H_2O na saída da tubeira (linha de simetria), para malha de 320x96 volumes – tubeira parabólica.....	153
Tabela 5.20: Resultados gerais das simulações com o modelo de escoamento em equilíbrio químico local 2D empregando-se a geometria parabólica.....	156
Tabela 5.21: Ordem aparente da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo químico 4) – tubeira parabólica.....	157
Tabela 5.22: Ordem aparente da solução numérica para o impulso específico no vácuo (I_{sp}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo químico 4) – tubeira parabólica.....	158
Tabela 5.23: Resultados e respectivas incertezas numéricas para o coeficiente de descarga, o empuxo no vácuo e o impulso específico, para malha de 320x96 volumes – tubeira parabólica.	160

Tabela 5.24: Resultados e respectivas incertezas numéricas para a pressão, a temperatura, a velocidade axial e a fração mássica de H ₂ O na saída da tubeira (linha de simetria), para malha de 320x96 volumes – tubeira parabólica.....	161
Tabela 5.25: Modelos físicos apresentados nas Figuras 5.14 a 5.19.....	162
Tabela 5.26: Resultados gerais das simulações com o modelo de escoamento com taxa finita de reação 2D empregando-se a geometria parabólica.	167
Tabela 5.27: Ordem aparente da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (esquema UDS) – tubeira parabólica.	168
Tabela 5.28: Ordem aparente da solução numérica para o impulso específico no vácuo (I_{sp}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (esquema UDS) – tubeira parabólica.....	169
Tabela 5.29: Quadro comparativo de modelos adotados para o escoamento 2D - variáveis de interesse globais, incluindo incerteza numérica (malha de 80x24 volumes) – tubeira parabólica.	170
Tabela 5.30: Quadro comparativo de modelos adotados para o escoamento 2D - variáveis de interesse locais (saída da tubeira, sobre a linha de simetria da mesma), incluindo incerteza numérica (malha de 80x24 volumes) – tubeira parabólica.	171

SUMÁRIO

RESUMO.....	3
ABSTRACT	4
LISTA DE FIGURAS.....	6
LISTA DE TABELAS.....	10
LISTA DE SÍMBOLOS	19
1 INTRODUÇÃO	23
1.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA	23
1.2 MOTIVAÇÃO.....	25
1.3 OBJETIVOS.....	27
1.4 ORGANIZAÇÃO DA TESE	28
1.5 RESUMO DO CAPÍTULO 1	28
2 FOGUETES	30
2.1 GENERALIDADES.....	30
2.2 PANORAMA HISTÓRICO	32
2.2.1. Geometria	33
2.2.2. Modelos unidimensionais	35
2.2.3. Métodos analíticos.....	38
2.2.4. Experimentação	39
2.2.5. Códigos computacionais.....	41
2.3 PARÂMETROS DE INTERESSE.....	45
2.4 REAÇÕES QUÍMICAS	48
2.5 RESUMO DO CAPÍTULO 2.....	59
3 MODELAGEM COMPUTACIONAL E ESTIMATIVA DE ERROS	61
3.1 MODELOS UNIDIMENSIONAIS.....	62
3.1.1. Modelos físicos.....	63
3.1.2. Modelo matemático	66

3.1.3.	Modelo numérico.....	68
3.1.4.	Condições de contorno	69
3.1.5.	Algoritmo do código Mach1D 5.0.....	70
3.2	MODELOS BIDIMENSIONAIS	71
3.2.1.	Modelos físicos.....	72
3.2.2.	Modelo matemático	72
3.2.3.	Modelo numérico.....	74
3.2.4.	Condições de contorno	76
3.2.5.	Algoritmo do código Mach2D 6.0.....	77
3.3	ESTIMATIVA DE ERROS	78
3.3.1.	Generalidades	79
3.3.2.	Estimadores de erro	81
3.4	RESUMO DO CAPÍTULO 3	85
4	RESULTADOS NUMÉRICOS UNIDIMENSIONAIS.....	87
4.1	PARÂMETROS GERAIS	87
4.2	ESCOAMENTO MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES CONSTANTES	89
4.3	ESCOAMENTO MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES VARIÁVEIS	101
4.4	ESCOAMENTO CONGELADO	104
4.5	ESCOAMENTO EM EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL	112
4.6	ESCOAMENTO EM DESEQUILÍBRIO QUÍMICO.....	121
4.7	RESUMO DO CAPÍTULO 4	130
5	RESULTADOS NUMÉRICOS BIDIMENSIONAIS.....	133
5.1	PARÂMETROS GERAIS 2D	133
5.2	ESCOAMENTO 2D MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES CONSTANTES ..	136
5.3	ESCOAMENTO 2D MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES VARIÁVEIS	144
5.4	ESCOAMENTO 2D CONGELADO	148
5.5	ESCOAMENTO 2D EM EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL	155
5.6	ESCOAMENTO 2D EM DESEQUILÍBRIO QUÍMICO.....	167
5.7	RESUMO DO CAPÍTULO 5	172
6	CONCLUSÃO.....	174
6.1	CONSTATAÇÕES GERAIS	174
6.2	CONTRIBUIÇÕES	176

6.3	TRABALHOS FUTUROS	177
7	REFERÊNCIAS	179
	ANEXO A. Coeficientes (a_{ki}) usados para determinação de propriedades termoquímicas das espécies químicas (c_{pi}, h_i e g_i).	183
	APÊNDICE A. Coeficientes do modelo unidimensional.....	184
	ESCOAMENTO MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES CONSTANTES	184
	Equação da conservação da quantidade de movimento linear	184
	Cálculo das velocidades nas faces	186
	Equação da energia térmica	187
	Equação da massa global	188
	Cálculo da massa específica nodal e nas faces	190
	Equações de correção com P'	191
	ESCOAMENTO MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES VARIÁVEIS	192
	Equação da quantidade de movimento linear	192
	Cálculo da velocidade nas faces	192
	Equação da energia térmica	193
	Equação da massa global	193
	Cálculo da massa específica nodal e nas faces	193
	Equações de correção com P'	193
	ESCOAMENTO CONGELADO	193
	ESCOAMENTO EM EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL	194
	ESCOAMENTO EM DESEQUILÍBRIO QUÍMICO	194
	Equação da energia térmica	194
	Equação da massa para cada espécie	195
	APÊNDICE B. Coeficientes do modelo bidimensional.	196
	COEFICIENTES GERAIS.....	196
	CONDIÇÕES DE CONTORNO	202
	Contorno sul (linha de simetria)	203
	Contorno norte (parede):	203
	Contorno leste (saída):	204
	Contorno oeste (entrada):	205

APÊNDICE C. Outros resultados para escoamento bidimensional.	206
ESCOAMENTO MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES CONSTANTES	206
ESCOAMENTO MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES VARIÁVEIS	208
ESCOAMENTO CONGELADO	210
ESCOAMENTO EM EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL	215
ESCOAMENTO EM DESEQUILÍBRIO QUÍMICO	220

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras romanas

A	símbolo da espécie química
a_{ki}	coeficientes para estimativa de propriedades termodinâmicas para a espécie química i
C^*	velocidade característica [m/s]
C_d	coeficiente de descarga [adimensional]
c_p	calor específico a pressão constante [J/kg·K]
$(c_p)_f$	calor específico congelado a pressão constante [J/kg·K]
CDS	“ <i>Central Differencing Scheme</i> ”
D	diâmetro [m]
E	erro numérico verdadeiro
ER	razão de expansão [adimensional]
F	empuxo dinâmico [N]
F^*	empuxo dinâmico adimensional [adimensional]
F'	força viscosa cisalhante [N]
g_o	aceleração da gravidade (ao nível do mar equivale a 9,8066 m/s ²)
h	métrica da malha [m]
h_i	entalpia da espécie química i [J/mol ou J/kg]
i	número de iterações
I_s	impulso específico (em unidades SI) [N·s/kg, ou simplesmente, m/s]
I_{sp}	impulso específico (em unidades usuais) [s]
J	acobiano
k	condutividade térmica [W/m·K]
K	constante de equilíbrio baseada nas pressões parciais
K_C	constante de equilíbrio baseada nas concentrações molares
L	número total de reações químicas
LH_2	hidrogênio molecular líquido
LOX	oxigênio molecular líquido
\dot{m}	vazão mássica [kg/s]
M	número de Mach [adimensional]

n	número de moles
n_0	número de moles na reação sem dissociação
N	número total de espécies químicas
OF	razão de mistura [adimensional]
p	pressão parcial [Pa]
P	pressão total [Pa]
P'	correção de pressão [Pa]
p_E	ordem efetiva do erro
p_L	ordem assintótica do erro
p_U	ordem aparente do erro
r	raio [m]
r_c	raio de curvatura da garganta [m]
R	constante do gás (ou mistura de gases) em consideração [J/kg·K]
Re	número de Reynolds [adimensional]
\bar{R}	constante universal dos gases (8,314510 J/mol·K)
S	área da seção transversal de escoamento [m ²]
T	temperatura [K]
t	tempo [s]
t_q	tempo de queima [s]
u	velocidade axial [m/s]
U	incerteza numérica
UDS	“Upstream Differencing Scheme”
X_i	fração molar da espécie química i
Y_i	fração mássica da espécie química i

Letras gregas

β	fator de mistura entre esquemas de interpolação
ΔG_j	variação da energia livre de Gibbs [J]
ε_j	grau de reação de dissociação j
γ	razão entre calores específicos [adimensional]
ρ	massa específica (densidade) [kg/m ³]
ν'_i	coeficiente estequiométrico da espécie i nos reagentes [moles]

ν_i''	coeficiente estequiométrico da espécie i nos produtos [moles]
ϕ	solução numérica da variável de interesse
Φ	solução analítica exata da variável de interesse
θ	efetividade
$\dot{\omega}_i$	taxa de geração de massa para a espécie química i [$\text{kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$]

Subíndices

0	propriedades de estagnação
1	malha fina
2	malha grossa
3	malha supergrossa
aw	parede adiabática
b	reação inversa
e	propriedade na face direita (face leste)
E	propriedade no volume à direita (volume leste)
ex	propriedades na saída da tubeira
f	reação direta
g	propriedade dos gases de combustão
GCI	estimador GCI (“ <i>Grid Convergence Index</i> ”)
i	espécie química
j	reação química
n	propriedade na face superior (face norte)
N	propriedade no volume superior (volume norte)
o	oxidante
P	propriedade no volume atual (volume P)
Ri	estimador de Richardson
s	propriedade na face inferior (face sul)
S	propriedade no volume inferior (volume sul)
w	propriedade na face esquerda (face oeste)
$wall$	propriedade na parede
W	propriedade no volume à esquerda (volume oeste)

Superíndices

- * indica propriedade na seção crítica (garganta)
- i* indica iteração

1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo introdutório é apresentado o problema tratado neste trabalho, que se constitui na verificação de erros numéricos para escoamentos reativos em tubeiras. São apresentados, também, a motivação, os objetivos e o delineamento deste documento, bem como um resumo do capítulo.

1.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

A propulsão, em um sentido amplo, é o ato de modificar a condição de movimento de um corpo. Mecanismos de propulsão, outrossim, fornecem uma força capaz de mover corpos inicialmente em repouso, mudar uma velocidade outrora constante, ou ainda, prover forças contrárias ao movimento do corpo, desacelerando-o (SUTTON e BIBLARZ, 2001). Três elementos se fazem essenciais em um mecanismo de propulsão: uma fonte energética, um dispositivo conversor de energia e uma massa de ejeção (normalmente representada por um gás ou por uma mistura de gases).

Foguetes são mecanismos ou dispositivos que convertem a energia armazenada sob uma forma conveniente, denominada propelente (correspondente em geral à energia química) em energia cinética, passando por uma fase intermediária de energia térmica. Dentre as diversas fontes energéticas utilizadas na propulsão de foguetes, destacam-se três: propulsão química, propulsão nuclear e propulsão solar.

Dentre as três fontes supracitadas, a de mais longa data conhecida e utilizada é a química (SUTTON e BIBLARZ, 2001). Neste sistema, a energia proveniente da reação de combustão dos propelentes químicos permite o aquecimento dos gases resultantes a temperaturas elevadas (2750 a 4400 K). Esses gases superaquecidos são, então, expandidos através de um bocal e acelerados a altas velocidades, originando a quantidade de movimento necessária para impulsionar o foguete.

Os propelentes podem apresentar composição química diversa e encontrar-se em diferentes estados físicos. Desta distinção, surgem diferentes concepções e projetos, cada qual

adequada a uma finalidade. Uma classificação normalmente adotada para foguetes a propulsão química é a de propelentes sólidos e líquidos.

Os primeiros foguetes a propelente sólido foram criados pelos chineses há mais de 700 anos. Foi, contudo, a partir do século XIX que a área de foguetes ganhou impulso, com os trabalhos de Konstantin Eduardovich Tsiolkowski, o primeiro a observar que a conquista espacial só seria possível através do desenvolvimento de foguetes. Dispositivos de propelentes sólidos apresentam uma complexidade de projeto mediana, além de elevados valores de empuxo e impulso específico; não são passíveis, contudo, de ignições múltiplas, o que os torna adequados para os estágios iniciais de foguetes (BROWN, 1996). Outrossim, por serem os combustíveis sólidos passíveis de estocagem, são adequados para finalidades militares.

Os foguetes a propelentes líquidos, por sua vez, apresentam maior complexidade de projeto e, dessa forma, também maiores custos. Possuem, porém, a capacidade de ignições múltiplas, importante para correções de órbita em veículos espaciais e satélites. Além disso, sua performance é elevada quando comparada a outros sistemas de propulsão química (BROWN, 1996). Isto os torna atraentes em diversos projetos, incluindo o propulsor principal presente nos ônibus espaciais e diferentes estágios de foguetes, como os das séries “*Jupiter*”, “*Saturn*” e “*Ariane*” (HUZEL e HUANG, 1992).

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). Devido ao elevado impulso específico, bem como ao fato de os gases de exaustão serem atóxicos e o hidrogênio apresentar boas propriedades como fluido refrigerante, tal par propelente é um dos mais utilizados na propulsão líquida.

Diferentes modelos físicos e químicos podem ser utilizados para a modelagem do escoamento reativo dos gases de combustão ao longo da tubeira (ou motor-foguete), provenientes da reação entre hidrogênio e oxigênio. A determinação de soluções numéricas uni e bidimensionais para tais modelos físicos e químicos, bem como sua verificação, é o escopo deste trabalho.

A verificação numérica se faz importante uma vez que a simples obtenção de uma solução numérica é insuficiente para garantir sua confiabilidade: deve-se, para tanto, estimar o erro numérico associado a tal solução, que é chamado de incerteza por Metha (1996). Em geral, a obtenção dessa incerteza é feita através de métodos baseados na extrapolação de Richardson (ROACHE, 1994), utilizando-se os estimadores de erro. Para este trabalho, são

utilizados os estimadores de Richardson e GCI, “*Grid Convergence Index*” (ROACHE, 1994), aplicando-os às variáveis de interesse (locais, como a velocidade e a temperatura na saída da tubeira, ou globais, como o coeficiente de descarga).

1.2 MOTIVAÇÃO

Os sistemas de propulsão líquida são os principais sistemas de propulsão espaciais, permitindo a conquista do espaço desde a década de 1960. Suas principais vantagens são o alto desempenho e o fato de que eles são bastante controláveis em termos de modulação de empuxo (HABIBALLAH *et al.*, 1998; SUTTON e BIBLARZ, 2001). Dentre os diversos foguetes equipados com propulsão líquida, citam-se os foguetes estadunidenses “*Redstone*”, “*Jupiter*”, “*Thor*”, “*Delta*”, “*Atlas*”, “*Saturn*” e o “SSME” – motor principal dos Ônibus Espaciais (HUZEL e HUANG, 1992). Não devem ser esquecidos, porém, os estágios superiores de foguetes desenvolvidos no Japão, na Rússia, na Europa e na China (SUTTON e BIBLARZ, 2001).

De toda a energia gerada no processo de combustão dos propelentes (e escoamento reativo da mistura de gases resultante), apenas de 0,5 a 5% do total são transferidos às paredes da tubeira (SUTTON e BIBLARZ, 2001). Tal quantidade de energia, contudo, é suficiente para aquecer sua estrutura, possibilitando a ocorrência de falhas. Assim, do ponto de vista de projeto, a previsão das características da transferência de calor em uma câmara-foguete com refrigeração regenerativa é o aspecto mais importante e o mais desafiador do trabalho, para um foguete de alta performance (FRÖHLICH *et al.*, 1993). Isto, pois, uma subestimativa das temperaturas alcançadas nas paredes da estrutura pode diminuir significativamente a vida útil da câmara e da tubeira. A modelagem dos fenômenos ocorrendo no interior da câmara de combustão, contudo, não alcançou um nível satisfatório capaz de assegurar resultados quantitativos confiáveis (SCHLEY *et al.*, 1996). Além disso, existe uma carência em dados experimentais, em especial quanto aos parâmetros utilizados, para que sejam realizadas comparações com resultados existentes na literatura, sejam eles experimentais ou numéricos (MARCHI *et al.*, 2004).

Desta forma, para o projeto de um motor-foguete, deve-se primeiramente estudar o escoamento reativo da mistura de gases de combustão. Neste caso, apesar de modelos bi e tridimensionais serem comumente utilizados, os modelos unidimensionais ainda são

empregados no projeto de tubeias, sendo corrigidas por coeficientes empíricos (FRÖHLICH *et al.*, 1993; SUTTON e BIBLARZ, 2001). Deste modo, não apenas o estudo de modelos bi ou tridimensionais, mas também dos unidimensionais ainda se mostra válido.

Para qualquer que seja o modelo adotado (uni, bi ou tridimensional), deve-se, no entanto, buscar a confiabilidade nos resultados numéricos, obtendo-se, então, a certeza de que tais resultados representam a realidade. Como ferramentas para adquirir tal confiabilidade, empregam-se a verificação e a validação (ROY, 2005).

Como validação entende-se o processo de determinar o grau com que um determinado modelo é uma representação acurada do fenômeno físico real (METHA, 1996; ROACHE, 1998; AIAA, 1998). Por outro lado, a verificação consiste na quantificação do erro numérico (METHA, 1996; ROACHE, 1998; AIAA, 1998; FORTUNA, 2000), erro este obtido da diferença entre a solução analítica exata e sua solução numérica (FERZIGER e PERIĆ, 2001). Essa quantificação é obtida através da utilização dos estimadores de erro, que são divididos em duas categorias: métodos “*a priori*” e “*a posteriori*” (SZABÓ e BABUSKA, 1991). A estimativa de erro “*a priori*” visa a obtenção da ordem do erro de discretização, enquanto a estimativa “*a posteriori*” é utilizada efetivamente para avaliar a magnitude desse erro.

Observa-se, contudo, que 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.

A prática da análise de erros para escoamentos em regime supersônico, no entanto, é ainda pouco difundida: poucos são os trabalhos que se preocupam em apresentar os resultados numéricos acrescidos de suas respectivas estimativas de erros. Mesmo trabalhos recentes, como o de Wang (2006) – em que efeitos turbulentos e reativos (no escoamento), além de efeitos radiativos (na transferência de calor entre os gases de combustão e a tubeira), para modelos bi e tridimensionais, são estudados – não apresentam estimativas de erros associadas aos resultados obtidos.

Diante deste quadro e do desejo da Agência Espacial Brasileira em capacitar o país na área de propulsão líquida, expresso no Programa Nacional de Atividades Espaciais (PNAE) 1998-2007 e reiterado no 1º Simpósio Brasileiro sobre Propulsão Líquida, observa-se que a propulsão líquida é um campo ainda bastante amplo para estudos.

1.3 OBJETIVOS

Este trabalho tem como objetivo principal solucionar numericamente o escoamento reativo ou não em tubeiras, apresentando, também, as estimativas de erros numéricos “*a posteriori*” associadas a tais soluções. Para tanto, são empregadas funções de interpolação de primeira ordem, UDS-1 (“*Upstream Differencing Scheme*”, referenciado neste trabalho apenas por UDS), e de segunda ordem, CDS (“*Central Differencing Scheme*”), com correção adiada para os termos advectivos e CDS puro para os termos difusivos e de pressão (TANNEHILL *et al.*, 1997), referenciado apenas como CDS com correção adiada.

Além das funções de interpolação, diferentes modelos físicos e químicos também são empregados. Cinco modelos físicos distintos são estudados: dois modelos monoespécie (com propriedades constantes e com propriedades variáveis) e três modelos multiespécie para mistura de gases reativos (escoamento congelado, escoamento em equilíbrio químico local e escoamento em desequilíbrio químico). Relacionados aos modelos físicos de escoamento congelado e em equilíbrio químico local, nove modelos químicos diversos são estudados (com número de espécies químicas variando entre três e oito e com total de reações de dissociação entre nenhum e dezoito). No caso do escoamento com taxa finita de reação (desequilíbrio químico), somente modelos com seis e com oito espécies foram considerados, perfazendo um número total de seis. Mesmo sendo o enfoque deste trabalho a verificação numérica, deve-se notar que poucos trabalhos fornecem resultados para escoamentos em desequilíbrio químico, de modo que esta tese procura, outrossim, suprir tal necessidade.

Ressalta-se, ainda, que na formulação dos modelos numéricos foi empregada uma formulação adequada a qualquer regime de velocidades (MARCHI e MALISKA, 1994), de modo que o campo de velocidades é obtido para todo o escoamento (e não somente para a região supersônica). Observa-se, também, que a equação da energia é baseada na temperatura e não na entalpia, como comumente é encontrado em outros trabalhos, como em LAROCCA (2000). Nota-se, outrossim, que foi utilizado o método de volumes finitos, empregando-se um arranjo co-localizado de variáveis.

Para todos os estudos, a estimativa de erro numérica “*a posteriori*” é obtida empregando-se os estimadores de erro de Richardson e/ou o estimador GCI, “*Grid Convergence Index*” (ROACHE, 1994). Para tanto, para cada modelo físico e/ou químico estudado, ao menos três diferentes malhas tiveram que ser consideradas. Conforme já comentado, poucos trabalhos apresentam estimativas de erros para equações do tipo

hiperbólicas, não sendo encontrado nenhuma contribuição na literatura em que tais estimativas fossem realizadas para escoamentos supersônicos reativos.

1.4 ORGANIZAÇÃO DA TESE

Este trabalho é constituído por seis capítulos, cujo conteúdo é brevemente descrito na seqüência:

- O Capítulo 1 apresentou brevemente a definição do problema, a motivação pela escolha do tema e os objetivos principais deste trabalho.
- No Capítulo 2 são apresentadas generalidades sobre foguetes, um breve panorama histórico do estudo e projeto de motores-foguete (incluindo sua geometria, modelos unidimensionais, testes estáticos e códigos computacionais), bem como as metodologias empregadas para a obtenção da composição química nos casos de equilíbrio e de desequilíbrio químico.
- No Capítulo 3 são abordados aspectos fundamentais da dinâmica de fluidos computacional aplicados neste trabalho. São expostos os modelos físico, matemático e numérico dos modelos uni e bidimensionais estudados, assim como os algoritmos implementados nos códigos Mach1D e Mach2D, respectivamente. É apresentada, também, a teoria sobre as estimativas de erros numéricos empregadas neste trabalho.
- No Capítulo 4 são expostos os resultados numéricos para o escoamento unidimensional, bem como as respectivas estimativas de erros.
- O Capítulo 5 é destinado à apresentação da solução numérica do escoamento reativo bidimensional axissimétrico, juntamente com as respectivas estimativas de erros numéricos.
- As conclusões gerais deste trabalho são apresentadas no Capítulo 6, bem como sugestões para trabalhos futuros.

1.5 RESUMO DO CAPÍTULO 1

Neste capítulo foi apresentado brevemente o problema abordado neste trabalho. O estudo de escoamentos reativos em tubeiras, aliado à estimativa de erros numéricos associado

aos resultados obtidos é o objetivo principal deste documento. De um modo geral, variados estudos tem sido realizados na literatura tendo-se o escoamento reativo em motor-foguete como foco; nota-se, porém, que não se alcançou ainda um nível satisfatório capaz de assegurar resultados quantitativos confiáveis (SCHLEY *et al.*, 1996), nem existem dados (experimentais e/ou numéricos) suficientes para comparações com modelos computacionais (MARCHI *et al.*, 2004). Observa-se, ainda, que poucos trabalhos se preocupam em determinar os erros numéricos associados aos resultados obtidos, em especial para escoamentos supersônicos.

2 FOGUETES

O crescente interesse dos países pelo desenvolvimento e produção de foguetes pode ser observado através do aumento no número de nações detentoras de projetos na área aeroespacial: de um grupo restrito de três em 1945, somam-se agora ao menos 35 países com ambições espaciais. Desde 1957 (ano em que foi lançado, pelos soviéticos, o primeiro satélite em órbita terrestre), um número superior a 4000 lançamentos de foguetes foi realizado, obtendo-se sucesso na grande maioria dos casos (SUTTON e BIBLARZ, 2001). Apesar de cada um desses lançamentos apresentar um objetivo específico, seja militar (como satélites de reconhecimento), não-militar (como satélites climáticos), de exploração espacial (missões planetárias) ou comercial (satélites de comunicação), os princípios básicos de funcionamento dos foguetes são os mesmos, sendo abordados brevemente neste capítulo.

2.1 GENERALIDADES

Foguetes e mísseis apresentam características de projeto bastante similares, diferindo, apenas, com relação à carga útil por eles transportada. Enquanto foguetes carregam, em geral, satélites e experimentos científicos, os mísseis apresentam características unicamente bélicas, transportando como carga útil artefatos explosivos.

Um foguete pode ser definido como um veículo que impulsiona a si mesmo para frente (ou para o alto) através da produção de empuxo. Diferentemente de outros veículos, o sistema de propulsão de um foguete utiliza somente o propelente nele contido, sendo possível sua operação em ambientes de vácuo (NASA, 2007a).

Sistemas de propulsão de foguetes podem ser classificados de acordo com diversos parâmetros, entre os quais se citam: a fonte energética, a função primordial, o tipo de veículo, o tamanho, o propelente, a construção ou o número de unidades propulsoras utilizadas em um dado veículo (SUTTON e BIBLARZ, 2001). Utilizando-se como critério de classificação a fonte energética, os foguetes podem ser divididos nas seguintes classes: propulsão química, propulsão nuclear, propulsão elétrica, além de novos conceitos de propulsão (como a

utilização direta da radiação solar para aquecer um fluido de trabalho ou a utilização de refletores de fótons solares).

No caso da propulsão nuclear, três conceitos básicos são possíveis: o primeiro baseado em reações de fissão nuclear, o segundo corresponde a uma fonte radiativa por decaimento de isótopos, e o terceiro trata da fusão nuclear. De um modo geral, a energia térmica obtida da reação nuclear é transmitida a um fluido de trabalho (como o hidrogênio), que é mantido, em geral, em separado do combustível nuclear, sendo tal fluido o responsável pelo fornecimento do empuxo ao veículo. Os riscos de um acidente com a conseqüente contaminação de extensas áreas com resíduos nucleares adiaram os testes com protótipos, de modo que nenhum foguete a propulsão nuclear se encontra completamente desenvolvido. Ressalta-se, porém, que durante as décadas de 1960 e 1970, a NASA conduziu estudos sobre a viabilidade da utilização da propulsão nuclear, realizando alguns experimentos com protótipos, através do projeto NERVA (*“Nuclear Engine for Rocket Vehicle Application”*), desativado em 1973 (NASA, 2007b). Observa-se, outrossim, um crescente interesse no desenvolvimento desta forma de propulsão, em especial para viagens planetárias, como uma possível viagem a Marte (SUTTON e BIBLARZ, 2001; NASA, 2007c).

Na propulsão elétrica, uma fonte de energia elétrica é utilizada para aquecer e/ou ejetar diretamente um propelente, sendo utilizada uma fonte energética independente do propelente propriamente dito. Tal tipo de propulsão é caracterizado pelo baixo empuxo (tipicamente entre 0,005 e 1 N), de modo que, para que o veículo atinja a velocidade adequada, o propulsor deve funcionar ininterruptamente por semanas ou meses. Dentre as possíveis aplicações para este tipo de propulsão, citam-se os controladores de atitude de satélites e missões interplanetárias.

A propulsão química pode ser subdividida em duas grandes categorias, dependendo do estado físico dos propelentes: sólida e líquida. A propulsão química a propelente sólido se destaca por apresentar projeto mais simples, com facilidades de operação e capacidade de estocagem por períodos que variam de 5 a 25 anos. Como desvantagens, citam-se o grande perigo de ignição e/ou explosão, a necessidade de sistema de ignição e a impossibilidade de serem testados anteriormente ao uso.

Os foguetes a propulsão líquida possuem a seu favor um maior impulso específico, a possibilidade de ignições múltiplas e de modificação nas condições de operação durante manobras (como forma de prevenir possíveis falhas). Tais foguetes, no entanto, apresentam uma maior complexidade de projeto, dificuldades na estocagem de propelentes (em especial

os criogênicos) e necessidade de mecanismos especiais no caso de ignição em ambiente de gravidade zero.

Apesar das diversas modalidades de fontes energéticas atualmente disponíveis para os sistemas de propulsão, a grande maioria dos projetos de foguetes é baseada na propulsão química (SUTTON e BIBLARZ, 2001). Em diversos veículos espaciais, como o caso do Ônibus Espacial, ambos os sistemas de propulsão química (sólida e líquida) são utilizados concomitantemente. Destaque, contudo, é dado à propulsão líquida, que permitiu a conquista do espaço nas últimas décadas (HABIBALLAH *et al.*, 1998). E dentre os diversos pares propelentes líquidos, sobressai-se o par oxigênio/hidrogênio que, devido ao seu elevado impulso específico, é utilizado para aumentar a performance de foguetes-lançadores. Tal par propelente provavelmente, continuará a ser o preferido durante as próximas décadas (HAIDN e HABIBALLAH, 2003), embora seja crescente a utilização de motores-foguete que utilizam outros pares propelentes, como o par querosene-oxigênio.

2.2 PANORAMA HISTÓRICO

Por muito tempo, o desenvolvimento dos foguetes se confundiu ao desenvolvimento bélico. Povos do Extremo Oriente (chineses e mongóis) e Oriente Médio (árabes) utilizavam precursores dos atuais foguetes, com fins militares, ainda nos idos do século XII (NASA, 2007a). Em 1792, durante a batalha de Seringapatam, as forças indianas utilizaram mísseis contra as tropas britânicas com tal eficiência que o soldado William Congreve projetou uma versão bastante melhorada para uso pelas forças britânicas (BROWN, 1996).

Em 1903, o professor de matemática russo Konstantin Eduardovich Tsiolkowski (ou Ziolkowsky) publicou um artigo descrevendo em detalhes como um vôo espacial poderia ser efetuado através de foguetes. Cabe a ele a descrição dos foguetes multiestágios e a prova matemática de que para a exploração espacial haveria necessidade de tais foguetes. Tsiolkowski, além disso, advogou o par oxigênio líquido (LOX) – hidrogênio líquido (LH2) como par propelente (BROWN, 1996).

Nos Estados Unidos, o professor Dr. Robert Hutchings Goddard foi pioneiro no projeto, construção e vôo de um foguete a propelente líquido, feito que necessitou de mais de 200 patentes. Seu foguete voou em 26 de março de 1926, durante 2,5 s, atingindo uma altitude de 12,5 m (41 ft), e atingiu uma velocidade de 101,4 km/h (63 mph) (BROWN, 1996).

Era, contudo, na Rússia e na Alemanha onde o entusiasmo com a Astronáutica se mostrava mais vigoroso. Em Munique, no ano de 1923, o Dr. Hermann Oberth publicou seu livro “*Die Rakete zu den Planetenräumen*”, que despertou o interesse para a formação de diversos grupos de estudos sobre foguetes ao redor do mundo (GLENN LEARNING TECHNOLOGIES PROJECT, 2006). Um desses grupos, chamado “*Verein für Raumschiffahrt*”, foi o responsável pelo projeto do míssil V-2, disparados contra Londres durante a Segunda Guerra Mundial. Dentre os participantes desse grupo, destaca-se o cientista Wernher von Braun, cuja equipe, após a Segunda Guerra Mundial, foi responsável por um impulso no desenvolvimento no campo da propulsão nos Estados Unidos.

A partir de então, diversos são os trabalhos existentes na literatura que abordam aspectos ligados a estudos teóricos, experimentais e numéricos na área de Astronáutica (mais especificamente no projeto e desenvolvimento de foguetes), abordando linhas como escoamento reativo de gases de combustão, injetores de propelentes, geometria ótima para tubeiras e sistemas de refrigeração.

2.2.1. Geometria

Inicialmente, a geometria adotada para os bocais convergentes-divergentes, utilizados como tubeiras, apresentavam quase que exclusivamente a forma cônica (Figura 2.1a). Dentre as vantagens dessa geometria pode-se citar a facilidade de manufatura e a flexibilidade na conversão de um projeto existente em um novo projeto, com maior ou menor razão de expansão. Por causa de seus bons resultados em relação ao peso, comprimento e performance, o bocal de 15° de semi-ângulo divergente tornou-se, praticamente, uma geometria padrão por um longo período de tempo (HUZEL e HUANG, 1992). Tal geometria ainda hoje é utilizada, sobretudo em tubeiras de pequena dimensão (SUTTON e BIBLARZ, 2001).

Na busca por um maior desempenho e menor comprimento foi desenvolvida a tubeira com perfil em forma de sino (Figura 2.1b). Ela emprega uma rápida expansão na seção inicial do divergente, seguida por uma gradual redução do ângulo interno, de modo que na saída da tubeira o semi-ângulo do divergente é pequeno, normalmente menor que 10° (HUZEL e HUANG, 1992; SUTTON e BIBLARZ, 2001). A obtenção de tal perfil foi apresentada originalmente por Rao (1958, 1961), utilizando o método das características aplicado a pequenas tubeiras. Para tanto, assume-se um escoamento isentrópico invíscido, de gás ideal, ao longo da tubeira. Como condições governantes nas imediações da garganta, são

considerados o comprimento da tubeira, a pressão ambiente e as condições do escoamento. Deve-se, então, solucionar o problema variacional associado a tais condições, de modo a maximizar o empuxo.

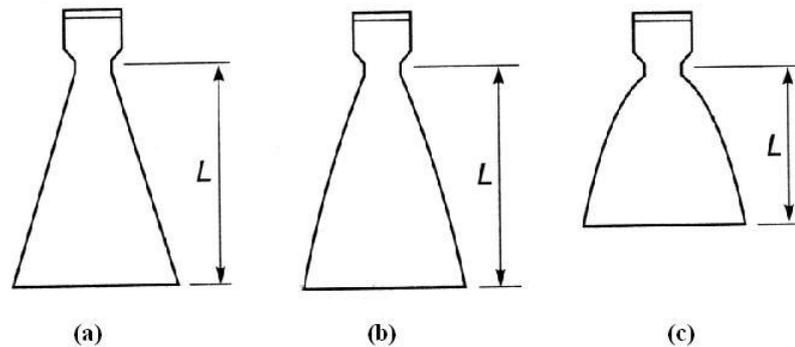


Figura 2.1: Tipos de tubeiras: (a) cônico, com semi-ângulo de 15°; (b) tipo sino; (c) tipo sino modificado (parabólico) [adaptado de Sutton e Biblarz (2001)].

O perfil sino é provavelmente o mais utilizado para tubeiras atualmente (SUTTON e BIBLARZ, 2001). Como na obtenção de tal perfil, porém, são desconsiderados os efeitos viscosos do escoamento, para pequenas tubeiras (nas quais os efeitos de camada limite tornam-se importantes) a comparação entre os resultados dos perfis do tipo sino e cônico apresentava ambigüidades. Isto levou a Arrington *et al.* (1996) a realizar experimentos com pequenas tubeiras, de 110 N de empuxo, comparando os resultados das tubeiras de perfil sino e cônico. Os testes foram realizados em uma câmara cuja pressão simulava a da atmosfera a uma altitude de 36,6 km. As tubeiras foram fabricadas em cobre, com sistema de refrigeração regenerativa (com água como refrigerante), sendo utilizados como propelentes hidrogênio e oxigênio. Um filme líquido de hidrogênio também era utilizado para auxiliar na refrigeração do motor-foguete. Como resultado experimental, observou-se que a velocidade característica em ambas as tubeiras era idêntica – caracterizando igual desempenho dos injetores e da câmara de combustão para ambas as geometrias. Os resultados obtidos para o impulso específico e do coeficiente de empuxo, no entanto, indicaram que o perfil sino, otimizado através da técnica de Rao (1958, 1961), apresenta um melhor desempenho que o perfil cônico.

Observa-se, contudo, que em diversos casos prefere-se utilizar uma tubeira do tipo sino adaptada (Figura 2.1c), com um comprimento menor que àquele esperado para o perfil sino tradicional – como nos trabalhos de Kacynski *et al.* (1987), Smith *et al.* (1987) e Pavli *et al.* (1987). Neste caso, existe alguma perda de desempenho devido ao fato de o escoamento,

na saída da tubeira, apresentar um componente de velocidade não perfeitamente alinhado com o eixo axial da tubeira. Essa perda, contudo, é compensada pelo fato de o peso total do veículo ser reduzido através da diminuição do comprimento total do motor-foguete. A Figura 2.2 apresenta um esquema de dois perfis do tipo sino modificados (um correspondente a 60% e o outro, a 80%, do tamanho do tipo sino original, conhecido como perfil parabólico), bem como o perfil cônico.

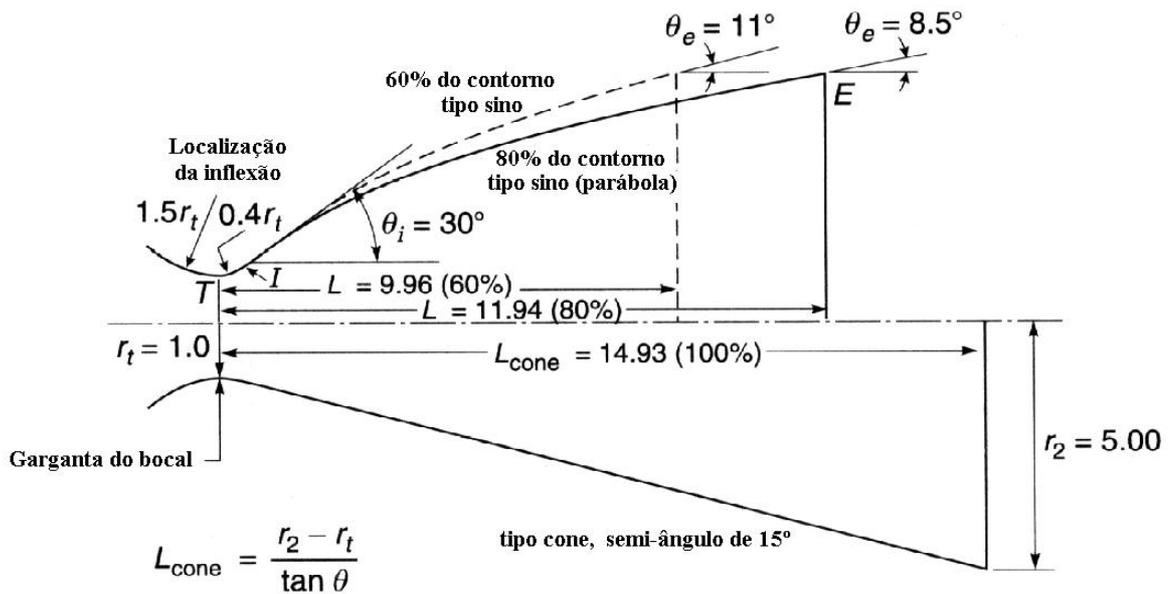


Figura 2.2: Tubeiras do tipo cônico e do tipo sino (modificado) [adaptado de Sutton e Biblarz (2001)].

Dente os perfis do tipo sino modificado, o mais empregado é aquele cujo comprimento total é de 80% do comprimento do perfil sino tradicional. Tal perfil é conhecido como “perfil parabólico”, pois o perfil divergente da tubeira, ao invés de ser obtido através do método das características, é aproximado através de uma função do tipo parabólica.

2.2.2. Modelos unidimensionais

Embora modelos bi e tridimensionais sejam utilizados no estudo do escoamento reativo em motores-foguete, como é feito por Wang (2006), ainda hoje é aceitável a prática de se utilizar parâmetros de tubeira ideal, modificadas apropriadamente por correções posteriores

(SUTTON e BIBLARZ, 2001). Uma tubeira ideal é aquela em que as seguintes hipóteses são válidas:

- A composição dos gases de combustão é homogênea e invariante ao longo do escoamento.
- Os gases de combustão seguem a lei dos gases perfeitos (ideais).
- Não existe atrito nas paredes da tubeira e, portanto, não há camada limite.
- Não ocorre transferência de calor através das paredes da tubeira.
- O escoamento é permanente e constante.
- Todos os gases deixam a tubeira axialmente.
- A velocidade dos gases, a pressão e a densidade são uniformes em qualquer seção transversal do eixo da tubeira.
- O equilíbrio químico é alcançado no interior da câmara de combustão e não se modifica ao longo da tubeira (escoamento congelado).
- Todas as espécies químicas em escoamento são gasosas.
- As forças de corpo atuantes sobre o escoamento são desprezíveis.

Utilizando-se as hipóteses, têm-se as condições de escoamento ideal, ou seja, um escoamento isentrópico unidimensional, que apresenta as seguintes relações para as propriedades de estagnação:

$$\frac{P_0}{P} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{\gamma/(\gamma-1)}, \quad (2.1)$$

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2, \quad (2.2)$$

$$\frac{\rho_0}{\rho} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{1/(\gamma-1)}, \quad (2.3)$$

sendo que o índice 0 representa a propriedade de estagnação; P corresponde à pressão [Pa]; ρ , à massa específica [kg/m^3]; T , à temperatura do gás [K]; γ , à razão entre os calores específicos a pressão e a volume constantes; e M é o número de Mach, definido através da seguinte expressão:

$$M = \frac{u}{c}, \quad (2.4)$$

em que u é a velocidade de escoamento do fluido [m/s] e c é a velocidade local do som [m/s].

A determinação do número de Mach local pode ser feita desde que seja conhecida a geometria da tubeira, que se constitui em um bocal do tipo convergente-divergente. A região de área mínima em uma tubeira é a garganta: a essa área convencionou-se chamar de área crítica. A partir da equação de conservação da massa, pode-se chegar à seguinte expressão (EMANUEL, 1986; KUNDU, 1990):

$$\frac{S}{S^*} = \frac{1}{M} \left[\frac{2}{\gamma + 1} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right) \right]^{(\gamma + 1) / [2(\gamma - 1)]}, \quad (2.5)$$

sendo S^* a área crítica [m²]. Desta forma, conhecendo-se a geometria da tubeira, pode-se obter o número de Mach local resolvendo-se a Eq. (2.5) e obter as propriedades de estado do fluido em escoamento através das Eqs. (2.1), (2.2) e (2.3).

Embora se trate de um modelo simplificado, o escoamento invíscido unidimensional é uma ferramenta importante na validação de códigos computacionais, uma vez que se torna possível avaliar o erro numérico verdadeiro cometido a partir da solução analítica conhecida. A facilidade e a rapidez de implementação de códigos computacionais unidimensionais, mesmo os generalizados (que levam em consideração efeitos viscosos e de transferência de calor) fez com que Beams (1992) incentivasse sua utilização, não em detrimento dos códigos multidimensionais, mas como uma ferramenta bastante útil para o projeto de tubeiras e como um instrumento auxiliar na aquisição de explicações físicas para resultados obtidos. Nesse trabalho, Beams (1992) implementou um programa unidimensional generalizado, realizando algumas simulações envolvendo escoamentos viscosos, com troca térmica e em tubeiras de diferentes perfis (cônico, sino e trompeta). Os resultados, no entanto, não foram comparados a outros (experimentais ou numéricos), nem foi realizada uma análise de erros sobre tais resultados. Desta forma, apenas resultados qualitativos foram apurados, como o fato de o número de Mach não aumentar monotonicamente sem uma seleção adequada do ângulo do divergente da tubeira e o fato de que o empuxo pode ser maximizado pela correta seleção do perfil da tubeira.

2.2.3. Métodos analíticos

O escoamento unidimensional isentrópico se constitui no único modelo em que os campos de pressão, velocidade, temperatura e massa específica (além de grandezas delas derivadas) podem ser encontrados. Kliegel e Levine (1969), contudo, desenvolveram uma expressão para a obtenção do coeficiente de empuxo adimensional (C_d), válida para tubeiras cujo raio de curvatura (r_c) normalizado com relação ao raio da garganta (r_l) é inferior à unidade, sujeitas a um escoamento de gás perfeito com propriedades constantes. Esta equação se constitui em um aprimoramento daquela obtida anteriormente por Hall (1962), uma vez que é obtida utilizando-se coordenadas toroidais, e não cilíndricas, permitindo-lhes que as condições de contorno fossem aplicadas em coordenadas constantes, o que não é possível em coordenadas cilíndricas. Tal expressão é apresentada na seqüência, sendo r^* a razão entre o raio de curvatura e o raio da garganta e γ a razão entre os calores específicos:

$$C_d = 1 - \frac{\gamma - 1}{(1 + r^*)^2} \left[\frac{1}{96} - \frac{(8\gamma - 27)}{2304(1 - r^*)} + \frac{754\gamma^2 - 757\gamma + 3633}{276480(1 + r^*)^2} \right], \quad (2.6)$$

e é válida para escoamentos invíscidos de gases perfeitos.

Além da expressão para o empuxo adimensional, Kliegel e Levine (1969) também apresentam expressões para a velocidade axial na linha de simetria e junto às paredes da tubeira, bem como expressões para as distâncias entre o centro geométrico da garganta (localizado sobre o eixo de simetria da tubeira) e: (a) o ponto sônico localizado sobre o eixo de simetria, e (b) o ponto sônico na direção radial, localizado na seção transversal que passa através da garganta do motor-foguete.

A comparação entre os resultados teóricos, a partir das equações de Kliegel e Levine (1969), e resultados experimentais foi efetuada por Cuffel *et al.* (1969). Para tanto, foi utilizada uma tubeira cônica, com ângulos iguais a 45° no lado convergente e 15° no divergente e uma razão (r^*) entre raio de curvatura e o raio da garganta igual a 0,625. Os experimentos foram feitos utilizando-se ar a uma pressão e uma temperatura de estagnação de 70 psia ($4,8263 \times 10^5$ Pa) e 300 K, respectivamente. Confrontando-se o resultado teórico, obtido através da equação de Kliegel e Levine (1969), ao experimental, obtido por Cuffel *et al.* (1969), obtiveram-se os valores de 0,982 e 0,985, respectivamente, o que mostra a boa concordância entre ambos os valores; resultados semelhantes foram observados comparando-

se os valores obtidos através das demais expressões apresentadas por Kliegel e Levine (1969) aos resultados experimentais.

2.2.4. Experimentação

Pavli *et al.* (1987), Smith *et al.* (1987) e Kacynski *et al.* (1987) realizaram, no “*Lewis Research Center*” – Cleveland (Ohio), experimentos utilizando duas tubeiras com perfil de Rao modificado, diâmetro da garganta de 1 polegada (25,4 mm) e razão de expansão (*ER*) igual a 1030. O aparato experimental permitia, também, que as tubeiras fossem testadas para a razão de expansão de 428,5, consistindo em uma espécie de truncamento das tubeiras originais. Como propelentes, foram utilizados oxigênio e hidrogênio, para diversas razões de mistura (*OF*), submetidos a uma pressão nominal na câmara de combustão de 350 psia (2,413 MPa). Tais trabalhos foram propostos em virtude da dificuldade de se encontrar resultados experimentais ou numéricos para tubeiras com razão de expansão elevada – poucos trabalhos haviam sido feitos com tubeiras com razão de expansão superior a 100 e nenhum apresentava resultados para razão de expansão acima de 400.

O trabalho de Pavli *et al.* (1987) abordou o empuxo obtido para tais tubeiras, apresentando os valores obtidos para o coeficiente de empuxo para diversas razões de mistura. Para tanto, foram conduzidos testes à pressão atmosférica, com o intuito de caracterizar o injetor e determinar as perdas relativas ao processo de combustão. Observaram-se, outrossim, as ocorrências de distribuições circunferenciais e radiais da pressão, não permitindo que medições discretas dessa propriedade fossem extrapoladas para toda a câmara de combustão.

Complementar ao trabalho de Pavli *et al.* (1987), Kacynski *et al.* (1987) apresentam os resultados experimentais para a temperatura e os fluxos de calor obtidos junto à parede da tubeira, bem como um estudo sobre a camada-limite ao longo do motor-foguete. A partir dos dados de temperatura na parede externa da tubeira, foram obtidos os fluxos de calor (através das paredes) e as temperaturas no interior do motor-foguete. Também foram calculadas as taxas de transferência de calor para posições axiais determinadas, utilizando-se os fluxos. Comparando-se os valores determinados experimentalmente àqueles previstos a partir de análises computacionais, utilizando o código TDK (“*Two-Dimensional Kinetics*”, desenvolvido pela NASA), observou-se que, para análises de camada-limite turbulenta, os fluxos de calor previstos apresentaram valores 120% superiores aos experimentais. Na previsão para camada-limite laminar, as diferenças entre os valores experimentais e

numéricos ficaram em torno de 15%. A partir de tais dados, Kacynski *et al.* (1987) concluíram que, para a tubeira analisada, o escoamento apresentava camada-limite laminar (resultante do fenômeno de laminarização da camada-limite), sustentada pela aceleração do escoamento através da tubeira associada a baixos números de Reynolds na camada-limite fluidodinâmica.

O código TDK utiliza o método das características na solução do problema reativo, sendo composto por um módulo principal e cinco módulos associados. Tais módulos permitem simulações uni ou bidimensionais. No caso de escoamento unidimensional, é possível obter-se resultados referentes aos escoamentos congelado, em equilíbrio químico local (módulo ODE, “*one-dimensional equilibrium*”) e/ou em desequilíbrio químico, para fluido invíscido (módulo ODK, “*one-dimensional kinetics*”). Um terceiro módulo, o TRAN (“*transonic flow*”) utiliza os resultados do módulo OKD para cálculos da região transônica (região da garganta) da tubeira, de modo a permitir a inicialização dos cálculos pelo método das características, que se constitui no quarto módulo (MOC). Este quarto módulo constrói uma malha em diferenças finitas, utilizando as linhas de corrente e as superfícies características, e é capaz de estimar as perdas de performance da tubeira ocasionadas pelos efeitos radiais do escoamento. O último módulo, denominado BLM (“*boundary-layer module*”) destina-se ao cálculo das camadas-limite laminar e/ou turbulenta junto às paredes do motor-foguete, para geometrias axissimétricas (KACYNSKI *et al.*, 1987; SMITH *et al.*, 1987).

Um terceiro trabalho complementar aos outros dois já apresentados é o de Smith *et al.* (1987), no qual os resultados experimentais são comparados aos numéricos obtidos utilizando-se o código TDK, de modo a calibrá-lo. Conforme apresentado por Kacynski *et al.* (1987), a comparação entre os modelos numéricos de camada-limite laminar e turbulenta mostrou que o modelo de camada-limite laminar apresentava melhores resultados, sendo portanto utilizado por Smith *et al.* (1987) em seu estudo. Os resultados numéricos para o impulso específico no vácuo apresentaram discrepâncias entre 0,12 e 1,9%, enquanto o coeficiente de empuxo apresentou variação de $\pm 1,3\%$, em relação aos resultados experimentais. Com relação à pressão estática na parede da tubeira, os resultados numéricos e os resultados experimentais diferiram em $\pm 5\%$, exceto no caso das regiões de maior e de menor expansão de área (regiões em que ER vale aproximadamente 1000 e 12, respectivamente), nas quais as previsões numéricas foram 15% menores que os resultados experimentais.

Apesar de os três trabalhos realizados por pesquisadores do “*Lewis Research Center*” se constituírem em importantes referências nos âmbitos experimental e numérico para tubeiras de elevada razão de expansão, observa-se que não foram fornecidas as incertezas experimentais para nenhum dos resultados. Também não foram apresentadas as malhas empregadas pelo código TDK na solução do escoamento reativo, nem qualquer análise de erros numéricos. Com isso, não se pode afirmar, com certeza, que as diferenças observadas na comparação entre resultados numéricos e resultados experimentais é significativa ou não. Observa-se, ainda, que ao se utilizar o código TDK, todo o escoamento a montante da garganta, que corresponde à região subsônica, é solucionada utilizando-se somente malhas unidimensionais, mesmo que o modelo bidimensional seja utilizado no trecho divergente da tubeira.

O fenômeno de laminarização de uma camada limite turbulenta em tubeiras foi anteriormente estudado por Boldman *et al.* (1968), também pertencente ao “*Lewis Research Center*”. Este trabalho foi motivado pelo fato de que, ao se comparar os resultados experimentais dos fluxos de calor existentes através da parede de uma tubeira, na região da garganta, e de um duto com igual diâmetro e vazão mássica, os resultados experimentais para a primeira geometria apresentam valores inferiores aos da segunda. Mesmo nos casos em que o escoamento na região subsônica da tubeira apresentava características turbulentas, observou-se uma queda na magnitude do fluxo de calor na região da garganta do motor-foguete, atribuída à redução da turbulência que ocorre em escoamentos turbulentos extremamente acelerados. Boldman *et al.* (1968) realizaram seus estudos utilizando tubeiras cônicas de semi-ângulo convergente igual a 30° e a 60°, operando com ar a uma temperatura de estagnação de 970°R (539 K) e uma faixa de pressões de estagnação entre 2,0 e 20,4 atm ($2,03 \times 10^5$ e $20,67 \times 10^5$ Pa). Através do levantamento dos perfis de camadas-limite fluidodinâmico e térmico e dos fluxos de calor através das paredes, foram obtidas evidências da laminarização do escoamento inicialmente turbulento.

2.2.5. Códigos computacionais

Embora os conceitos básicos da propulsão líquida tenham sido estabelecidos ainda no início do século XX, muito esforço foi necessário para atingir a maturidade tecnológica necessária ao seu uso prático. A fase de desenvolvimento mais intenso iniciou-se na década de 1950, baseando-se, principalmente, em resultados experimentais, aproximações e ferramentas

rudimentares de análise e não no desenvolvimento lógico, combinando aproximações teóricas e experimentais coerentes. Desde então, um grande progresso foi observado nos métodos de diagnóstico, na capacidade de processamento e na Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD, do inglês, “*Computational Fluid Dynamics*”) (HABIBALLAH *et al.*, 1998).

Fröhlich *et al.* (1993) apresentam um resumo dos principais esforços da equipe da DASA (“*Deutsche Aerospace*”) na busca pela melhoria contínua e pela validação de códigos numéricos, utilizando, para tanto, informações disponíveis de testes experimentais e programas anteriormente desenvolvidos. Para todos os programas apresentados, o par propelente modelado é o hidrogênio/oxigênio, diferindo apenas a razão de mistura utilizada para cada estudo. O primeiro programa citado é o “*Bord I*” (1967-68), cuja finalidade era de prever o fluxo de calor através das paredes de uma tubeira. Os resultados foram comparados a resultados experimentais, observando-se uma diferença significativa dos perfis dos fluxos, em relação à razão de mistura oxidante/combustível (*OF*). Isto levou a equipe de desenvolvimento à conclusão de que o fluxo de calor não pode ser corretamente modelado por uma equação baseada apenas no número de Nusselt.

O segundo programa apresentado por Fröhlich *et al.* (1993) é o HM7 (1972-77), cujos resultados novamente apresentam desvios significativos em relação aos resultados experimentais. O fluxo de calor na garganta da tubeira analisada, contudo, foi adequadamente previsto utilizando-se o código computacional. Durante a década de 1980 e início da de 1990, os códigos computacionais foram aprimorados, sendo utilizados principalmente para estudos do motor “*Vulcain*”, propulsor do veículo espacial “*Ariane*”, da Agência Espacial Européia. Nos novos códigos, observou-se uma melhoria significativa na comparação entre os resultados experimentais e numéricos, baseada na experiência obtida com os primeiros programas computacionais. Tais códigos permitem a avaliação de diferentes efeitos sobre o escoamento no interior da câmara de combustão e sobre o escoamento do refrigerante (sistema de refrigeração regenerativa). Os resultados apresentados, contudo, não determinam as faixas de erro, sejam experimentais, sejam numéricas, como a grande maioria dos trabalhos que tratam de escoamentos em foguetes.

As paredes de tubeiras com refrigeração regenerativa, como é o caso do motor “*Vulcain*”, estão sujeitas a elevados gradientes de temperatura, ocasionado pela diferença de temperaturas existente entre os gases de combustão e o fluido refrigerante. Isto gera um elevado fluxo de calor que, aliado aos efeitos de camada-limite, ocasionam tensões térmicas e mecânicas sobre a estrutura do motor-foguete, o que pode conduzi-la à falha. Desta forma, Kuhl *et al.* (1998) promoveram um estudo acoplado da interação fluido-estrutura, utilizando

uma modelagem em elementos finitos, em que tanto o escoamento do refrigerante quanto a condução de calor através das paredes e a deformação plástica das mesmas são apresentadas.

Em seu código, Kuhl *et al.* (1998) obtêm inicialmente o campo de velocidades do refrigerante, solucionando, na seqüência, os campos de temperatura do fluido e da parede da tubeira para então determinar o campo de deformações da estrutura. Efeitos de turbulência no escoamento refrigerante foram modelados utilizando-se o modelo $k-\epsilon$ e, de modo a simplificar as análises, o escoamento reativo dos gases de combustão não foi estudado. Foram feitas simulações para um modelo qualitativo de tubeira, com geometria semelhante à do motor “*Vulcain*”, permitindo aos autores demonstrar a aplicabilidade da estratégia apresentada. Observa-se, contudo, que neste caso também nem resultados experimentais, nem resultados de análises de erros foram fornecidos pelos autores.

Enfoque no escoamento reativo em desequilíbrio químico é dado por Barros (1993). Neste trabalho, são apresentados dois modelos de escoamento: o primeiro, unidimensional, utiliza o método de Multivalores de GEAR para a integração das equações diferenciais que modelam o escoamento; o segundo modelo, bidimensional, requer o uso do método das características para o cálculo da região supersônica. Em ambos os modelos, efeitos viscosos foram desconsiderados. Com a finalidade de validar os códigos, dois sistemas reativos foram empregados: o primeiro baseado em reações entre H_2 e F_2 , comparado aos resultados de Zucrow e Hoffman (1977), e o segundo baseado em reações entre H_2 e O_2 , com resultados confrontados aos de Kacynski *et al.* (1987), Pavli *et al.* (1987) e Smith *et al.* (1987). No caso do par propelente H_2/O_2 , um esquema com oito reações químicas e seis espécies (H_2 , O_2 , H_2O , H , O e OH) foi empregado. Em todas as comparações, observou-se boa concordância com os resultados experimentais, com uma variação de 0,3% no valor do impulso específico para o modelo bidimensional.

Barros (1993) observou, outrossim, que os métodos de integração explícitos não são adequados para aplicações envolvendo reações de cinética química, em termos de precisão e desempenho computacional. Com relação ao processo de cálculo na região transônica da tubeira, no modelo unidimensional, verificou-se que o processo de ortogonalização de Gram-Schmidt apresentou os melhores resultados. Para o modelo bidimensional, notou-se que a série transônica de Kliegel-Levine, proposta originalmente por Kliegel e Levine (1969), foi o procedimento que resultou em melhores condições de inicialização do escoamento supersônico (necessárias para utilização do método das características).

Apesar de os resultados obtidos por Barros (1993) apresentarem boa concordância com resultados experimentais, ressalta-se novamente que não foram efetuadas análises de erro

para as soluções. Observa-se, igualmente, que no caso do modelo bidimensional, o escoamento não é solucionado de modo bidimensional na parte subsônica da tubeira, uma vez que foi utilizado o método das características.

Laroca (2000) apresentou um modelo quase-unidimensional invíscido destinado ao estudo de escoamentos congelado e em equilíbrio químico local para o par propelente H_2/F_2 . Neste trabalho foi empregado o método dos volumes finitos com arranjo desencontrado de variáveis, utilizando uma formulação adequada a qualquer regime de velocidades e funções de interpolação de segunda ordem, aplicadas com correção adiada. Os resultados obtidos foram comparados aos do código NASA SP-273, utilizado como referência, apresentando boa concordância. Ressalta-se que o código implementado por Laroca (2000) não inclui efeitos viscosos ou de transferência de calor, embora o mesmo procedimento pudesse ser aplicado de modo a contemplar tais fenômenos. Nota-se, ainda, que neste trabalho não foram realizadas análises de erros numéricos.

A utilização de volumes finitos para o estudo de escoamentos supersônicos, envolvendo trocas térmicas, foi realizada por Marchi *et al.* (2004). Neste trabalho utilizou-se outrossim uma formulação adequada a qualquer regime de velocidade, com funções de interpolação de segunda ordem aplicadas com correção adiada; ressalta-se que, no entanto, com relação às malhas, foi empregado um arranjo co-localizado, na qual todas as propriedades são armazenadas em uma mesma malha. Nesse trabalho, a mistura de gases de combustão é modelada através de um gás termicamente perfeito, monoespécie, sendo empregado um modelo quase-unidimensional para seu escoamento. Um sistema de refrigeração regenerativo também é modelado, empregando-se, para tanto, um modelo unidimensional para os canais de refrigeração.

Marchi *et al.* (2004) empregam seu código na solução do escoamento com refrigeração regenerativa de uma tubeira hipotética, de seção longitudinal cossenoidal. Dois casos foram estudados: o primeiro para um gás, monoespécie, com propriedades constantes e o segundo para um gás, monoespécie, com propriedades variáveis. Em ambos os casos foram empregadas diversas malhas (apresentando desde 10 até 1280 volumes, com razão de refinamento igual a 2), com o intuito de se realizar uma análise de erros, baseada no estimador GCI. Observou-se, assim, que uma malha de 80 volumes de controle oferecia erros numéricos comparáveis aos erros experimentais. Verificou-se, também, que para a determinação do empuxo da tubeira poder-se-ia utilizar o modelo de escoamento com propriedades constantes, enquanto para a determinação da máxima temperatura na parede da tubeira é conveniente o uso do modelo de gás monoespécie com propriedades variáveis. Apesar de não contemplar

misturas de gases (e escoamentos reativos), a metodologia apresentada por Marchi *et al.* (2004) pode ser estendida para contemplar tais efeitos e, igualmente, ser utilizada para modelos bidimensionais.

O trabalho de Wang (2006), por sua vez, enfocou o escoamento reativo bi e tridimensional em motor-foguete a propulsão líquida (H_2/O_2) com refrigeração regenerativa, levando em consideração efeitos de turbulência (modelo $k-\epsilon$) e trocas térmicas por convecção e radiação. Para tanto, foram empregados o método de volumes finitos, com malhas estruturadas ou não-estruturadas (no interior e na região à jusante da saída da tubeira) e um esquema de nove reações químicas, contemplando seis espécies químicas provenientes da reação H_2/O_2 (H_2 , O_2 , H_2O , H , O e OH), além de N_2 , que no caso do escoamento em motor-foguete é inexistente. Comparações entre os resultados empregando malhas estruturadas e não-estruturadas indicaram que as primeiras se mostram mais adequadas à previsão de elementos do escoamento, como ondas de choque. Os resultados numéricos apresentaram boa concordância com os resultados experimentais e resultados anteriores (WANG e CHEN, 1993), sendo que o modelo de desequilíbrio químico se mostrou mais acurado que o de equilíbrio químico local. Observa-se que, mesmo este sendo um trabalho bastante recente e completo do ponto de vista fenomenológico, também neste caso não foram efetuadas análises de erros.

2.3 PARÂMETROS DE INTERESSE

A definição de certos parâmetros (físicos, geométricos, de desempenho) é importante na caracterização de um foguete, sendo apresentados a seguir os mais relevantes utilizados neste trabalho. Maiores detalhes e outros parâmetros comumente presentes na avaliação de foguetes podem ser encontrados em Huzel e Huang (1992), Brown (1996) e Sutton e Biblarz (2001).

Razão de mistura (OF) [adimensional]

No caso de sistemas bipropelentes, a razão de mistura (OF) é um importante parâmetro de propulsão. Na condição de razão de mistura ideal, as proporções de oxidante e

de combustível são tais que a reação libera a máxima quantidade de energia, produzindo um impulso específico máximo. Tal parâmetro é definido como

$$OF = \frac{\dot{m}_o}{\dot{m}_f}, \quad (2.7)$$

sendo: \dot{m}_o a vazão mássica de oxidante [kg/s] e \dot{m}_f a vazão mássica de combustível [kg/s].

Razão de expansão (ER) [adimensional]

A razão de expansão é o quociente entre a área de saída da tubeira (S_{ex}) e a área da garganta (S^*), ou seja,

$$ER = \frac{S_{ex}}{S^*}. \quad (2.8)$$

Da teoria de bocais convergentes-divergentes, sabe-se que a expansão é considerada ótima quando a pressão de saída do bocal equivale à pressão ambiente. Para foguetes, contudo, tem-se um inconveniente: a pressão ambiente varia de acordo com a altitude alcançada. Assim, não existe um perfil de bocal ótimo para todas as altitudes (algo assim só seria obtido caso o próprio perfil do bocal mudasse ao longo da trajetória do foguete). Deve-se atentar, também, na existência de choques, tanto os devidos ao descolamento da camada-limite no interior da tubeira, quanto àqueles observados pela baixa pressão na saída da mesma.

Empuxo dinâmico (F) [N]

O empuxo dinâmico é a força produzida por um sistema de propulsão atuante sobre todo o foguete. De um modo simplificado, é a reação experimentada pela estrutura do veículo devido à ejeção de matéria a alta velocidade. Deste modo, o empuxo no vácuo pode ser calculado através da seguinte expressão

$$F = \int_{S_{ex}} \rho u u dS + \int_{S_{ex}} p dS, \quad (2.9)$$

sendo: ρ a massa específica da mistura de gases de combustão [kg/m^3], u é a componente axial da velocidade de saída dos gases de combustão [m/s] e p a pressão dos gases na saída da tubeira [Pa].

Neste trabalho, é também utilizado um outro parâmetro, resultante da adimensionalização do empuxo dinâmico e por isso denominado empuxo dinâmico adimensional (F^*), que corresponde ao quociente entre o empuxo real (ou calculado) e o empuxo ideal, ou seja,

$$F^* = \frac{F_{real/calculado}}{F_{ideal}}. \quad (2.10)$$

Impulso específico (I_s) [em SI, N·s/kg] ou (I_{sp}) [em unidades usuais, s]:

Definido como a razão entre o impulso total e a massa total de propelentes, apresenta como unidade N·s/kg (ou, simplesmente, m/s), sendo obtido através da seguinte expressão:

$$I_s = \frac{\int_0^{t_q} F dt}{\int_0^{t_q} \dot{m}_p dt}, \quad (2.11a)$$

onde t_q corresponde ao tempo de queima do(s) propelente(s) [s] e \dot{m}_p é a vazão mássica de propelente [kg/s]. Observa-se, contudo, que o impulso específico é normalmente expresso como a razão do impulso total e o peso total do(s) propelente(s), sendo agregada à expressão acima a aceleração da gravidade (que ao nível do mar equivale a $9,8066 \text{ m/s}^2$). Deste modo, obtém-se uma grandeza expressa em segundos [s]:

$$I_{sp} = \frac{\int_0^{t_q} F dt}{g_o \int_0^{t_q} \dot{m}_p dt}. \quad (2.11b)$$

Coefficiente de descarga (C_d) [adimensional]

O coeficiente de descarga (C_d) é o resultado do quociente entre a vazão mássica real (ou calculada) na saída da tubeira e a vazão mássica ideal dos gases de combustão, sendo obtida através da seguinte expressão:

$$C_d = \frac{\dot{m}_{real/calculado}}{\dot{m}_{ideal}}, \quad (2.12)$$

sendo, desta forma, um parâmetro de desempenho global (ou seja, do motor-foguete).

Tanto o coeficiente de descarga (C_d) quanto o empuxo dinâmico adimensional (F^*) indicam o quão distante o caso real (ou calculado) se encontra do caso ideal (escoamento isentrópico unidimensional).

2.4 REAÇÕES QUÍMICAS

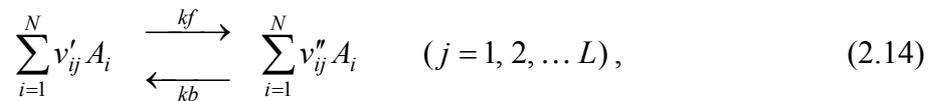
A combustão é a mais antiga tecnologia da humanidade, utilizada há mais de um milhão de anos. Cerca de 90% da energia consumida no mundo (em veículos automotores, geração de energia elétrica e aquecimento, por exemplo) são fornecidos por processos de combustão (WARNATZ, 2001). O projeto, desenvolvimento e operação de foguetes a propulsão líquida requerem uma queima estável dos propelentes e a geração de uma mistura de gases uniforme, a altas temperaturas (SUTTON e BIBLARZ, 2001).

O princípio básico da combustão é a reação química exotérmica. Neste processo, em geral, duas ou mais substâncias iniciais entram em contato e, através de colisões moleculares, há a troca de átomos e rearranjo molecular, com liberação de energia. Uma reação química arbitrária pode ser escrita na seguinte forma:



sendo: i a espécie química, N o número total de espécies químicas, ν' e ν'' , nesta ordem, os coeficientes estequiométricos da espécie química i nos reagentes e nos produtos e A o símbolo

de cada espécie química. No caso da Eq. (2.13), verifica-se a existência de uma seta unidirecional: neste caso, tem-se que a reação ocorre somente no sentido dos reagentes para os produtos, o que é uma boa aproximação para a maioria das reações a baixas temperaturas. Deve-se notar, no entanto, que para altas temperaturas as reações passam a ocorrer em ambos os sentidos, ou seja, na direção dos reagentes para os produtos e dos produtos para os reagentes. Neste caso, para um sistema de reações químicas em equilíbrio ocorrendo concomitantemente, a Eq. (2.13) deve ser generalizada para (KUO, 1986):



sendo: j a reação química, L o número total de reações químicas envolvidas, kf e kb , nesta ordem, as constantes de reação direta e inversa (que são necessárias na determinação da composição química em modelos de desequilíbrio químico).

A cada reação química está relacionada uma constante de equilíbrio (K), a qual mostra como as reações direta e inversa estão relacionadas para uma dada temperatura. Ela pode ser calculada a partir das pressões parciais (p) de cada espécie química i existente em uma mistura gasosa, a partir da seguinte relação (KUO, 1986):

$$K_j = \prod_{i=1}^N p_i^{(v''_{ij} - v'_{ij})}. \quad (2.15)$$

Há, contudo, uma outra forma de obtenção desta constante de equilíbrio, a qual é baseada na variação da energia livre de Gibbs para a reação (ΔG_j), cujo cálculo pode ser feito através de

$$\Delta G_j = \sum_{i=1}^N v''_{ij} g_i - \sum_{i=1}^N v'_{ij} g_i, \quad (2.16)$$

onde g_i corresponde à energia livre de Gibbs da espécie i . Este valor pode ser calculado através da metodologia apresentada por McBride *et al.* (1993), na qual os valores do calor específico a pressão constante (c_p), a entalpia (h) e a energia livre de Gibbs (g), nesta ordem, à pressão de 1 atm (101,325 kPa), podem ser obtidos através de

$$c_{pi} = \bar{R} (a_{1i} + a_{2i}T + a_{3i}T^2 + a_{4i}T^3 + a_{5i}T^4), \quad (2.17)$$

$$h_i = \bar{R} T_i \left(a_{1i} + a_{2i} \frac{T}{2} + a_{3i} \frac{T^2}{3} + a_{4i} \frac{T^3}{4} + a_{5i} \frac{T^4}{5} + \frac{a_{6i}}{T} \right), \quad (2.18)$$

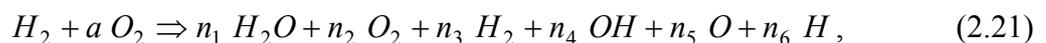
$$g_i = \bar{R} T_i \left[a_{1i}(1 - \ln T) - a_{2i} \frac{T}{2} - a_{3i} \frac{T^2}{6} - a_{4i} \frac{T^3}{12} - a_{5i} \frac{T^4}{20} + \frac{a_{6i}}{T} - a_{7i} \right], \quad (2.19)$$

sendo: a_{ki} os coeficientes dos polinômios interpoladores para cada espécie química (apresentados no Anexo A) i e \bar{R} a constante universal dos gases perfeitos (8,314510 J/mol·K). Deste modo, a constante de equilíbrio pode ser determinada através da seguinte relação:

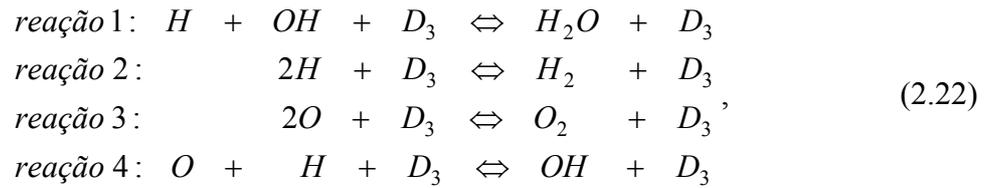
$$K_j = \exp\left(-\frac{\Delta G_j}{\bar{R} T}\right). \quad (2.20)$$

O número de moles de cada espécie química (n_i) deve ser obtido através da conservação de massa para cada espécie. Para tanto, é considerada a equação global da reação (isto é, a equação que apresenta os reagentes e todos os produtos considerados no modelo) e o grau de reação de cada uma das equações de dissociação (ε_j). Esta metodologia é apropriada para a obtenção da condição de equilíbrio químico a qualquer conjunto de reações e, neste trabalho, é empregada para diversos modelos de reações para o par hidrogênio/oxigênio (H₂/O₂), conforme indicado na Tabela 2.1, apresentada na seqüência.

A seguir, é mostrado um exemplo da metodologia anteriormente apresentada, empregando-se o modelo químico 3, que contabiliza seis espécies (H₂O, O₂, H₂, OH, O, H) e cuja equação global é:



sujeita às seguintes reações de dissociação:



sendo D_3 um terceiro corpo, cuja influência é verificada apenas no modelo de desequilíbrio químico (no caso da obtenção do equilíbrio químico, os terceiros corpos podem ser desconsiderados).

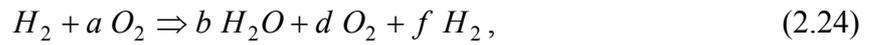
Tabela 2.1: Modelos químicos adotados nos códigos uni e bidimensionais implementados (para os escoamentos congelado e em equilíbrio químico local).

Modelo	L	N	Espécies envolvidas	Observações
0	0	3	H_2O, O_2, H_2	modelo ideal
1	1	3	H_2O, O_2, H_2	---
2	2	4	H_2O, O_2, H_2, OH	---
3	4	6	H_2O, O_2, H_2, OH, O, H	4 reações com 3º corpo de Barros <i>et al.</i> (1990) e Smith <i>et al.</i> (1987)
4	4	6	H_2O, O_2, H_2, OH, O, H	modelo de Svehla (1964)
5	8	6	H_2O, O_2, H_2, OH, O, H	modelo de Barros <i>et al.</i> (1990)
7	8	6	H_2O, O_2, H_2, OH, O, H	modelo de Smith <i>et al.</i> (1987)
10	6	8	$H_2O, O_2, H_2, OH, O, H, HO_2, H_2O_2$	4 reações do modelo 3 e 2 do modelo de Kee <i>et al.</i> (1990)
9	18	8	$H_2O, O_2, H_2, OH, O, H, HO_2, H_2O_2$	modelo de Kee <i>et al.</i> (1990)

Do emprego das reações químicas anteriormente citadas, obtém-se o sistema de equações para determinação do número de moles:

$$\begin{aligned}
n_1 &= b + \varepsilon_1 \\
n_2 &= d + \varepsilon_3 \\
n_3 &= f + \varepsilon_2 \\
n_4 &= -\varepsilon_1 + \varepsilon_4 \\
n_5 &= -2\varepsilon_3 - \varepsilon_4 \\
n_6 &= -\varepsilon_1 - 2\varepsilon_2 - \varepsilon_4 \\
n &= n_0 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \varepsilon_3 - \varepsilon_4
\end{aligned} \tag{2.23}$$

sendo: n_i o número de moles de cada espécie química, ε_j os graus de dissociação de cada reação química considerada (totalizando 4 para este modelo) e b , d e f determinados a partir do balanço de massa da seguinte reação (sem dissociação):



atentando-se que

$$n_0 = b + d + f \quad (2.25)$$

é o número total de moles na reação sem dissociação.

Para o modelo 3 a aplicação da Eq. (2.16) à Eq. (2.22) resulta em

$$\begin{aligned} \Delta G_1 &= g_1 - g_4 - g_6 \\ \Delta G_2 &= g_3 - 2g_6 \\ \Delta G_3 &= g_2 - 2g_5 \\ \Delta G_4 &= g_4 - g_5 - g_6 \end{aligned} \quad (2.26)$$

Aplicando-se a Eq. (2.15) ao modelo 3, bem como o conceito de fração molar de uma espécie química (X_i),

$$X_i = \frac{n_i}{n} = \frac{p_i}{p}, \quad (2.27)$$

obtém-se o seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned} K_1 p n_4 n_6 &= n_1 n \\ K_2 p n_6^2 &= n_3 n \\ K_3 p n_5^2 &= n_2 n \\ K_4 p n_5 n_6 &= n_4 n \end{aligned} \quad (2.28)$$

Desta forma, a partir da determinação dos graus de dissociação para cada uma das reações consideradas, pode-se, então, obter o número de moles de cada espécie química e, também, o número total de moles. Esta metodologia é empregada para os modelos físicos de escoamento congelado e de equilíbrio químico local, que se constituem nos casos limites do mecanismo real de reações químicas.

O algoritmo geral para obtenção da composição química em equilíbrio é apresentado na seqüência:

1. Definir os dados: número do modelo reativo, temperatura (T), pressão total (p), razão mássica oxidante/combustível (OF), e parâmetros numéricos (números de iterações e tolerâncias).
2. Ler os coeficientes termodinâmicos (a_{ki}) das Eqs. (2.17) a (2.19).
3. Calcular os coeficientes da Eq. (2.24): a é obtido a partir da seguinte expressão:

$$a = OF \frac{M_3}{M_2}, \quad (2.29)$$

onde M_3 e M_2 são respectivamente a massa molecular do hidrogênio molecular (H_2) e do oxigênio molecular (O_2). Os coeficientes b , d e f da Eq. (2.24) são obtidos da conservação de massa das espécies atômicas envolvidas, hidrogênio e oxigênio atômicos, resultando em três casos:

- Caso 1: composição estequiométrica:

$$a = 1/2, \quad b = 1, \quad d = f = 0 \quad (2.30)$$

- Caso 2: mistura rica em oxidante (O_2):

$$a > 1/2, \quad b = 1, \quad d = a - 1/2, \quad f = 0 \quad (2.31)$$

- Caso 3: mistura rica em combustível (H_2):

$$a < 1/2, \quad b = 2a, \quad d = 0, \quad f = 1 - 2a \quad (2.32)$$

4. Inicializar os graus de reação (ε_j), de cada reação de dissociação, com o valor zero.
5. Calcular o número inicial de moles de cada espécie (n_i) do modelo reativo e o número total de moles (n) com base nas variáveis dos itens 3 e 4.
6. Calcular a energia livre de Gibbs para cada espécie (g_i), a variação da energia livre de Gibbs de cada reação j (ΔG_j) e a constante de equilíbrio de cada reação j baseada na pressão parcial (K_j) através da Eq. (2.20).
7. Iterativamente, através do método de Newton-Raphson, até que seja atingido o número máximo de iterações ($itimax$) ou que a tolerância (tol_e) seja satisfeita, calcular o grau de reação (ε_j) de cada reação de dissociação.
8. Com os ε_j obtidos no item 7, atualizar o número de moles de cada espécie (n_i) do modelo reativo e o número total de moles (n).
9. Calcular a variação do número total de moles (Δn). Voltar ao item 7 até que seja atingido o número máximo de iterações ($itemax$) ou enquanto Δn for maior do que a tolerância (tol_n).
10. Calcular as propriedades de mistura (massa molecular média, frações molar e mássica de cada espécie química, constante da mistura de gases, massa específica total da mistura, razão de calores específicos, concentração de cada espécie química, concentração total da mistura e entalpia total).

No caso dos modelos de desequilíbrio químico, faz-se necessária a utilização de uma outra metodologia, levando-se em consideração as constantes de reação direta e indireta (kf e kb , respectivamente) presentes na Eq. (2.14). Desta forma, a taxa geral de variação de uma espécie i devido às reações químicas em que tal espécie participa, é dada por

$$\frac{dC_i}{dt} = (v_{ij}'' - v_{ij}') \left\{ kf \prod_i C_i^{v_{ij}'} - kb \prod_i C_i^{v_{ij}''} \right\}, \quad (2.33)$$

sendo C_i a concentração molar da espécie química i na mistura. No equilíbrio químico, a derivada existente no lado esquerdo da equação se anula, de modo que a Eq. (2.33) pode ser escrita como

$$Kc_j = \frac{kf_j}{kb_j}, \quad (2.34)$$

que é válida para uma reação j , sendo Kc a constante de equilíbrio químico baseada nas concentrações molares. As constantes de equilíbrio baseadas na concentração molar e nas pressões parciais se relacionam entre si através da seguinte equação

$$Kc_j = (\bar{R} T)^{-\Delta v_j} K_j \quad (2.35)$$

sendo Δv_j a variação do número de moles da reação j , obtida por

$$\Delta v_j = \sum_{i=1}^N (v_{ij}'' - v_{ij}'), \quad (2.36)$$

em que v_{ij}'' e v_{ij}' são, respectivamente, os números de moles da espécie i , na reação j , presentes nos produtos e nos reagentes.

Com a finalidade de se obterem as taxas de geração de massa para as diversas espécies presentes na reação entre hidrogênio e oxigênio líquidos, serão a seguir definidas algumas variáveis, como a taxa de progressão da j -ésima reação, que é dada pela diferença entre as taxas de reação direta e inversa e é apresentada a seguir:

$$\gamma_j = \left\{ kf_j \prod_{i=1}^N C_i^{v_{ij}'} - kb_j \prod_{i=1}^N C_i^{v_{ij}''} \right\}. \quad (2.37)$$

Multiplicando-se a Eq. (2.37) pela concentração efetiva do terceiro corpo na j -ésima reação, tem-se a taxa de geração de espécies (em moles), dada por

$$\theta_j = \lambda_j \gamma_j, \quad (2.38)$$

em que λ_j é definida como

$$\lambda_j = \sum_{i=1}^N \alpha_{ij} C_i \quad (2.39)$$

e α_{ij} é a eficiência da espécie i na reação de dissociação. Verifica-se, contudo, uma certa dificuldade na obtenção de dados experimentais sobre a eficiência de espécies químicas sobre uma reação de dissociação. Neste caso, uma solução comumente adotada é considerar a eficiência de todas as espécies químicas igual à unidade, de modo que a concentração do terceiro corpo é igual à concentração total de moléculas existentes (BARROS *et al.*, 1990).

A obtenção das taxas de geração de massa para as diversas espécies, em unidades mássicas e para todas as reações, é então feita multiplicando-se a Eq. (2.38) pela massa molecular de cada espécie química envolvida; tem-se assim a seguinte expressão:

$$\dot{\omega}_i = M_i \sum_{j=1}^L (\Delta v_{ij} \theta_j), \quad (2.40)$$

em que M_i é a massa molecular da espécie química X_i , L é o número total de reações e Δv_{ij} é dado por

$$\Delta v_{ij} = v_{ij}'' - v_{ij}', \quad (2.41)$$

e representa a diferença entre o número de moles formado e consumido em uma dada reação j .

Esta metodologia pode ser empregada para qualquer sistema reativo, sendo neste trabalho utilizada para o sistema H_2/O_2 . Os modelos químicos adotados são os mesmos listados na Tabela 2.1, observando-se, contudo, que somente os modelos com seis ou oito espécies foram considerados. Ressalta-se, ainda, que o modelo químico 4 não foi empregado para a condição de desequilíbrio químico e que o modelo 3 foi dividido em dois: modelos químicos 31 e 32, cuja diferença reside nas taxas de reação direta – enquanto para o modelo 31 utilizaram-se os dados provenientes do trabalho de Barros *et al.* (1990), para o modelo 32 o trabalho de referência foi o de Smith *et al.* (1987).

A seguir, é mostrado um exemplo da metodologia anteriormente apresentada, empregando-se o modelo químico 31, derivado do modelo químico 3, cuja equação geral e reações químicas são representadas pelas Eqs. (2.21) e (2.22). Para este modelo, as taxas de reação direta (k_f) são definidas como:

$$\begin{aligned}
 kf_1 &= 3,626 \times 10^{19} / T \\
 kf_2 &= 7,50 \times 10^{17} / T \\
 kf_3 &= 3,626 \times 10^{18} / T \\
 kf_4 &= 3,626 \times 10^{18} / T
 \end{aligned}
 \tag{2.42}$$

Para a obtenção das taxas de reação indireta, os valores apresentados na Eq. (2.42) são aplicados à Eq. (2.34). Verifica-se, contudo, a necessidade do conhecimento prévio da constante de equilíbrio químico baseado nas concentrações molares (K_C). Para tanto, é utilizada a Eq. (2.35), que relaciona K_C à constante de equilíbrio químico baseado nas pressões parciais (K_j), que pode ser obtido tanto experimentalmente – utilizando-se, então, uma equação como a de Arrhenius para correlação dos dados – quanto numericamente – através da variação da energia livre de Gibbs. Sendo conhecidas as taxas de reação das reações diretas e inversas, pode-se, então, calcular as taxas de progressão das reações, através da Eq. (2.37):

$$\begin{aligned}
 \text{reação 1: } \gamma_1 &= kf_1 C_4 C_6 - kb_1 C_1 \\
 \text{reação 2: } \gamma_2 &= kf_2 C_6^2 - kb_2 C_3 \\
 \text{reação 3: } \gamma_3 &= kf_3 C_5^2 - kb_3 C_2 \\
 \text{reação 4: } \gamma_4 &= kf_4 C_5 C_6 - kb_4 C_4
 \end{aligned}
 \tag{2.43}$$

Do trabalho de Barros *et al.* (1990) também foram obtidos os dados relativos à eficiência das espécies químicas nas reações. Tais dados são apresentados a seguir:

$$\alpha_{ij} = 1, \text{ para todas as espécies e em todas as reações.}
 \tag{2.44}$$

Com os valores das eficiências das espécies químicas e das taxas de progressão das reações, utilizando-se as Eqs. (2.39) e (2.38), torna-se possível calcular as taxas de geração das espécies envolvidas, em moles, em cada reação:

$$\begin{aligned}
 \text{reação 1: } \theta_1 &= C \gamma_1 \\
 \text{reação 2: } \theta_2 &= C \gamma_2 \\
 \text{reação 3: } \theta_3 &= C \gamma_3 \\
 \text{reação 4: } \theta_4 &= C \gamma_4
 \end{aligned}
 \tag{2.45}$$

Por último, utilizando-se a Eq. (2.40) e os dados das taxas de geração de espécies (em moles), calculam-se as taxas de geração de massa:

$$\begin{aligned}
 [\text{H}_2\text{O}] \quad \dot{\omega}_1 &= M_1 \theta_1 \\
 [\text{O}_2] \quad \dot{\omega}_2 &= M_2 \theta_3 \\
 [\text{H}_2] \quad \dot{\omega}_3 &= M_3 \theta_2 \\
 [\text{OH}] \quad \dot{\omega}_4 &= M_4(\theta_4 - \theta_1) \\
 [\text{O}] \quad \dot{\omega}_5 &= -M_5(2\theta_3 + \theta_4) \\
 [\text{H}] \quad \dot{\omega}_6 &= M_6(\theta_6 + 2\theta_2 + \theta_4)
 \end{aligned} \tag{2.46}$$

O algoritmo geral para a obtenção da composição química da mistura de gases em desequilíbrio químico é apresentado a seguir:

1. Definir os dados: número do modelo reativo, temperatura (T) e pressão total (p).
2. Ler os coeficientes termodinâmicos (a_{ki}) das Eqs. (2.17) a (2.19).
3. Inicializar as frações mássicas (Y_i). Cálculo inicial das concentrações mássicas (C_i) das espécies e da concentração total (C), com as relações:

$$C_i = \frac{\rho_i}{M_i} = \rho \frac{Y_i}{M_i} = \frac{p_i}{Ru T}, \tag{2.47}$$

$$C = \sum_{i=1}^N C_i = \frac{p}{Ru T}, \tag{2.48}$$

sendo ρ a massa específica da mistura de gases e ρ_i a massa específica da espécie i .

4. Calcular a energia livre de Gibbs para cada espécie (g_i) com a Eq. (2.19), a variação da energia livre de Gibbs de cada reação j (ΔG_j), com a Eq. (2.16) e a constante de equilíbrio de cada reação j baseada na pressão parcial (K_j), com a Eq. (2.15).
5. Calcular a constante de equilíbrio da reação inversa (kb_j), para cada uma das L reações de dissociação. Para tanto, são utilizadas: as constantes de reação diretas (kf_j) – dependentes do modelo adotado; as constantes de equilíbrio baseada na concentração (Kc_j) – que são obtidas das constantes de equilíbrio baseadas nas pressões parciais através da Eq. (2.35); e a Eq. (2.34).
6. Obter as taxas de progressão das reações (γ_j), utilizando a Eq. (2.37).

7. Para cada um dos modelos, são fornecidos os valores das taxas de eficiência das espécies (α_{ij}), com os quais são calculados os valores de λ_j com a Eq. (2.39) – ou diretamente os valores de λ_j . Calcular, então, os valores das taxas da geração de espécies, em moles (θ_j), com a Eq. (2.38).
8. Calcular as taxas de geração de massa ($\dot{\omega}_i$) para cada uma das espécies do modelo, utilizando a Eq. (2.40).
9. Repetir os passos 4 a 8 até que seja atingido o número máximo de iterações.

2.5 RESUMO DO CAPÍTULO 2

A conquista do espaço nas últimas décadas deveu-se, sobretudo, à utilização de foguetes a propulsão líquida (HABIBALLAH *et al.*, 1998), sobressaindo-se a utilização do par hidrogênio/oxigênio como par propelente, que deve continuar a ser um dos pares preferidos pelas próximas décadas (HAIDN e HABIBALLAH, 2003), ao lado de novos pares propelentes, como o querosene e o oxigênio. O início do desenvolvimento dos foguetes se confunde ao desenvolvimento bélico, datando os primeiros artefatos ao século XII. O impulso no desenvolvimento de foguetes (e da Astronáutica como um todo) ocorreu, contudo, durante o século XX, especialmente a partir da década de 1950. Estudos sobre a geometria ideal para tuberias, modelos unidimensionais, testes estáticos em bancadas e códigos computacionais foram efetuados durante as últimas décadas, buscando sempre o aprimoramento do conhecimento sobre a fenomenologia do escoamento reativos em motores-foguete. Utilizam-se, atualmente, códigos computacionais dotados de modelos bi e tridimensionais, capazes de modelar escoamentos turbulentos e efeitos de trocas térmicas entre os gases de combustão e a estrutura da tubeira; observa-se, contudo, que em poucos trabalhos é feita uma análise dos erros numéricos associados às simulações efetuadas, como forma de aumentar a confiabilidade do resultado numérico obtido.

Neste capítulo foi apresentado, brevemente, um panorama histórico do estudo de foguetes, bem como os parâmetros de interesse empregados neste trabalho (como empuxo, razão de mistura e impulso específico). Também foi descrita a metodologia empregada na determinação da composição em condições de equilíbrio e de desequilíbrio químicos.

Para a determinação das condições de equilíbrio químico é utilizada a metodologia baseada nas constantes de equilíbrio, conforme pode ser encontrada em Kuo (1986). Para

tanto, são utilizados polinômios interpoladores para a determinação das propriedades termofísicas das espécies químicas envolvidas na reação, obtidos de McBride *et al.* (1993). Na determinação das condições de equilíbrio, nove diferentes modelos para o par propelente H_2/O_2 foram utilizados, com um número total de espécies variando entre três e oito e contando de nenhuma a 18 reações de dissociação. A metodologia empregada para a determinação das condições de desequilíbrio químico também foi apresentada, sendo que, para este caso, apenas modelos químicos de seis e de oito espécies foram consideradas. Ressalta-se que ambas as metodologias são gerais, podendo ser empregadas para quaisquer modelos químicos de reações.

3 MODELAGEM COMPUTACIONAL E ESTIMATIVA DE ERROS

A rápida evolução da capacidade de processamento dos computadores tem possibilitado a utilização de técnicas numéricas na solução de equações diferenciais parciais que modelam diversos problemas, muitos deles complexos, nas áreas da engenharia e da física (MALISKA, 1995; ROACHE, 1998; ZHANG *et al.*, 2001). Tal evolução, associada à utilização de técnicas computacionais, como o processamento paralelo, reflete-se positivamente no custo relativo da experimentação numérica (simulações), que vem se reduzindo em comparação à experimentação convencional.

Observa-se, contudo, que embora a simulação não substitua (nem substituirá) a experimentação convencional, a utilização de modelos numéricos desempenha uma função importante no projeto, na análise e na otimização de sistemas da engenharia (ROY, 2005). Um exemplo de utilização conjunta da experimentação convencional e de métodos numéricos pode ser visto durante a concepção do aeroporto de Kansai (Japão), cujo projeto de ar condicionado foi realizado utilizando-se diversas simulações numéricas, seguidas por ensaios em um modelo reduzido, construído com o intuito de complementar o estudo numérico (FORTUNA, 2000). Também no projeto de aviões o uso de técnicas numéricas é bastante difundido, visando à redução do trabalho de laboratório; como exemplo, cita-se o caso do Boeing 737-300, cuja atual configuração só foi possível graças a inúmeros experimentos numéricos (MALISKA, 1995).

Para que a simulação numérica alcance seu pleno potencial, entretanto, é necessário que se obtenha plena confiança de que os resultados numéricos obtidos sejam uma acurada representação da realidade. Isto pode ser alcançado utilizando-se ferramentas como a validação e a verificação numéricas (ROY, 2005).

Neste capítulo serão apresentados os modelos físicos, matemáticos e numéricos utilizados para a implementação dos códigos Mach1D, versão 5.0, e Mach2D, versão 6.0. São abordados, outrossim, aspectos fundamentais da Dinâmica dos Fluidos Computacional (comumente abreviado como CFD, da terminologia inglesa “*Computational Fluid Dynamics*”) empregados para a obtenção dos modelos numéricos. Neste capítulo serão discutidas, igualmente, as ferramentas de estimativa de erros numéricos utilizadas no decorrer deste trabalho.

3.1 MODELOS UNIDIMENSIONAIS

Em uma tubeira real, a mistura de gases de combustão apresenta um comportamento tridimensional, devido a variações azimutais, temporais e/ou oscilações resultantes de interações entre combustão, evaporação e mistura de propelentes. Nota-se, contudo, que por diversas vezes, tal comportamento é idealizado por meio de um modelo bidimensional axissimétrico. Neste caso, observa-se que ao longo de uma seção transversal ao escoamento, os campos de temperatura e de velocidade variam apenas ao longo do raio e do eixo axial da tubeira. Neste caso, em uma dada seção transversal ao eixo axial do motor-foguete, observam-se valores mais elevados para a temperatura e a velocidade na região central e mais baixos na região periférica do escoamento.

Atenta-se, contudo, que mesmo que o uso de modelos multidimensionais tenha se difundido no projeto de novos foguetes, é aceitável a utilização de modelos unidimensionais, modificadas apropriadamente por correções posteriores, com a finalidade de prever o escoamento reativo em motores-foguete (SUTTON e BIBLARZ, 2001). Observa-se, também, que modelos unidimensionais podem ser utilizados como ferramentas auxiliares na compreensão de fenômenos físicos, podendo ser sua implementação encarada como etapa inicial para o desenvolvimento de ferramentas bi e tridimensionais.

Deste modo, foi realizada a implementação de um código unidimensional, capaz de solucionar o escoamento reativo (ou não) de uma mistura de gases (ou gás monoespécie) ao longo de uma tubeira: o código Mach1D, versão 5.0. Tal código, escrito em linguagem Fortran 95 (e compilado com o Compaq Visual Fortran 6.6), resolve cinco modelos físicos (e matemáticos) distintos:

1. solução numérica de escoamento monoespécie, com propriedades constantes;
2. solução numérica de escoamento monoespécie, com propriedades variáveis;
3. solução numérica de escoamento congelado;
4. solução numérica de escoamento em equilíbrio químico local;
5. solução numérica de escoamento com taxa finita de reação.

A solução analítica (isentrópica) é calculada qualquer que seja o modelo físico adotado. Isto se deve ao fato de que seus resultados são utilizados como estimativa inicial para os demais modelos físicos. Nos dois primeiros modelos físicos, por se tratarem de escoamentos de monoespécie, não são utilizados quaisquer modelos de reações químicas. A presença desses modelos só é observada para os modelos que tratam de misturas 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.

A combustão, para os modelos multiespécies, é simulada através de um modelo ideal, não se levando em consideração fenômenos como a mudança de fase (líquido-vapor) da mistura combustível-oxidante, ou parâmetros como o tamanho das gotas de combustível. Considera-se, outrossim, que todos os produtos do processo de combustão se apresentem em sua fase gasosa, eletricamente neutros, constituindo-se em uma mistura perfeitamente homogênea.

3.1.1. Modelos físicos

Na concepção do código Mach1D, versão 5.0, cinco diferentes modelos físicos foram adotados: dois modelos monoespécie (o primeiro apresentando propriedades constantes e o segundo possuindo propriedades variáveis) e três modelos para misturas de gases (correspondentes aos escoamentos congelado, em equilíbrio químico local e em desequilíbrio químico). Para cada um dos modelos citados, algumas considerações foram empregadas, sendo apresentadas na seqüência.

Escoamento monoespécie com propriedades constantes:

Para este modelo é utilizado um gás monoespécie compressível com propriedades constantes, sendo estas informadas pelo usuário do código. Os efeitos viscosos sobre o escoamento podem ser desprezados ou não, a critério da análise efetuada; isto é válido também para os efeitos de troca de calor bem como os efeitos de dissipação viscosa.

Com relação ao escoamento, admite-se um escoamento interno, não-reativo, quase-unidimensional, em regime permanente. Propriedades, como o fator de atrito de Darcy (f), o fator de recuperação (rec), cuja definição é fornecida na seção 3.1.2, e o coeficiente de convecção entre o gás e a parede (h_g), são consideradas constantes. A tubeira possui uma seção transversal circular, de área variável, dotada de paredes adiabáticas (ou não). Os efeitos da radiação térmica podem (ou não) ser desprezados e propriedades como a emissividade média entre a parede e o gás ($\bar{\epsilon}$) e a temperatura da parede (T_{wall}) são tomadas como constantes.

Escoamento monoespécie com propriedades variáveis

Este modelo se diferencia do anterior pelo fato de o fluido (neste trabalho, vapor de água) apresentar algumas propriedades variáveis: calor específico a pressão constante (c_p), razão entre calores específicos (γ), viscosidade absoluta (μ) e condutividade térmica (k), todos calculados direta ou indiretamente através de polinômios interpoladores obtidos de McBride *et al.* (1993).

Escoamento congelado

Se a velocidade ao longo do escoamento for muito elevada em relação à velocidade das reações químicas, o tempo de permanência dos gases no interior do motor-foguete é muito pequeno; neste caso, praticamente não se verificam modificações na composição química da mistura de gases no interior da tubeira. Supõe-se, assim, que a composição química dos gases de combustão seja a mesma, desde a câmara de combustão até a exaustão da tubeira, sendo esta condição conhecida como modelo de escoamento congelado (ANDERSON JR., 1990). Neste caso, a composição química é calculada uma única vez, na determinação da mistura homogênea dos gases durante o processo de combustão.

A diferenciação entre os modelos físicos de escoamento monoespécie com propriedades variáveis e o escoamento congelado reside, fundamentalmente, pelo fato de que este último contempla uma mistura de gases, com até oito espécies do sistema H_2/O_2 (conforme Tabela 2.1, apresentada na seção 2.4). Desta forma, são obtidas as propriedades termofísicas para cada espécie que compõe a mistura, sendo então avaliadas as propriedades da mistura, utilizando-se, para tanto, as frações mássicas de cada espécie.

Escoamento em equilíbrio químico local

Quando a velocidade das reações químicas é extremamente elevada, pode-se considerar que a mistura de gases atinge o equilíbrio químico em todos os pontos do escoamento. Tem-se, então, um segundo caso de idealização do modelo físico real, conhecido como escoamento em equilíbrio químico local (ANDERSON Jr, 1990). Assim, a determinação da composição química deve ser efetuada para cada um dos volumes finitos, nos quais o domínio é dividido, sendo esta a diferença fundamental entre os modelos de escoamento congelado e em equilíbrio químico local. Os modelos de escoamento congelado e

de escoamento em equilíbrio químico local se constituem nos dois casos-limite: o primeiro correspondente ao modelo de velocidade de reação nula e o segundo ao de velocidade de reação infinita em relação à velocidade de escoamento.

Escoamento em desequilíbrio químico local (ou com taxa finita de reação)

Similarmente à condição de equilíbrio químico local, no escoamento com taxa finita de reação observa-se a variação da composição química da mistura de gases de combustão para cada seção transversal ao longo do escoamento. Contudo, na taxa finita, por se tratar de uma condição de não-equilíbrio, devem ser estimadas as taxas de geração de massa de cada espécie química presente no escoamento, diferentemente do observado no modelo de equilíbrio químico local.

Os modelos químicos adotados para o escoamento com taxa finita de reação foram escolhidos entre os de seis e de oito espécies químicas utilizados para os escoamentos congelado e em equilíbrio químico local. Observa-se, entretanto, a ausência do modelo químico 4 e a divisão do modelo químico 3 em dois, conforme pode ser visto na Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Modelos de reações químicas implementadas no programa Mach1D 5.0, para escoamento em desequilíbrio químico.

Modelo	L	N	Espécies envolvidas	Observações
31	4	6	H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H	4 reações com 3º corpo de Barros <i>et al.</i> (1990)
32	4	6	H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H	4 reações com 3º corpo de Smith <i>et al.</i> (1987)
5	8	6	H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H	8 reações, sendo 4 com 3º corpo; modelo de Barros <i>et al.</i> (1990)
7	8	6	H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H	8 reações, sendo 4 com 3º corpo; modelo de Smith <i>et al.</i> (1987)
10	6	8	H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H, HO ₂ , H ₂ O ₂	6 reações com 3º corpo, sendo 4 modelo 31 e 2 do modelo de Kee <i>et al.</i> (1990)
9	18	8	H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H, HO ₂ , H ₂ O ₂	18 reações, sendo 5 com 3º corpo; modelo de Kee <i>et al.</i> (1990)

3.1.2. Modelo matemático

O modelo matemático adotado para cada um dos cinco modelos físicos é bastante similar, sendo baseado nas equações da conservação da massa, da conservação da quantidade de movimento linear, da conservação da energia térmica e na de estado dos gases perfeitos, dadas nesta ordem, por (para a hipótese de regime permanente) (KUNDU, 1990; MALISKA, 1995):

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

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

$$(c_p)_f \frac{d}{dx}(\rho u S T) = u S \frac{dP}{dx} + S_{eq/TF}, \quad (3.3)$$

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

sendo: ρ , u , P e T as quatro variáveis dependentes, representando a massa específica, a velocidade, a pressão e a temperatura, nesta ordem; x representa a coordenada axial da tubeira; S a área da seção transversal ao longo do eixo longitudinal da tubeira; R a constante da mistura de gases no interior da tubeira e $(c_p)_f$ o calor específico congelado, a pressão constante, de tal mistura.

A parcela $S_{eq/TF}$ constitui-se em um termo-fonte da equação da energia, Eq. (3.3), cujo valor é nulo no caso de escoamentos monoespécie e congelado e deve ser avaliado através da seguinte expressão (KUO, 1986):

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

no caso de escoamento em equilíbrio químico local; e por (KUO, 1986):

$$S_{eq/xf} = -S \sum_{i=1}^N h_i \dot{w}_i, \quad (3.6)$$

no caso de escoamento em desequilíbrio químico local, observando-se que: N é o número total de espécies químicas; Y_i , h_i e \dot{w}_i , nessa ordem, representam a fração mássica, a entalpia e a taxa de geração de uma espécie química i .

É importante observar, também, que no caso dos escoamentos em equilíbrio químico local e em desequilíbrio químico, o calor específico congelado a pressão constante $(c_p)_f$ e a razão entre os calores específicos (γ) são variáveis de acordo com a posição na tubeira. Neste caso, tais propriedades devem ser estimadas através de expressões especiais, apresentadas a seguir (KUO, 1986):

$$(c_p)_f = \sum_{i=1}^N \left[Y_i (c_p)_{f_i} \right], \quad (3.7)$$

sendo $(c_p)_{f_i}$ o calor específico para cada espécie química i , em cada volume de controle (admitida a composição química constante para esse volume), obtido através da Eq. (2.17), e

$$\gamma = \frac{1}{1 + \frac{P}{M} \sum_{i=1}^N \left[\left(\frac{\partial X_i}{\partial P} \right)_T \cdot M_i \right]} \cdot \frac{(c_p)_f}{(c_p)_f - R}, \quad (3.8)$$

sendo X_i a fração molar da espécie i e a constante da mistura de gases obtida por (KUO, 1986)

$$R = \sum_{i=1}^N Y_i R_i. \quad (3.9)$$

No caso do escoamento em desequilíbrio químico, faz-se necessário utilizar uma quinta relação, além das Eqs. (3.1) a (3.4): a equação da conservação da massa para cada espécie química i isoladamente (KUO, 1986; KEE *et al.*, 1990),

$$\frac{d}{dx} (\rho u S Y_i) = S \dot{w}_i, \quad (3.10)$$

sendo (KEE *et al.*, 1990):

$$\dot{w}_i = M_i \sum_{j=1}^L (\Delta \nu_{ij} \theta_j), \quad (3.11)$$

na qual: $\Delta \nu_{ij}$, calculado por $\Delta \nu_{ij} = \nu_{ij}'' - \nu_{ij}'$, representa a diferença entre o número de moles formados e consumidos durante a reação j ; θ_j é a taxa de geração de espécies relacionada à reação j ; e L é o número total de reações químicas.

3.1.3. Modelo numérico

Os coeficientes e termos-fontes das equações discretizadas são apresentados no Apêndice A, sendo feitos nesta seção comentários gerais sobre sua obtenção.

As equações que modelam matematicamente o escoamento no interior da tubeira são discretizadas através do método de volumes finitos. A tubeira é dividida em $Nvol$ volumes de controle, na direção axial (x), sendo feita a integração de cada uma das equações diferenciais – Eqs. (3.1) a (3.3) – em um dos volumes. A malha, constituída pelos volumes de controle, pode ser uniforme ou não, sendo utilizado o esquema de volumes de faces centradas.

É utilizada, também, uma formulação adequada a qualquer regime de velocidades (MARCHI e MALISKA, 1994), com arranjo co-localizado de variáveis (MALISKA, 1995) e funções de interpolação de primeira ordem (UDS) ou de segunda ordem (CDS) com correção adiada (FERZIGER e PERIĆ, 2001). A escolha por uma ou outra função de interpolação é feita através de um fator β ($\beta = 0$, esquema UDS; $\beta = 1$, esquema CDS), que permite outrossim uma função de interpolação mista, no caso de $0 < \beta < 1$. Do processo de discretização, resulta um sistema algébrico de equações lineares, cuja solução é alcançada utilizando-se o método TDMA (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995; TANNEHILL *et al.*, 1997; FERZIGER e PERIĆ, 2001). Deve-se atentar que, pelo fato de ser utilizada uma formulação adequada a qualquer velocidade, é obtido o perfil de velocidades para todo o escoamento e não somente para a região supersônica, como é comumente apresentado utilizando-se o método das características (SMITH *et al.*, 1987; BARROS, 1993).

Da equação da conservação da quantidade de movimento, Eq. (3.2), obtém-se um sistema de equações para a determinação da velocidade nodal (u_p). Com relação à equação da conservação da massa, Eq. (3.1), é utilizado o Método SIMPLEC (VAN DOORMAAL e

RAITHBY, 1984) para o acoplamento pressão-velocidade, transformando tal equação em uma relação para obtenção de uma correção da pressão (P').

Em função da necessidade de que as velocidades nas faces do volume de controle fossem avaliadas, utiliza-se a equação da conservação da quantidade de movimento linear discretizada para um volume de controle P e seu vizinho a jusante E. Combinando-se ambas as equações, conforme proposto por Marchi e Maliska (1994), obtêm-se expressões para as faces a montante (oeste, u_w) e a jusante (leste, u_e) do volume de controle P.

A temperatura no volume de controle é obtida diretamente da discretização da equação da energia, Eq. (3.3), diferentemente de outros trabalhos em que tal equação é formulada em função da entalpia (BARROS, 1993; LAROCA, 2000). Por último, a massa específica (ρ) é determinada a partir das demais propriedades termodinâmicas, utilizando-se para tanto a equação de estado, Eq. (3.4).

3.1.4. Condições de contorno

As condições de contorno empregadas na modelagem unidimensional estão representadas na Figura 3.1, sendo a seguir definidas:

- Condições de entrada: A temperatura (T) e a pressão (P) da mistura de gases de combustão são tomadas como funções das propriedades de estagnação; a composição química (frações mássicas - Y_i) das espécies químicas é definida a partir da temperatura e pressão locais; e a velocidade (u) na entrada é extrapolada linearmente da velocidade no interior da câmara-tubeira.

$$\begin{cases} T = f(T_0); & P = f(P_0) \\ Y_i = f(T, P); & \frac{d^2 u}{dx^2} = 0 \end{cases} \quad (3.12)$$

- Condições na saída da tubeira: A solução do escoamento em tubeiras não requer condições de contorno na saída quando o escoamento é supersônico nessa região. Contudo, para implementação de um modelo numérico, há necessidade da especificação das condições de contorno para tal região. Sendo assim, as condições de contorno na saída da tubeira para temperatura (T), pressão (P), velocidade (u) e

frações mássicas (Y_i) são tomadas como extrapolações lineares dessas propriedades para os valores encontrados no interior da câmara-tubeira.

$$\begin{cases} \frac{d^2 T}{dx^2} = 0; & \frac{d^2 P}{dx^2} = 0 \\ \frac{d^2 u}{dx^2} = 0; & \frac{d^2 Y_i}{dx^2} = 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

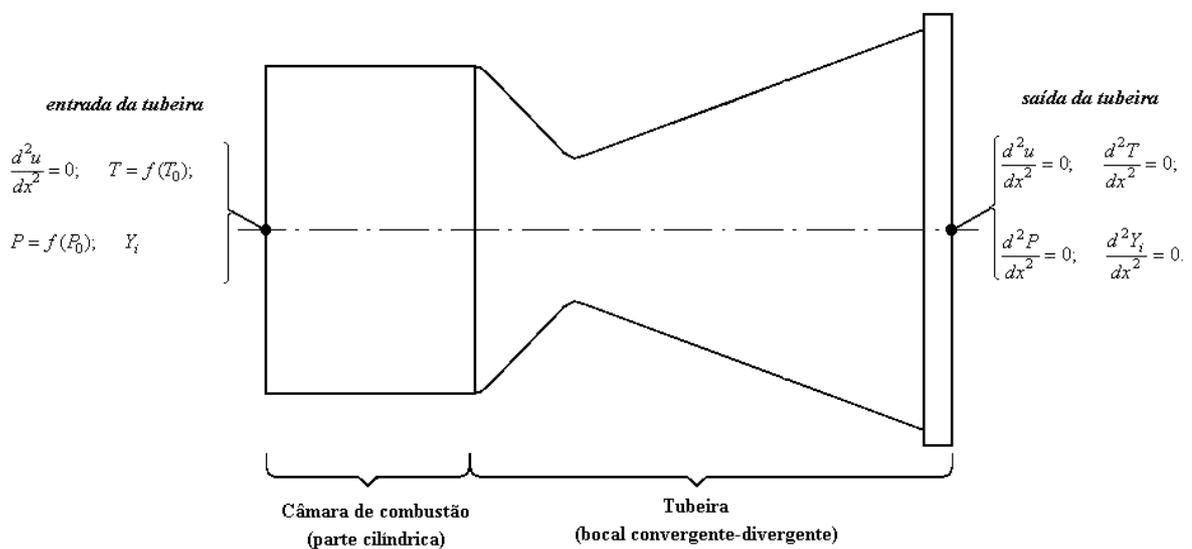


Figura 3.1: Condições de contorno para o escoamento 1D na tubeira.

3.1.5. Algoritmo do código Mach1D 5.0

É apresentado, na seqüência, o algoritmo básico para solução do escoamento reativo (ou não) da mistura de gases (ou gás monoespécie) no interior de uma tubeira. Tal algoritmo foi implementado no código Mach1D, versão 5.0, utilizando-se como linguagem de programação Fortran 95 e compilador Compaq 6.6.

1. Inicialização dos campos de pressão (P), temperatura (T), velocidade (u) e massa específica (ρ), no instante de tempo t , utilizando a solução analítica para escoamento isentrópico de gás perfeito.
2. Estimativa dos campos para o instante de tempo $t + \Delta t$ (a integração de todas as equações é baseada em uma formulação totalmente implícita, sendo o tempo utilizado

apenas como parâmetro de relaxação, uma vez que se soluciona um escoamento em regime permanente).

3. Determinação de propriedades termofísicas, como calor específico a pressão constante (c_p), razão entre calores específicos (γ) e constante do gás ou da mistura de gases (R).
4. Estimativa da pressão e da velocidade de entrada na tubeira.
5. Cálculo dos coeficientes oriundos da discretização da equação da quantidade de movimento linear e conseqüente solução do sistema algébrico de equações, através do método TDMA, obtendo-se o campo de velocidades u .
6. Cálculo dos coeficientes do método SIMPLEC.
7. Cálculo da velocidade nas faces.
8. Estimativa da temperatura na entrada da tubeira.
9. Cálculo dos coeficientes oriundos da discretização da equação da energia e posterior solução do sistema algébrico de equações, através do método TDMA, obtendo-se o campo de temperaturas T .
10. Cálculo da massa específica para o interior e as faces dos volumes de controle.
11. Cálculo dos coeficientes oriundos da discretização da equação da conservação da massa e posterior solução do sistema algébrico de equações, através do método TDMA, obtendo-se o campo de correção de pressão P' .
12. Correção da pressão nodal, da massa específica nas faces e no interior dos volumes de controle e da velocidade nodais e nas faces dos volumes, utilizando P' .
13. Caso se trate de modelo de escoamento com taxa finita de reação, cálculo dos coeficientes, termos-fontes e condições de contorno para as frações mássicas Y_i , solucionando o sistema gerado através do método TDMA.
14. Retornar ao item 2, até atingir o número desejado de iterações.
15. Pós-processamento.

3.2 MODELOS BIDIMENSIONAIS

Os modelos unidimensionais utilizados na análise de escoamentos reativos em tubeiras fornecem, de um modo geral, estimativas satisfatórias para as diversas propriedades do mesmo, como a temperatura, a pressão, a velocidade axial e/ou o número de Mach (SUTTON e BIBLARZ, 2001). Em certas situações, porém, os modelos unidimensionais não apresentam

resultados aceitáveis, como em estudos de choques oblíquos. Atenta-se, outrossim, ao fato de que o escoamento real na tubeira apresenta um comportamento bidimensional, em que os campos das propriedades variam não apenas axialmente ao longo da linha de simetria do motor-foguete, mas também radialmente. Por esse motivo, diversos modelos multidimensionais têm sido elaborados e implementados, como aqueles propostos por Barros (1993) e Wang (2006).

Nesta seção são apresentados os modelos físicos, matemático e numérico inerentes ao código Mach2D 6.0, destinado à solução de escoamento reativo (ou não) de uma mistura de gases (ou de um gás monoespécie) em motores-foguetes. Tal código foi implementado em linguagem Fortran 95, utilizando-se compilador Compaq Visual 6.6. Empregou-se o Método dos Volumes Finitos na discretização das equações diferenciais, utilizando-se volumes fictícios para aplicação das condições de contorno. A combustão, assim como no código Mach1D, foi idealizada, não se levando em consideração fenômenos como a mudança de fase da mistura combustível-oxidante ou parâmetros como o tamanho das gotas do combustível.

3.2.1. Modelos físicos

Os modelos físicos implementados no código bidimensional são basicamente os mesmos anteriormente apresentados para o código unidimensional: escoamento monoespécie com propriedades constantes, monoespécie com propriedades variáveis, escoamento congelado, em equilíbrio químico local e em desequilíbrio químico. Nota-se, contudo, que algumas hipóteses não incluídas no modelo unidimensional foram adotadas no caso do escoamento bidimensional:

- ausência de efeitos viscosos;
- ausência de transferência de calor do fluido para a parede.

3.2.2. Modelo matemático

O modelo matemático é baseado nas equações de conservação da massa, da conservação de quantidade movimento linear nas direções axial e radial (Equações de Euler), equação da energia e equação de estado, apresentadas nesta ordem, considerando-se um escoamento em regime permanente (KUNDU, 1990):

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v) = 0, \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v u) = -\frac{\partial P}{\partial z}, \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v v) = -\frac{\partial P}{\partial r}, \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u T) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v T) = \frac{1}{(c_p)_f} [\nabla(P \vec{V}) - P \nabla \vec{V}] + S_{eq/ff}, \quad (3.17)$$

$$P = \rho R T, \quad (3.18)$$

sendo: ρ , u , v , P e T as cinco variáveis dependentes, representando a massa específica, a velocidade axial, a velocidade radial, a pressão e a temperatura, nesta ordem; z e r , as direções axial e radial, respectivamente; $(c_p)_f$ o calor específico congelado a pressão constante; R , a constante da mistura de gases no interior da tubeira; \vec{V} , o vetor velocidade; e $S_{eq/ff}$, o termo-fonte químico, dado por (KUO, 1986):

$$S_{eq/ff} = -\frac{1}{(c_p)_f} \left[\sum_{i=1}^N h_i \frac{\partial}{\partial z}(\rho u Y_i) - \sum_{i=1}^N h_i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v Y_i) \right], \quad (3.19)$$

para o modelo de escoamento em equilíbrio químico local; e (KUO, 1986)

$$S_{eq/ff} = -\frac{1}{(c_p)_f} \sum_{i=1}^N h_i \dot{w}_i, \quad (3.20)$$

no caso do modelo de escoamento com taxa finita de reação, sendo N o número total de espécies, Y_i , h_i e \dot{w}_i , nesta ordem, a fração mássica, a entalpia e a taxa de geração de massa da espécie química i . Para os demais modelos físicos (escoamentos monoespécie e congelado), tal termo-fonte é nulo. Deve-se atentar, ainda, que no caso do modelo de escoamento com

taxa finita de reação, há a necessidade da solução de uma última equação para a conservação mássica de cada espécie química i , dada por:

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u Y_i) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v Y_i) = \dot{w}_i, \quad (3.21)$$

sendo \dot{w}_i obtida utilizando-se a Eq. (3.11).

No caso dos escoamentos em equilíbrio químico local e em desequilíbrio químico, o valor do calor específico (c_p), empregado na equação da energia, deve ser obtido para cada volume de controle. Para tanto, é utilizada a Eq. (3.7).

3.2.3. Modelo numérico

O primeiro passo para a obtenção do modelo numérico é a transformação do sistema de coordenadas axissimétrico (z - r) para um sistema de coordenadas generalizado (ξ - η) (MALISKA, 1995). As equações transformadas podem ser escritas da seguinte forma geral, Eq. (3.22), cujos coeficientes são apresentados na Tabela 3.2.

$$\frac{1}{J} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \xi}(r \rho U \Phi) + \frac{1}{J} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \eta}(r \rho V \Phi) = -\hat{P}^\Phi + \hat{S}^\Phi, \quad (3.22)$$

sendo:

$$U = u r_\eta - v z_\eta, \quad (3.23)$$

e

$$V = v z_\xi - u r_\xi. \quad (3.24)$$

O Jacobiano (J) é obtido através das funções transformadas, podendo ser calculado através da seguinte expressão:

$$J = \frac{1}{z_\xi r_\eta - r_\xi z_\eta}. \quad (3.25)$$

Tabela 3.2: Valores dos coeficientes para a equação transformada geral.

Equação de conservação	Φ	\hat{P}^Φ	\hat{S}^Φ
Massa	1	0	0
Quantidade de movimento axial	u	$\frac{\partial P}{\partial \xi} r_\eta - \frac{\partial P}{\partial \eta} r_\xi$	0
Quantidade de movimento radial	v	$\frac{\partial P}{\partial \eta} z_\xi - \frac{\partial P}{\partial \xi} z_\eta$	0
Energia	T	0	$\frac{1}{J c_p} [\nabla(P \vec{V}) - P \nabla \vec{V}]_+ S_{eq/lf}$
Espécies	Y_i	0	$\frac{\dot{w}_i}{J}$

Para a discretização das equações, foi utilizado o Método dos Volumes Finitos, associado a uma formulação adequada para qualquer velocidade (MARCHI e MALISKA, 1994), arranjo co-localizado de variáveis (MALISKA, 1995) e funções de interpolação de primeira ordem (UDS) ou de segunda ordem (CDS) com correção adiada (FERZIGER e PERIĆ, 2001). As condições de contorno foram aplicadas mediante o uso de volumes fictícios. Do processo de discretização, resulta um sistema algébrico de equações lineares, cuja solução é obtida utilizando-se o método MSI, “*Modified Strong Implicit*”, (SCHNEIDER e ZEDAN, 1981). Ressalta-se que por ser utilizado uma formulação adequada a qualquer regime de velocidades, obtém-se um perfil para todo o escoamento, desde a entrada da tubeira (regime subsônico) até sua saída (regime supersônico), diferentemente dos resultados comumente apresentados, baseados no método das características.

Das equações de conservação da quantidade de movimento linear são obtidas expressões para a determinação das velocidades nodais nas direções axial e radial. A equação da conservação da massa é utilizada para a determinação de uma correção de pressão, obtida através do acoplamento pressão-velocidade, empregando-se o Método SIMPLEC (VAN DOORMALL e RAITHBY, 1984). No código Mach2D também se mostra necessário avaliar as velocidades nas faces do volume de controle, o que é feito empregando-se um procedimento análogo apresentado para o código Mach1D, empregando-se as equações de conservação da quantidade de movimento linear e os volumes de controle P e seus vizinhos a jusante (E) e superior (N).

A obtenção da temperatura no código Mach2D é feita diretamente a partir da equação da energia, em procedimento análogo ao empregado no código Mach1D. E a equação de estado é empregada para obtenção da massa específica, sendo conhecidas as demais propriedades termodinâmicas da mistura de gases (ou do gás monoespécie).

Os coeficientes e termos-fontes provenientes da discretização do modelo bidimensional são apresentados no Apêndice B.

3.2.4. Condições de contorno

As condições de contorno, mostradas na Figura 3.2, são definidas como se segue:

- Condições de entrada: A temperatura (T) e a pressão (P) da mistura de gases de combustão são tomadas como funções das propriedades de estagnação; a composição (frações mássicas - Y_i) das espécies químicas é definida a partir da temperatura e pressão locais; a velocidade axial (u) na entrada é extrapolada linearmente da velocidade no interior da câmara-tubeira, enquanto a velocidade radial (v) é nula.

$$\left\{ \begin{array}{l} T = f(T_0); \quad P = f(P_0); \\ Y_i = f(T, P); \quad \frac{d^2 u}{dz^2} = 0; \quad v = 0 \end{array} \right. \quad (3.26)$$

- Condições na parede da tubeira: Parede adiabática, impermeável.
- Condições no centro da tubeira (linha de simetria): Condições de simetria (impermeável, adiabática).
- Condições na saída da tubeira: A solução do escoamento em tubeiras não requer condições de contorno na saída quando o escoamento é supersônico nessa região. Contudo, para implementação de um modelo numérico, há necessidade da especificação das condições de contorno para tal região. Sendo assim, as condições de contorno na saída da tubeira para temperatura (T), pressão (P), velocidades axial (u) e radial (v) e frações mássicas (Y_i) são tomadas como extrapolações lineares dessas propriedades para os valores encontrados no interior da câmara-tubeira.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 T}{dz^2} = 0; \quad \frac{d^2 P}{dz^2} = 0; \\ \frac{d^2 Y_i}{dz^2} = 0; \quad \frac{d^2 u}{dz^2} = 0; \quad \frac{d^2 v}{dz^2} = 0 \end{array} \right. \quad (3.27)$$

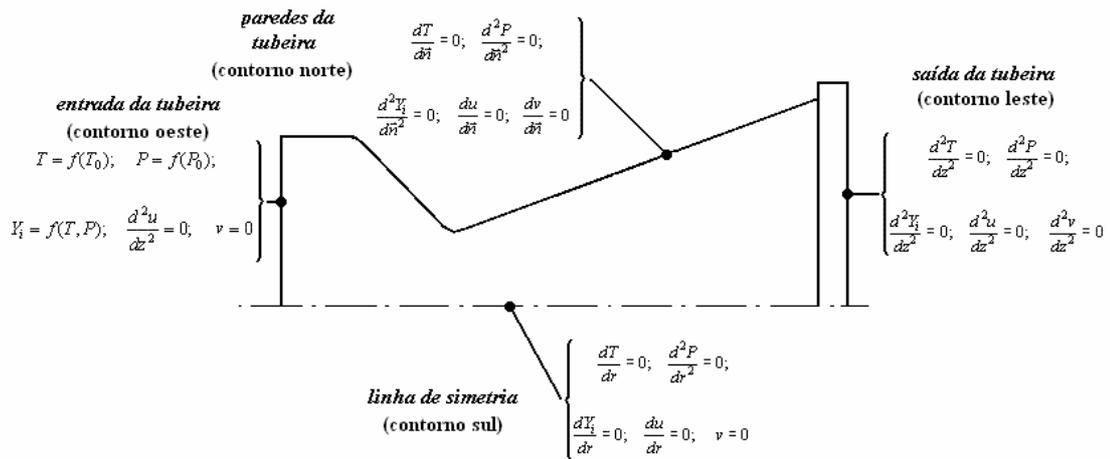


Figura 3.2: Condições de contorno aplicadas à tubeira 2D.

3.2.5. Algoritmo do código Mach2D 6.0

Na seqüência é apresentado o algoritmo para a solução do escoamento bidimensional dos gases de combustão no interior da tubeira. Para tanto, foram utilizadas as equações de conservação da quantidade de movimento nas direções axial e radial, de conservação da energia e de conservação da massa (já discretizadas), bem como a equação de estado.

1. Leitura dos dados.
2. Geração da malha.
3. Cálculo das métricas ($z_\xi, z_\eta, r_\xi, r_\eta$).
4. Estimativa inicial para o momento $t + \Delta t$.
5. Cálculo da pressão e da temperatura na entrada da tubeira com base na velocidade de entrada.
6. Cálculo do calor específico a pressão constante.

7. Cálculo dos coeficientes, termos-fontes e condições de contorno para a velocidade u , solucionando o sistema gerado através do método MSI.
8. Cálculo dos coeficientes, termos-fontes e condições de contorno para a velocidade v , solucionando o sistema gerado através do método MSI.
9. Cálculo dos coeficientes, termos-fontes e condições de contorno para a temperatura T , solucionando o sistema gerado através do método MSI.
10. Cálculo de ρ_p e de ρ_e , através da equação de estado.
11. Cálculo dos coeficientes do método SIMPLEC.
12. Cálculo de U_e e de V_n (velocidade contravariante na face leste e velocidade contravariante na face norte do volume de controle).
13. Cálculo dos coeficientes, termos-fontes e condições de contorno para a correção de pressão P' , solucionando o sistema gerado através do método MSI.
14. Correção das variáveis utilizando-se a correção de pressão P' .
15. Retornar ao item 13 até atingir o número máximo de iterações do ciclo da massa.
16. Caso se trate de modelo de escoamento com taxa finita de reação, cálculo dos coeficientes, termos-fontes e condições de contorno para as frações mássicas Y_i , solucionando o sistema gerado através do método MSI.
17. Retornar ao item 4, até atingir o número máximo de iterações ou satisfazer um critério de convergência.
18. Pós-processamento.

3.3 ESTIMATIVA DE ERROS

Devido à crescente capacidade de processamento dos computadores e a avanços na computação paralela, o custo da simulação numérica tem diminuído em relação à experimentação tradicional, tornando-a uma importante ferramenta no projeto, análise e otimização de sistemas em engenharia. Observa-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). Tal confiabilidade também se faz necessária em publicações científicas, como atestam as políticas de publicação de revistas como “*Journal of Fluids Engineering*”, “*Journal of Heat Transfer*” e “*Journal of Spacecraft and Rockets*”, entre outras (ROACHE, 1998).

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 um 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. Atenta-se que, enquanto a verificação do código é realizada normalmente uma única vez, a verificação da solução deve ser realizada sempre que uma simulação é significativamente diferente daquelas anteriormente realizadas (ROY, 2005). Neste contexto, é imprescindível o estudo de erros numéricos, o que é feito brevemente nesta seção.

3.3.1. Generalidades

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 (ϕ) e a analítica exata (Φ), para qualquer variável de interesse, sendo tal diferença denominada de erro da solução numérica ou, simplesmente, erro numérico – $E(\phi)$ (FERZIGER e PERIĆ, 2001):

$$E(\phi) = \Phi - \phi . \quad (3.28)$$

Este erro pode ser ocasionado por diversas fontes, sendo classificado em (MARCHI, 2001): erros de truncamento (E_T), erros de iteração (E_n), erros de arredondamento (E_π) e erros de programação (E_p), ou seja,

$$E(\phi) = E(E_T, E_n, E_\pi, E_p). \quad (3.29)$$

Erros de truncamento são originários do processo de discretização de um modelo matemático (TANNEHILL *et al.*, 1997). Ao erro de truncamento está relacionado o conceito de consistência de um método numérico. Para que um método seja consistente, é necessário que o erro de truncamento torne-se nulo para malhas numéricas bastante refinadas, ou seja, a equação discretizada deve tender à equação original, quando a malha tende a zero (MALISKA, 1995). A consistência, contudo, não garante que a solução do problema discretizado seja a solução exata para malhas extremamente refinadas; para tanto, é necessário que haja estabilidade do método. A estabilidade em um método numérico é obtida quando os erros não cresçam em magnitude na seqüência dos procedimentos numéricos para obtenção da solução (TANNEHILL *et al.*, 1997). Consistência e estabilidade são condições necessárias e suficientes para a convergência. A solução numérica é convergente quando é estável e tende para a solução das equações diferenciais quando a malha é refinada (MALISKA, 1995).

Erros de iteração estão associados à utilização de métodos iterativos na solução dos sistemas de equações algébricas obtidas do processo de discretização das equações diferenciais governantes do fenômeno físico estudado. Considerando-se que a solução do sistema de equações seja única, define-se o erro de iteração como sendo a diferença entre a solução exata e a solução do sistema de equações em uma dada iteração (FERZIGER e PERIĆ, 2001). Esse erro pode ser originado por diferentes fatores (MARTINS, 2002), como: o emprego de métodos iterativos para solução das equações discretizadas, o uso de métodos segregados na obtenção da solução de modelos constituídos por várias equações diferenciais, ou ainda pela existência de não-linearidades no modelo matemático.

Erros de arredondamento estão relacionados à capacidade finita de representação de um certo número por um computador. Desta forma, os números são armazenados levando-se em consideração um número limitado de dígitos, que varia de acordo com a linguagem de programação, o tipo de variável utilizado e o processador empregado (MARTINS, 2002).

Erros de programação, por sua vez, são inerentes ao programador e à utilização do código implementado, incluindo basicamente (ROACHE, 1998): os erros resultantes do uso incorreto de um modelo numérico na aproximação de um modelo matemático, os erros gerados na implementação do modelo numérico em um código computacional, os erros cometidos no uso do código durante a solução numérica e quaisquer outras fontes de erro.

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 (ϕ_∞) e a própria solução numérica, ou seja,

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi. \quad (3.30)$$

A incerteza de uma solução numérica é calculada utilizando-se estimadores de erro, como os estimadores de Richardson e GCI (ROACHE, 1998), apresentados na seção 3.3.2.

3.3.2. Estimadores de erro

No caso em que os erros de programação, de arredondamento e de iteração são controlados a ponto de serem desprezíveis, observa-se que o erro da solução numérica obtida

é causado pelos erros de truncamento. Neste caso, o erro numérico recebe a denominação de erro de discretização (FERZIGER e PERIĆ, 2001), podendo ser expresso como:

$$E(\phi) = b_1 h^{p_L} + b_2 h^{p_2} + b_3 h^{p_3} + \dots, \quad (3.31)$$

conhecida como equação geral do erro de truncamento (ou de discretização), na qual: os b_i são coeficientes independentes do tamanho da malha (h), mas que podem ser funções da variável dependente; e os p_v (isto é, p_L, p_2, p_3, \dots) são as ordens verdadeiras do erro. Por definição, as ordens verdadeiras (p_v) correspondem aos expoentes de h dos termos não-nulos. O menor dos expoentes de h na equação geral do erro de truncamento é denominado ordem assintótica (p_L), que deve ser um número inteiro positivo, satisfazendo a condição: $p_L \geq 1$.

As estimativas de erro de discretização podem ser classificadas em dois grupos básicos (SZÁBO e BABUSKA, 1991): estimativas “*a priori*” e estimativas “*a posteriori*”. Enquanto as estimativas de erro “*a priori*” são utilizadas para estimar a ordem do erro de discretização (através da estimativa do erro de truncamento via série de Taylor), as estimativas de erro “*a posteriori*” são usadas efetivamente para avaliar a magnitude do erro de discretização. As estimativas de erro “*a posteriori*” podem ser divididas em dois grandes grupos (MARCHI, 2001): o primeiro, na qual a estimativa de erro é avaliada a partir da solução numérica em uma única malha (usualmente utilizada para o método de elementos finitos); e o segundo, na qual as estimativas de erros são feitas utilizando-se resultados de várias malhas (normalmente utilizado para os métodos de diferenças e de volumes finitos).

A qualidade de uma estimativa de erro pode ser avaliada através de sua efetividade (θ), definida como a razão entre a incerteza (U) e o erro (E) (ZHU e ZIENKIEWICZ, 1990):

$$\theta = \frac{U}{E}. \quad (3.32)$$

Uma estimativa de erro é considerada ideal quando sua efetividade é igual à unidade ($\theta = 1$), o que significa que a estimativa é igual ao erro. Neste caso, diz-se que a estimativa é confiável e apresenta a máxima acurácia possível. Uma estimativa é considerada confiável quando a magnitude da incerteza é superior à magnitude do erro de iteração, apresentando ambas o mesmo sinal (MARCHI, 2001; MARTINS, 2002), ou seja, quando $\theta \geq 1$. Se a magnitude da incerteza é próxima da magnitude do erro de iteração (o que implica em $\theta \approx 1$), diz-se que a estimativa de erro é acurada (CHAPRA e CANALE, 1994).

Observa-se, contudo, que poucos são os trabalhos que possuem análises de erros para problemas hiperbólicos (como é o caso do escoamento supersônico). Somente nos últimos anos a estimativa de erros e seu controle têm recebido uma maior atenção, apesar da importância dessa classe de problemas em aplicações práticas (ZHANG *et al.*, 2001). Mesmo trabalhos recentes, como o de Wang (2006) – bastante completo do ponto de vista físico por se estudar o escoamento tridimensional reativo, levando-se em consideração efeitos radiativos de transferência de calor e turbulência –, pecam por não apresentar as estimativas de erros numéricos associados à solução obtida.

Estimador de Richardson

Utilizando-se o estimador de Richardson (RICHARDSON e GAUNT, 1927; BLOTTNER, 1990), a incerteza (U_{Ri}) da solução numérica (ϕ), para qualquer variável de interesse, é obtida através da seguinte expressão:

$$U_{Ri} = \phi_{\infty} - \phi, \quad (3.33)$$

sendo ϕ_{∞} a estimativa do valor da solução analítica, obtida através da extrapolação de Richardson generalizada (ROACHE, 1994):

$$\phi_{\infty} = \phi_1 + \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(r_{21}^{PL} - 1)}, \quad (3.34)$$

sendo ϕ_1 e ϕ_2 as soluções numéricas obtidas em uma malha fina e uma malha grosseira, respectivamente; e r_{21} a razão de refino de malha, definida como o quociente entre o tamanho dos elementos de uma malha grosseira (h_2) e uma malha fina (h_1), ou seja,

$$r_{21} = \frac{h_2}{h_1}. \quad (3.35)$$

Para uma boa análise da solução numérica, é recomendável a utilização de r_{21} igual a 2.

Desta forma, obtém-se a seguinte expressão para o estimador de Richardson, baseada na ordem assintótica do erro:

$$U_{Ri}(\phi_1, p_L) = \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(r_{21}^{p_L} - 1)}, \quad (3.36)$$

O estimador de Richardson também pode ser obtido utilizando-se a ordem aparente do erro (p_U), ao invés da ordem assintótica, resultado na seguinte expressão:

$$U_{Ri}(\phi_1, p_U) = \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(r_{21}^{p_U} - 1)}, \quad (3.37)$$

sendo a ordem aparente (p_U) do erro estimado na malha fina definida como (para $r_{32} = r_{21}$):

$$p_U = \frac{\log\left[\frac{\phi_2 - \phi_3}{\phi_1 - \phi_2}\right]}{\log(r_{21})}, \quad (3.38)$$

onde ϕ_3 é a solução numérica em uma malha supergrossa, cujo tamanho dos elementos é h_3 .

Além das ordens assintótica e aparente do erro, em alguns casos pode-se, ainda, obter a ordem efetiva (p_E) do erro verdadeiro na malha fina (h_1), que é definida como:

$$p_E(h_1) = \frac{\log\left[\frac{E(\phi_2)}{E(\phi_1)}\right]}{\log(r_{21})}, \quad (3.39)$$

sendo: $E(\phi_1)$ e $E(\phi_2)$ o erro verdadeiro das soluções numéricas ϕ_1 e ϕ_2 , em duas malhas diferentes, h_1 (fina) e h_2 (grosseira), respectivamente. As ordens aparente e efetiva do erro permitem verificar “*a posteriori*” as soluções numéricas se a ordem assintótica dos erros de discretização são atingidos, uma vez que esta se trata de um resultado teórico, calculado “*a priori*” das soluções numéricas.

Estimador GCI

A estimativa de erro numérico, utilizando o estimador GCI (“*Grid Convergence Index*”) é feita utilizando-se a seguinte expressão (ROACHE, 1998):

$$U_{GCI}(\phi_1, p_L) = F_S \frac{|\phi_1 - \phi_2|}{(r_{21}^{p_L} - 1)}, \quad (3.40)$$

sendo F_S um fator de segurança, que usualmente apresenta valor igual a 3. A Eq. (3.40) pode ser generalizada para uma ordem de erro p , dando origem à seguinte expressão:

$$U_{GCI}(\phi_1, p) = F_S \frac{|\phi_1 - \phi_2|}{(r_{21}^p - 1)}, \quad (3.41)$$

sendo p o menor valor entre p_U e p_L , ou seja, $p = \min(p_U, p_L)$, desde que $p_U > 0$.

Para o estimador GCI, a solução numérica obtida representada na forma:

$$\phi = \phi_1 \pm U_{GCI}, \quad (3.42)$$

sendo ϕ_1 a solução numérica obtida na malha mais refinada e U a estimativa do erro (incerteza numérica). No caso dos estimadores de Richardson, o sinal da incerteza numérica é fornecido através da própria formulação, sendo a solução numérica representada através da seguinte expressão:

$$\phi = \phi_1 + U_{Ri}. \quad (3.43)$$

3.4 RESUMO DO CAPÍTULO 3

Neste capítulo foram apresentados os modelos uni e bidimensionais estudados neste trabalho, que deram origem aos códigos computacionais Mach1D, versão 5.0, e Mach2D, versão 6.0. Ambos os códigos foram implementados utilizando-se o Método de Volumes Finitos, com arranjo co-localizado de malhas (MALISKA, 1995), método SIMPLEC (VAN DOORMAAL e RAITHBY, 1984) para acoplamento pressão-velocidade, metodologia adequada a qualquer regime de velocidades (MARCHI e MALISKA, 1994) e condições de contorno aplicadas usando volumes fictícios. Como linguagem de programação, utilizou-se o

Fortran 95, com compilador Visual Compaq 6.6. No caso do código Mach2D foram empregadas, outrossim, malhas não-ortogonais.

Em ambos os códigos foram implementados os mesmos modelos físicos: escoamento monoespécie com propriedades constantes e com propriedades variáveis e escoamentos multiespécies (reativos) congelado, em equilíbrio químico local e em desequilíbrio químico. Para os escoamentos multiespécies, diferentes modelos químicos foram adotados, com número de espécies variando entre três e oito e número de reações de dissociação entre nenhum e dezoito.

Neste capítulo foi exposta brevemente, também, a terminologia e algumas definições pertinentes à estimativa de erros, como a classificação dos erros numéricos e as definições de acurácia e confiabilidade. Foram abordados, outrossim, os estimadores de erro de Richardson (RICHARDSON e GAUNT, 1927; BLOTTNER, 1990) e GCI (ROACHE, 1998), utilizados ao longo dos próximos capítulos.

4 RESULTADOS NUMÉRICOS UNIDIMENSIONAIS

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos com o código Mach1D, versão 5.0, destinado à solução numérica de escoamentos reativos (ou não) de mistura de gases (ou de escoamento monoespécie), ao longo de um motor-foguete. Este código, implementado em linguagem Fortran 95, com estrutura modular, foi apresentado na seção 3.1 (modelos físico, matemático e numérico, bem como o algoritmo), sendo utilizado o compilador Compaq Visual Fortran 6.6, para um projeto do tipo “*Fortran Standard Graphics or QuickWin Application*” e aritmética de dupla precisão. Foram feitas análises de erro para todos os modelos físicos analisados, utilizando-se os estimadores expostos na seção 3.3.

4.1 PARÂMETROS GERAIS

Para todos os estudos aqui apresentados, foi utilizada uma câmara-tubeira hipotética, empregada nos trabalhos de Marchi *et al.* (2000; 2004), sendo composta por uma câmara de combustão cilíndrica (de raio r_{in} e comprimento L_c) acoplada a um bocal convergente-divergente, de formato cossenoidal (com comprimento L_n). Tal perfil é mostrado através da Figura 4.1, enquanto a geometria discretizada, para uma malha de 80 volumes de controle, é apresentada na Figura 4.2. O raio r da tubeira na região cossenoidal ($x \geq L_c$) pode ser obtido através da seguinte expressão:

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

cujos valores são apresentados na Tabela 4.1. O raio de curvatura (r_c), mostrado na Figura 4.1, é obtido através da seguinte expressão (sendo seu valor também apresentado na Tabela 4.1):

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

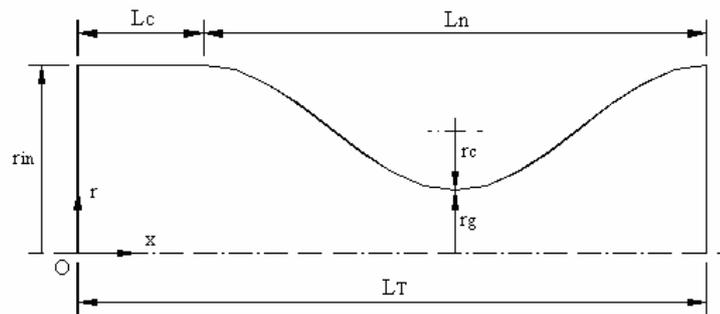


Figura 4.1: Parâmetros geométricos do motor-foguete. Fonte: Marchi *et al.* (2000; 2004).

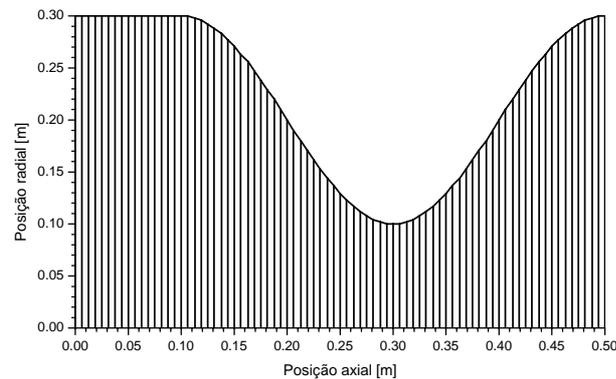


Figura 4.2: Malha unidimensional com 80 volumes de controle (geometria cossenoidal).

Tabela 4.1: Parâmetros geométricos, parâmetros físicos e microcomputador utilizados nos estudos efetuados.

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 na câmara / entrada da tubeira (r_{in})	0,300 m
	Raio na garganta da tubeira (r_g)	0,100 m
	Raio de curvatura (r_c)	0,1273 m
	Razão r_c/r_g	1,273
Parâmetros físicos	Temperatura de estagnação (T_0)	3420,33 K
	Pressão de estagnação (P_0)	$2,0 \times 10^6$ Pa
	Razão entre calores específicos (γ) ¹	1,1956
	Constante do gás (R) ¹	526,97 J/kg·K
Microcomputador	Razão em massa oxidante/combustível (OF)	7,936682739
	Processador	Pentium IV, 2,40 GHz / (Pentium IV, 3,40 GHz) ²
	Memória RAM	1 GB / (4 GB) ²
	Sistema operacional	Windows 2000 / (Windows XP) ²

¹ Variável com valor arbitrado apenas nos modelos monoespécie.

² Utilizado em simulações utilizando o modelo de equilíbrio químico local e desequilíbrio químico.

Ressalta-se que no interior da câmara de combustão não são modelados fenômenos típicos, como mudança de fase ou a mistura entre gotas de combustível e de oxidante. O processo de combustão é estudado de modo simplificado, resultando apenas na composição química e nas propriedades termoquímicas da mistura de gases de combustão – isto para os modelos de escoamento congelado, em equilíbrio químico e de taxa finita de reação, uma vez que no caso de monoespécie, não há necessidade de modelos de reações químicas. Sendo assim, a câmara de combustão serve apenas como duto cilíndrico, conectado à tubeira (bocal convergente-divergente), no qual ocorre o escoamento monoespécie (ou mistura de gases) proveniente do processo de combustão. Observa-se, outrossim, que apesar de ser estudado um escoamento em regime permanente, na discretização do modelo matemático empregou-se um passo de tempo, o qual pode ser encarado como parâmetro de relaxação.

4.2 ESCOAMENTO MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES CONSTANTES

Para a obtenção da solução numérica deste modelo físico (bem como para os demais modelos) é utilizado o código Mach1D, versão 5.0, empregando-se as seguintes opções de otimização:

- “Code generation”: Pentium IV (compatível com o microcomputador utilizado);
“Math Library: fast”.
- “Optimizations”: “Maximum optimizations” e “Processor: Pentium 4”.
- “General”: “Debugging level: None”.

Nota-se que ao serem desconsiderados os efeitos viscosos e as trocas térmicas, o modelo de escoamento monoespécie com propriedades constantes é equivalente ao escoamento isentrópico, cuja solução analítica é conhecida (e foi apresentada na seção 2.2.2). Tem-se, assim, a oportunidade de calcular-se o erro verdadeiro da solução numérica, comparando-se as diferentes ordens do erro (assintótica, efetiva e aparente), bem como avaliar as estimativas de erro numérico em relação ao erro verdadeiro.

Para as simulações, foram utilizadas malhas uniformes com total de volumes variando entre 10 (a mais grosseira) e 10240 (a mais refinada), mantendo-se sempre a razão de refino igual a dois, conforme pode ser observado na Tabela 4.2. Em todas as simulações, utilizou-se um número de iterações suficiente para que fosse atingido o erro de máquina (definido na seqüência), obtendo-se um número total de algarismos significativos entre 11 e 15, para cada

variável de interesse estudada. Estas podem ser classificadas em dois grupos: variáveis globais (coeficiente de descarga e empuxo dinâmico adimensional) e locais (velocidade, temperatura, pressão e número de Mach, todas na saída da tubeira). As Tabelas 4.3 e 4.4, mostradas na seqüência, apresentam os resultados numéricos e seus respectivos erros verdadeiros, nas diferentes malhas empregadas, para duas das variáveis de interesse.

Tabela 4.2: Resultados gerais das simulações realizadas com o modelo de escoamento monoespécie com propriedades constantes.

Malha (volumes)	Tamanho dos volumes (h)	Δt	Iterações externas efetuadas	Iterações necessárias à convergência	Tempo de CPU	Algarismos significativos
10	$5,00000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	2.200	0,226 s	15
20	$2,50000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	20.000	600	0,578 s	12
40	$1,25000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	30.000	1.000	1,20 s	13
80	$6,25000000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-4}$	50.000	5.100	3,08 s	12
160	$3,12500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-5}$	50.000	4.000	5,30 s	12
320	$1,56250000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-6}$	50.000	6.000	9,73 s	12
640	$7,81250000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-6}$	50.000	15.000	19,8 s	12
1280	$3,90625000 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-6}$	80.000	24.000	58,6 s	11
2560	$1,95312500 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-7}$	80.000	45.000	2,07 min	11
5120	$9,76562500 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-7}$	150.000	147.000	13,8 min	12
10240	$4,88281250 \times 10^{-5}$	$1,00 \times 10^{-7}$	250.000	190.000	56,9 min	11

Tabela 4.3: Solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) [solução analítica: 1,0].

Malha (volumes)	Solução numérica [adimensional]	Erro numérico verdadeiro [adimensional]
10	1,1205509544	$-1,206 \times 10^{-1}$
20	1,0235160757	$-2,352 \times 10^{-2}$
40	1,0027042823	$-2,704 \times 10^{-3}$
80	1,0001495117	$-1,495 \times 10^{-4}$
160	$9,9996968440 \times 10^{-1}$	$3,032 \times 10^{-5}$
320	$9,9998395655 \times 10^{-1}$	$1,604 \times 10^{-5}$
640	$9,9999493104 \times 10^{-1}$	$5,069 \times 10^{-6}$
1280	$9,9999860046 \times 10^{-1}$	$1,400 \times 10^{-6}$
2560	$9,9999963357 \times 10^{-1}$	$3,664 \times 10^{-7}$
5120	$9,999990632 \times 10^{-1}$	$9,368 \times 10^{-8}$
10240	$9,999997632 \times 10^{-1}$	$2,368 \times 10^{-8}$

Tabela 4.4: Solução numérica para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}) [solução analítica: $1,712740923776014 \times 10^3$ K].

Malha (volumes)	Solução numérica [K]	Erro numérico verdadeiro [K]
10	$1,5828766093 \times 10^3$	$1,299 \times 10^2$
20	$1,6828293180 \times 10^3$	$2,991 \times 10^1$
40	$1,7044211245 \times 10^3$	8,320
80	$1,7104735913 \times 10^3$	2,267
160	$1,7121481766 \times 10^3$	$5,927 \times 10^{-1}$
320	$1,7125894043 \times 10^3$	$1,515 \times 10^{-1}$
640	$1,7127026219 \times 10^3$	$3,830 \times 10^{-2}$
1280	$1,7127312952 \times 10^3$	$9,629 \times 10^{-3}$
2560	$1,7127385100 \times 10^3$	$2,414 \times 10^{-3}$
5120	$1,7127403195 \times 10^3$	$6,043 \times 10^{-4}$
10240	$1,7127407726 \times 10^3$	$1,512 \times 10^{-4}$

A determinação do erro de máquina foi efetuada comparando-se os resultados entre a última iteração (iteração N) e as iterações anteriores. Isto é apresentado na Figura 4.3. Observa-se que, após um determinado número de iterações, a solução numérica obtida se estabiliza em um determinado patamar: no caso da malha de 10 volumes de controle, são necessárias cerca de 550 iterações (para o coeficiente de descarga), enquanto no caso da malha de 1280 volumes, cerca de 24000 iterações foram necessárias (para a mesma variável de interesse).

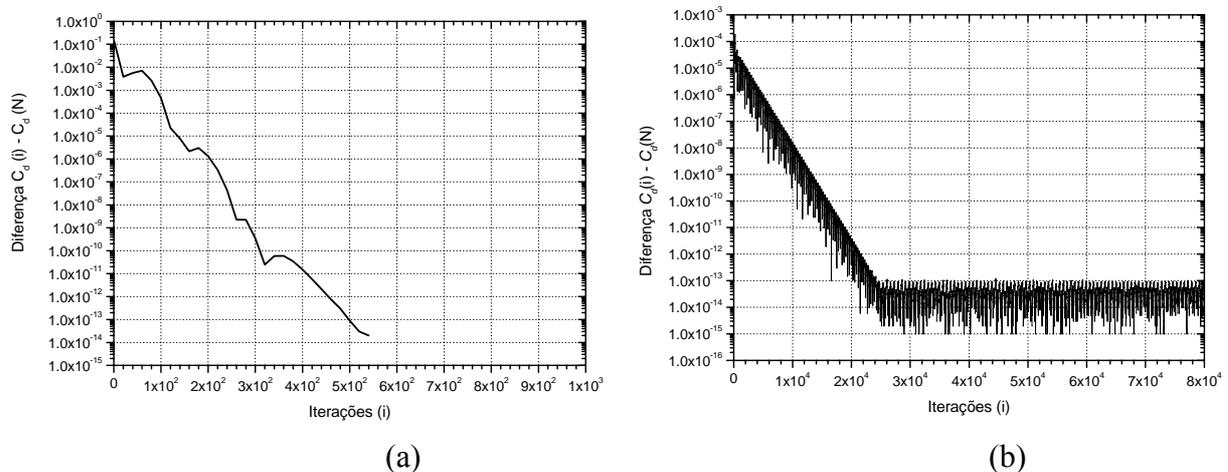


Figura 4.3: Comportamento do coeficiente de descarga x número de iterações para malhas de: (a) 10 e (b) 1280 volumes de controle.

Deve-se ressaltar, também, que no caso da malha de 10 volumes de controle, para um total de iterações superior a 550 (tendo-se como variável de interesse o coeficiente de descarga), a solução numérica estabiliza-se em um determinado valor, de modo que a diferença entre os valores de C_d na 1000ª ou 5000ª iteração e na última iteração (10.000) é nula. Isto não ocorre no caso da malha de 1280 volumes, para a qual a solução numérica oscila em uma determinada faixa de valores. Tal comportamento se deve ao aumento do erro de arredondamento, devido ao maior número de variáveis a ser resolvido para malhas mais refinadas. Tais malhas resultam em sistemas algébricos com maior número de incógnitas, de modo que os efeitos do arredondamento dos números envolvidos nos cálculos (pelo número finito de algarismos que o processador consegue armazenar) se propagam, acarretando nas oscilações típicas observadas na Figura 4.3b. Salienta-se, contudo, que o refinamento de malhas conduz a erros de truncamento de menor magnitude, conforme pode ser observado através da Tabela 4.3, uma vez que o efeito relacionado aos termos desprezados do processo de discretização do modelo matemático é minimizado com o refinamento da malha.

Resultados referentes às ordens efetiva e aparente do erro são mostradas nas Tabelas 4.5 e 4.6, para o coeficiente de descarga (C_d) e a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}). Para algumas malhas, não foi possível determinar os valores das ordens efetiva e/ou aparente: isto se deve a uma variação do sinal do erro verdadeiro, impossibilitando a determinação de p_U e p_E . Nestes casos, são apresentados traços (---) nos respectivos valores das tabelas e descontinuidades nos gráficos correspondentes.

Tabela 4.5: Ordens práticas da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d)
[$p_L = 2$].

Malha (volumes)	Ordem efetiva (p_E)	Ordem aparente (p_U)
10	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	2,358	<i>não se aplica</i>
40	3,120	2,221
80	4,177	3,026
160	---	3,829
320	$9,181 \times 10^{-1}$	---
640	1,662	$3,790 \times 10^{-1}$
1280	1,857	1,581
2560	1,933	1,829
5120	1,968	1,921
10240	1,973	1,962

Tabela 4.6: Ordens práticas da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}) [$p_L = 2$].

Malha (volumes)	Ordem efetiva (p_E)	Ordem aparente (p_U)
10	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	2,118	<i>não se aplica</i>
40	1,846	2,211
80	1,876	1,835
160	1,936	1,854
320	1,968	1,924
640	1,984	1,962
1280	1,992	1,981
2560	1,996	1,991
5120	1,998	1,995
10240	1,988	1,998

Dentre os critérios sugeridos para assegurar a verificação de um código numérico, citam-se, em ordem crescente de rigor (ROY, 2005): o julgamento de especialistas; a quantificação do erro; critérios de consistência e de convergência; e a ordem de acurácia. A quantificação do erro verdadeiro foi realizada através da comparação entre os resultados numéricos e a solução analítica, sendo tais resultados mostrados nas Tabelas 4.3 e 4.4 (para duas das variáveis de interesse). Desse estudo tem-se um indício de que o código Mach1D fornece resultados confiáveis para o fenômeno modelado. Outro critério pode ser avaliado levando-se em consideração os resultados apresentados nas Tabelas 4.5 e 4.6 e nas Figuras 4.4 a 4.9, mostradas na seqüência: a ordem de acurácia. Observa-se, a partir dos resultados obtidos, que à medida que a malha é refinada, ambas as ordens (efetiva e aparente) se aproximam do valor da ordem assintótica (que é igual a 2 para todas as variáveis de interesse, uma vez que são utilizadas funções de interpolação CDS na discretização de todas as equações). Desta forma, pode-se afirmar que as soluções numéricas fornecidas pelo código Mach1D resolvem corretamente o modelo matemático nele implementado, uma vez que a ordem de acurácia é o critério mais dificilmente satisfeito e o mais sensível a erros no código (ROY, 2005).

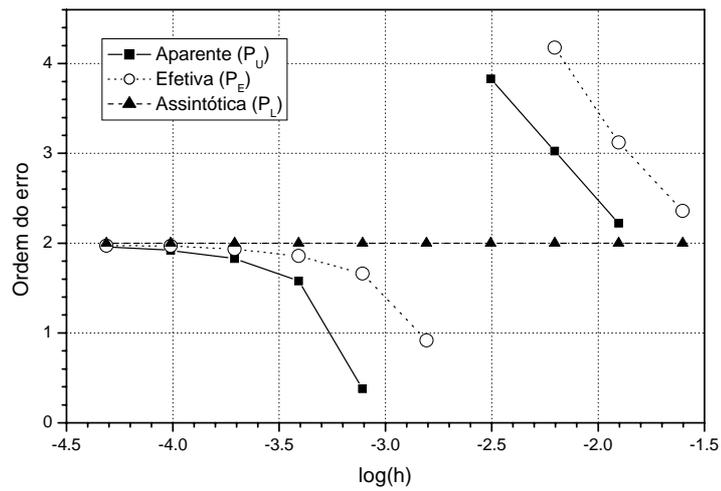


Figura 4.4: Ordens assintótica, aparente e efetiva para o coeficiente de descarga.

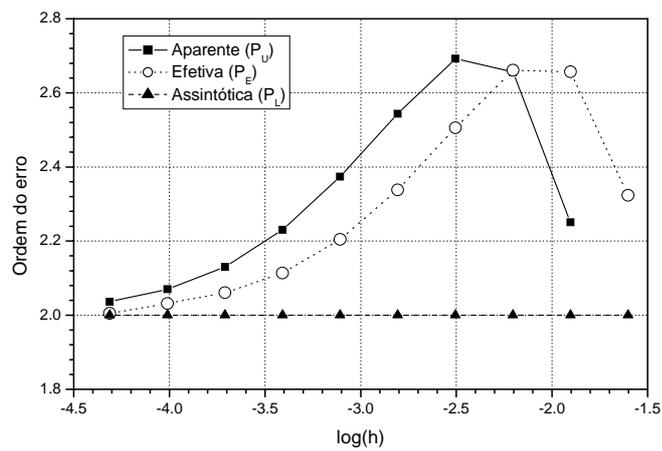


Figura 4.5: Ordens assintótica, aparente e efetiva para o empuxo dinâmico adimensional.

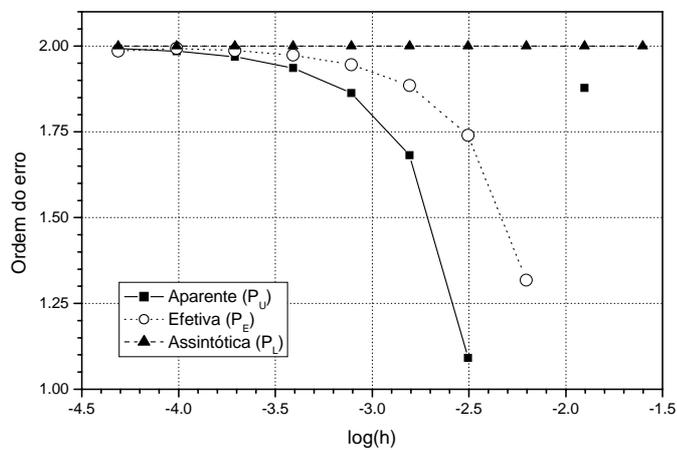


Figura 4.6: Ordens assintótica, aparente e efetiva para a pressão na saída da tubeira.

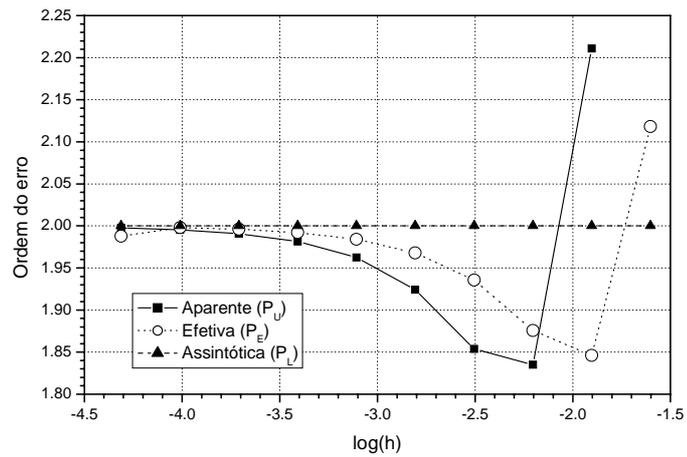


Figura 4.7: Ordens assintótica, aparente e efetiva para a temperatura na saída da tubeira.

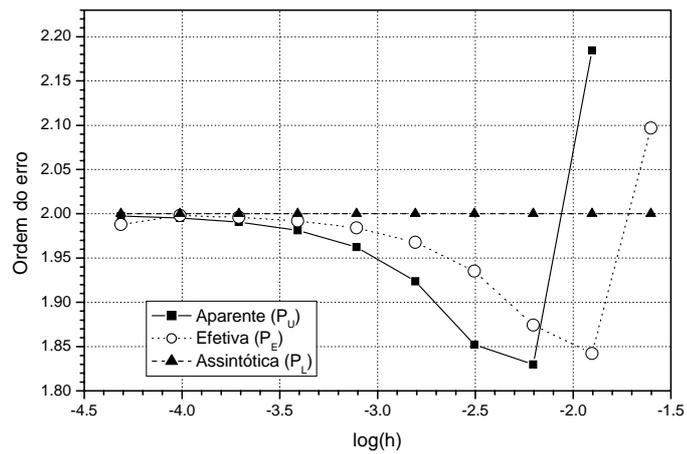


Figura 4.8: Ordens assintótica, aparente e efetiva para a velocidade na saída da tubeira.

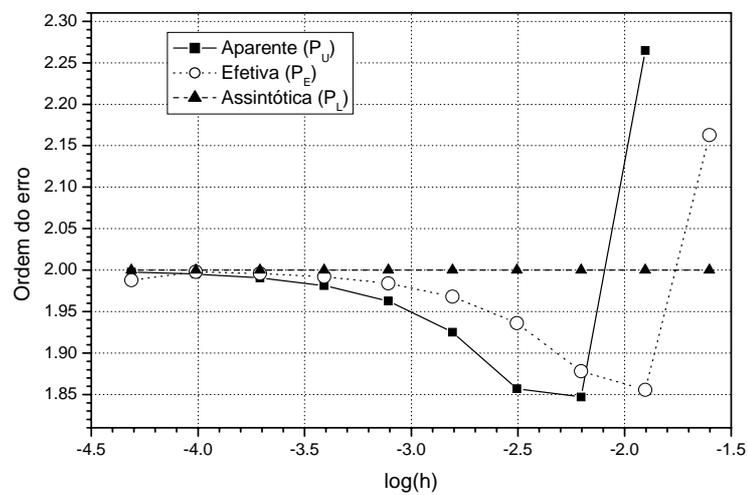


Figura 4.9: Ordens assintótica, aparente e efetiva para o número de Mach na saída da tubeira.

Por último, foram realizadas estimativas do erro numérico: duas utilizando o estimador de Richardson (empregando-se as ordens assintótica e aparente) e o estimador GCI. Como o erro verdadeiro é conhecido, pode-se calcular a efetividade para cada uma das variáveis de interesse, conforme pode ser visto nas Tabelas 4.7 e 4.8 e nas Figuras 4.10 a 4.15. Observa-se que à medida que a malha é refinada, os estimadores de Richardson, baseados nas ordens assintótica e aparente, apresentam resultados acurados ($\theta \approx 1$), contudo, nem sempre confiáveis ($\theta \geq 1$).

Tabela 4.7: Efetividade para o coeficiente de descarga (C_d).

Malha (volumes)	Erro verdadeiro (E)	$U_{Ri}(\phi_1, p_L)/E$	$U_{Ri}(\phi_1, p_U)/E$	$U_{GCI}(\phi_1, p)/ E $
10	$-1,2055095442 \times 10^{-1}$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	$-2,3516075747 \times 10^{-2}$	1,375	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40	$-2,7042822593 \times 10^{-3}$	2,565	2,101	7,696
80	$-1,4951171910 \times 10^{-4}$	5,696	2,391	$1,709 \times 10^1$
160	$3,0315603872 \times 10^{-5}$	-1,977	$-4,492 \times 10^{-1}$	5,932
320	$1,6043450625 \times 10^{-5}$	$2,965 \times 10^{-1}$	---	---
640	$5,0689639750 \times 10^{-6}$	$7,217 \times 10^{-1}$	7,205	$2,162 \times 10^1$
1280	$1,3995443680 \times 10^{-6}$	$8,740 \times 10^{-1}$	1,317	3,951
2560	$3,6642827705 \times 10^{-7}$	$9,398 \times 10^{-1}$	1,105	3,315
5120	$9,3675227020 \times 10^{-8}$	$9,706 \times 10^{-1}$	1,044	3,133
10240	$2,3677230954 \times 10^{-8}$	$9,854 \times 10^{-1}$	1,021	3,062

Tabela 4.8: Efetividade para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}).

Malha (volumes)	Erro verdadeiro (E)	$U_{Ri}(\phi_1, p_L)/E$	$U_{Ri}(\phi_1, p_U)/E$	$U_{GCI}(\phi_1, p)/ E $
10	$1,2986431447 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	$2,9911605752 \times 10^1$	1,114	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40	8,3197993056	$8,651 \times 10^{-1}$	$7,151 \times 10^{-1}$	2,595
80	2,2673324595	$8,898 \times 10^{-1}$	1,040	3,119
160	$5,9274714037 \times 10^{-1}$	$9,417 \times 10^{-1}$	1,081	3,242
320	$1,5151947400 \times 10^{-1}$	$9,707 \times 10^{-1}$	1,042	3,125
640	$3,8301846630 \times 10^{-2}$	$9,853 \times 10^{-1}$	1,020	3,061
1280	$9,6285544901 \times 10^{-3}$	$9,926 \times 10^{-1}$	1,010	3,030
2560	$2,4137974701 \times 10^{-3}$	$9,963 \times 10^{-1}$	1,005	3,015
5120	$6,0428313009 \times 10^{-4}$	$9,982 \times 10^{-1}$	1,002	3,007
10240	$1,5117515000 \times 10^{-4}$	$9,991 \times 10^{-1}$	1,001	3,004

A utilização do estimador GCI, por sua vez, apresenta sempre resultados confiáveis, para os casos em que ele é aplicável, exceção feita para a pressão na saída da tubeira, utilizando-se uma malha de 40 volumes de controle. A aplicabilidade desse estimador foi condicionada à possibilidade da obtenção da ordem aparente do erro, conforme já exposto na seção 3.3.2.

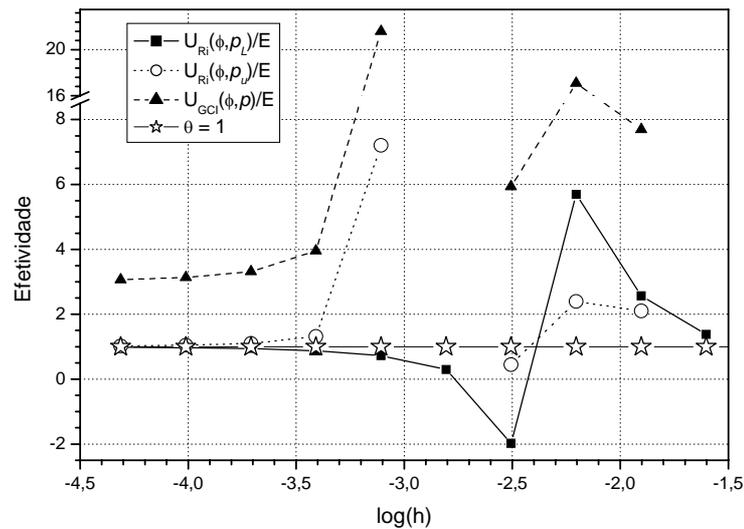


Figura 4.10: Efetividade para o coeficiente de descarga (C_d).

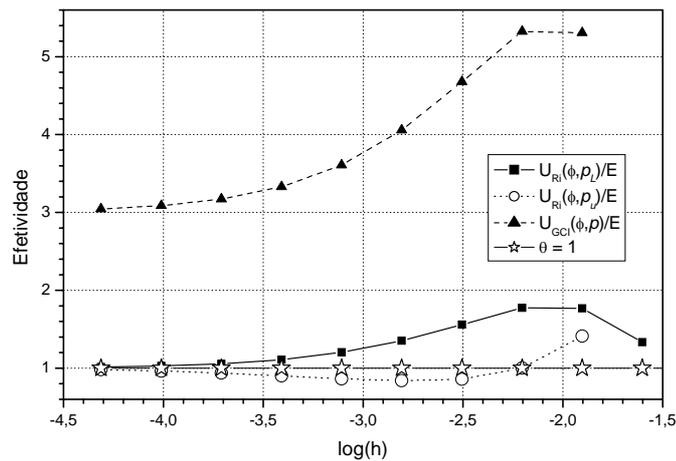


Figura 4.11: Efetividade para o empuxo dinâmico adimensional (F^*).

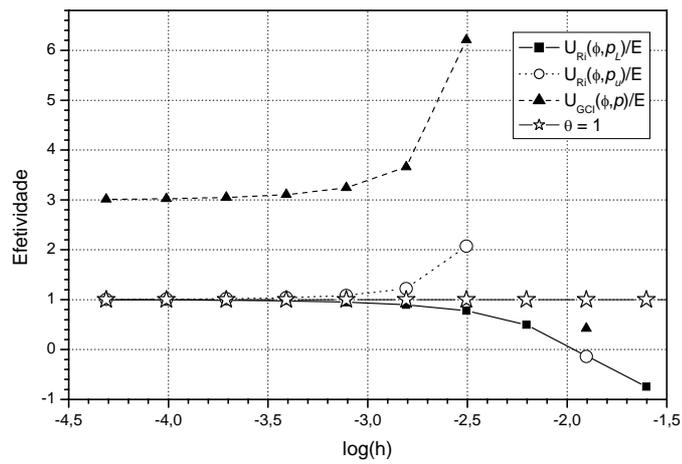


Figura 4.12: Efetividade para a pressão na saída da tubeira (P_{ex}).

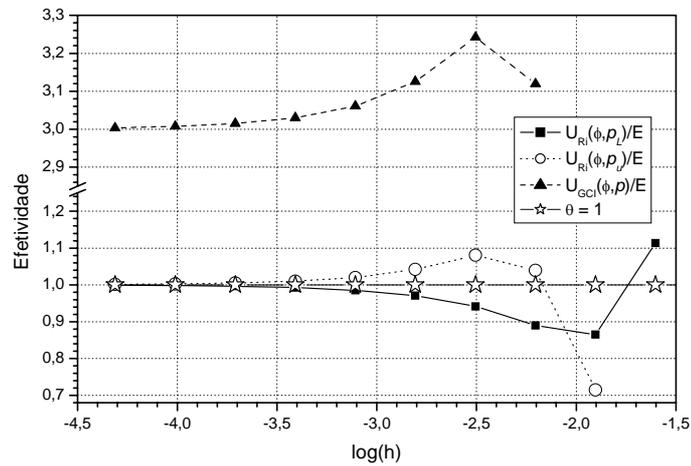


Figura 4.13: Efetividade para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}).

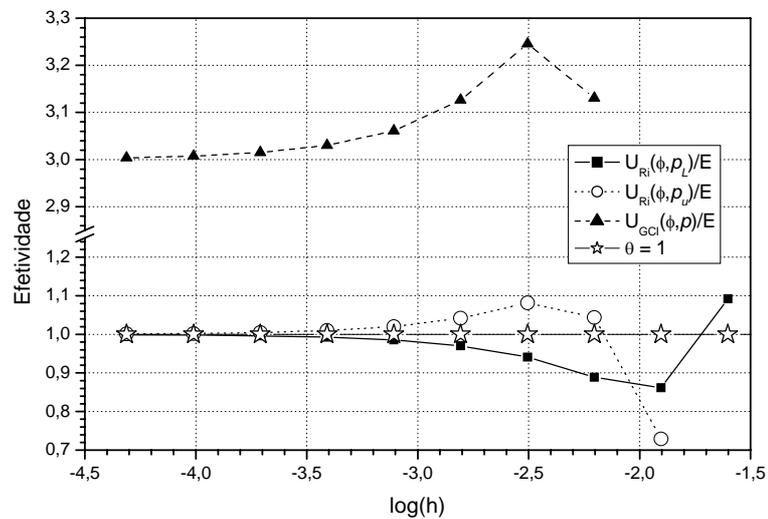


Figura 4.14: Efetividade para a velocidade na saída da tubeira (u_{ex}).

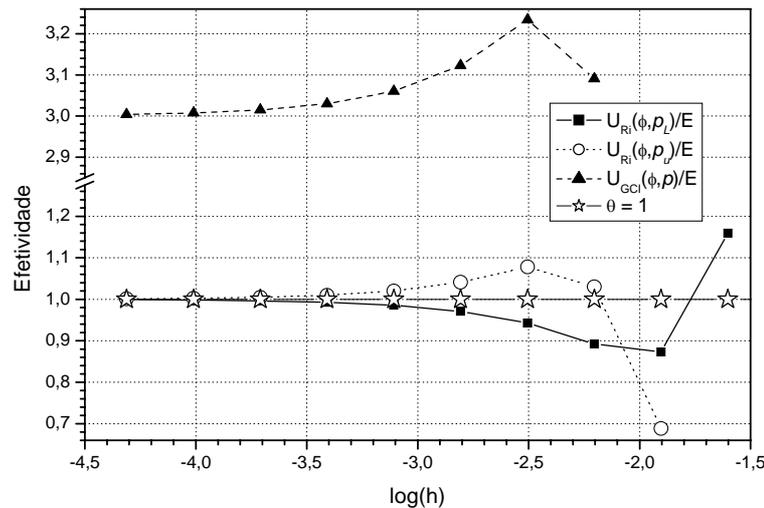


Figura 4.15: Efetividade para o número de Mach na saída da tubeira (M_{ex}).

A partir dos resultados obtidos, verifica-se que a utilização de uma malha de 80 volumes de controle é suficiente para produzir resultados cujos erros numéricos associados (obtidos através dos estimadores de Richardson e GCI) apresentam ordem de grandeza semelhante àquela observada à incerteza experimental. Esta constatação foi obtida primeiramente por Marchi *et al.* (2000; 2004), sendo corroborada através da análise dos resultados obtidos neste trabalho, e apresentados através da Tabela 4.9 e das Figuras 4.16 e 4.17. Em tais figuras, são expostos os logaritmos decimais do erro numérico verdadeiro e das incertezas numéricas calculadas. Verifica-se que, ao menos para as malhas mais refinadas, as estimativas de erro, baseadas no estimador de Richardson, são praticamente coincidentes com o erro numérico verdadeiro (conforme esperado, uma vez que a efetividade para tais estimativas é próxima à unidade). Torna-se mais claro, também, que o emprego do fator de segurança igual a três no estimador GCI lhe confere uma estimativa de erro mais conservadora, o que lhe garante a empregabilidade em praticamente todos os casos.

A possibilidade da utilização de uma malha mais grosseira, como é a de 80 volumes, garante uma maior rapidez para a obtenção de resultados numéricos confiáveis e acurados. Comparando-se os tempos de CPU demandados para duas simulações (de 80 e de 10240 volumes de controle), nota-se que enquanto para a malha mais grosseira foram necessários pouco mais de 3 s de simulação (3,08 s), para a malha mais refinada foi preciso um tempo mais de 1000 vezes superior (56,9 min). Desta forma, para finalidades de engenharia recomenda-se a utilização de malhas de 80 volumes de controle (cuja incerteza numérica é equivalente à incerteza experimental). A utilização de malhas mais refinadas, contudo,

mostrou-se importante para a determinação da validade dos estimadores de erro empregados, apresentando a confiabilidade e a acurácia necessárias para a obtenção da própria incerteza numérica. Uma vez que o estimador GCI se mostrou praticamente sempre confiável, a maior parte das estimativas apresentadas neste trabalho é baseada nesse estimador.

Tabela 4.9: Resultados numéricos e seus erros estimados (com estimador GCI) para as variáveis de interesse.

Variáveis de interesse	80 volumes	2560 volumes	10240 volumes
coeficiente de descarga (C_d)	$1,000 \pm 3 \times 10^{-3}$ [adim.]	$1,000000 \pm 1 \times 10^{-6}$ [adim.]	$0,99999998 \pm 7 \times 10^{-8}$ [adim.]
empuxo dinâmico adimensional (F^*)	$1,001 \pm 4 \times 10^{-3}$ [adim.]	$1,000000 \pm 1 \times 10^{-6}$ [adim.]	$1,00000002 \pm 6 \times 10^{-8}$ [adim.]
pressão estática na saída da tubeira (P_{ex})	$29120 \pm 8 \times 10^1$ [Pa] ³	$29173,3 \pm 2 \times 10^{-1}$ [Pa]	$29173,41 \pm 1 \times 10^{-2}$ [Pa]
temperatura na saída da tubeira (T_{ex})	1710 ± 7 [K]	$1712,739 \pm 7 \times 10^{-3}$ [K]	$1712,7408 \pm 5 \times 10^{-4}$ [K]
velocidade na saída da tubeira (u_{ex})	3319 ± 7 [m/s]	$3316,717 \pm 7 \times 10^{-3}$ [m/s]	$3316,7152 \pm 4 \times 10^{-4}$ [m/s]
número de Mach na saída da tubeira (M_{ex})	$3,20 \pm 1 \times 10^{-2}$ [adim.]	$3,19284 \pm 1 \times 10^{-5}$ [adim.]	$3,1928349 \pm 8 \times 10^{-7}$ [adim.]

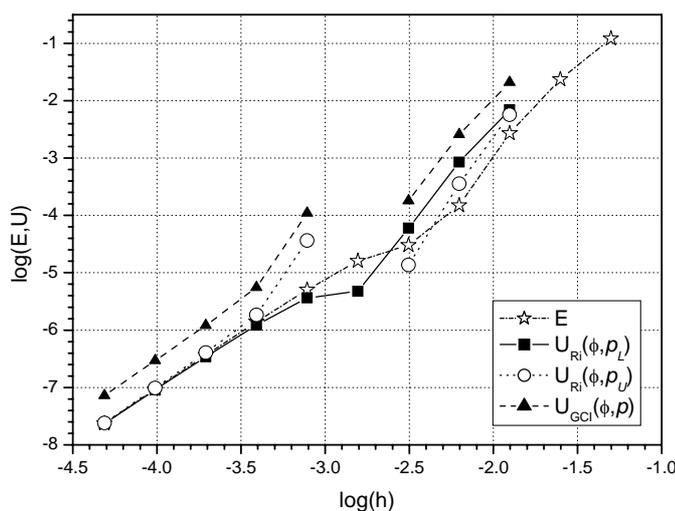


Figura 4.16: Comparação entre os logaritmos decimais do erro verdadeiro (E) e das estimativas de erro (U) para o coeficiente de descarga (C_d).

³ Estimativa de erro utilizando-se o estimador GCI para a ordem assintótica.

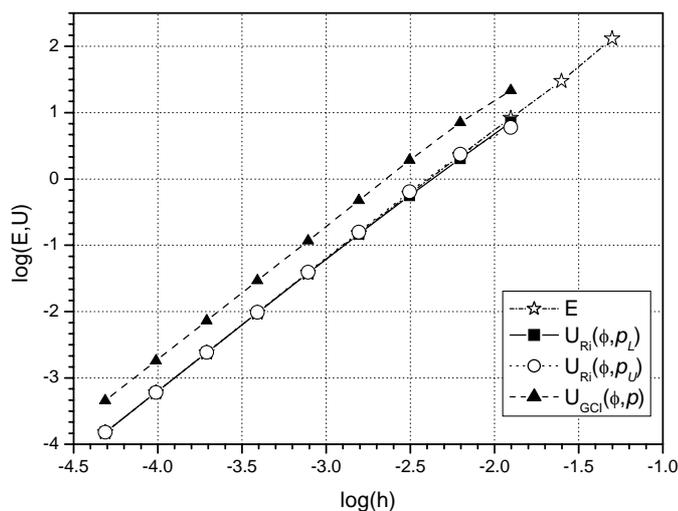


Figura 4.17: Comparação entre os logaritmos decimais do erro verdadeiro (E) e das estimativas de erro (U) para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}).

4.3 ESCOAMENTO MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES VARIÁVEIS

O passo anterior à obtenção da solução numérica do escoamento reativo em motores-foguete é a aquisição de resultados numéricos para o escoamento monoespécie com propriedades variáveis. Para tanto, foi considerado o escoamento de vapor de água, cujas propriedades termofísicas foram obtidas empregando-se polinômios interpoladores apresentados no trabalho de McBride *et al.* (1993). As simulações, cujas malhas são as mesmas utilizadas no estudo do escoamento monoespécie com propriedades constantes, bem como dados gerais das simulações realizadas, são apresentadas na Tabela 4.10.

O escoamento monoespécie com propriedades variáveis, diferentemente do escoamento com propriedades constantes, não apresenta solução analítica conhecida. Deste modo, torna-se impossível a obtenção do erro numérico verdadeiro, bem como da ordem efetiva do erro. Conseqüentemente apenas a ordem aparente do erro foi calculada, assim como a incerteza numérica baseada em tal ordem, sendo seus resultados apresentados nas Tabelas 4.11 e 4.12, para o coeficiente de descarga e a temperatura na saída da tubeira. Da análise dos resultados obtidos, verifica-se que a ordem aparente aproxima-se do valor da ordem assintótica, assim como observado no caso do escoamento monoespécie com propriedades constantes. Como já apresentado, este é o critério mais dificilmente atendido na verificação de um código numérico. Desta forma, afirma-se que o código Mach1D apresenta soluções corretas do modelo matemático implementado.

Tabela 4.10: Resultados gerais das simulações realizadas com o modelo de escoamento monoespécie com propriedades variáveis.

Malha (volumes)	Tamanho dos volumes (h)	Δt	Iterações externas efetuadas	Iterações necessárias à convergência	Tempo de CPU	Algarismos significativos
10	$5,00000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	800	0,266 s	13
20	$2,50000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	700	0,328 s	13
40	$1,25000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	1.000	0,469 s	13
80	$6,25000000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	4.200	0,750 s	12
160	$3,12500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-5}$	20.000	3.600	2,53 s	13
320	$1,56250000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-6}$	25.000	7.000	5,67 s	13
640	$7,81250000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-6}$	50.000	19.600	10,8 s	13
1280	$3,90625000 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	36.000	43,3 s	11
2560	$1,95312500 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-7}$	80.000	73.600	3,02 min	12
5120	$9,76562500 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-7}$	250.000	192.000	27,9 min	12
10240	$4,88281250 \times 10^{-5}$	$1,00 \times 10^{-7}$	400.000	378.000	1h 39 min	11

Ao serem obtidas as estimativas de erro numérico, constata-se novamente que as incertezas obtidas para a malha de 80 volumes de controle apresentam a mesma ordem de grandeza verificada para os resultados experimentais (MARCHI *et al.*, 2000; 2004), conforme pode ser observado nas Tabelas 4.11 e 4.12. Para dois casos apresentados na Tabela 4.11, a ordem aparente apresenta valor negativo ou indefinido, sendo utilizada a ordem assintótica com a finalidade de calcular a estimativa de erro GCI. Tais casos são identificados com dois asteriscos (**) à direita dos valores numéricos apresentados.

Tabela 4.11: Ordens práticas da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) [$p_L: 2$] e estimativa U_{GCI} , utilizando $R \approx 461,53 \text{ J/kgK}$.

Malha (volumes)	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
10	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40	2,191	$2,270 \times 10^{-2}$
80	2,979	$2,879 \times 10^{-3}$
160	3,630	$2,325 \times 10^{-4}$
320	---	$4,913 \times 10^{-6}$ **
640	$-8,912 \times 10^{-1}$	$9,113 \times 10^{-6}$ **
1280	1,481	$5,463 \times 10^{-6}$
2560	1,797	$1,138 \times 10^{-6}$
5120	1,908	$2,726 \times 10^{-7}$
10240	1,956	$6,715 \times 10^{-8}$

Tabela 4.12: Ordens práticas da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}) [$p_i: 2$] e estimativa U_{GCI} , utilizando $R \approx 461,53$ J/kgK.

Malha (volumes)	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
10	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40	2,231	$2,183 \times 10^1$
80	1,824	7,279
160	1,845	1,984
320	1,920	$4,882 \times 10^{-1}$
640	1,961	$1,208 \times 10^{-1}$
1280	1,980	$3,005 \times 10^{-2}$
2560	1,990	$7,494 \times 10^{-3}$
5120	1,995	$1,871 \times 10^{-3}$
10240	1,998	$4,676 \times 10^{-4}$

A comparação entre os resultados dos modelos de escoamento monoespécie com propriedades constantes ou variáveis é feita através das Tabelas 4.13 a 4.15. Observa-se que, como a diferença entre ambos os resultados é superior à estimativa de erro numérico, as variações entre os resultados obtidos (embora pequenas) são devidas à adoção de diferentes modelos físicos – comprovação esta que não seria possível obter caso não fossem calculadas as incertezas numéricas.

Tabela 4.13: Resultados e suas respectivas incertezas numéricas para as variáveis de interesse (malha de 80 volumes).

Variáveis de interesse	Numérico constante	Numérico variável ($R \approx 461.53$ J/kgK)	Varição ⁴
C_d	$1,000 \pm 3 \times 10^{-3}$ [adim.]	$1,060 \pm 3 \times 10^{-3}$ [adim.]	6,0 %
F^*	$1,001 \pm 4 \times 10^{-3}$ [adim.]	$1,004 \pm 4 \times 10^{-3}$ [adim.]	0,3 %
P_{ex}	$2,912 \times 10^4 \pm 8 \times 10^1$ [Pa] ⁵	$3,005 \cdot 10^4 \pm 7 \times 10^1$ [Pa]	2,9 %
T_{ex}	1710 ± 7 [K]	1800 ± 7 [K]	5,3 %
u_{ex}	3319 ± 7 [m/s]	3142 ± 6 [m/s]	-5,3 %
M_{ex}	$3,20 \pm 1 \times 10^{-2}$ [adim.]	$3,15 \pm 1 \times 10^{-2}$ [adim.]	-1,6 %

⁴ Calculada através da seguinte expressão: $\text{variação} = 100 \cdot \left(\frac{\text{numérico variável} - \text{numérico constante}}{\text{numérico constante}} \right)$.

⁵ Estimativa de erro utilizando-se estimador GCI para a ordem assintótica.

Tabela 4.14: Resultados e suas respectivas incertezas numéricas para as variáveis de interesse (malha de 2560 volumes).

Variáveis de interesse	Numérico constante	Numérico variável ($R \approx 461.53$ J/kgK)	Varição ⁴
C_d	$1,000000 \pm 1 \times 10^{-6}$ [adim.]	$1,059739 \pm 1 \times 10^{-6}$ [adim.]	5,97 %
F^*	$1,000000 \pm 1 \times 10^{-6}$ [adim.]	$1,003224 \pm 1 \times 10^{-6}$ [adim.]	0,32 %
P_{ex}	$29.173,3 \pm 2 \times 10^{-1}$ [Pa]	$30.098,3 \pm 2 \times 10^{-1}$ [Pa]	3,17 %
T_{ex}	$1712,739 \pm 7 \times 10^{-3}$ [K]	$1802,338 \pm 7 \times 10^{-3}$ [K]	5,23 %
u_{ex}	$3316,717 \pm 7 \times 10^{-3}$ [m/s]	$3139,835 \pm 7 \times 10^{-3}$ [m/s]	-5,33 %
M_{ex}	$3,19284 \pm 1 \times 10^{-5}$ [adim.]	$3,14424 \pm 1 \times 10^{-5}$ [adim.]	-1,52 %

Tabela 4.15: Resultados e suas respectivas incertezas numéricas para as variáveis de interesse (malha de 10240 volumes).

Variáveis de interesse	Numérico constante	Numérico variável ($R \approx 461.53$ J/kgK)	Varição ⁴
C_d	$0,99999998 \pm 7 \times 10^{-8}$ [adim.]	$1,05973981 \pm 7 \times 10^{-8}$ [adim.]	5,97 %
F^*	$1,00000002 \pm 6 \times 10^{-8}$ [adim.]	$1,00322326 \pm 7 \times 10^{-8}$ [adim.]	0,32 %
P_{ex}	$29173,41 \pm 1 \times 10^{-2}$ [Pa]	$30098,38 \pm 1 \times 10^{-2}$ [Pa]	3,17 %
T_{ex}	$1712,7408 \pm 5 \times 10^{-4}$ [K]	$1802,3406 \pm 5 \times 10^{-4}$ [K]	5,23 %
u_{ex}	$3316,7152 \pm 4 \times 10^{-4}$ [m/s]	$3139,8326 \pm 4 \times 10^{-4}$ [m/s]	-5,33 %
M_{ex}	$3,1928349 \pm 8 \times 10^{-7}$ [adim.]	$3,1442408 \pm 8 \times 10^{-7}$ [adim.]	-1,52 %

4.4 ESCOAMENTO CONGELADO

Esta e as próximas duas seções deste capítulo são dedicadas à obtenção de soluções numéricas em escoamentos reativos, concomitantemente à estimativa da incerteza numérica associada. Ressalta-se, novamente, que poucos trabalhos apresentam estimativas de erros para problemas do tipo hiperbólico (ZHANG, 2001), não tendo sido encontrados resultados para escoamentos supersônicos reativos, como o que ocorre em tubeiras.

Diferentes modelos químicos foram empregados, com o intuito de definir qual (ou quais) apresenta(m) melhor(es) desempenho computacional. Os resultados numéricos obtidos empregando-se o código Mach1D são comparados àqueles provenientes da utilização do código CEA (GLENN RESEARCH CENTER/NASA, 2005), tomado como referência, para nove espécies químicas diferentes (H_2O , O_2 , H_2 , OH , O , H , HO_2 , H_2O_2 e O_3 ; este último ausente de todos os modelos implementados no código Mach1D).

Todos os nove modelos químicos implementados no código Mach1D (e listados na Tabela 2.1) foram empregados nas simulações, para malhas variando entre 10 e 10240 volumes (com razão de refino de malha sempre igual a 2). Dados e resultados gerais das simulações efetuadas são apresentados nas Tabelas 4.16 e 4.17, mostradas a seguir.

Tabela 4.16: Resultados gerais das simulações realizadas com o modelo de escoamento congelado.

Modelo reativo	Malha (volumes)	Tamanho dos volumes (h)	Δt	Iterações externas	Tempo de CPU
0	10	$5,00000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,500 s
	20	$2,50000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,532 s
	40	$1,25000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,672 s
	80	$6,25000000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,984 s
	160	$3,12500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-5}$	20.000	2,30 s
	320	$1,56250000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-6}$	25.000	5,16 s
	640	$7,81250000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-6}$	25.000	11,4 s
	1.280	$3,90625000 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	43,7 s
	2.560	$1,95312500 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-7}$	80.000	2,79 min
	5.120	$9,76562500 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-7}$	250.000	25,7 min
10.240	$4,88281250 \times 10^{-5}$	$1,00 \times 10^{-7}$	400.000	1,57 h	
1	10	$5,00000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,484 s
	20	$2,50000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,469 s
	40	$1,25000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,625 s
	80	$6,25000000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,922 s
	160	$3,12500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-5}$	20.000	2,23 s
	320	$1,56250000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-6}$	25.000	5,02 s
	640	$7,81250000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-6}$	25.000	11,3 s
	1.280	$3,90625000 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	44,7 s
	2.560	$1,95312500 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-7}$	80.000	2,72 min
	5.120	$9,76562500 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-7}$	250.000	25,4 min
10.240	$4,88281250 \times 10^{-5}$	$1,00 \times 10^{-7}$	400.000	1,56 h	
2	10	$5,00000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,485 s
	20	$2,50000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,516 s
	40	$1,25000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,672 s
	80	$6,25000000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,984 s
	160	$3,12500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-5}$	20.000	2,33 s
	320	$1,56250000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-6}$	25.000	5,14 s
	640	$7,81250000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-6}$	25.000	11,4 s
	1.280	$3,90625000 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	41,4 s
	2.560	$1,95312500 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-7}$	80.000	2,54 min
	5.120	$9,76562500 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-7}$	250.000	25,5 min
10.240	$4,88281250 \times 10^{-5}$	$1,00 \times 10^{-7}$	400.000	1,50 h	
3	10	$5,00000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,484 s
	20	$2,50000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,453 s
	40	$1,25000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,594 s
	80	$6,25000000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,969 s
	160	$3,12500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-5}$	20.000	2,28 s
	320	$1,56250000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-6}$	25.000	5,08 s
	640	$7,81250000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-6}$	25.000	11,3 s
	1.280	$3,90625000 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	43,5 s
	2.560	$1,95312500 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-7}$	80.000	2,66 min
	5.120	$9,76562500 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-7}$	250.000	26,1 min
10.240	$4,88281250 \times 10^{-5}$	$1,00 \times 10^{-7}$	400.000	1,49 h	

(continuação Tabela 4.16)

Modelo reativo	Malha (volumes)	Tamanho dos volumes (h)	Δt	Iterações externas	Tempo de CPU
4	10	$5,00000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,469 s
	20	$2,50000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,469 s
	40	$1,25000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,609 s
	80	$6,25000000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,953 s
	160	$3,12500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-5}$	20.000	2,25 s
	320	$1,56250000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-6}$	25.000	5,09 s
	640	$7,81250000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-6}$	25.000	11,4 s
	1.280	$3,90625000 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	43,6 s
	2.560	$1,95312500 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-7}$	80.000	2,63 min
	5.120	$9,76562500 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-7}$	250.000	25,5 min
10.240	$4,88281250 \times 10^{-5}$	$1,00 \times 10^{-7}$	400.000	1,64 h	
5	10	$5,00000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,484 s
	20	$2,50000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,172 s**
	40	$1,25000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,609 s
	80	$6,25000000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,938 s
	160	$3,12500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-5}$	20.000	2,25 s
	320	$1,56250000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-6}$	25.000	5,03 s
	640	$7,81250000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-6}$	25.000	11,3 s
	1.280	$3,90625000 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	43,5 s
	2.560	$1,95312500 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-7}$	80.000	2,48 min
	5.120	$9,76562500 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-7}$	250.000	25,3 min
10.240	$4,88281250 \times 10^{-5}$	$1,00 \times 10^{-7}$	400.000	1,57 h	
7	10	$5,00000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,500 s
	20	$2,50000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,625 s
	40	$1,25000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,735 s
	80	$6,25000000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,968 s
	160	$3,12500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-5}$	20.000	2,81 s
	320	$1,56250000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-6}$	25.000	5,08 s
	640	$7,81250000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-6}$	25.000	11,4 s
	1.280	$3,90625000 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	43,6 s
	2.560	$1,95312500 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-7}$	80.000	2,65 min
	5.120	$9,76562500 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-7}$	250.000	26,5 min
10.240	$4,88281250 \times 10^{-5}$	$1,00 \times 10^{-7}$	400.000	1,56 h	
9	10	$5,00000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,469 s
	20	$2,50000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,468 s
	40	$1,25000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,594 s
	80	$6,25000000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10000	0,922 s
	160	$3,12500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-5}$	20.000	2,27 s
	320	$1,56250000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-6}$	25.000	5,02 s
	640	$7,81250000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-6}$	25.000	11,3 s
	1.280	$3,90625000 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	43,5 s
	2.560	$1,95312500 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-7}$	80.000	2,83 min
	5.120	$9,76562500 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-7}$	250.000	27,1 min
10.240	$4,88281250 \times 10^{-5}$	$1,00 \times 10^{-7}$	400.000	1,47 h	
10	10	$5,00000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,485 s
	20	$2,50000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,453 s
	40	$1,25000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,594 s
	80	$6,25000000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,953 s
	160	$3,12500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-5}$	20.000	2,27 s
	320	$1,56250000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-6}$	25.000	5,06 s
	640	$7,81250000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-6}$	25.000	11,3 s
	1.280	$3,90625000 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	43,7 s
	2.560	$1,95312500 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-7}$	80.000	2,51 min
	5.120	$9,76562500 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-7}$	250.000	25,7 min
10.240	$4,88281250 \times 10^{-5}$	$1,00 \times 10^{-7}$	400.000	1,49 h	

** Solução obtida utilizando-se um microcomputador Pentium IV, 3400 MHz, 4GB de memória RAM.

Tabela 4.17: Resultados de convergência para o escoamento congelado.

Malha (volumes)	Algarismos significativos	Iterações para a convergência
10	13	2.000
20	13	2.000
40	13	2.000
80	13	4.000
160	13	4.000
320	12	7.500
640	12	16.000
1.280	12	32.000
2.560	11	60.000
5.120	11	150.000
10.240	11	360.000

Para todas as simulações foram efetuadas iterações externas em número suficiente para se atingir o erro de máquina. A Tabela 4.18 apresenta a composição química obtida utilizando-se os códigos Mach1D e CEA. Nota-se que os modelos de 6 e de 8 espécies (modelos 5 e 9, respectivamente) são os que apresentam resultados mais próximos aos da referência.

Tabela 4.18: Composição química para os diversos modelos químicos do escoamento congelado (resultados do código CEA utilizados como referência).

Modelo	H ₂ O	O ₂	H ₂	OH	O	H	HO ₂	H ₂ O ₂	O ₃
0	1,00000	0,00000	7,32x10 ⁻¹³	---	---	---	---	---	---
1	0,87442	0,11153	0,01405	---	---	---	---	---	---
2	0,80422	0,07703	0,01581	0,10295	---	---	---	---	---
Erro do modelo 2	-2,4x10 ⁻²	-1,9x10 ⁻³	-1,1x10 ⁻⁴	6,1x10 ⁻³	1,8x10 ⁻²	2,5x10 ⁻³	2,7x10 ⁻⁴	4,0x10 ⁻⁵	---
5	0,78369	0,07754	0,01565	0,10276	0,01790	0,00247	---	---	---
Erro do modelo 5	-3,8x10 ⁻³	-2,4x10 ⁻³	5,0x10 ⁻⁵	6,2x10 ⁻³	-3,9x10 ⁻⁴	-1,0x10 ⁻⁵	2,7x10 ⁻⁴	4,0x10 ⁻⁵	---
CEA (congelado)	0,77987	0,07515	0,01570	0,10900	0,01751	0,00246	0,00027	0,00004	<0,00001
9	0,78354	0,07743	0,01565	0,10272	0,01789	0,00247	0,00027	0,00004	---
Erro do modelo 9	-3,7x10 ⁻³	-2,3x10 ⁻³	5,0x10 ⁻⁵	6,3x10 ⁻⁵	-3,8x10 ⁻⁴	-1,0x10 ⁻⁵	0	0	---

Como já observado nos modelos de escoamento monoespécie, também neste modelo as ordens aparentes de todas as variáveis tendem ao valor assintótico, conforme pode ser observado nas Tabelas 4.19 e 4.20 para duas variáveis de interesse, utilizando-se o modelo químico 5. Atenta-se que os valores que apresentam (**) à sua direita, no caso da incerteza numérica, foram obtidos utilizando-se a ordem assintótica do erro.

Tabela 4.19: Ordens práticas da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) [p_L : 2] e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo 5).

Malha (volumes)	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
10	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40	2,2171291961911200	$2,0721241515739800 \times 10^{-2}$
80	3,0387681524781200	$2,5214793099401800 \times 10^{-3}$
160	3,8876578620418300	$1,7035456643999000 \times 10^{-4}$
320	---	$1,6808554360148200 \times 10^{-5}$ **
640	$5,3134704828499700 \times 10^{-1}$	$7,8355404089232500 \times 10^{-5}$
1280	1,6001940363784900	$5,6637506016220100 \times 10^{-6}$
2560	1,8351421561277000	$1,2558994169085300 \times 10^{-6}$
5120	1,9241176958374000	$3,0405681749659700 \times 10^{-7}$
10240	1,9635174804747200	$7,5136442525518100 \times 10^{-8}$

Tabela 4.20: Ordens práticas da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}) [p_L : 2] e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo 5).

Malha (volumes)	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
10	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40	2,2639558568714800	$2,8058628374389900 \times 10$
80	1,8728032067087500	$8,6325423060008500$
160	1,8716496301493500	$2,3615318003880700$
320	1,9316286225681300	$5,8487185530521300 \times 10^{-1}$
640	1,9657148012811400	$1,4503504038599600 \times 10^{-1}$
1280	1,9828634226733600	$3,6111626216260100 \times 10^{-2}$
2560	1,9914325263122800	$9,0098263293753100 \times 10^{-3}$
5120	1,9957161684211700	$2,2502153765724100 \times 10^{-3}$
10240	1,9978670797855200	$5,6226650148605800 \times 10^{-4}$

Neste ponto, torna-se possível realizar uma comparação gráfica (e numérica) dos resultados numéricos obtidos empregando-se o código Mach1D, para três diferentes modelos físicos (e modelos químicos diversos, no caso do escoamento congelado). A Tabela 4.21 expõe os diferentes modelos físicos empregados e mostrados nas Figuras 4.18 a 4.23, incluindo as respectivas estimativas de erro, para uma malha de 80 volumes de controle.

Tabela 4.21: Modelos físicos apresentados nas Figuras 4.18 a 4.23.

Solução	Modelos
1	Modelo com propriedades constantes ($R = 526,97 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$)
2	Modelo com propriedades variáveis ($R = 526,97 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$)
3	Modelo com propriedades variáveis ($R \approx 461,53 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$)
4	Modelo congelado – modelo químico 0
5	Modelo congelado – modelo químico 1
6	Modelo congelado – modelo químico 2
7	Modelo congelado – modelo químico 5 (resultados idênticos aos modelos químicos 3, 4 e 7)
8	Modelo congelado – modelo químico 9 (resultados idênticos ao modelo químico 10)

Três diferentes modelos físicos foram empregados: o modelo monoespécie com propriedades constantes; o modelo monoespécie com propriedades variáveis e o modelo de escoamento congelado de mistura de gases. Para o modelo de escoamento monoespécie com propriedades variáveis foram empregados dois valores diferentes para a constante do gás: o primeiro, de $526,97 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$, que corresponde ao valor utilizado nos estudos para propriedades constantes e o segundo, de aproximadamente $461,53 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$, cujo valor foi obtido para o caso de escoamento de vapor de água, para comparações com o modelo químico 0 (sem reações de dissociação), do escoamento congelado.

Ao se empregar o modelo de escoamento congelado, cinco diferentes modelos químicos foram considerados: dois modelos apresentando três espécies (modelos 0 e 1), um com quatro espécies (modelo 2), um com seis (modelo 5) e outro com oito (modelo 9). Os demais modelos não são mostrados nas Figuras 4.18 a 4.23 pois apresentam soluções numéricas coincidentes às obtidas para os modelos 5 e 9, constantes das figuras. A escolha

por um ou outro modelo químico para as simulações numéricas, envolvendo os modelos químicos de 6 e de 8 espécies, não resulta em variações consideráveis em relação às variáveis de interesse estudadas. Este comportamento foi observado ao se confrontar os resultados numéricos obtidos com o auxílio de diferentes modelos de reações químicas implementados, calculando-se, posteriormente, as respectivas incertezas numéricas.

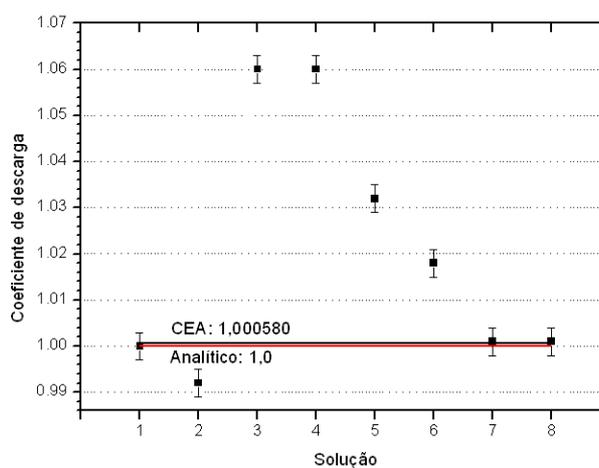


Figura 4.18: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para C_d), para uma malha de 80 volumes de controle.

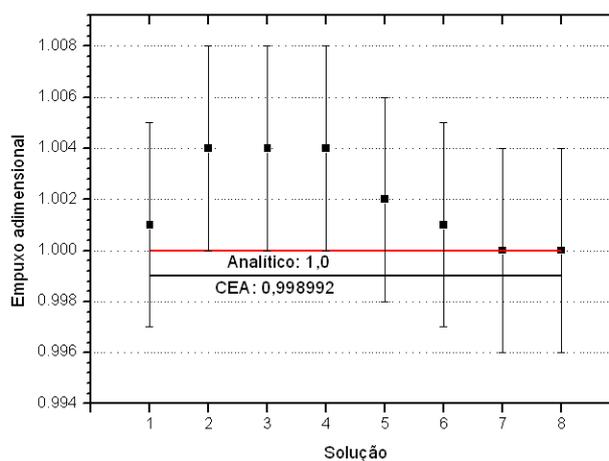


Figura 4.19: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para F^*), para uma malha de 80 volumes de controle.

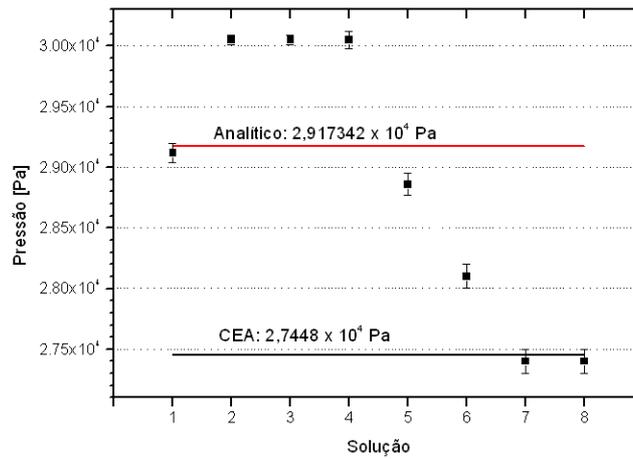


Figura 4.20: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para P_{ex}), para uma malha de 80 volumes de controle.

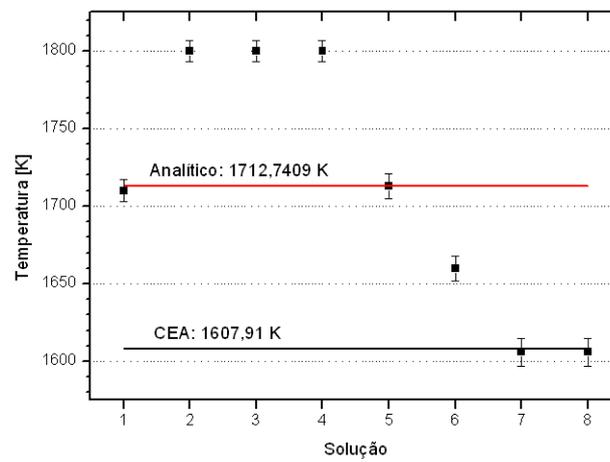


Figura 4.21: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para T_{ex}), para uma malha de 80 volumes de controle.

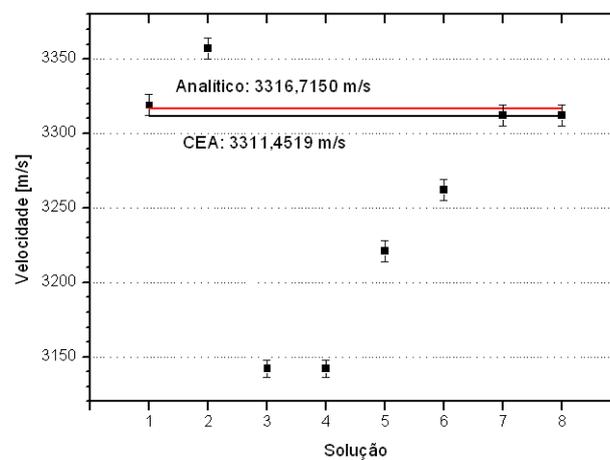


Figura 4.22: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para u_{ex}), para uma malha de 80 volumes de controle.

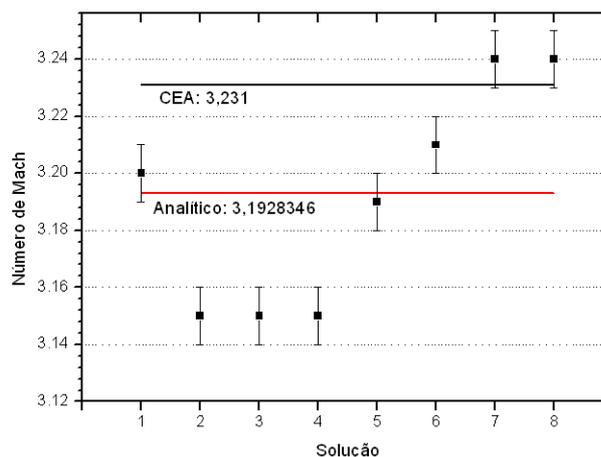


Figura 4.23: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para M_{ex}), para uma malha de 80 volumes de controle.

Confrontando-se os valores numéricos obtidos e mostrados através das Figuras 4.18 a 4.23, verifica-se que os resultados para modelos de 6 e de 8 espécies, do código Mach1D, correspondem aos obtidos utilizando-se o código CEA, considerando-se a incerteza numérica associada às simulações. Pode-se observar, outrossim, que algumas diferenças entre resultados numéricos pode ser atribuída ao emprego de diferentes modelos físicos e/ou químicos e não às incertezas numéricas.

4.5 ESCOAMENTO EM EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL

O escoamento em equilíbrio químico local se constitui (ao lado do escoamento congelado) em um dos casos-limite ou idealizações de um escoamento reativo real. Neste modelo considera-se que a velocidade de reações químicas é infinita (ou grande o suficiente para que a composição química atinja condições de equilíbrio em toda seção transversal ao escoamento). Analogamente ao escoamento congelado, os resultados numéricos obtidos para o escoamento em equilíbrio químico local com o código Mach1D foram comparados aos provenientes do código CEA (GLENN RESEARCH CENTER/NASA, 2005).

Foram efetuadas simulações numéricas utilizando-se os nove modelos químicos implementados no código Mach1D. Observa-se, contudo, que para cada modelo químico, diferentes níveis de refinamento de malha foram empregados: para os modelos químicos 0, 1 e 2, utilizaram-se malhas tão refinadas quanto 10240 volumes de controle; para os modelos

químicos 3, 4 e 10, a malha mais refinada possuía 2560 volumes; e para os modelos 5, 7 e 9, a mais refinada das malhas continha 160 volumes. Deve-se observar, no entanto, que em todos os casos a malha mais grosseira exibiu 10 volumes de controle, sendo empregada uma razão de refino igual a 2. A malha mais refinada empregada para cada modelo químico foi determinada de modo que a simulação a ela relacionada não apresentasse uma duração superior a 60 horas (ou 2,50 dias).

A Tabela 4.22 apresenta os principais dados e resultados sobre as simulações efetuadas empregando-se os diferentes modelos químicos para a condição de escoamento em equilíbrio químico local. Verifica-se que, diferentemente do observado para o escoamento congelado, a escolha do modelo químico implica em uma grande variação no tempo de CPU (embora a solução numérica seja equivalente para modelos com igual número de espécies): enquanto o modelo 4 necessita menos de 10 minutos para uma malha de 160 volumes de controle (e 50.000 iterações), os modelos 5 e 7 necessitam mais de 20 horas para a realizar a mesma simulação. Isto também é verificado no caso dos modelos de oito espécies: para a mesma malha de 160 volumes de controle, enquanto o modelo 10 demanda menos de 15 minutos para que a simulação seja concluída, para o modelo 9 são necessárias 20 horas para se executar o mesmo número de iterações.

Tabela 4.22: Resultados gerais das simulações realizadas com o modelo de escoamento em equilíbrio químico local.

Modelo	Malha (volumes)	Tamanho dos volumes (h)	Δt	Iterações externas efetuadas	Tempo de CPU
0	10	$5,0000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	2.000	0,047 s
	20	$2,5000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	2.000	0,047 s
	40	$1,2500000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	2.000	0,109 s
	80	$6,2500000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	0,953 s
	160	$3,1250000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-5}$	10.000	1,88 s
	320	$1,5625000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-6}$	10.000	3,67 s
	640	$7,8125000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-6}$	20.000	14,4 s
	1.280	$3,9062500 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	1,26 min
	2.560	$1,9531250 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-7}$	80.000	4,36 min
	5.120	$9,7656250 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-7}$	200.000	24,2 min
10.240	$4,8828125 \times 10^{-5}$	$1,00 \times 10^{-7}$	400.000	1,73 h	
1	10	$5,0000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	2.000	0,063 s
	20	$2,5000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	2.000	0,109 s
	40	$1,2500000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	2.000	0,188 s
	80	$6,2500000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-4}$	10.000	1,70 s
	160	$3,1250000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-5}$	10.000	3,16 s
	320	$1,5625000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-6}$	10.000	6,16 s

(continuação da Tabela 4.22)

Modelo	Malha (volumes)	Tamanho dos volumes (h)	Δt	Iterações externas efetuadas	Tempo de CPU
	640	$7,8125000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-6}$	20.000	24,1 s
	1.280	$3,9062500 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	2,10 min
	2.560	$1,9531250 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-7}$	80.000	7,39 min
	5.120	$9,7656250 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-7}$	250.000	50,0 min
	10.240	$4,8828125 \times 10^{-5}$	$1,00 \times 10^{-7}$	500.000	3,25 h
	10	$5,0000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-4}$	2.500	0,250 s
	20	$2,5000000 \times 10^{-2}$	$5,00 \times 10^{-5}$	2.500	0,391 s
	40	$1,2500000 \times 10^{-2}$	$2,00 \times 10^{-5}$	2.500	0,672 s
	80	$6,2500000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-5}$	5.000	2,45 s
	160	$3,1250000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-6}$	20.000	18,1 s
2	320	$1,5625000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	1,46 min
	640	$7,8125000 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-7}$	80.000	5,21 min
	1.280	$3,9062500 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-7}$	200.000	26,5 min
	2.560	$1,9531250 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-7}$	500.000	2,24 h
	5.120	$9,7656250 \times 10^{-5}$	$5,00 \times 10^{-8}$	1.000.000	7,83 h
	10.240	$4,8828125 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-8}$	2.000.000	1,29 dia
	10	$5,0000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-5}$	5.000	6,73 s
	20	$2,5000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-5}$	5.000	10,3 s
	40	$1,2500000 \times 10^{-2}$	$5,00 \times 10^{-6}$	10.000	35,5 s
	80	$6,2500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-6}$	20.000	2,34 min
3	160	$3,1250000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	11,3 min
	320	$1,5625000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-7}$	100.000	41,3 min
	640	$7,8125000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-7}$	200.000	2,63 h
	1.280	$3,9062500 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-7}$	500.000	12,4 h
	2.560	$1,9531250 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-8}$	1.000.000	1,98 dia
	10	$5,0000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-5}$	5.000	5,03 s
	20	$2,5000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-5}$	5.000	7,81 s
	40	$1,2500000 \times 10^{-2}$	$5,00 \times 10^{-6}$	10.000	27,1 s
	80	$6,2500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-6}$	20.000	1,61 min
4	160	$3,1250000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	8,16 min
	320	$1,5625000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-7}$	100.000	31,9 min
	640	$7,8125000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-7}$	200.000	2,18 h
	1.280	$3,9062500 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-7}$	500.000	9,82 h
	2.560	$1,9531250 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-8}$	1.000.000	1,41 dia
	10	$5,0000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-5}$	5.000	5,01 min
	20	$2,5000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-5}$	5.000	5,58 min*
5	40	$1,2500000 \times 10^{-2}$	$5,00 \times 10^{-6}$	10.000	2,88 h
	80	$6,2500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-6}$	20.000	4,96 h
	160	$3,1250000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	1,26 dia
	10	$5,0000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-5}$	5.000	11,8 min
	20	$2,5000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-5}$	5.000	14,5 min
7	40	$1,2500000 \times 10^{-2}$	$5,00 \times 10^{-6}$	10.000	2,61 h
	80	$6,2500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-6}$	20.000	7,32 h
	160	$3,1250000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	2,00 dias
	10	$5,0000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-5}$	15.000	27,4 min
9	20	$2,5000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-5}$	15.000	37,4 min
	40	$1,2500000 \times 10^{-2}$	$5,00 \times 10^{-6}$	15.000	1,30 h**

(continuação da Tabela 4.22)

Modelo	Malha (volumes)	Tamanho dos volumes (h)	Δt	Iterações externas efetuadas	Tempo de CPU
9	80	$6,2500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-6}$	20.000	3,01 h
	160	$3,1250000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	20,0 h
10	10	$5,0000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-5}$	10.000	17,0 s
	20	$2,5000000 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-5}$	10.000	26,3 s
	40	$1,2500000 \times 10^{-2}$	$5,00 \times 10^{-6}$	10.000	45,4 s
	80	$6,2500000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-6}$	20.000	2,95 min
	160	$3,1250000 \times 10^{-3}$	$1,00 \times 10^{-6}$	50.000	14,5 min
	320	$1,5625000 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-7}$	100.000	58,4 min
	640	$7,8125000 \times 10^{-4}$	$2,00 \times 10^{-7}$	200.000	3,08 h
	1.280	$3,9062500 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-7}$	500.000	14,8 h
2.560	$1,9531250 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-8}$	1.000.000	2,42 dias	

* Simulação iniciada com 20 iterações utilizando-se o modelo 3.

** Simulação efetuada em um microcomputador Pentium IV, 2,4 MHz, com 1,0 GB de memória RAM, iniciada com 20 iterações do modelo 10.

Ressalta-se, também, que o número de iterações necessárias para a convergência, bem como o número total de algarismos significativos, depende do modelo químico adotado, conforme pode ser observado através das Tabelas 4.23 e 4.24, apresentadas na seqüência.

Tabela 4.23: Resultados gerais de convergência (modelos 0, 1 e 2).

Malha (volumes)	Modelo 0		Modelo 1		Modelo 2	
	Algarismos significativos	Iterações para convergência	Algarismos significativos	Iterações para convergência	Algarismos significativos	Iterações para convergência
10	14	700	14	400	14	400
20	12	600	14	500	14	1.400
40	12	1.000	14	1.200	14	1.000
80	14	4.000	14	4.800	14	2.800
160	14	3.600	14	3.600	12	17.500
320	13	6.600	12	6.900	12	35.200
640	13	17.000	12	16.400	12	74.000
1.280	13	41.000	12	39.000	12	184.000
2.560	13	76.000	13	72.500	12	392.000
5.120	13	187.000	13	210.000	12	750.000
10.240	13	380.000	10	380.000	3 a 9	1.280.000

Tabela 4.24: Resultados gerais de convergência (modelos 3, 4, 5, 7, 9 e 10).

Malha (volumes)	Modelos 3 e 4		Modelos 5 e 7		Modelo 10		Modelo 9	
	Algarismos significativos	Iterações para convergência	Algarismos significativos	Iterações para convergência	Algarismos significativos	Iterações para convergência	Algarismos significativos	Iterações para convergência
10	13	3.000	10	2.400	12	3.000	9	2.800
20	12	2.700	8	2.700	13	3.000	9	2.000
40	12	6.300	8	5.000	13	6.500	8	6.400
80	11	18.500	8	14.000	11	16.100	8	12.400
160	11	41.500	8	28.000	12	42.000	8	28.000
320	11	83.000	---	---	12	84.000	---	---
640	11	195.000	---	---	12	191.000	---	---
1.280	11	468.000	---	---	11	405.000	---	---
2.560	9	850.000	---	---	11	796.000	---	---

De um modo geral, o aumento do número de espécies envolvidas em uma simulação acarreta um incremento no número de iterações necessárias à convergência do modelo – resultando, outrossim, em um acréscimo no tempo de CPU. Como exemplo, cita-se a malha de 160 volumes de controle, para a qual são necessárias 3.600 iterações, para sua solução, empregando-se os modelos 0 e 1; um total de 17.500 iterações deve ser feito com o modelo 2; ao menos 41.500 iterações devem ser usadas no caso dos modelos 3 e 4; e um mínimo de 42.000 iterações é demandado para o modelo 10.

Verifica-se, contudo, que não apenas o número de iterações é dependente do modelo químico empregado, mas também o total de algarismos significativos alcançados em uma simulação. Através da Tabela 4.24, observa-se que ao ser utilizada uma malha de 160 volumes de controle, obtém-se 11 algarismos significativos ao serem utilizados os modelos químicos 3 e/ou 4, ou 8 algarismos, se for empregado os modelos 5 e/ou 7. Aliando-se esta constatação ao tempo de CPU demandado (Tabela 4.22), conclui-se que o maior número de reações químicas inerentes aos modelos 5 e 7 (para seis espécies) e modelo 9 (para oito espécies) resulta em um aumento no erro de arredondamento (devido à maior quantidade de cálculos a ser efetuada), ocasionando em um menor número de algarismos significativos.

Atenta-se, ainda, à exigência de um maior esforço computacional (e conseqüentemente um maior tempo de CPU) para a obtenção da solução numérica por parte dos modelos químicos 5, 7 e 9 (que apresentam um maior número de reações químicas). Desta maneira, ao menos para o modelo de escoamento em equilíbrio químico local, é recomendável a utilização de modelos químicos que apresentem o menor número possível de reações químicas (para um

determinado número de espécies consideradas). Esta recomendação não se faz necessária ao escoamento congelado, uma vez que a composição química é determinada uma única vez, de modo que a influência do modelo químico escolhido sobre o tempo de CPU é reduzida.

Como efetuado para os demais modelos físicos de escoamento, também para o escoamento em equilíbrio químico local foram obtidas a ordem aparente do erro numérico e a incerteza numérica baseada no estimador GCI, sendo alguns resultados apresentados nas Tabelas 4.25 e 4.26. Observa-se, entretanto, que a ordem assintótica do erro para este modelo é igual a 1. Isto se deve ao fato de um termo da equação da energia, Eq. (3.3), ser discretizado utilizando-se funções de interpolação de primeira ordem (UDS). Deve-se ressaltar que tal procedimento só foi realizado pela impossibilidade de discretizar todos os termos da equação empregando-se funções de interpolação CDS: todas as tentativas de se empregar funções de aproximação de segunda ordem resultaram em divergência do modelo numérico, não se obtendo solução numérica. Com isso, optou-se pelo emprego de funções de interpolação de primeira ordem, mesmo que isto pudesse ocasionar uma redução da ordem aparente de todo o modelo numérico. Assim, apesar de a maior parte das equações do modelo matemático ser discretizada empregando-se funções de interpolação de segunda ordem, o fato de um termo da equação apresentar ordem unitária é suficiente para que a convergência de todo o sistema seja afetada.

Tabela 4.25: Ordem aparente da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) [p_L : 1] e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo 3).

Malha (volumes)	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_{1,p})$
10	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40	1,9818630796237000	$7,5884545094694100 \times 10^{-2}$
80	2,4442401802332500	$1,3943240685782800 \times 10^{-2}$
160	2,0808145703577900	$3,2959159116361400 \times 10^{-3}$
320	1,4460126527432300	$1,2097146509938400 \times 10^{-3}$
640	1,1135091667926400	$5,5909200360326800 \times 10^{-4}$
1280	1,0177172791914900	$2,7613398007497700 \times 10^{-4}$
2560	$9,9840255169920800 \times 10^{-1}$	$1,3852655362599400 \times 10^{-4}$

Tabela 4.26: Ordem aparente da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}) [p_i : 1] e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo 3).

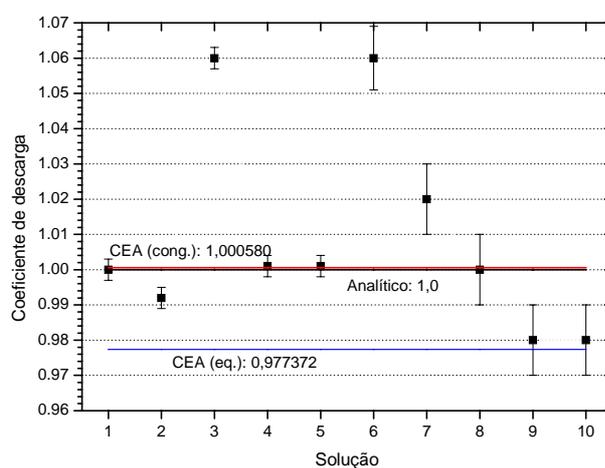
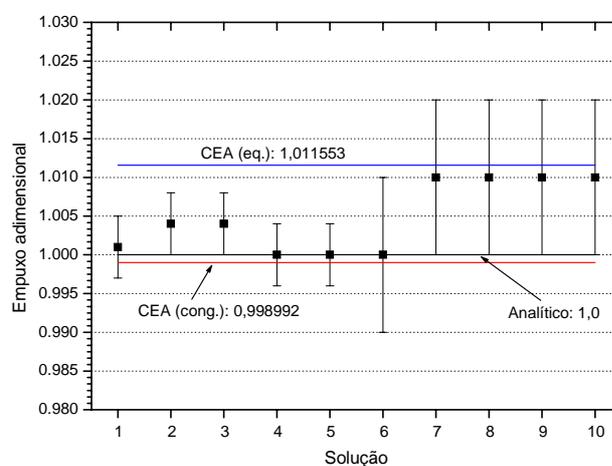
Malha (volumes)	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
10	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40	3,4348164977995100	6,1252732015796000
80	---	3,3257607078030600x10 ⁻¹ **
160	-2,2265967069298400	1,5565511443192000x10 ⁻¹ **
320	2,9770810391330800x10 ⁻¹	5,5252049057003300
640	7,0875118289009300x10 ⁻¹	1,2213312917501800
1280	8,6523489896518300x10 ⁻¹	5,1766370390471200x10 ⁻¹
2560	9,3498997836785100x10 ⁻¹	2,4396686346993500x10 ⁻¹

Deve-se atentar, também, que nas Tabelas 4.25 e 4.26, quando não é possível obter o valor da ordem aparente, o respectivo valor é indicado através de traços (---). Ressalta-se, ainda, que ao não ser possível estimar a incerteza numérica baseada na ordem aparente, emprega-se a ordem assintótica, sendo tais casos identificados através de asteriscos (**) à direita dos valores apresentados. A partir dos dados mostrados nas Tabelas 4.25 e 4.26, observa-se que à medida que a malha é refinada, a ordem aparente se aproxima da ordem assintótica, como esperado e verificado para os demais modelos físicos implementados no código Mach1D. Por se tratar do critério mais dificilmente atendido na verificação de um código numérico, afirma-se que o código Mach1D apresenta soluções corretas do modelo matemático implementado.

Observa-se que, embora a incerteza numérica seja maior para a malha de 80 volumes de controle, empregando-se o modelo de equilíbrio químico local, ainda assim ela é compatível à ordem de grandeza dos erros experimentais. Obtidas as estimativas de erro, são apresentados, a seguir, os resultados numéricos empregando-se o código Mach1D, comparando-os com os resultados analítico e provenientes do código CEA (para escoamentos congelado e em equilíbrio químico local), através das Figuras 4.24 a 4.29, para uma malha de 80 volumes de controle.

Tabela 4.27: Modelos físicos apresentados nas Figuras 4.24 a 4.29.

Solução	Modelos
1	Modelo com propriedades constantes ($R = 526,97 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$)
2	Modelo com propriedades variáveis ($R = 526,97 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$)
3	Modelo com propriedades variáveis ($R \approx 461,53 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$)
4	Modelo congelado – modelo químico 5
5	Modelo congelado – modelo químico 9
6	Modelo equilíbrio químico local – modelo químico 0
7	Modelo equilíbrio químico local – modelo químico 1
8	Modelo equilíbrio químico local – modelo químico 2
9	Modelo equilíbrio químico local – modelo químico 3
10	Modelo equilíbrio químico local – modelo químico 10

Figura 4.24: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para C_d), para malha de 80 volumes de controle.Figura 4.25: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para F^*), para malha de 80 volumes de controle.

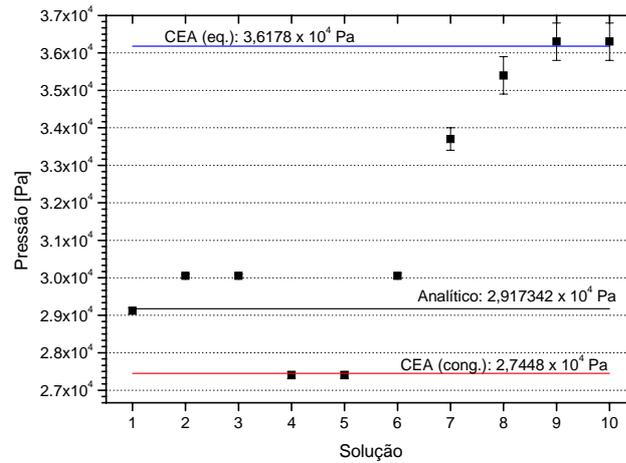


Figura 4.26: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para P_{ex}), para malha de 80 volumes de controle.

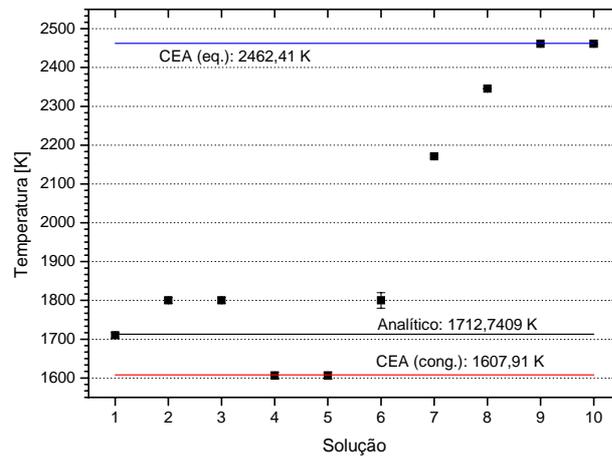


Figura 4.27: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para T_{ex}), para malha de 80 volumes de controle.

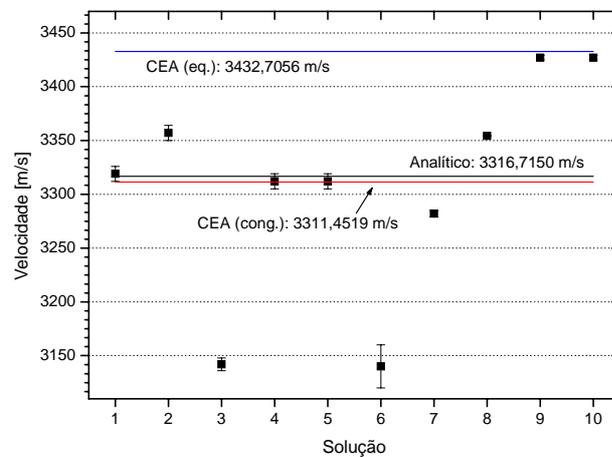


Figura 4.28: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para u_{ex}), para malha de 80 volumes de controle.

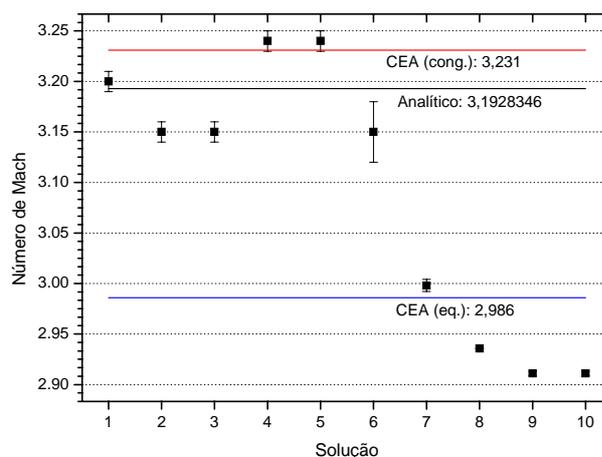


Figura 4.29: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para M_{ex}), para malhas de 80 volumes de controle.

A partir das Figuras 4.24 a 4.29, nota-se que, de um modo geral, os únicos modelos a apresentarem boa concordância (para todas as seis variáveis de interesse) com os resultados obtidos com o programa CEA (congelado) foram os modelos congelados com seis e oito espécies (modelos químicos 5 e 9). No caso do escoamento em equilíbrio químico local, outrossim foram os modelos de seis e oito espécies (modelos 3 e 10) os que mais se aproximaram dos resultados obtidos com o programa CEA (equilíbrio); ressalta-se, contudo, que os modelos 3 e 10 subestimaram o número de Mach na saída da tubeira, quando comparados aos resultados do CEA. Verifica-se, ainda, que os modelos numéricos variáveis (para R de 526,97 e 461,53 J/kg.K) e o modelo em equilíbrio (com modelo químico 0) possuem resultados equivalentes para a grande maioria das variáveis de interesse, com exceção da velocidade de saída da tubeira (em que apenas os modelos numérico variável com R de 461,53 J/kg.K e o modelo químico 0 são coincidentes). Por último, pode-se afirmar que as diferenças entre os resultados numéricos são devidas aos modelos físicos e/ou químicos utilizados, uma vez que tais diferenças superam as incertezas numéricas associadas aos valores obtidos.

4.6 ESCOAMENTO EM DESEQUILÍBRIO QUÍMICO

O último modelo físico estudado dentre os casos unidimensionais é o escoamento em desequilíbrio químico. Por se situar entre os escoamentos congelado e em equilíbrio químico

local, este modelo deve apresentar resultados mais próximos aos da situação real de funcionamento de um motor-foguete. Observa-se, contudo, que a necessidade do cálculo das taxas de geração de espécies para cada modelo químico torna este modelo mais complexo que os anteriores, sendo necessário agregar a equação da conservação de massa para cada espécie química ao modelo matemático. Dados e resultados gerais das simulações envolvendo este modelo físico estão relacionadas na Tabela 4.28.

Tabela 4.28: Dados gerais das simulações realizadas com o modelo de desequilíbrio químico.

Modelo reativo	Malha (volumes)	Tamanho dos volumes (h)	Δt	Iterações externas	Tempo de CPU
31	10	$5,0000000000000000 \times 10^{-2}$	$4,00 \times 10^{-8}$	$1,50 \times 10^6$	57,8 s
	20	$2,5000000000000000 \times 10^{-2}$	$4,00 \times 10^{-8}$	$2,00 \times 10^6$	2,04 min
	40	$1,2500000000000000 \times 10^{-2}$	$4,00 \times 10^{-8}$	$4,00 \times 10^6$	6,19 min
	80	$6,2500000000000000 \times 10^{-3}$	$4,00 \times 10^{-8}$	$5,00 \times 10^6$	17,0 min
	160	$3,1250000000000000 \times 10^{-3}$	$4,00 \times 10^{-8}$	$1,00 \times 10^7$	1,09 h
	320	$1,5625000000000000 \times 10^{-3}$	$4,00 \times 10^{-8}$	$5,00 \times 10^6$	1,04 h
	640	$7,8125000000000000 \times 10^{-4}$	$4,00 \times 10^{-8}$	$3,00 \times 10^6$	1,24 h
	1280	$3,9062500000000000 \times 10^{-4}$	$4,00 \times 10^{-8}$	$2,00 \times 10^6$	1,63 h
	2560	$1,9531250000000000 \times 10^{-4}$	$4,00 \times 10^{-8}$	$1,00 \times 10^6$	1,66 h
32	10	$5,0000000000000000 \times 10^{-2}$	$3,00 \times 10^{-8}$	$1,50 \times 10^6$	1,01 min
	20	$2,5000000000000000 \times 10^{-2}$	$3,00 \times 10^{-8}$	$3,00 \times 10^6$	3,13 min
	40	$1,2500000000000000 \times 10^{-2}$	$3,00 \times 10^{-8}$	$4,50 \times 10^6$	8,20 min
	80	$6,2500000000000000 \times 10^{-3}$	$3,00 \times 10^{-8}$	$8,00 \times 10^6$	27,3 min
	160	$3,1250000000000000 \times 10^{-3}$	$3,00 \times 10^{-8}$	$1,50 \times 10^7$	1,71 h
	320	$1,5625000000000000 \times 10^{-3}$	$3,00 \times 10^{-8}$	$7,50 \times 10^6$	1,62 h
	640	$7,8125000000000000 \times 10^{-4}$	$3,00 \times 10^{-8}$	$5,00 \times 10^6$	2,14 h
	1280	$3,9062500000000000 \times 10^{-4}$	$3,00 \times 10^{-8}$	$3,00 \times 10^6$	2,57 h
	2560	$1,9531250000000000 \times 10^{-4}$	$3,00 \times 10^{-8}$	$1,50 \times 10^6$	2,61 h
5	20	$2,5000000000000000 \times 10^{-2}$	$9,00 \times 10^{-10}$	$8,00 \times 10^7$	1,85 h
	40	$1,2500000000000000 \times 10^{-2}$	$9,00 \times 10^{-10}$	$1,20 \times 10^8$	5,01 h*
	80	$6,2500000000000000 \times 10^{-3}$	$9,00 \times 10^{-10}$	$2,00 \times 10^8$	15,6 h
7	20	$2,5000000000000000 \times 10^{-2}$	$9,00 \times 10^{-10}$	$6,00 \times 10^7$	1,30 h
	40	$1,2500000000000000 \times 10^{-2}$	$9,00 \times 10^{-10}$	$1,00 \times 10^8$	3,83 h
	80	$6,2500000000000000 \times 10^{-3}$	$9,00 \times 10^{-10}$	$2,00 \times 10^8$	14,3 h
9	80	$6,2500000000000000 \times 10^{-3}$	$3,00 \times 10^{-13}$	$1,00 \times 10^9$	não convergiu após 5,35 dias e $1,00 \times 10^9$ iterações
10	10	$5,0000000000000000 \times 10^{-2}$	$2,00 \times 10^{-10}$	$5,00 \times 10^8$	6,13 h
	20	$2,5000000000000000 \times 10^{-2}$	$2,00 \times 10^{-10}$	$4,00 \times 10^8$	7,97 h
	40	$1,2500000000000000 \times 10^{-2}$	$2,00 \times 10^{-10}$	$6,50 \times 10^8$	22,9 h
	80	$6,2500000000000000 \times 10^{-3}$	$2,00 \times 10^{-10}$	$1,20 \times 10^9$	3,30 dias

Apenas modelos químicos de seis e de oito espécies foram considerados para estudos em desequilíbrio químico, conforme apresentado na Tabela 3.1. Dados gerais das simulações efetuadas são apresentados na Tabela 4.28. Observa-se, novamente, que o refinamento das malhas foi dependente do modelo químico adotado: enquanto para os modelos 31 e 32 foram efetuados estudos com malhas de até 2560 volumes, para os modelos 5, 7 e 10 os estudos envolveram malhas de até 80 volumes. Além disso, o modelo 9 não pôde ser empregado devido ao tempo de CPU demandado: não se obteve a convergência para a malha de 80 volumes nem após 1,0 bilhão de iterações (e mais de cinco dias de simulação). Isto pode ser observado mais claramente através da Figura 4.30: os resultados do coeficiente de descarga não se estabilizam em um determinado valor ou patamar (conforme esperado e observado na Figura 4.3).

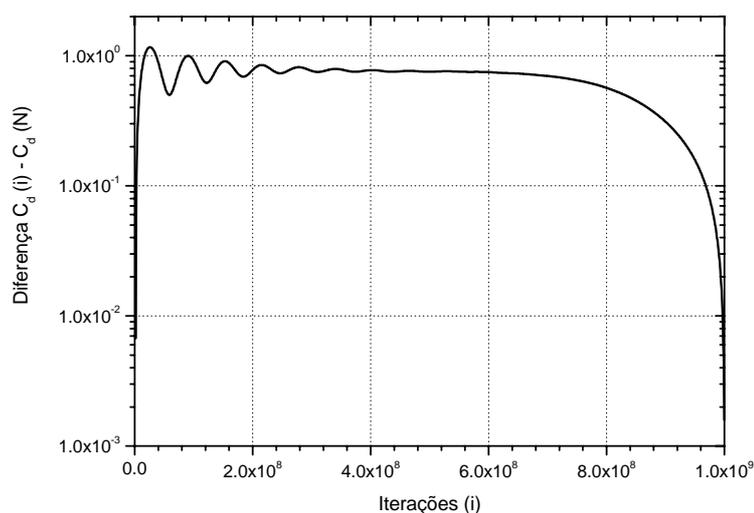


Figura 4.30: Comportamento do coeficiente de descarga x número de iterações (malha de 80 volumes).

Notou-se, também, que a escolha por determinado modelo químico para uma dada malha, afetou consideravelmente o número total de algarismos significativos obtidos na solução numérica. Isto pode ser visto através das Tabelas 4.29 e 4.30, mostradas a seguir. De uma forma geral, observou-se um menor número de algarismos significativos associados aos modelos químicos que apresentam maior número de reações de dissociação. Este fato pode ser relacionado ao maior número de operações necessárias por tais modelos para se obter a solução numérica, implicando em níveis mais elevados de erros de arredondamento.

Tabela 4.29: Dados gerais de convergência (modelos 31 e 32).

Malha (volumes)	Modelo 31		Modelo 32	
	Algarismos significativos	Iterações para convergência	Algarismos significativos	Iterações para convergência
10	16	$1,14 \times 10^6$	16	$1,49 \times 10^6$
20	16	$1,92 \times 10^6$	16	$2,37 \times 10^6$
40	12	$2,85 \times 10^6$	12	$4,00 \times 10^6$
80	11	$4,85 \times 10^6$	11	$6,82 \times 10^6$
160	12	$7,18 \times 10^6$	11	$1,11 \times 10^7$
320	12	$3,05 \times 10^6$	12	$5,26 \times 10^6$
640	12	$1,10 \times 10^6$	12	$1,60 \times 10^6$
1280	13	$1,10 \times 10^6$	12	$1,40 \times 10^6$
2560	13	$9,60 \times 10^5$	12	$1,25 \times 10^6$

Ao se calcular as ordens aparentes do erro numérico para o modelo de escoamento em desequilíbrio químico (Tabelas 4.31 e 4.32), observou-se que tais ordens não apresentam uma tendência clara: possivelmente, a ordem aparente tenda à unidade, ao invés de tender a um valor igual a dois. Este resultado pode estar associado à solução da equação de conservação da energia, devido ao fato que a mesma apresentar um termo-fonte cuja discretização é feita empregando-se funções de interpolação de primeira ordem (UDS), similarmente ao ocorrido para o modelo de escoamento em equilíbrio químico local. Também neste caso foram feitas simulações empregando-se funções de interpolação de segunda ordem, sem sucesso (divergência em todos os caso), o que motivou a utilização de funções do tipo UDS. Observa-se, ainda, que nas Tabelas 4.30 e 4.31, quando não foi possível utilizar o estimador GCI baseado na ordem aparente do erro, empregou-se a ordem assintótica do mesmo, identificando tais resultados por asteriscos (**) à direita do valor exibido.

Tabela 4.30: Dados gerais de convergência (modelos 5, 7 e 10).

Malha (volumes)	Modelo 5		Modelo 7		Modelo 10	
	Algarismos significativos	Iterações para convergência	Algarismos significativos	Iterações para convergência	Algarismos significativos	Iterações para convergência
10	---	---	---	---	16	$1,84 \times 10^8$
20	16	$6,10 \times 10^7$	10	$5,30 \times 10^7$	16	$2,92 \times 10^8$
40	9	$1,15 \times 10^8$	10	$8,80 \times 10^7$	16	$6,05 \times 10^8$
80	10	$1,87 \times 10^8$	10	$1,80 \times 10^8$	11	$9,30 \times 10^8$

Tabela 4.31: Ordem aparente da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) [p_L : 1] e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo 31).

Malha (volumes)	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
10	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40	2,109	$7,010 \times 10^{-2}$
80	2,844	$9,764 \times 10^{-3}$
160	3,194	$1,067 \times 10^{-3}$
320	3,441	$9,822 \times 10^{-5}$
640	3,202	$1,067 \times 10^{-5}$
1280	1,031	$5,221 \times 10^{-6}$
2560	$-2,577 \times 10^{-1}$	$6,243 \times 10^{-6}$ **

Tabela 4.32: Ordem aparente da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira (T_{ex}) [p_L : 1] e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo 31).

Malha (volumes)	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
10	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40	2,274	$9,385 \times 10^1$
80	1,858	$2,588 \times 10^1$
160	1,863	7,113
320	1,896	1,911
640	1,865	$5,246 \times 10^{-1}$
1280	1,762	$1,547 \times 10^{-1}$
2560	1,351	$6,066 \times 10^{-2}$

As incertezas numéricas obtidas para cada modelo químico no escoamento em desequilíbrio químico apresentam mesma ordem de grandeza das estimativas de erro (para todas as variáveis de interesse estudadas) para os demais modelos físicos implementados no código Mach1D. Desta forma, mesmo que o valor da ordem aparente seja diferente do esperado, há indícios de que o código resolva corretamente o modelo matemático empregado. Esta hipótese é reforçada pelo fato de os resultados numéricos obtidos se encontrarem entre os resultados dos escoamentos congelado e em equilíbrio químico local, conforme esperado.

Tendo-se os resultados numéricos e as respectivas estimativas de erro GCI, é feita a comparação entre os diversos modelos químicos existentes para o escoamento em desequilíbrio químico, bem como com os resultados obtidos com os modelos físicos anteriores e com o programa CEA. Tal comparação é apresentada nas Tabelas 4.33 e 4.34, sendo considerada uma malha de 80 volumes para todos os modelos.

Tabela 4.33: Quadro comparativo de modelos adotados para o coeficiente de descarga, empuxo dinâmico adimensional e pressão na saída da tubeira, incluindo erros numéricos estimados (malhas de 80 volumes).

Modelo	C_d [adim.]	F^* [adim.]	P_{ex} [Pa]
Analítico(R1)	1,0	1,0	$2,917342 \times 10^4$
Numérico constante (R1)	$1,000 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1,001 \pm 4 \times 10^{-3}$	$2,912 \times 10^4 \pm 8 \times 10^1$
Numérico variável (R1)	$0,992 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1,004 \pm 4 \times 10^{-3}$	$3,005 \times 10^4 \pm 7 \times 10^1$
Numérico variável (R2)	$1,060 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1,004 \pm 4 \times 10^{-3}$	$3,005 \times 10^4 \pm 7 \times 10^1$
Congelado – mod. 0	$1,060 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1,004 \pm 4 \times 10^{-3}$	$3,005 \times 10^4 \pm 7 \times 10^1$
Congelado – mod. 1	$1,032 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1,002 \pm 4 \times 10^{-3}$	$2,886 \times 10^4 \pm 9 \times 10^1$
Congelado – mod. 2	$1,018 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1,001 \pm 4 \times 10^{-3}$	$2,81 \times 10^4 \pm 1 \times 10^2$
Congelado – mod. 3, 4, 5 e 7	$1,001 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1,000 \pm 4 \times 10^{-3}$	$2,74 \times 10^4 \pm 1 \times 10^2$
Congelado – mod. 9 e 10	$1,001 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1,000 \pm 4 \times 10^{-3}$	$2,74 \times 10^4 \pm 1 \times 10^2$
CEA (congelado)	1,000580	0,998992	$2,7448 \times 10^4$
Equilíbrio – mod. 0	$1,060 \pm 9 \times 10^{-3}$	$1,00 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,005 \times 10^4 \pm 7 \times 10^1$
Equilíbrio – mod. 1	$1,02 \pm 1 \times 10^{-2}$	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,37 \times 10^4 \pm 3 \times 10^2$
Equilíbrio – mod. 2	$1,00 \pm 1 \times 10^{-2}$	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,54 \times 10^4 \pm 5 \times 10^2$
Equilíbrio – mod. 3 e 4	$0,98 \pm 1 \times 10^{-2}$	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,63 \times 10^4 \pm 5 \times 10^2$
Equilíbrio – mod. 10	$0,98 \pm 1 \times 10^{-2}$	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,63 \times 10^4 \pm 5 \times 10^2$
CEA (equilíbrio)	0,977372	1,011553	$3,6178 \times 10^4$
Taxa finita – mod. 31	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,18 \times 10^4 \pm 2 \times 10^2$
Taxa finita – mod. 32	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,25 \times 10^4 \pm 2 \times 10^2$
Taxa finita – mod. 5	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,36 \times 10^4 \pm 2 \times 10^2$
Taxa finita – mod. 7	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,433 \times 10^4 \pm 9 \times 10^1$
Taxa finita – mod. 10	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,18 \times 10^4 \pm 2 \times 10^2$

(R1): $R = 526,97 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$; (R2): $R \approx 461,53 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$

Comparando-se os resultados obtidos e suas respectivas incertezas numéricas, a partir das Tabelas 4.33 e 4.34, pode-se avaliar os efeitos dos diferentes modelos físicos e/ou químicos sobre as soluções numéricas: para muitas das variáveis, as diferenças entre os resultados pode ser atribuído à utilização de modelos diferentes (e não ao erro numérico associado à simulação). De um modo geral, também, não há vantagens em se utilizar um modelo químico com mais de seis espécies, uma vez que a incerteza numérica é superior à diferença entre os resultados obtidos. Ressalta-se, contudo, que a utilização de modelos químicos com número de espécies inferior a quatro também não é recomendável, em virtude do elevado erro de modelagem cometido ao serem desprezadas espécies químicas com importante papel no quadro geral de reações, como o oxigênio e o hidrogênio monoatômicos.

Tabela 4.34: Quadro comparativo de modelos adotados para a temperatura, a velocidade e o número de Mach (todos na saída da tubeira), incluindo erros numéricos estimados (malha de 80 volumes).

Modelo	T_{ex} [K]	u_{ex} [m/s]	M_{ex} [adim.]
Analítico(R1)	1.712,7409	3.316,7150	3,1928346
Numérico constante (R1)	1.710 ± 7	3.319 ± 7	3,20 ± 1x10 ⁻²
Numérico variável (R1)	1.800 ± 7	3.357 ± 7	3,15 ± 1x10 ⁻²
Numérico variável (R2)	1.800 ± 7	3.142 ± 6	3,15 ± 1x10 ⁻²
Congelado – mod. 0	1.800 ± 7	3.142 ± 6	3,15 ± 1x10 ⁻²
Congelado – mod. 1	1.713 ± 8	3.221 ± 7	3,19 ± 1x10 ⁻²
Congelado – mod. 2	1.660 ± 8	3.262 ± 7	3,21 ± 1x10 ⁻²
Congelado – mod. 3, 4, 5 e 7	1.606 ± 9	3.312 ± 7	3,24 ± 1x10 ⁻²
Congelado – mod. 9 e 10	1.606 ± 9	3.312 ± 7	3,24 ± 1x10 ⁻²
CEA (congelado)	1.607,91	3.311,4519	3,231
Equilíbrio – mod. 0	1.800 ± 2x10	3.140 ± 2x10	3,15 ± 3x10 ⁻²
Equilíbrio – mod. 1	2.171 ± 4	3.282 ± 3	2,998 ± 6x10 ⁻³
Equilíbrio – mod. 2	2.345,9 ± 7x10 ⁻¹	3.354,3 ± 1x10 ⁻¹	2,9357 ± 3x10 ⁻⁴
Equilíbrio – mod. 3 e 4	2.461,2 ± 3x10 ⁻¹	3.427 ± 2	2,911 ± 2x10 ⁻³
Equilíbrio – mod. 10	2.461,4 ± 3x10 ⁻¹	3.427 ± 2	2,911 ± 2x10 ⁻³
CEA (equilíbrio)	2.462,41	3.432,7056	2,986
Taxa finita – mod. 31	1.910 ± 3x10 ¹	3.330 ± 1x10 ¹	3,05 ± 3x10 ⁻²
Taxa finita – mod. 32	1.980 ± 3x10 ¹	3.340 ± 1x10 ¹	3,02 ± 3x10 ⁻²
Taxa finita – mod. 5	2.060 ± 2x10 ¹	3.340 ± 1x10 ¹	2,98 ± 3x10 ⁻²
Taxa finita – mod. 7	2.120 ± 2x10 ¹	3.340 ± 1x10 ¹	2,96 ± 2x10 ⁻²
Taxa finita – mod. 10	1.910 ± 3x10 ¹	3.330 ± 1x10 ¹	3,05 ± 3x10 ⁻²

(R1): $R = 526,97 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$; (R2): $R \approx 461,53 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$

Ao se comparar os resultados obtidos nas Tabelas 4.33 e 4.34, observa-se que as reações químicas empregadas nos modelos de equilíbrio químico local são do tipo exotérmicas: há um notável aumento da temperatura na saída da tubeira decorrente da liberação da energia interna ocasionado pelas reações químicas entre as diversas espécies em escoamento. Esta liberação de energia é ocasionada pelo fato de que as certas espécies existentes no escoamento (como o oxigênio e o hidrogênio monoatômicos) tendem a se reagrupar formando vapor de água, num processo inverso ao da dissociação (que ocorre a altas temperaturas, através de reações do tipo endotérmicas). O aumento da temperatura da mistura de gases em escoamento é notado, outrossim, na velocidade de escoamento, uma vez que existe uma maior quantidade de energia térmica disponível para ser convertida em energia cinética. Observa-se, dessa maneira, um aumento da velocidade na saída da tubeira, que chega a cerca de 120 m/s.

A incerteza numérica das soluções foi obtida, outrossim, para malhas mais refinadas, como a de 2560 volumes, conforme pode ser visto nas Tabelas 4.35 e 4.36. A ausência de resultados para os modelos químicos 5, 7, 9 e 10, para o escoamento em desequilíbrio

químico local, se deve a restrições de tempo computacional (tais modelos demandariam um tempo por demais elevado para que as simulações fossem realizadas).

Tabela 4.35: Quadro comparativo de modelos adotados para o coeficiente de descarga, empuxo dinâmico adimensional e pressão na saída da tubeira, incluindo erros numéricos estimados (malhas de 2560 volumes).

Modelo	C_d [adim.]	F^* [adim.]	P_{ex} [Pa]
Analítico(R1)	1,0	1,0	29.173,42
Numérico constante (R1)	$1,000000 \pm 1 \times 10^{-6}$	$1,000000 \pm 1 \times 10^{-6}$	$29.173,3 \pm 2 \times 10^{-1}$
Numérico variável (R1)	$0,991754 \pm 1 \times 10^{-6}$	$1,003224 \pm 1 \times 10^{-6}$	$30.098,3 \pm 2 \times 10^{-1}$
Numérico variável (R2)	$1,059739 \pm 1 \times 10^{-6}$	$1,003224 \pm 1 \times 10^{-6}$	$30.098,3 \pm 2 \times 10^{-1}$
Congelado – mod. 0	$1,059711 \pm 1 \times 10^{-6}$	$1,003224 \pm 1 \times 10^{-6}$	$30.098,6 \pm 2 \times 10^{-1}$
Congelado – mod. 1	$1,031887 \pm 1 \times 10^{-6}$	$1,001341 \pm 1 \times 10^{-6}$	$28.915,0 \pm 2 \times 10^{-1}$
Congelado – mod. 2	$1,017664 \pm 1 \times 10^{-6}$	$1,000191 \pm 1 \times 10^{-6}$	$28.201,0 \pm 2 \times 10^{-1}$
Congelado – mod. 3, 4, 5 e 7	$1,001086 \pm 1 \times 10^{-6}$	$0,998981 \pm 1 \times 10^{-6}$	$27.460,1 \pm 2 \times 10^{-1}$
Congelado – mod. 9 e 10	$1,001094 \pm 1 \times 10^{-6}$	$0,998982 \pm 1 \times 10^{-6}$	$27.460,7 \pm 2 \times 10^{-1}$
CEA (congelado)	1,000580	0,998992	27.448
Equilíbrio – mod. 0	$1,059711 \pm 3 \times 10^{-6}$	$1,003224 \pm 4 \times 10^{-6}$	$30.098,6 \pm 6 \times 10^{-1}$
Equilíbrio – mod. 1	$1,0190 \pm 1 \times 10^{-4}$	$1,00884 \pm 1 \times 10^{-5}$	$33.610 \pm 1 \times 10^1$
Equilíbrio – mod. 2	$0,9986 \pm 1 \times 10^{-4}$	$1,010751 \pm 8 \times 10^{-6}$	$35.290 \pm 1 \times 10^1$
Equilíbrio – mod. 3 e 4	$0,9782 \pm 1 \times 10^{-4}$	$1,011582 \pm 8 \times 10^{-6}$	$36.160 \pm 2 \times 10^1$
Equilíbrio – mod. 10	$0,9782 \pm 1 \times 10^{-4}$	$1,011587 \pm 8 \times 10^{-6}$	$36.170 \pm 2 \times 10^1$
CEA (equilíbrio)	0,977372	1,011553	36.178
Taxa finita – mod. 31	$1,007717 \pm 6 \times 10^{-6}$	$1,011741 \pm 4 \times 10^{-6}$	$31.804,9 \pm 9 \times 10^{-1}$
Taxa finita – mod. 32	$1,00682 \pm 1 \times 10^{-5} **$	$1,012647 \pm 4 \times 10^{-6}$	32.592 ± 1

(R1): $R = 526,97 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$; (R2): $R \approx 461,53 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$

Comparando-se os resultados numéricos obtidos para a malha de 80 volumes de controle (Tabelas 4.33 e 4.34) e a de 2560 volumes (Tabelas 4.35 e 4.36), observa-se que, à exceção da temperatura de saída (no caso de escoamento em equilíbrio químico), o refinamento da malha provê resultados (do código Mach1D) mais próximos aos apresentados pelo programa CEA. Enquanto para a malha de 80 volumes de controle, a diferença entre os resultados do programa Mach1D (para o número de Mach na saída da tubeira) é de 0,28% para o escoamento congelado e 2,51% para o escoamento em equilíbrio químico, para a malha de 2560 volumes tal diferença se reduz a 0,08% para o escoamento congelado e 2,39% para o equilíbrio químico.

Tabela 4.36: Quadro comparativo de modelos adotados para a temperatura, a velocidade e o número de Mach (todos na saída da tubeira), incluindo erros numéricos estimados (malha de 2560 volumes).

Model	T_{ex} [K]	u_{ex} [m/s]	M_{ex} [adim.]
Analítico(R1)	1.712,7409	3.316,7150	3,1928346
Numérico constante (R1)	$1.712,739 \pm 7 \times 10^{-3}$	$3.316,717 \pm 7 \times 10^{-3}$	$3,19284 \pm 1 \times 10^{-5}$
Numérico variável (R1)	$1.802,338 \pm 7 \times 10^{-3}$	$3.355,072 \pm 7 \times 10^{-3}$	$3,14424 \pm 1 \times 10^{-5}$
Numérico variável (R2)	$1.802,338 \pm 7 \times 10^{-3}$	$3.139,835 \pm 7 \times 10^{-3}$	$3,14424 \pm 1 \times 10^{-5}$
Congelado – mod. 0	$1.802,450 \pm 7 \times 10^{-3}$	$3.139,920 \pm 7 \times 10^{-3}$	$3,14424 \pm 1 \times 10^{-5}$
Congelado – mod. 1	$1.715,090 \pm 8 \times 10^{-3}$	$3.218,531 \pm 7 \times 10^{-3}$	$3,18174 \pm 1 \times 10^{-5}$
Congelado – mod. 2	$1.662,928 \pm 9 \times 10^{-3}$	$3.259,770 \pm 7 \times 10^{-3}$	$3,20535 \pm 1 \times 10^{-5}$
Congelado – mod. 3, 4, 5 e 7	$1.609,141 \pm 9 \times 10^{-3}$	$3.309,743 \pm 7 \times 10^{-3}$	$3,23078 \pm 2 \times 10^{-5}$
Congelado – mod. 9 e 10	$1.609,185 \pm 9 \times 10^{-3}$	$3.309,720 \pm 7 \times 10^{-3}$	$3,23076 \pm 2 \times 10^{-5}$
CEA (congelado)	1.607,91	3.311,4519	3,231
Equilíbrio – mod. 0	$1.802,45 \pm 2 \times 10^{-2}$	$3.139,92 \pm 2 \times 10^{-2}$	$3,14424 \pm 4 \times 10^{-5}$
Equilíbrio – mod. 1	$2.169,9 \pm 3 \times 10^{-1}$	$3.283,5 \pm 4 \times 10^{-1}$	$3,0009 \pm 6 \times 10^{-4}$
Equilíbrio – mod. 2	$2.344,3 \pm 3 \times 10^{-1}$	$3.356,9 \pm 5 \times 10^{-1}$	$2,9392 \pm 6 \times 10^{-4}$
Equilíbrio – mod. 3 e 4	$2.459,8 \pm 2 \times 10^{-1}$	$3.429,8 \pm 5 \times 10^{-1}$	$2,9147 \pm 6 \times 10^{-4}$
Equilíbrio – mod. 10	$2.460,0 \pm 2 \times 10^{-1}$	$3.429,8 \pm 5 \times 10^{-1}$	$2,9146 \pm 6 \times 10^{-4}$
CEA (equilíbrio)	2.462,41	3.432,7056	2,986
Taxa finita – mod. 31	$1.915,20 \pm 6 \times 10^{-2}$	$3.329,958 \pm 9 \times 10^{-3}$	$3,04829 \pm 5 \times 10^{-5}$
Taxa finita – mod. 32	$1.980,9 \pm 1 \times 10^{-1}$	$3.335,89 \pm 3 \times 10^{-2}$	$3,01833 \pm 6 \times 10^{-5}$

(R1): $R = 526,97$ J/kg·K; (R2): $R \approx 461,53$ J/kg·K

Tal redução, no entanto, é bastante pequena frente ao aumento do tempo computacional, conforme pode ser observado na Tabela 4.37: o tempo computacional necessário para o escoamento congelado é mais de 150 vezes superior para a malha mais refinada, enquanto para o escoamento em equilíbrio químico local, o tempo demandado é mais de 1200 vezes superior (para o modelo químico 3). Deste modo, para projetos em geral, cujo foco não seja o estudo de erros numéricos e/ou novos modelos matemáticos, é recomendável a utilização de malhas de 80 volumes de controle, cuja incerteza numérica é equivalente à incerteza experimental.

Tabela 4.37: Comparação entre tempos de CPU para diversos modelos físicos, empregando-se diferentes malhas.

Malha	Escoamento monoespécie		Escoamento congelado (modelo 3)	Equilíbrio químico local (modelo 3)	Taxa finita de reação	
	Propriedades constantes	Propriedades variáveis			Modelo 31	Modelo 32
80 volumes	3,08 s	0,750 s	0,969 s	2,34 min	17,0 min	27,3 min
2560 volumes	2,07 min	3,02 min	2,66 min	1,98 dia	1,66 h	2,61 h
10240 volumes	56,9 min	1,65 h	1,49 h	---	---	---

4.7 RESUMO DO CAPÍTULO 4

Foram apresentadas, neste capítulo, as soluções numéricas (e suas respectivas análises de erros) referentes ao código computacional Mach1D, versão 5.0. Na seção 4.1 foi apresentada a geometria utilizada para as simulações: uma tubeira composta por uma câmara de combustão cilíndrica e um bocal convergente-divergente (ou de Laval), com perfil cossenoidal. Foram mostradas, outrossim, as hipóteses admitidas para as simulações efetuadas, os parâmetros físicos geométricos e os recursos computacionais empregados.

Na seção 4.2 foi apresentada a solução numérica para escoamento monoespécie com propriedades constantes. Para as condições de solução especificadas, a solução deste modelo é equivalente ao escoamento isentrópico em bocal convergente-divergente, cuja solução analítica é conhecida. Desta forma, foi possível comparar os resultados numéricos do código Mach1D aos analíticos, realizando-se uma análise aprofundada sobre erros numéricos. Observou-se que, para este modelo, as ordens efetiva e aparente da incerteza numérica tendiam à ordem assintótica à medida que a malha é refinada. Foi possível, também, verificar os critérios de acurácia e confiabilidade para três estimadores de erro: dois baseados no estimador de Richardson (para ordem aparente e para ordem assintótica), além do estimador GCI (para ordem aparente ou assintótica). De acordo com os resultados obtidos, optou-se por utilizar o estimador GCI para as demais simulações, uma vez que este se mostrou confiável para praticamente todos os casos em que pôde ser empregado. Foi verificado, outrossim, que a incerteza numérica para malhas de 80 volumes de controle apresenta ordem de grandeza equivalente à de resultados experimentais, conforme já mencionado por Marchi *et al.* (2004).

A seção 4.3 foi dedicada ao escoamento monoespécie com propriedades variáveis. Para este modelo, bem como para os demais apresentados neste capítulo, apenas a obtenção da ordem aparente foi possível, uma vez que não existe solução analítica conhecida para este caso. Observou-se, no entanto, que à medida que a malha era refinada, também neste modelo a ordem aparente se aproximava da assintótica, conforme esperado. Isto permite afirmar que o código Mach1D, utilizado nas simulações, fornece resultados corretos do modelo matemático implementado, uma vez que este critério é o mais dificilmente atendido na verificação numérica (ROY, 2005).

O escoamento congelado (multiespécie) foi o foco da seção 4.4. Diferentes modelos químicos foram testados, utilizando-se malhas de até 10240 volumes de controle (que também

foram empregadas para os casos de escoamento monoespécie). Os resultados obtidos foram comparados aos do código CEA (GLENN RESEARCH CENTER/NASA, 2005) apresentando boa concordância. Observou-se que a influência do modelo químico utilizado é elevada quando se utilizam 3 ou 4 espécies; tal efeito, contudo, é muito atenuado quando empregados modelos de 6 e/ou de 8 espécies: para tais modelos, a incerteza numérica é superior à diferença entre os resultados obtidos. Isto se deve ao fato de que os modelos com 3 ou 4 espécies não levam em consideração espécies monoatômicas, cuja participação é importante para a definição das propriedades da mistura de gases.

Na seção 4.5 foi estudado o escoamento em equilíbrio químico local. Também para este modelo físico, diferentes malhas e modelos químicos foram adotados. Diferentemente do caso do escoamento congelado, em que a escolha por determinado modelo químico não afetava em muito o tempo de CPU demandado e o número de algarismos significativos da solução numérica, observou-se para o escoamento em equilíbrio químico que o número de reações químicas é um parâmetro que deve ser considerado. Mesmo obtendo-se soluções numéricas equivalentes ao se empregar modelos com diferentes reações químicas (mas mesmas espécies), verificou-se que os modelos que apresentavam maior número de reações demandaram maior tempo de CPU e possuíam menor número de algarismos significativos. Isto se deve, provavelmente, ao maior número de equações a ser solucionado, o que implica em uma maior quantidade de iterações a ser efetuada e a um aumento no erro de arredondamento cometido.

A condição de desequilíbrio químico foi o enfoque da seção 4.6. Apesar de a ordem aparente não tender claramente à assintótica para este modelo, observou-se que a incerteza numérica calculada é compatível à das demais simulações. Notou-se, também, que as soluções obtidas pertencem ao intervalo entre as soluções do escoamento congelado e em equilíbrio químico local. Desta forma, têm-se indícios para afirmar que também neste caso o código Mach1D resolve o modelo matemático corretamente.

Da comparação entre todos os resultados e as incertezas numéricas a eles associadas, recomenda-se a utilização de modelos químicos com 6 espécies para a solução numérica de escoamentos reativos. Isto se deve ao fato de: (1) modelos com menor número de espécies desprezam espécies importantes, como o oxigênio e o hidrogênio monoatômicos; e (2) a incerteza numérica é superior à diferença entre os resultados de 6 e de 8 espécies, não permitindo que se afirme que tal diferença se deve à utilização de um modelo químico melhor. Com relação às malhas, recomenda-se o emprego de malhas com 80 volumes de controle para aplicações gerais (excetuando-se análise de erros numéricos e/ou novos modelos

matemáticos), uma vez que a incerteza numérica associada a tal malha é equivalente aos erros experimentais. Ressalta-se, finalmente, que poucos trabalhos aplicam a análise de erros em problemas do tipo hiperbólico (ZHANG *et al.*, 2001), em especial para modelos reativos, como feito nesta tese.

5 RESULTADOS NUMÉRICOS BIDIMENSIONAIS

São apresentados neste capítulo os resultados obtidos empregando-se o código Mach2D, versão 6.0, cuja finalidade é a solução de escoamentos bidimensionais reativos (ou não) de mistura de gases (ou de escoamento monoespécie) ao longo de um motor-foguete de simetria axial. Este código, assim como o Mach1D, foi escrito em linguagem Fortran 95, com estrutura modular e dupla precisão, empregando-se o método de volumes finitos, formulação adequada a qualquer regime de velocidades e malhas co-localizadas, não-ortogonais. Foram efetuadas análises de erro numérico para cada um dos modelos estudados, utilizando-se os estimadores de erro previamente apresentados na seção 3.3.

5.1 PARÂMETROS GERAIS 2D

A primeira geometria de câmara-tubeira utilizada nas simulações para o escoamento bidimensional é a mesma apresentada no trabalho de Back *et al.* (1965), cujo perfil é apresentado na Figura 5.1 e cujos parâmetros gerais são apresentados na Tabela 5.1. Back *et al.* (1965) apresentaram resultados experimentais para o escoamento de ar, que neste trabalho serão reproduzidos, empregando-se o código Mach2D, modelando-se o ar como um gás perfeito monoespécie.

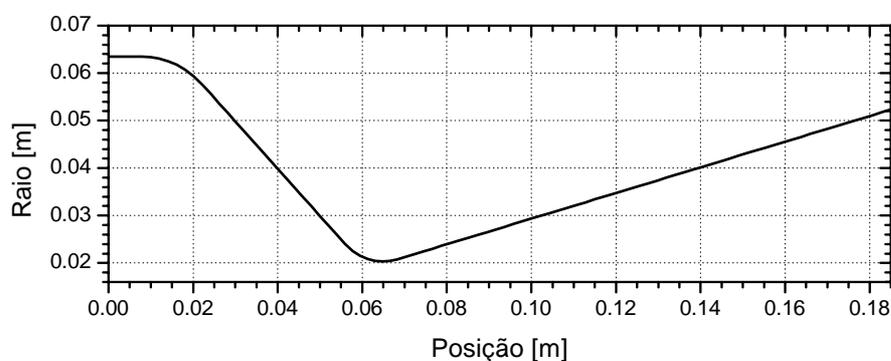


Figura 5.1: Perfil de uma tubeira utilizada nas simulações 2D [Fonte: Back *et al.* (1965)].

Tabela 5.1: Parâmetros geométricos, físicos e numéricos e microcomputador utilizados nos estudos empregando-se a tubeira de Back *et al.* (1965).

Parâmetros geométricos	Raio de entrada	0,063482 m
	Raio na garganta	0,020320 m
	Raio de curvatura na garganta	0,012700 m
	Raio na saída	0,052322 m
	Razão de expansão de áreas	6,63
	Comprimento total	0,185039 m
	Posição da garganta	0,064872 m
Parâmetros físicos (modelo monoespécie: ar)	Temperatura de estagnação (T_0)	833,33 K
	Pressão de estagnação (P_0)	$1,725068 \times 10^6$ Pa
	Razão entre calores específicos (γ)	1,35
	Constante do gás (R)	287,0 J/kg·K
Parâmetro numérico	Beta (fator de mistura entre esquemas: UDS, $\beta = 0$; e CDS, $\beta = 1$)	1,0
Microcomputador	Processador	Pentium IV, 3,40 GHz
	Memória RAM	4 GB
	Sistema operacional	Windows XP

Empregou-se, outrossim, uma segunda geometria-teste para as simulações: trata-se de um perfil perfeitamente parabólico, apresentado na Figura 5.2. Esta tubeira se diferencia da tubeira parabólica tradicional pois a mesma apresenta um perfil convexo (visto do interior do motor-foguete), enquanto o perfil parabólico (sino modificado) apresenta um formato convexo (visto do interior do motor-foguete). Deve-se notar, contudo, que o perfil empregado neste trabalho é um perfil didático, semelhante ao apresentado por Fox e McDonald (1998) no estudo de escoamentos supersônicos.

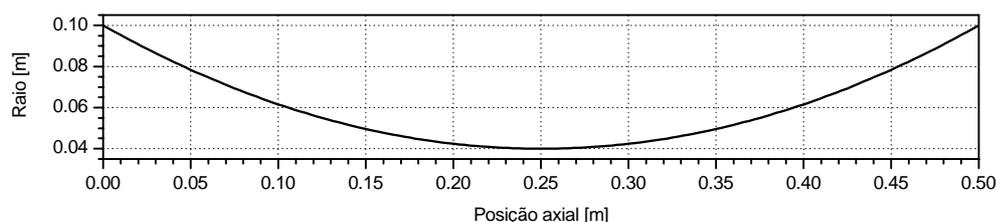


Figura 5.2: Perfil de uma tubeira parabólica, utilizada nas simulações 2D.

Tal perfil pode ser obtido através da seguinte expressão:

$$r = 0,1 - 0,48x + 0,96x^2, \quad (5.1)$$

sendo r o raio da tubeira e x a posição axial. A Tabela 5.2 apresenta os principais parâmetros empregados nas simulações efetuadas empregando-se tal geometria, enquanto um exemplo de malha empregada na discretização do domínio é apresentada na Figura 5.3 .

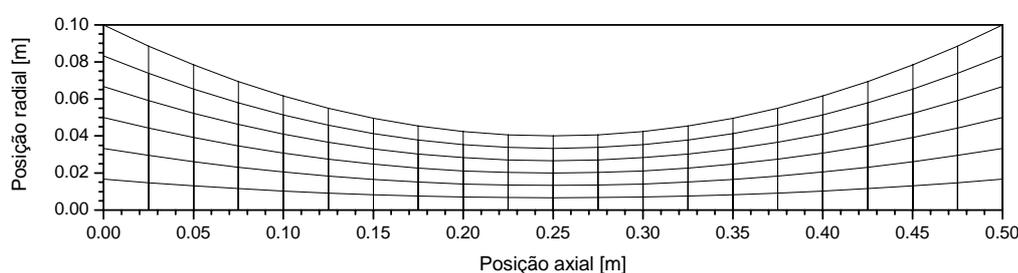


Figura 5.3: Malha empregada na discretização da tubeira parabólica (malha de 20x6 volumes de controle).

Tabela 5.2: Parâmetros geométricos, físicos e microcomputador utilizados nos estudos empregando-se a geometria parabólica.

Parâmetros geométricos	Raio de entrada	0,100 m
	Raio na garganta	0,040 m
	Raio na saída	0,100 m
	Razão de expansão de áreas	6,25
	Comprimento total	0,500 m
	Posição da garganta	0,250 m
Parâmetros físicos (modelo monoespécie: H₂O)	Temperatura de estagnação (T_0)	3420,33 K
	Pressão de estagnação (P_0)	2,0x10 ⁶ Pa
	Razão entre calores específicos (γ)	1,1956
	Constante do gás (R)	526,97 J/kg·K
Parâmetro numérico	Beta (fator de mistura entre esquemas: UDS, $\beta = 0$; e CDS, $\beta = 1$)	1,0 (exceto no modelo de desequilíbrio químico: $\beta = 0$)
	Microcomputador	
	Processador	Pentium IV, 3,40 GHz
	Memória RAM	4 GB
	Sistema operacional	Windows XP

Para ambas as geometrias foram utilizadas malhas não-ortogonais, obtidas através da transformação das equações gerais, conforme apresentado por Maliska (1995). Deve-se atentar, outrossim, que a discretização das malhas foi efetuada de tal modo que a mesma se apresentasse uniforme (ou praticamente uniforme) na direção axial, com razão de refino igual a 2 em ambas as direções (axial e radial).

Da mesma forma que para os modelos unidimensionais, ressalta-se que não foram modelados fenômenos típicos da combustão (para os modelos de escoamento multiespécie), como o processo de formação de gotas e mudança de fase do combustível e/ou do oxidante. Novamente o processo de combustão é estudado de modo simplificado, resultando apenas na composição química e nas propriedades termoquímicas da mistura dos gases de combustão. É necessário observar, também, que por serem utilizadas as equações de Euler bidimensionais na modelagem matemática do código Mach2D, não são considerados efeitos viscosos ou de trocas térmicas. Por último, observa-se que o passo de tempo foi empregado como parâmetro de relaxação para todos os modelos estudados, uma vez que foram analisados apenas escoamentos em regime permanente.

5.2 ESCOAMENTO 2D MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES CONSTANTES

Para este modelo físico, foram efetuadas duas análises diferentes: a primeira, envolvendo escoamento de ar, para comparação com resultados experimentais provenientes do trabalho de Back *et al.* (1965); e a segunda, envolvendo escoamento de vapor de água, para posterior comparação com resultados para escoamentos reativos envolvendo o par propelente H_2/O_2 , empregando-se a tubeira do tipo parabólica. Por se tratar de escoamentos de gás monoespécie perfeito com propriedades constantes, a solução numérica para o coeficiente de empuxo adimensional (C_d) pode ser comparada diretamente à solução analítica, fornecida por Kliegel e Levine (1969), expressa através da Eq. (2.6), uma vez que essas foram as hipóteses de escoamento feitas para a obtenção de tal expressão.

Ressalta-se, no entanto, que para a geometria de Back *et al.* (1965) foram efetuadas iterações suficientes para que o resíduo atinja uma tolerância de 10^{-10} , baseado na norma L1. Tal norma pode ser obtida empregando-se a seguinte expressão (BURDEN e FAIRES, 2003):

$$\|\Phi\|_1 = \sum_{i=1}^N |\Phi_i|, \quad (5.1)$$

sendo: $\|\Phi\|_1$ a norma L1 do vetor de soluções Φ , i o subíndice dos elementos Φ_i que compõem o vetor Φ ; e N o número total de elementos de Φ . Deve-se observar que, neste trabalho, em que as equações que regem o fenômeno físico foram discretizadas na forma:

$$a_p \Phi_P + a_w \Phi_W + a_e \Phi_E + a_s \Phi_S + a_n \Phi_N = b_p^\Phi, \quad (5.2)$$

a norma L1 pode ser obtida através da seguinte expressão:

$$\|\Phi\|_1 = \sum_{i=1}^N \left[b_p^\Phi - (a_p \Phi_P + a_w \Phi_W + a_e \Phi_E + a_s \Phi_S + a_n \Phi_N) \right]_i \quad (5.3)$$

onde os subíndices P , N , S , E e W indicam, respectivamente, o volume de controle P e seus vizinhos superior, inferior, à direita e à esquerda; os coeficientes a_p , a_n , a_s , a_e e a_w , bem como o termo-fonte b_p pode ser encontrado no Apêndice B.

Pelo fato de que para a geometria de Back *et al.* (1965) o critério de parada empregado foi o da norma L1, foi possível empregar-se a estimativas de erros apenas para a geometria parabólica, uma vez que para tal geometria foram feitas iterações suficientes para se atingir o erro de máquina. Assim, os resultados numéricos para a tubeira de Back *et al.* (1965) foram apenas confrontados aos resultados experimentais.

A Tabela 5.3 apresenta os resultados gerais para as simulações empregando-se a tubeira de Back *et al.* (1965). Foram utilizadas quatro diferentes malhas, com total de volumes variando entre 900 (90 na direção axial e 10 na direção radial) e 57.600 (720 na direção axial e 80 na radial). Empregaram-se, também, funções de interpolação de primeira (UDS) e de segunda (CDS) ordens, mantendo-se, porém, sempre a tolerância em 10^{-10} . Observa-se, a partir da Figura 5.4 que os resultados numéricos são praticamente coincidentes aos experimentais, mesmo considerando-se o ar como um gás monoespécie perfeito com propriedades constantes. Este se constitui em um indício de que o código Mach2D resolve corretamente o modelo matemático e o erro de modelagem é relativamente pequeno.

Tabela 5.3: Resultados gerais das simulações realizadas para o escoamento 2D monoespécie (ar) com propriedades constantes – tubeira de Back *et al.* (1965) e tolerância de 10^{-10} para o resíduo.

Número de volumes		Δt	Iterações externas	Tempo de CPU
Direção Axial	Direção Radial			
Funções de interpolação UDS				
90	10	$3,0 \times 10^{-6}$	2.071	4,55 s
180	20	$3,0 \times 10^{-6}$	1.882	21,3 s
360	40	$3,0 \times 10^{-6}$	1.811	2,04 min
720	80	$1,0 \times 10^{-6}$	5.581	24,7 min
Funções de interpolação CDS				
90	10	$3,0 \times 10^{-6}$	6.877	16,1 s
180	20	$3,0 \times 10^{-6}$	4.967	57,8 s
360	40	$3,0 \times 10^{-6}$	2.881	3,08 min
720	80	$1,0 \times 10^{-6}$	7.240	31,0 min

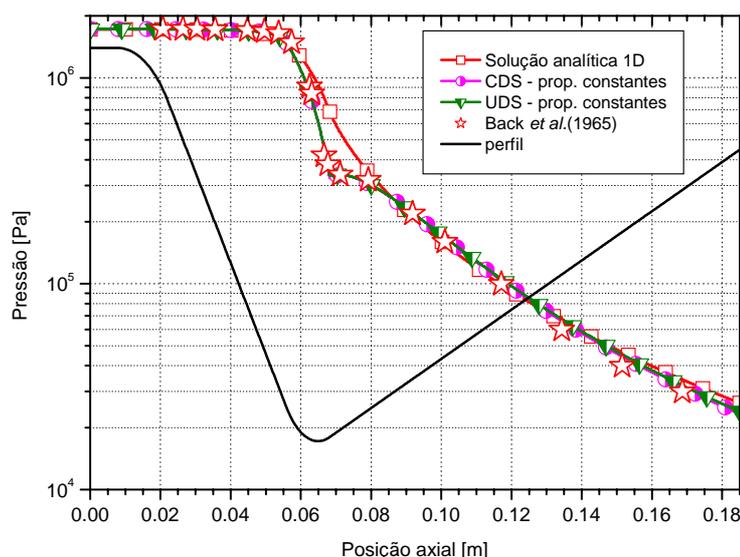


Figura 5.4: Distribuição da pressão ao longo da parede do motor-foguete – tubeira de Back *et al.* (1965), malha de 720x80 volumes de controle.

Além das simulações para a tubeira de Back *et al.* (1965), foram realizados estudos envolvendo o motor-foguete de geometria parabólica, cujos dados e resultados gerais são mostrados na Tabela 5.4. Para tal tubeira, utilizaram-se malhas contendo desde 30 volumes (10 na direção axial e 3 na radial) até 122.880 volumes (640 na direção axial e 192 na radial). Para tais simulações atingiu-se o erro de máquina, com o intuito de reduzir a influência de outras fontes de erro numérico à exceção do erro de discretização. Uma análise mais completa sobre a incerteza numérica pôde ser efetuada para o coeficiente de descarga, uma vez que o mesmo possui solução analítica apresentada por Kliegel e Levine (1969), obtida para

escoamentos monoespécie, com propriedades constantes, em tuberias cujo quociente entre o raio de curvatura e o raio da garganta seja inferior à unidade. Deste modo, obteve-se o erro numérico verdadeiro, bem como as ordens aparente e efetiva, mostradas através das Tabelas 5.5 e 5.6, respectivamente.

Tabela 5.4: Resultados gerais das simulações realizadas para o escoamento 2D monoespécie (H₂O) com propriedades constantes - tubeira parabólica.

Número de volumes		Δt	Iterações externas efetuadas	Iterações necessárias à convergência	Tempo de CPU	Algarismos significativos
Direção Axial	Direção Radial					
Função de interpolação UDS						
10	3	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	600	0,280 s	14
20	6	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	600	0,810 s	14
40	12	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	700	2,98 s	14
80	24	$5,0 \times 10^{-6}$	2.000	900	12,2 s	14
160	48	$2,0 \times 10^{-6}$	5.000	2.700	2,48 min	14
320	96	$2,0 \times 10^{-6}$	10.000	2.500	25,3 min	14
640	192	$1,0 \times 10^{-6}$	12.000	8.000	2,18 h	14
Função de interpolação CDS						
10	3	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	1.100	0,280 s	15
20	6	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	1.000	0,800 s	15
40	12	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	1.000	2,81 s	15
80	24	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	1.100	11,3 s	15
160	48	$5,0 \times 10^{-6}$	5.000	3.000	2,35 min	14
320	96	$2,0 \times 10^{-6}$	10.000	4.000	31,3 min	14
640	192	$1,0 \times 10^{-6}$	16.000	8.000	3,36 h	14

Através da análise dos resultados apresentados na Tabela 5.4, observa-se que o número de algarismos significativos empregando-se funções de interpolação UDS (primeira ordem) é equivalente aos casos em que são utilizadas funções de interpolação CDS (segunda ordem). Verificou-se, outrossim, que para malhas mais refinadas, os modelos empregando funções de interpolação CDS necessitaram um maior tempo de CPU frente àqueles em que o esquema UDS foi utilizado: enquanto para a malha de 640x192 volumes os modelos utilizando esquema de interpolação UDS necessitaram 0,655 segundo por iteração, quando empregado o esquema CDS o tempo necessário foi de 0,755 segundo por iteração. Nota-se, contudo, a partir da Tabela 5.5 que a magnitude do erro numérico é bastante superior quando são utilizadas funções de primeira ordem: para a malha mais refinada (640x192 volumes de controle), o erro numérico verdadeiro é aproximadamente 4 ordens de grandeza maior que o erro observado para funções de interpolação CDS.

Tabela 5.5: Solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) [solução analítica: $9,998768484976 \times 10^{-1}$] - tubeira parabólica.

Número de volumes		Solução numérica	Erro verdadeiro
Direção Axial	Direção Radial		
Função de interpolação UDS			
10	3	1,1888919003030	$-1,8901505180587 \times 10^{-1}$
20	6	1,0925017531712	$-9,2624904673993 \times 10^{-2}$
40	12	1,0466375135929	$-4,6760665095693 \times 10^{-2}$
80	24	1,0234608475106	$-2,3583999013403 \times 10^{-2}$
160	48	1,0117361823445	$-1,1859333847313 \times 10^{-2}$
320	96	1,0058238232216	$-5,9469747244429 \times 10^{-3}$
640	192	1,0028561919816	$-2,9793434844330 \times 10^{-3}$
Função de interpolação CDS			
10	3	1,0149866908451	$-1,5109842347973 \times 10^{-2}$
20	6	1,0018836102764	$-2,0067617792730 \times 10^{-3}$
40	12	1,0001426939727	$-2,6584547557307 \times 10^{-4}$
80	24	$9,9990993686328 \times 10^{-1}$	$-3,3088366119038 \times 10^{-5}$
160	48	$9,9987784218305 \times 10^{-1}$	$-9,9368589701054 \times 10^{-7}$
320	96	$9,9987581084168 \times 10^{-1}$	$1,0376554799851 \times 10^{-6}$
640	192	$9,9987749693654 \times 10^{-1}$	$-6,4843938107906 \times 10^{-7}$

A partir dos resultados apresentados na Tabela 5.6, verifica-se que quando empregadas funções de interpolação CDS (segunda ordem), não é possível definir claramente que as ordens aparente e efetiva se aproximam da ordem assintótica (como foi observado no código Mach1D). Isto pode ser decorrente da pequena quantidade de simulações efetuadas (7 diferentes malhas no caso bidimensional, enquanto 11 foram analisadas com o código Mach1D), uma vez que para o modelo unidimensional apenas a partir da malha contendo 2560 volumes pôde-se notar a tendência das ordens efetiva e aparente se aproximarem da ordem assintótica.

Nota-se, contudo, que ao serem empregadas funções de interpolação de primeira ordem (UDS), ambas as ordens (aparente e efetiva) se aproximam da ordem assintótica, como esperado. Deste modo, pode-se afirmar que as soluções numéricas fornecidas pelo código Mach2D, para o esquema UDS, resolvem corretamente o modelo matemático implementado, uma vez que a ordem de acurácia é o critério mais dificilmente satisfeito na verificação numérica (ROY, 2005).

Tabela 5.6: Ordens práticas da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) – tubeira parabólica.

Número de volumes		Ordem efetiva (p_E)	Ordem aparente (p_U)
Direção Axial	Direção Radial		
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10	3	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	6	1,029	<i>não se aplica</i>
40	12	$9,861 \times 10^{-1}$	1,072
80	24	$9,875 \times 10^{-1}$	$9,847 \times 10^{-1}$
160	48	$9,918 \times 10^{-1}$	$9,831 \times 10^{-1}$
320	96	$9,958 \times 10^{-1}$	$9,877 \times 10^{-1}$
640	192	$9,972 \times 10^{-1}$	$9,944 \times 10^{-1}$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10	3	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	6	2,913	<i>não se aplica</i>
40	12	2,916	2,912
80	24	3,006	2,903
160	48	5,057	2,858
320	96	---	3,982
640	192	---	---

Foram efetuadas, também, estimativas de incerteza numérica, baseadas nos estimadores de Richardson e GCI. A Tabela 5.7 apresenta os resultados para a efetividade das soluções numéricas para o coeficiente de descarga, para as diferentes malhas estudadas.

Tabela 5.7: Efetividade para o coeficiente de descarga (C_d) – tubeira parabólica.

Número de volumes		Erro verdadeiro	$U_{Ri}(\phi_1, p_L)/E$	$U_{Ri}(\phi_1, p_U)/E$	$U_{GCI}(\phi_1, p)/ E $
Direção Axial	Direção Radial				
Função de interpolação UDS					
10	3	$-1,8901505180587 \times 10^{-1}$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	6	$-9,2624904673993 \times 10^{-2}$	1,041	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40	12	$-4,6760665095693 \times 10^{-2}$	$9,808 \times 10^{-1}$	$8,903 \times 10^{-1}$	2,942
80	24	$-2,3583999013403 \times 10^{-2}$	$9,827 \times 10^{-1}$	1,004	3,012
160	48	$-1,1859333847313 \times 10^{-2}$	$9,886 \times 10^{-1}$	1,012	3,037
320	96	$-5,9469747244429 \times 10^{-3}$	$9,942 \times 10^{-1}$	1,011	3,034
640	192	$-2,9793434844330 \times 10^{-3}$	$9,961 \times 10^{-1}$	1,004	3,011
Função de interpolação CDS					
10	3	$-1,5109842347973 \times 10^{-2}$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20	6	$-2,0067617792730 \times 10^{-3}$	2,176	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40	12	$-2,6584547557307 \times 10^{-4}$	2,183	1,003	6,549
80	24	$-3,3088366119038 \times 10^{-5}$	2,345	1,086	7,034
160	48	$-9,9368589701054 \times 10^{-7}$	$1,077 \times 10^1$	5,166	$3,230 \times 10^1$
320	96	$1,0376554799851 \times 10^{-6}$	$-6,525 \times 10^{-1}$	$-1,323 \times 10^{-1}$	1,958
640	192	$-6,4843938107906 \times 10^{-7}$	$-8,667 \times 10^{-1}$	---	---

Observa-se que não se pode afirmar, ao menos para as malhas estudadas, que as incertezas numéricas obtidas empregando-se os estimadores de Richardson sejam acuradas e/ou confiáveis para os casos em que foram utilizadas funções de interpolação de segunda ordem. Tal comportamento foi verificado, outrossim, para malhas menos refinadas (de até 320 volumes de controle) no caso do escoamento unidimensional, conforme pode ser visto na Tabela 4.7. Notou-se, contudo, que para as mesmas malhas, empregando-se funções de interpolação de primeira ordem (UDS), as estimativas de erro se mostraram acuradas ($\theta \approx 1$), embora somente os resultados baseados no estimador de Richardson empregando-se a ordem do erro aparente e o estimador GCI se mostraram confiáveis ($\theta \geq 1$).

No caso das demais variáveis de interesse, pôde-se apenas calcular a ordem aparente do erro numérico e a incerteza numérica baseada no estimador GCI – a escolha por tal estimador se deve ao fato do mesmo apresentar resultados confiáveis para os casos em que é aplicável. De um modo geral, observou-se que as ordens aparentes tendem à ordem assintótica para todas as variáveis. Verificou-se, outrossim, que o emprego de uma malha de 80x24 volumes de controle, com funções de interpolação CDS, é suficiente para que a magnitude da incerteza numérica seja equivalente à dos erros experimentais, conforme resultados para o impulso específico apresentados na Tabela 5.8.

Tabela 5.8: Ordem aparente da solução numérica para o impulso específico (I_{sp}), e estimativa U_{GCI} (escoamento monoespécie com propriedades constantes) – tubeira parabólica.

Número de volumes Direção Axial	Solução numérica [s]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$3,1161527226289 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,2290655179433 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,3123648502923 \times 10^2$	$4,388 \times 10^{-1}$	$7,029 \times 10^1$
80x24	$3,3619479227196 \times 10^2$	$7,485 \times 10^{-1}$	$2,188 \times 10^1$
160x48	$3,3889103170996 \times 10^2$	$8,789 \times 10^{-1}$	9,641
320x96	$3,4029555193145 \times 10^2$	$9,409 \times 10^{-1}$	4,582
640x192	$3,4101428500656 \times 10^2$	$9,665 \times 10^{-1}$	2,260
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$3,4544657903354 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,4253345132846 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,4192236526036 \times 10^2$	2,253	$6,111 \times 10^{-1}$
80x24	$3,4178454391768 \times 10^2$	2,149	$1,378 \times 10^{-1}$
160x48	$3,4175137754853 \times 10^2$	2,055	$3,317 \times 10^{-2}$
320x96	$3,4174339614843 \times 10^2$	2,055	$7,981 \times 10^{-3}$
640x192	$3,4174119219084 \times 10^2$	1,857	$2,522 \times 10^{-3}$

Na Tabela 5.9 são apresentados os resultados obtidos empregando-se o código Mach2D, associados a suas respectivas incertezas numéricas, para o escoamento monoespécie com propriedades constantes na tubeira parabólica. Pode-se observar claramente a influência das funções de interpolações escolhidas para a obtenção da solução: em geral, as incertezas numéricas associadas às funções de interpolação UDS são pelo menos duas ordens de grandeza superiores às relacionadas às funções de interpolação CDS. Verifica-se, no entanto, que nem sempre as incertezas numéricas diminuem com o refinamento da malha (por exemplo, para a temperatura e a pressão na linha de simetria). Isto se deve ao fato de que nem todas as variáveis apresentam a ordem aparente tendendo à assintótica, para as malhas estudadas. Este comportamento foi observado também para os modelos unidimensionais, empregando-se malhas com 320 ou 640 volumes de controle, sendo atenuado para malhas mais refinadas. Observa-se, contudo, que a ordem de grandeza da incerteza numérica para a malha de 80x24 volumes (e funções de interpolação CDS) é equivalente à incerteza experimental, similarmente à malha de 80 volumes de controle no modelo unidimensional.

Tabela 5.9: Resultados numéricos e seus erros estimados (com estimador GCI) para as variáveis de interesse – tubeira parabólica.

Variáveis de interesse	Função de interpolação UDS		Função de interpolação CDS	
	80x24 volumes	320x96 volumes	80x24 volumes	320x96 volumes
coeficiente de descarga (C_d)	$1,02 \pm 7 \times 10^{-2}$ [adim.]	$1,01 \pm 2 \times 10^{-2}$ [adim.]	$0,99991 \pm 4 \times 10^{-5}$ [adim.]	$0,999876 \pm 2 \times 10^{-6}$ [adim.]
empuxo no vácuo (F)	$16.400 \pm 4 \times 10^2$ [N]	$16.280 \pm 8 \times 10^1$ [N]	$16.250 \pm 1 \times 10^1$ [N]	$16.251,6 \pm 4 \times 10^{-1}$ [N]
impulso específico (I_{sp})	$340 \pm 2 \times 10^1$ [s]	345 ± 5 [s]	$341,8 \pm 1 \times 10^{-1}$ [s]	$341,743 \pm 8 \times 10^{-3}$ [s]
impulso específico (I_s)	$3300 \pm 2 \times 10^2$ [N·s/kg]	$3380 \pm 5 \times 10^1$ [N·s/kg]	3352 ± 1 [N·s/kg]	$3351,34 \pm 8 \times 10^{-2}$ [N·s/kg]
pressão estática na saída da tubeira – linha de simetria (P_{ex})	$73.000 \pm 4 \times 10^3$ [Pa] ⁶	$72.000 \pm 7 \times 10^3$ [Pa]	$71.600 \pm 1 \times 10^2$ [Pa] ⁶	$71.400 \pm 1 \times 10^2$ [Pa] ⁶
temperatura na saída da tubeira – linha de simetria (T_{ex})	$2010 \pm 7 \times 10^1$ [K] ⁶	$1990 \pm 4 \times 10^1$ [K]	$1983,5 \pm 2 \times 10^{-1}$ [K]	$1980 \pm 1 \times 10^1$ [K]
velocidade axial na saída da tubeira – linha de simetria (u_{ex})	$3000 \pm 3 \times 10^2$ [m/s]	$3030 \pm 5 \times 10^1$ [m/s]	$3042,4 \pm 2 \times 10^{-2}$ [m/s]	$3040 \pm 2 \times 10^1$ [m/s]

⁶ Estimativa de erro utilizando-se o estimador GCI para a ordem assintótica.

5.3 ESCOAMENTO 2D MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES VARIÁVEIS

Nesta seção são apresentados os resultados numéricos para escoamento monoespécie, para ar e vapor de água, empregando-se propriedades variáveis. As propriedades do vapor de água são obtidas através de polinômios interpoladores presentes no trabalho de McBride *et al.* (1993), conforme já realizado para o modelo de escoamento unidimensional; as propriedades do ar foram obtidas através da interpolação polinomial dos valores apresentados para as mesmas em Incropera e DeWitt (1998). Foram empregadas as mesmas malhas usadas no estudo do escoamento monoespécie com propriedades constantes, conforme pode ser visto nas Tabelas 5.10 e 5.11.

Tabela 5.10: Resultados gerais das simulações com o modelo de escoamento 2D monoespécie (H₂O) com propriedades variáveis – tubeira parabólica.

Número de volumes		Δt	Iterações externas efetuadas	Iterações necessárias à convergência	Tempo de CPU	Algarismos significativos
Direção Axial	Direção Radial					
Função de interpolação UDS						
10	3	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	800	0,700	14
20	6	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	500	1,25	14
40	12	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	600	3,33	14
80	24	$5,0 \times 10^{-6}$	2.000	1.000	12,6	14
160	48	$2,0 \times 10^{-6}$	5.000	2.800	2,46 min	14
320	96	$2,0 \times 10^{-6}$	10.000	2.500	23,6 min	14
640	192	$1,0 \times 10^{-6}$	12.000	8.000	2,95 h	13
Função de interpolação CDS						
10	3	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	1.200	0,690 s	14
20	6	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	1.000	1,19 s	14
40	12	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	1.000	3,30 s	14
80	24	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	1.200	11,8 s	14
160	48	$5,0 \times 10^{-6}$	5.000	3.000	2,48 min	14
320	96	$2,0 \times 10^{-6}$	10.000	4.500	23,9 min	14
640	192	$1,0 \times 10^{-6}$	12.000	8.000	3,13 h	13

De modo análogo ao escoamento bidimensional de gás monoespécie com propriedades constantes, apenas para a geometria parabólica foram realizadas estimativas da incerteza numérica. Para a outra geometria, os resultados numéricos obtidos foram confrontados diretamente àqueles apresentados por Back *et al.* (1965), através da Figura 5.5. Observa-se que, embora os resultados para o modelo monoespécie com propriedades constantes tenham

mostrado boa concordância aos resultados experimentais, os modelos monoespécie com propriedades variáveis apresentaram melhor concordância, em especial nas regiões mais próximas à saída da tubeira.

Tabela 5.11: Resultados gerais das simulações realizadas para o escoamento 2D monoespécie (ar) com propriedades variáveis – tubeira de Back *et al.* (1965) e tolerância de 10^{-10} para o resíduo.

Número de volumes		Δt	Iterações externas	Tempo de CPU
Direção Axial	Direção Radial			
Funções de interpolação UDS				
90	10	$3,0 \times 10^{-6}$	2071	4,58 s
180	20	$3,0 \times 10^{-6}$	1882	20,8 s
360	40	$3,0 \times 10^{-6}$	1775	1,97 min
720	80	$1,0 \times 10^{-6}$	5580	25,6 min
Funções de interpolação CDS				
90	10	$3,0 \times 10^{-6}$	6859	16,0 s
180	20	$3,0 \times 10^{-6}$	4887	55,6 s
360	40	$3,0 \times 10^{-6}$	2865	2,99 min
720	80	$1,0 \times 10^{-6}$	7246	36,5 min

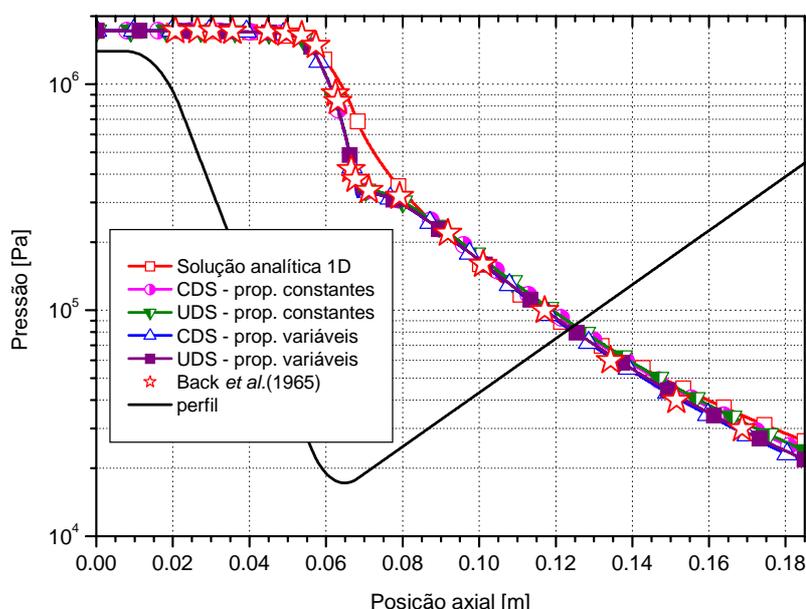


Figura 5.5: Distribuição da pressão ao longo da parede do motor-foguete (modelos monoespécie) – tubeira de Back *et al.* (1965), malha de 720x80 volumes de controle.

Uma vez que o escoamento monoespécie com propriedades variáveis não apresenta solução analítica conhecida (para nenhuma das variáveis de interesse), não é possível o cálculo do erro numérico verdadeiro ou da ordem efetiva. Desta forma, para a análise da incerteza numérica, são obtidas apenas a ordem aparente e a estimativa do erro numérico (baseada no estimador GCI), conforme apresentado nas Tabelas 5.12 e 5.13 para duas das variáveis de interesse (coeficiente de descarga e impulso específico). Nota-se que, quando não foi possível a determinação da incerteza numérica baseada na ordem aparente (por esta apresentar valor negativo ou indefinido), optou-se por empregar o estimador GCI baseado na ordem assintótica, identificando tais casos com dois asteriscos (**) à direita do valor apresentado.

Tabela 5.12: Ordem aparente da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico – tubeira parabólica.

Malha	Solução numérica [adim.]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	1,1802206923249	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	1,0839224052246	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	1,0381806073137	1,074	$1,372 \times 10^{-1}$
80x24	1,0151112632923	$9,875 \times 10^{-1}$	$7,042 \times 10^{-2}$
160x48	1,0034564180395	$9,850 \times 10^{-1}$	$3,570 \times 10^{-2}$
320x96	$9,9758338508957 \times 10^{-1}$	$9,888 \times 10^{-1}$	$1,790 \times 10^{-2}$
640x192	$9,9463655190596 \times 10^{-1}$	$9,949 \times 10^{-1}$	$8,903 \times 10^{-3}$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	1,0071553316154	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$9,9378941867105 \times 10^{-1}$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$9,9197234611242 \times 10^{-1}$	2,879	$1,817 \times 10^{-3}$
80x24	$9,9171964276921 \times 10^{-1}$	2,846	$2,527 \times 10^{-4}$
160x48	$9,9168192413596 \times 10^{-1}$	2,744	$3,772 \times 10^{-5}$
320x96	$9,9167840203594 \times 10^{-1}$	3,421	$3,522 \times 10^{-6}$
640x192	$9,9167966616819 \times 10^{-1}$	---	$1,264 \times 10^{-6}$ **

Similarmente ao ocorrido para o modelo de escoamento bidimensional monoespécie com propriedades constantes, observa-se através dos resultados da Tabela 5.12 que ao se empregar funções de interpolação CDS não se obtém uma tendência clara da ordem aparente em se igualar à ordem assintótica para o coeficiente de descarga. Isto é observado também para outras variáveis, como a temperatura e a pressão na saída da tubeira (ambas sobre a linha

de simetria do motor-foguete). Verifica-se, entretanto, que para algumas propriedades, como o impulso específico, apresentado na Tabela 5.13, tal tendência é confirmada, de modo que se espera, para malhas mais refinadas, que a ordem aparente se aproxime da assintótica para todas as variáveis de interesse. Levando-se em consideração os resultados para funções de interpolação de primeira ordem (UDS) e a concordância entre os resultados numéricos e os experimentais apresentados por Back *et al.* (1965), tem-se indícios de que o código Mach2D resolve corretamente o modelo matemático nele implementado para o escoamento monoespécie com propriedades variáveis.

Tabela 5.13: Ordem aparente da solução numérica para o impulso específico no vácuo (I_{sp}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico – tubeira parabólica.

Malha	Solução numérica [s]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$3,1517617827890 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,2679199339119 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,3533908861301 \times 10^2$	$4,426 \times 10^{-1}$	$7,142 \times 10^1$
80x24	$3,4042216483601 \times 10^2$	$7,497 \times 10^{-1}$	$2,238 \times 10^1$
160x48	$3,4318646951303 \times 10^2$	$8,788 \times 10^{-1}$	9,886
320x96	$3,4462676306959 \times 10^2$	$9,406 \times 10^{-1}$	4,700
640x192	$3,4536373766535 \times 10^2$	$9,667 \times 10^{-1}$	2,317
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$3,4984970883460 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,4690398387974 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,4629068244003 \times 10^2$	2,264	$6,133 \times 10^{-1}$
80x24	$3,4615254404850 \times 10^2$	2,150	$1,381 \times 10^{-1}$
160x48	$3,4611935686581 \times 10^2$	2,057	$3,319 \times 10^{-2}$
320x96	$3,4611139552298 \times 10^2$	2,060	$7,961 \times 10^{-3}$
640x192	$3,4610919714931 \times 10^2$	1,857	$2,516 \times 10^{-3}$

Na Tabela 5.14 são apresentados os resultados obtidos empregando-se o código Mach2D para o caso de escoamento monoespécie com propriedades variáveis. Comparando-se os resultados das Tabelas 5.9 e 5.14, para o esquema CDS, observa-se que a diferença entre os resultados obtidos para os dois modelos físicos, apesar de pequena, é superior à incerteza numérica associada aos resultados. Pode-se afirmar, assim, que tal diferença é decorrente do modelo físico adotado.

Tabela 5.14: Resultados numéricos e seus erros estimados (com estimador GCI) para as variáveis de interesse (escoamento monoespécie com propriedades variáveis) – tubeira parabólica.

Variáveis de interesse	Função de interpolação UDS		Função de interpolação CDS	
	80x24 volumes	320x96 volumes	80x24 volumes	320x96 volumes
coeficiente de descarga (C_d)	$1,02 \pm 7 \times 10^{-2}$ [adim.]	$1,00 \pm 2 \times 10^{-2}$ [adim.]	$0,9917 \pm 3 \times 10^{-4}$ [adim.]	$0,991678 \pm 4 \times 10^{-6}$ [adim.]
empuxo no vácuo (F)	$16.400 \pm 4 \times 10^2$ [N]	$16.350 \pm 8 \times 10^1$ [N]	$16.330 \pm 1 \times 10^1$ [N]	$16.324,42 \pm 8 \times 10^{-2}$ [N]
impulso específico (I_{sp})	$340 \pm 2 \times 10^1$ [s]	345 ± 5 [s]	$346,2 \pm 1 \times 10^{-1}$ [s]	$346,111 \pm 3 \times 10^{-3}$ [s]
impulso específico (I_s)	$3300 \pm 2 \times 10^2$ [N·s/kg]	$3380 \pm 5 \times 10^1$ [N·s/kg]	3395 ± 1 [N·s/kg]	$3394,17 \pm 3 \times 10^{-2}$ [N·s/kg]
pressão estática na saída da tubeira – linha de simetria (P_{ex})	$75.000 \pm 4 \times 10^3$ [Pa] ⁷	$70.000 \pm 1 \times 10^4$ [Pa]	$73.700 \pm 2 \times 10^2$ [Pa] ⁷	$73.400 \pm 9 \times 10^2$ [Pa]
temperatura na saída da tubeira – linha de simetria (T_{ex})	$2110 \pm 6 \times 10^1$ [K] ⁷	$2090 \pm 4 \times 10^1$ [K]	$2083,73 \pm 5 \times 10^{-2}$ [K]	2083 ± 7 [K]
velocidade axial na saída da tubeira – linha de simetria (u_{ex})	$3000 \pm 3 \times 10^2$ [m/s]	$3060 \pm 6 \times 10^1$ [m/s]	$3069,96 \pm 2 \times 10^{-2}$ [m/s] ⁷	$3070 \pm 1 \times 10^1$ [m/s]

5.4 ESCOAMENTO 2D CONGELADO

A partir desta seção são abordadas as soluções numéricas para escoamentos reativos, concomitantemente à estimativa da incerteza numérica associada. Embora os mesmos modelos químicos do código Mach1D estivessem implementados no código Mach2D, preferiu-se utilizar apenas os modelos químicos 4 e 10 (apresentando seis e oito espécies, respectivamente), por seus menores erros de modelagem. Nesta (e nas próximas seções) serão mostrados resultados numéricos para a geometria do tipo parabólica, associados a suas respectivas estimativas de erros, obtidas através do estimador GCI. Salienta-se, novamente, que poucos são os trabalhos que apresentam o estudo de incertezas numéricas para problemas do tipo hiperbólico (ZHANG, 2001), em especial envolvendo escoamentos reativos. A Tabela 5.15 mostra dados e resultados gerais das simulações utilizando-se o modelo de escoamento congelado 2D.

⁷ Estimativa de erro utilizando-se o estimador GCI para a ordem assintótica.

Tabela 5.15: Resultados gerais das simulações com o modelo de escoamento congelado 2D empregando-se a geometria parabólica.

Número de volumes		Δt	Iterações externas efetuadas	Iterações necessárias à convergência	Tempo de CPU	Algarismos significativos
Direção Axial	Direção Radial					
Função de interpolação UDS – modelo 4						
10	3	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	900	0,280 s	14
20	6	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	900	0,830 s	14
40	12	$1,0 \times 10^{-5}$	5.000	1.100	7,14 s	14
80	24	$5,0 \times 10^{-6}$	5.000	1.200	32,8 s	14
160	48	$2,0 \times 10^{-6}$	8.000	2.500	3,98 min	14
320	96	$2,0 \times 10^{-6}$	10.000	2.300	22,4 min	14
640	192	$1,0 \times 10^{-6}$	12.000	7.500	2,49 h	14
Função de interpolação CDS – modelo 4						
10	3	$1,0 \times 10^{-5}$	5.000	1.800	0,690 s	14
20	6	$1,0 \times 10^{-5}$	5.000	1.800	2,06 s	14
40	12	$1,0 \times 10^{-5}$	5.000	1.600	7,42 s	14
80	24	$1,0 \times 10^{-5}$	5.000	1.600	28,5 s	14
160	48	$5,0 \times 10^{-6}$	10.000	2.400	4,80 min	14
320	96	$2,0 \times 10^{-6}$	10.000	4.300	23,6 min	14
640	192	$1,0 \times 10^{-6}$	12.000	8.000	2,30 h	14
Função de interpolação UDS – modelo 10						
10	3	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	1.000	0,280 s	14
20	6	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	1.000	0,810 s	14
40	12	$1,0 \times 10^{-5}$	2.000	1.000	2,94 s	14
80	24	$5,0 \times 10^{-6}$	5.000	1.500	28,9 s	14
160	48	$2,0 \times 10^{-6}$	5.000	3.000	2,39 min	14
320	96	$1,0 \times 10^{-6}$	10.000	7.000	21,3 min	14
640	192	$1,0 \times 10^{-6}$	12.000	8.000	2,97 h	14
Função de interpolação CDS – modelo 10						
10	3	$1,0 \times 10^{-5}$	10.000	1.600	1,53 s	14
20	6	$1,0 \times 10^{-5}$	5.000	1.600	2,03 s	14
40	12	$1,0 \times 10^{-5}$	5.000	1.600	7,08 s	14
80	24	$1,0 \times 10^{-5}$	5.000	1.600	28,2 s	14
160	48	$5,0 \times 10^{-6}$	5.000	2.000	2,34 min	14
320	96	$2,0 \times 10^{-6}$	10.000	3.600	23,1 min	14
640	192	$1,0 \times 10^{-6}$	12.000	8.000	2,27 h	14

Observa-se, a partir dos resultados apresentados nas Tabelas 5.16 e 5.17, que novamente a ordem aparente da incerteza numérica tende à assintótica no caso da utilização de funções de interpolação UDS; no caso do esquema de interpolação CDS, essa tendência é observada para alguns parâmetros, como o impulso específico no vácuo. As Tabelas 5.16 e 5.17 mostram, outrossim, as estimativas de erro numérico para duas das variáveis de interesse. Deve-se notar que, para os casos em que a ordem aparente é negativa ou indefinida, utiliza-se a ordem assintótica para o cálculo da incerteza numérica, indicando-se tais valores com asteriscos (**) à direita do valor numérico.

Tabela 5.16: Ordem aparente da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo químico 4) – tubeira parabólica.

Malha	Solução numérica [adim.]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	1,1907111433162	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	1,0940012341315	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	1,0479372892723	1,070	$1,382 \times 10^{-1}$
80x24	1,0246595541981	$9,847 \times 10^{-1}$	$7,134 \times 10^{-2}$
160x48	1,0128779929603	$9,824 \times 10^{-1}$	$3,622 \times 10^{-2}$
320x96	1,0069378335938	$9,880 \times 10^{-1}$	$1,812 \times 10^{-2}$
640x192	1,0039562982868	$9,944 \times 10^{-1}$	$9,014 \times 10^{-3}$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	1,0159701070894	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	1,0029363126496	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	1,0012206869679	2,925	$1,716 \times 10^{-3}$
80x24	1,0009943775917	2,922	$2,263 \times 10^{-4}$
160x48	1,0009636799485	2,882	$3,070 \times 10^{-5}$
320x96	1,0009618402198	4,061	$1,840 \times 10^{-6}$
640x192	1,0009635087928	---	$1,669 \times 10^{-6} **$

Tabela 5.17: Ordem aparente da solução numérica para o impulso específico no vácuo (I_{sp}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo químico 4) – tubeira parabólica.

Malha	Solução numérica [s]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$3,1015614181090 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,2134478031197 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,2958555741776 \times 10^2$	$4,412 \times 10^{-1}$	$6,911 \times 10^1$
80x24	$3,3449248289436 \times 10^2$	$7,480 \times 10^{-1}$	$2,167 \times 10^1$
160x48	$3,3716441496388 \times 10^2$	$8,769 \times 10^{-1}$	9,583
320x96	$3,3855603196018 \times 10^2$	$9,411 \times 10^{-1}$	4,538
640x192	$3,3926895367461 \times 10^2$	$9,649 \times 10^{-1}$	2,247
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$3,4382251171120 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,4081960248159 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,4018096016090 \times 10^2$	2,233	$6,386 \times 10^{-1}$
80x24	$3,4003612753193 \times 10^2$	2,141	$1,448 \times 10^{-1}$
160x48	$3,4000123734981 \times 10^2$	2,053	$3,489 \times 10^{-2}$
320x96	$3,3999278395331 \times 10^2$	2,045	$8,453 \times 10^{-3}$
640x192	$3,3999043509536 \times 10^2$	1,848	$2,711 \times 10^{-3}$

Ressalta-se, novamente, que apesar de a utilização do esquema de interpolação adotado influenciar pouco na quantidade de algarismos significativos, conforme pode ser visto na Tabela 5.15, a incerteza numérica é três ordens de grandeza menor (para a malha de 640x192 volumes) no caso do esquema CDS. Esse comportamento pode ser observado para outras variáveis de interesse, como a temperatura na saída da tubeira (linha de simetria), conforme mostrado na Figura 5.6, embora a diferença entre as incertezas numéricas para ambos os esquemas possa ser menor. Nota-se, em tal figura, além da incerteza numérica obtida empregando-se o estimador GCI, as estimativas de erro numérico baseadas no estimador de Richardson, empregando-se as ordens assintótica e aparente. As descontinuidades verificadas para os estimadores baseados na ordem aparente correspondem às malhas em que tal ordem é indefinida.

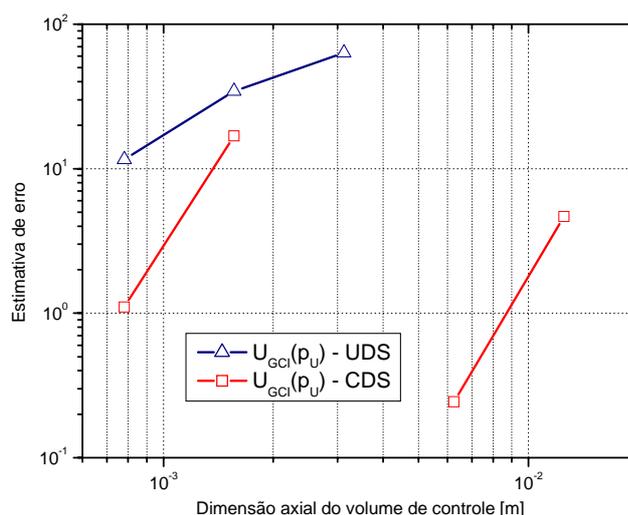


Figura 5.6: Estimativas de incerteza numérica (modelo químico 4), em módulo, para a temperatura na saída da tubeira parabólica (linha de simetria).

Estimativas da incerteza numérica foram obtidas também para as demais variáveis de interesse, como é o caso do empuxo no vácuo, mostrado na Figura 5.7. Observa-se que para esta propriedade não se verificou a presença de descontinuidades (como no caso da temperatura na saída da tubeira). Ao se comparar os estimadores de incerteza numérica através das Figuras 5.6 e 5.7, nota-se (como já discutido na seção 4.2) que o fator de segurança igual a três empregado no estimador GCI lhe confere uma estimativa da incerteza numérica mais conservadora, fato que o levou a ser empregado também nas simulações de escoamento bidimensional.

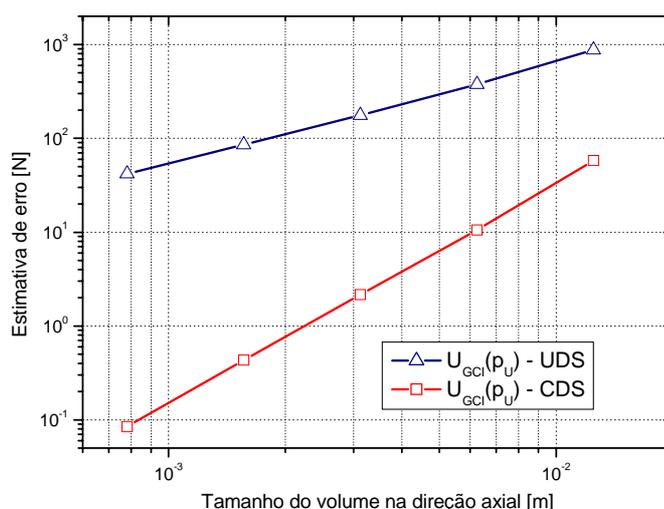


Figura 5.7: Estimativas de incerteza numérica (modelo químico 4), em módulo, para o empuxo no vácuo (tubo parabólica).

Apesar de a ordem aparente não apresentar clara tendência à ordem assintótica no caso de todas as variáveis de interesse (para o esquema de interpolação CDS), pode-se ainda afirmar que o código Mach2D soluciona corretamente o modelo matemático implementado. Esta afirmação se baseia no comportamento da incerteza numérica calculada, bem como na tendência da ordem aparente no caso das funções de interpolação UDS.

As Tabelas 5.18 e 5.19, mostradas a seguir, apresentam os resultados numéricos para os diferentes modelos físicos já apresentados, incluindo as respectivas incertezas numéricas calculadas. Observa-se, de um modo geral, que as diferenças entre os modelos físicos, embora pequena, pode ser atribuída ao modelo físico adotado, uma vez que tal diferença é superior à incerteza numérica. Ressalta-se, contudo, que o efeito da escolha pelo modelo físico de escoamento congelado resulta em variações bastante reduzidas sobre as variáveis de interesse (comparando-se aos resultados obtidos para o escoamento monoespécie com propriedades constantes), em especial para as globais: apenas 0,11% no caso do coeficiente de descarga, 0,40% para o empuxo no vácuo e 0,51% no caso do impulso específico. Para as variáveis locais, tal diferença é maior, contudo não atinge os 5%. Ao se comparar os resultados uni e bidimensionais para a mesma geometria, nota-se que os efeitos bidimensionais são relativamente elevados, atingindo cerca de 5,5% no caso do empuxo e do impulso específico no vácuo (para o modelo monoespécie com propriedades constantes). Como a variação observada para as variáveis de interesse neste caso também é superior ao erro numérico estimado, pode-se afirmar que tal variação pode ser atribuída aos efeitos bidimensionais do escoamento.

Tabela 5.18: Resultados e respectivas incertezas numéricas para o coeficiente de descarga, o empuxo no vácuo e o impulso específico (no vácuo), para malha de 320x96 volumes – tubeira parabólica.

Modelo	C_d [adim.]	F [N]	I_{sp} [s]	I_s [N·s/kg]
UDS				
Monoespécie, prop. constantes	$1,01 \pm 2 \times 10^{-2}$	$1,628 \times 10^4 \pm 8 \times 10^1$	$3,45 \times 10^2 \pm 5$	$3,38 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$
Monoespécie, prop. variáveis	$1,00 \pm 2 \times 10^{-2}$	$1,635 \times 10^4 \pm 8 \times 10^1$	$3,45 \times 10^2 \pm 5$	$3,38 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$
Esc. congelado – mod. 4	$1,01 \pm 2 \times 10^{-2}$	$1,621 \times 10^4 \pm 9 \times 10^1$	$3,39 \times 10^2 \pm 5$	$3,32 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$
Esc. congelado – mod. 10	$1,01 \pm 2 \times 10^{-2}$	$1,621 \times 10^4 \pm 8 \times 10^1$	$3,39 \times 10^2 \pm 5$	$3,32 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$
CDS com correção adiada				
Monoespécie, prop. constantes	$0,999876 \pm 2 \times 10^{-6}$	$1,62516 \times 10^4 \pm 4 \times 10^{-1}$	$3,41743 \times 10^2 \pm 8 \times 10^{-3}$	$3,35134 \times 10^3 \pm 8 \times 10^{-2}$
Monoespécie, prop. variáveis	$0,991678 \pm 4 \times 10^{-6}$	$1,632442 \times 10^4 \pm 8 \times 10^{-2}$	$3,46111 \times 10^2 \pm 3 \times 10^{-3}$	$3,39417 \times 10^3 \pm 3 \times 10^{-2}$
Esc. congelado – mod. 4	$1,000962 \pm 2 \times 10^{-6}$	$1,61859 \times 10^4 \pm 4 \times 10^{-1}$	$3,39993 \times 10^2 \pm 8 \times 10^{-3}$	$3,33418 \times 10^3 \pm 8 \times 10^{-2}$
Esc. congelado – mod. 10	$1,000970 \pm 2 \times 10^{-6}$	$1,61860 \times 10^4 \pm 4 \times 10^{-1}$	$3,39991 \times 10^2 \pm 8 \times 10^{-3}$	$3,33416 \times 10^3 \pm 8 \times 10^{-2}$
Solução analítica 2D de Kliegel e Levine (1969)	0,999877	---	---	---
CDS com correção adiada – 1D (malha de 320 volumes)				
Monoespécie, prop. constantes	$1,00000 \pm 3 \times 10^{-5}$	$1,54007 \times 10^4 \pm 3 \times 10^{-1}$	$3,2381 \times 10^2 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,1755 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$
Monoespécie, prop. variáveis	$0,99178 \pm 5 \times 10^{-5}$	$1,54272 \times 10^4 \pm 3 \times 10^{-1}$	$3,27055 \times 10^2 \pm 9 \times 10^{-3}$	$3,20730 \times 10^3 \pm 9 \times 10^{-2}$
Esc. congelado – mod. 4	$1,00108 \pm 3 \times 10^{-5}$	$1,53993 \times 10^4 \pm 3 \times 10^{-1}$	$3,2343 \times 10^2 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,1717 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$
Esc. congelado – mod. 10	$1,00109 \pm 3 \times 10^{-5}$	$1,53993 \times 10^4 \pm 3 \times 10^{-1}$	$3,2343 \times 10^2 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,1717 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$

Tabela 5.19: Resultados e respectivas incertezas numéricas para a pressão, a temperatura, a velocidade axial e a fração mássica de H₂O na saída da tubeira (linha de simetria), para malha de 320x96 volumes – tubeira parabólica.

Modelo	P_{ex} [Pa]	T_{ex} [K]	u_{ex} [m/s]	$Y(H_2O)_{ex}$ [adim.]
UDS – 2D				
Monoespécie, prop. constantes	$7,2 \times 10^4 \pm 7 \times 10^3$	$1,99 \times 10^3 \pm 4 \times 10^1$	$3,03 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$	---
Monoespécie, prop. variáveis	$7 \times 10^4 \pm 1 \times 10^4$	$2,09 \times 10^3 \pm 4 \times 10^1$	$3,06 \times 10^3 \pm 6 \times 10^1$	---
Esc. congelado – mod. 4	$6,9 \times 10^4 \pm 3 \times 10^3$	$1,92 \times 10^3 \pm 3 \times 10^1$	$3,03 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$	0,783686
Esc. congelado – mod. 10	$6,9 \times 10^4 \pm 2 \times 10^3$	$1,92 \times 10^3 \pm 3 \times 10^1$	$3,03 \times 10^3 \pm 4 \times 10^1$	0,783539
CDS com correção adiada – 2D				
Monoespécie, prop. constantes	$7,14 \times 10^4 \pm 9 \times 10^2$	$1,98 \times 10^3 \pm 1 \times 10^1$	$3,04 \times 10^3 \pm 2 \times 10^1$	---
Monoespécie, prop. variáveis	$7,34 \times 10^4 \pm 9 \times 10^2$	$2,083 \times 10^3 \pm 7$	$3,07 \times 10^3 \pm 1 \times 10^1$	---
Esc. congelado – mod. 4	$6,90 \times 10^4 \pm 9 \times 10^2$	$1,91 \times 10^3 \pm 2 \times 10^1$	$3,04 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$	0,783686
Esc. congelado – mod. 10	$6,90 \times 10^4 \pm 9 \times 10^2$	$1,91 \times 10^3 \pm 2 \times 10^1$	$3,04 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$	0,783539
CDS com correção adiada – 1D (malha de 320 volumes)				
Monoespécie, prop. constantes	$4,7524 \times 10^4 \pm 3$	$1,85506 \times 10^3 \pm 9 \times 10^{-2}$	$3,17550 \times 10^3 \pm 9 \times 10^{-2}$	---
Monoespécie, prop. variáveis	$4,9127 \times 10^4 \pm 3$	$1,95287 \times 10^3 \pm 8 \times 10^{-2}$	$3,20731 \times 10^3 \pm 9 \times 10^{-2}$	---
Esc. congelado – mod. 4	$4,5413 \times 10^4 \pm 3$	$1,7710 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$	$3,1718 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$	0,783686
Esc. congelado – mod. 10	$4,5414 \times 10^4 \pm 3$	$1,7710 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$	$3,1718 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$	0,783539

Na seqüência, nas Figuras 5.8 a 5.11, são expostos os campos de temperatura e pressão, bem como isolinhas para números de Mach e os vetores de velocidades obtidos empregando-se código Mach2D para a condição de escoamento congelado, com o modelo químico 4, para malha de 80x24 volumes de controle. Através de tais figuras, é possível verificar a variação radial das propriedades termofísicas da mistura de gases em escoamento, especialmente na região divergente da tubeira. Pode-se observar, outrossim, através da Figura 5.10, que a linha sônica não cruza a linha de simetria da tubeira exatamente na garganta do motor-foguete. Tal fenômeno se deve aos efeitos bidimensionais do escoamento, que afetam tanto os campos de velocidade, quanto os de pressão, influenciando assim o comportamento da linha sônica.

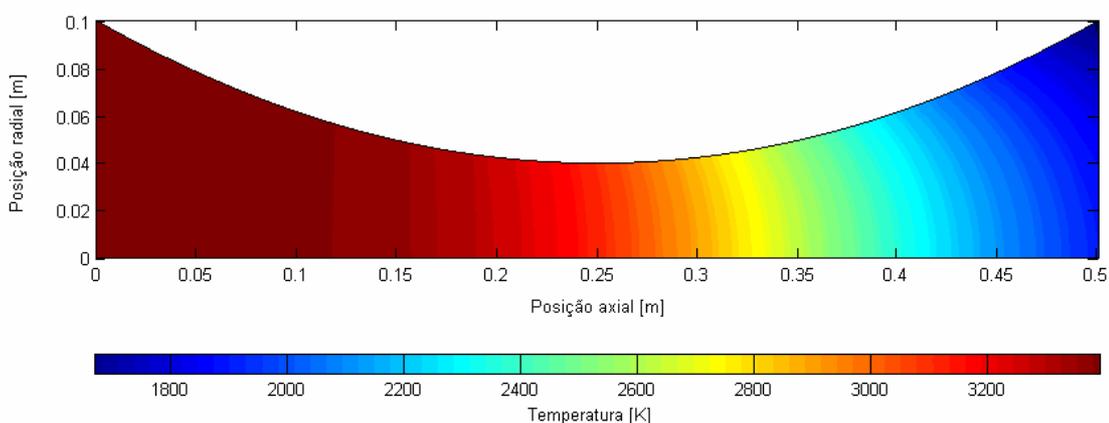


Figura 5.8: Campo de temperaturas no interior da tubeira parabólica (malha de 80x24 volumes de controle, modelo químico 4, escoamento congelado).

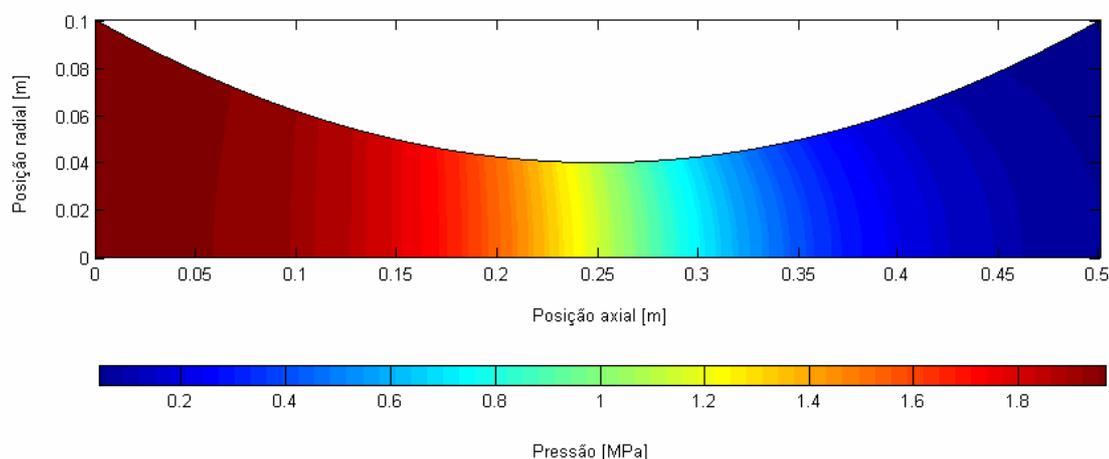


Figura 5.9: Campo de pressão no interior da tubeira parabólica (malha de 80x24 volumes de controle, modelo químico 4, escoamento congelado).

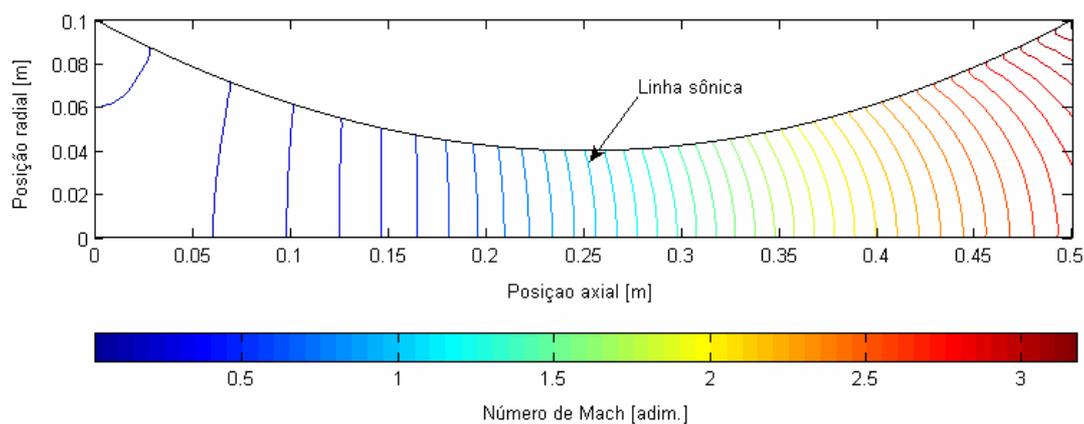


Figura 5.10: Isolinhas para números de Mach no interior da tubeira parabólica (malha de 80x24 volumes de controle, modelo químico 4, escoamento congelado).

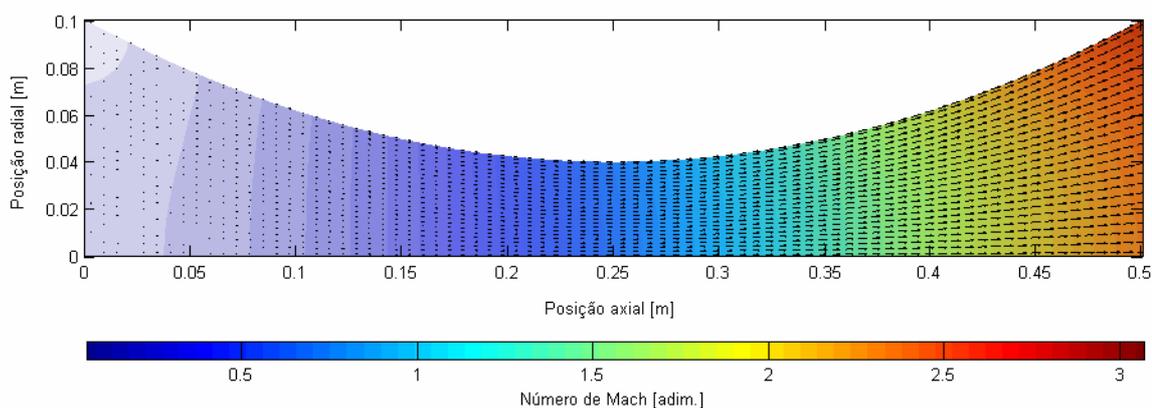


Figura 5.11: Vetores de velocidade e números de Mach no interior da tubeira parabólica (malha de 80x24 volumes de controle, modelo químico 4, escoamento congelado).

5.5 ESCOAMENTO 2D EM EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL

Analogamente ao escoamento congelado 2D, para o escoamento em equilíbrio químico local foram analisados apenas os modelos químicos 4 e 10 (apresentando, respectivamente, 6 e 8 espécies). Tais modelos químicos foram escolhidos uma vez que o erro de modelagem a eles associados é menor em relação aos modelos com menor número de espécies. Observa-se, contudo, que a malha mais refinada para a qual foram feitas simulações se constitui de 320x96 volumes de controle. A malha mais refinada foi determinada de modo

que as simulações apresentassem duração inferior a 24 horas (1 dia). Dados e resultados gerais das simulações realizadas são apresentados na Tabela 5.20.

Tabela 5.20: Resultados gerais das simulações com o modelo de escoamento em equilíbrio químico local 2D empregando-se a geometria parabólica.

Número de volumes		Δt	Iterações externas efetuadas	Iterações necessárias à convergência	Tempo de CPU	Algarismos significativos
Direção Axial	Direção Radial					
Função de interpolação UDS – modelo 4						
10	3	$1,0 \times 10^{-5}$	5.000	700	19,5 s	13
20	6	$1,0 \times 10^{-5}$	5.000	700	55,0 s	10
40	12	$5,0 \times 10^{-6}$	5.000	1.900	3,20 min	9
80	24	$2,0 \times 10^{-6}$	5.000	2.500	12,0 min	13
160	48	$1,0 \times 10^{-6}$	8.000	5.600	1,20 h	11
320	96	$5,0 \times 10^{-7}$	30.000	22.500	13,9 h	12
Função de interpolação CDS – modelo 4						
10	3	$1,0 \times 10^{-5}$	10.000	800	41,8 s	14
20	6	$1,0 \times 10^{-5}$	5.000	900	58,8 s	14
40	12	$5,0 \times 10^{-6}$	5.000	1.200	3,06 min	13
80	24	$2,0 \times 10^{-6}$	5.000	2.300	10,2 min	13
160	48	$1,0 \times 10^{-6}$	10.000	6.400	1,24 h	12
320	96	$5,0 \times 10^{-7}$	30.000	15.000	13,6 h	11
Função de interpolação UDS – modelo 10						
20	6	$1,0 \times 10^{-5}$	5.000	700	1,52 min	12
40	12	$5,0 \times 10^{-6}$	5.000	900	4,93 min	11
80	24	$2,0 \times 10^{-6}$	5.000	2.000	17,5 min	13
160	48	$1,0 \times 10^{-6}$	10.000	7.000	2,06 h	13
320	96	$5,0 \times 10^{-7}$	30.000	25.000	21,4 h	13
Função de interpolação CDS – modelo 10						
10	3	$1,0 \times 10^{-5}$	5.000	900	32,9 s	13
20	6	$1,0 \times 10^{-5}$	5.000	800	1,52 min	14
40	12	$6,0 \times 10^{-6}$	5.000	3.200	4,81 min	12
80	24	$2,0 \times 10^{-6}$	5.000	2.900	16,2 min	13
160	48	$1,0 \times 10^{-6}$	10.000	6.000	1,98 h	13
320	96	$5,0 \times 10^{-7}$	30.000	16.000	21,3 h	12

Para todas as simulações efetuadas, foi calculada a ordem aparente da solução obtida, bem como a estimativa da incerteza numérica, baseada no estimador GCI, sendo alguns resultados apresentados nas Tabelas 5.21 e 5.22. Ressalta-se que, diferentemente do observado para os modelos físicos anteriormente estudados, mesmo ao se empregar funções de interpolação de segunda ordem (CDS), a ordem assintótica se mantém igual à unidade. Isto se deve ao fato de o termo-fonte da equação da energia térmica, Eq. (3.29), ser discretizado utilizando-se funções de interpolação de primeira ordem. Tal procedimento foi adotado pois,

ao serem empregadas funções de interpolação de segunda ordem, não se obteve convergência em nenhum dos modelos, fato que ocasionou a opção pelas funções de interpolação do tipo UDS, analogamente ao ocorrido na implementação do código Mach1D para escoamento em equilíbrio químico local. Assim, apesar de a maior parte das equações do modelo matemático apresentarem discretização empregando-se funções de segunda ordem, a inclusão de um único termo de uma equação discretizada utilizando-se funções de interpolação de primeira ordem é suficiente para que a convergência de todo o modelo seja afetada.

Tabela 5.21: Ordem aparente da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo químico 4) – tubeira parabólica.

Malha	Solução numérica [adim.]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, \mathbf{p})$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	1,16352084	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	1,06845300	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	1,02362796	1,085	$1,345 \times 10^{-1}$
80x24	1,00114645	$9,956 \times 10^{-1}$	$6,786 \times 10^{-2}$
160x48	$9,89811945 \times 10^{-1}$	$9,880 \times 10^{-1}$	$3,458 \times 10^{-2}$
320x96	$9,84111891 \times 10^{-1}$	$9,917 \times 10^{-1}$	$1,730 \times 10^{-2}$
Função de interpolação CDS [$p_L = 1$]			
10x3	1,00019589	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$9,83447453 \times 10^{-1}$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$9,80065434 \times 10^{-1}$	2,308	$1,015 \times 10^{-2}$
80x24	$9,79091794 \times 10^{-1}$	1,796	$2,921 \times 10^{-3}$
160x48	$9,78718167 \times 10^{-1}$	1,382	$1,121 \times 10^{-3}$
320x96	$9,78548238 \times 10^{-1}$	1,137	$5,098 \times 10^{-4}$

A redução da ordem de convergência é claramente vista tanto para o coeficiente de descarga quanto para o impulso específico (e demais variáveis de interesse). Nota-se, contudo, que mesmo apresentando mesma tendência à ordem assintótica unitária, as estimativas de erro empregando-se funções de interpolação CDS apresentam, em geral, menor ordem de grandeza frente aos resultados numéricos para o esquema de interpolação UDS. Esta diferença em favor da utilização do esquema CDS (mesmo que o sistema de equações apresente ordem assintótica unitária) pode ser explicada pelo fato de grande parte dos termos das equações apresentar funções de interpolação de ordem 2. Desta forma, a solução numérica obtida possui uma menor incerteza numérica, mesmo que a ordem de convergência se degenere para a unidade.

Tabela 5.22: Ordem aparente da solução numérica para o impulso específico no vácuo (I_{sp}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (modelo químico 4) – tubeira parabólica.

Malha	Solução numérica [s]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$3,23815711 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,36422785 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,45642492 \times 10^2$	$4,514 \times 10^{-1}$	$7,528 \times 10^1$
80x24	$3,51170741 \times 10^2$	$7,379 \times 10^{-1}$	$2,484 \times 10^1$
160x48	$3,54134929 \times 10^2$	$8,992 \times 10^{-1}$	$1,028 \times 10^1$
320x96	$3,55677976 \times 10^2$	$9,419 \times 10^{-1}$	5,026
Função de interpolação CDS [$p_L = 1$]			
10x3	$3,58952596 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,57120214 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,57002558 \times 10^2$	3,961	$3,530 \times 10^{-1}$
80x24	$3,57094123 \times 10^2$	---	$9,157 \times 10^{-2} **$
160x48	$3,57164303 \times 10^2$	$3,837 \times 10^{-1}$	$6,909 \times 10^{-1}$
320x96	$3,57207824 \times 10^2$	$6,893 \times 10^{-1}$	$2,131 \times 10^{-1}$

O comportamento da ordem aparente com o refinamento da malha pode ser observado, outrossim, através das Figuras 5.12 e 5.13, mostradas a seguir.

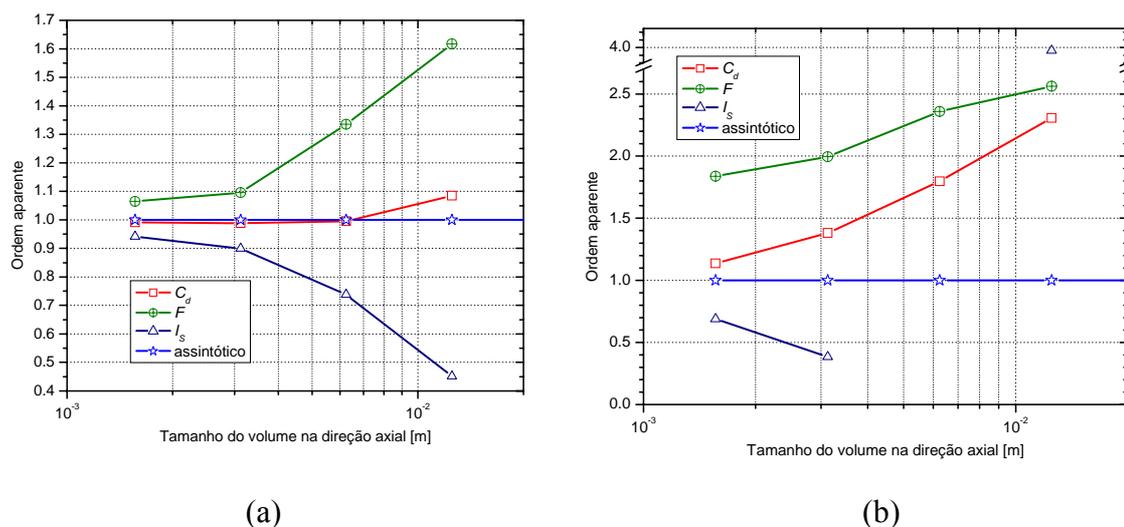


Figura 5.12: Comportamento da ordem aparente para o coeficiente de descarga, o empuxo no vácuo e o impulso específico (modelo químico 4), empregando-se a tubeira parabólica e funções de interpolação: (a) UDS; e (b) CDS.

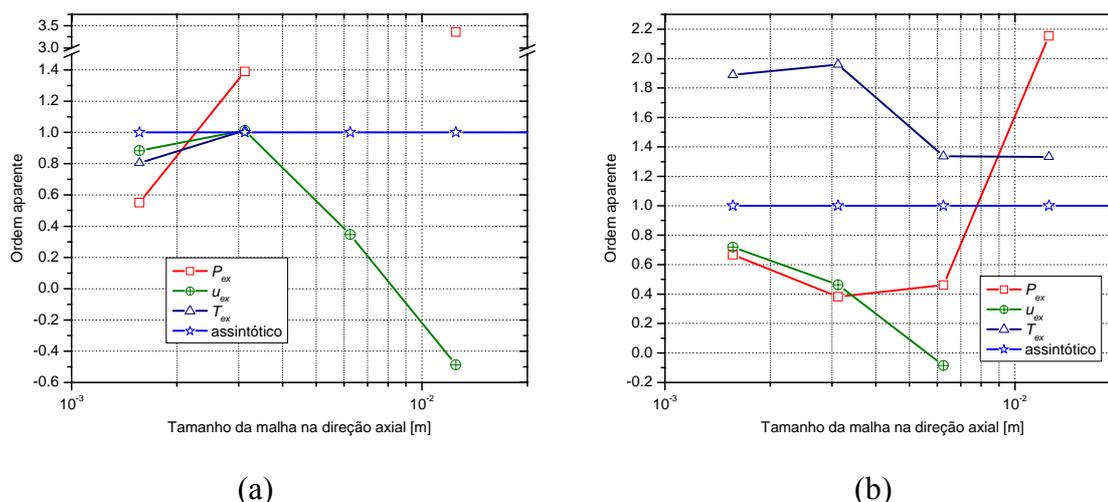


Figura 5.13: Comportamento da ordem aparente para a pressão, a temperatura e a velocidade axial na saída da tubeira (eixo de simetria, modelo químico 4), empregando-se a tubeira parabólica e funções de interpolação: (a) UDS; e (b) CDS.

De um modo geral, nota-se que a tendência de aproximação em relação à ordem assintótica é mais rápida para as variáveis de interesse globais (como o empuxo e o coeficiente de descarga). Soluções numéricas e as respectivas incertezas são mostradas nas Tabelas 5.23 e 5.24, apresentadas na seqüência. Nelas estão relacionadas as variáveis de interesse analisadas neste trabalho, para uma malha de 320x96 volumes de controle.

A partir das Tabelas 5.23 e 5.24, verifica-se que os modelos 4 e 10 (respectivamente, com 6 e 8 espécies) apresentam resultados numéricos equivalentes, similarmente ao ocorrido nos modelos unidimensionais. Ao se comparar o tempo de CPU demandado por cada um dos modelos, contudo, nota-se que a escolha por um ou por outro modelo químico é importante, em especial para o modelo de equilíbrio químico local: enquanto para o modelo 4 o tempo de CPU demandado foi de 13,6 horas para executar-se 30.000 iterações, o mesmo número de iterações necessitou 21,3 horas (57,6% a mais) ao ser utilizado o modelo químico 10, com resultados equivalentes. Recomenda-se, assim, a utilização do modelo químico de seis espécies, em detrimento do de oito espécies, mais complexo e com maior tempo de computação.

Comparando-se os resultados obtidos com os códigos Mach1D e Mach2D para a geometria parabólica, observa-se que, no caso do escoamento em equilíbrio químico a variação entre os resultados numéricos para o empuxo e o impulso específico (ambos no vácuo) atinge 7,4%. Como tal variação é superior ao erro numérico estimado, também neste caso atribui-se tal variação aos efeitos bidimensionais do escoamento, conforme já observado

para os escoamentos congelado e monoespécie. No entanto, ao se comparar os resultados para o coeficiente de descarga, observa-se que a variação é muito pequena e, no caso do escoamento em equilíbrio químico local, os resultados dos modelos uni e bidimensionais são equivalentes.

Tabela 5.23: Resultados e respectivas incertezas numéricas para o coeficiente de descarga, o empuxo no vácuo e o impulso específico, para malha de 320x96 volumes – tubeira parabólica.

Modelo	C_d [adim.]	F [N]	I_{sp} [s]	I_s [N·s/kg]
UDS – 1D				
Monoespécie, prop. constantes	$1,01 \pm 2 \times 10^{-2}$	$1,628 \times 10^4 \pm 8 \times 10^1$	$3,45 \times 10^2 \pm 5$	$3,38 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$
Monoespécie, prop. variáveis	$1,00 \pm 2 \times 10^{-2}$	$1,635 \times 10^4 \pm 8 \times 10^1$	$3,45 \times 10^2 \pm 5$	$3,38 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$
Esc. congelado – mod. 4	$1,01 \pm 2 \times 10^{-2}$	$1,621 \times 10^4 \pm 9 \times 10^1$	$3,39 \times 10^2 \pm 5$	$3,32 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$
Esc. congelado – mod. 10	$1,01 \pm 2 \times 10^{-2}$	$1,621 \times 10^4 \pm 8 \times 10^1$	$3,39 \times 10^2 \pm 5$	$3,32 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$
Esc. em equilíbrio químico – mod. 4	$0,98 \pm 1 \times 10^{-2}$	$1,665 \times 10^4 \pm 7 \times 10^1$	$3,56 \times 10^2 \pm 5$	$3,49 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$
Esc. em equilíbrio químico – mod. 10	$0,98 \pm 2 \times 10^{-2}$	$1,665 \times 10^4 \pm 7 \times 10^1$	$3,56 \times 10^2 \pm 5$	$3,49 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$
CDS com correção adiada – 2D				
Monoespécie, prop. constantes	$0,999876 \pm 2 \times 10^{-6}$	$1,62516 \times 10^4 \pm 4 \times 10^{-1}$	$3,41743 \times 10^2 \pm 8 \times 10^{-3}$	$3,35134 \times 10^3 \pm 8 \times 10^{-2}$
Monoespécie, prop. variáveis	$0,991678 \pm 4 \times 10^{-6}$	$1,632442 \times 10^4 \pm 8 \times 10^{-2}$	$3,46111 \times 10^2 \pm 3 \times 10^{-3}$	$3,39417 \times 10^3 \pm 3 \times 10^{-2}$
Escoamento congelado – mod. 4	$1,000962 \pm 2 \times 10^{-6}$	$1,61859 \times 10^4 \pm 4 \times 10^{-1}$	$3,39993 \times 10^2 \pm 8 \times 10^{-3}$	$3,33418 \times 10^3 \pm 8 \times 10^{-2}$
Escoamento congelado – mod. 10	$1,000970 \pm 2 \times 10^{-6}$	$1,61860 \times 10^4 \pm 4 \times 10^{-1}$	$3,39991 \times 10^2 \pm 8 \times 10^{-3}$	$3,33416 \times 10^3 \pm 8 \times 10^{-2}$
Esc. em equilíbrio químico – mod. 4	$0,9785 \pm 4 \times 10^{-4}$	$1,6625 \times 10^4 \pm 1$	$3,572 \times 10^2 \pm 2 \times 10^{-1}$	$3,503 \times 10^3 \pm 2$
Esc. em equilíbrio químico – mod. 10	$0,9785 \pm 4 \times 10^{-4}$	$1,6625 \times 10^4 \pm 1$	$3,572 \times 10^2 \pm 2 \times 10^{-1}$	$3,503 \times 10^3 \pm 2$
Solução analítica 2D de Kliegel e Levine (1969)	0,999877	---	---	---
CDS com correção adiada – 1D (malha de 320 volumes)				
Monoespécie, prop. constantes	$1,00000 \pm 3 \times 10^{-5}$	$1,54007 \times 10^4 \pm 3 \times 10^{-1}$	$3,2381 \times 10^2 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,1755 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$
Monoespécie, prop. variáveis	$0,99178 \pm 5 \times 10^{-5}$	$1,54272 \times 10^4 \pm 3 \times 10^{-1}$	$3,27055 \times 10^2 \pm 9 \times 10^{-3}$	$3,20730 \times 10^3 \pm 9 \times 10^{-2}$
Escoamento congelado – mod. 4	$1,00108 \pm 3 \times 10^{-5}$	$1,53993 \times 10^4 \pm 3 \times 10^{-1}$	$3,2343 \times 10^2 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,1717 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$
Escoamento congelado – mod. 10	$1,00109 \pm 3 \times 10^{-5}$	$1,53993 \times 10^4 \pm 3 \times 10^{-1}$	$3,2343 \times 10^2 \pm 1 \times 10^{-2}$	$3,1717 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$
Escoamento em equilíbrio químico – mod. 4	$0,9786 \pm 5 \times 10^{-4}$	$1,5478 \times 10^4 \pm 1$	$3,3257 \times 10^2 \pm 2 \times 10^{-1}$	$3,2614 \times 10^3 \pm 2$
Escoamento em equilíbrio químico – mod. 10	$0,9785 \pm 5 \times 10^{-4}$	$1,5478 \times 10^4 \pm 1$	$3,3258 \times 10^2 \pm 2 \times 10^{-1}$	$3,2615 \times 10^3 \pm 2$

Tabela 5.24: Resultados e respectivas incertezas numéricas para a pressão, a temperatura, a velocidade axial e a fração mássica de H₂O na saída da tubeira (linha de simetria), para malha de 320x96 volumes – tubeira parabólica.

Modelo	P_{ex} [Pa]	T_{ex} [K]	u_{ex} [m/s]	$Y(H_2O)_{ex}$ [adim.]
UDS – 2D				
Monoespécie, prop. constantes	$7,2 \times 10^4 \pm 7 \times 10^3$	$1,99 \times 10^3 \pm 4 \times 10^1$	$3,03 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$	---
Monoespécie, prop. variáveis	$7 \times 10^4 \pm 1 \times 10^4$	$2,09 \times 10^3 \pm 4 \times 10^1$	$3,06 \times 10^3 \pm 6 \times 10^1$	---
Esc. congelado – mod. 4	$6,9 \times 10^4 \pm 3 \times 10^3$	$1,92 \times 10^3 \pm 3 \times 10^1$	$3,03 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$	0,783686
Esc. congelado – mod. 10	$6,9 \times 10^4 \pm 2 \times 10^3$	$1,92 \times 10^3 \pm 3 \times 10^1$	$3,03 \times 10^3 \pm 4 \times 10^1$	0,783539
Esc. em equilíbrio químico – mod. 4	$8,3 \times 10^4 \pm 3 \times 10^3$	$2,64 \times 10^3 \pm 1 \times 10^1$	$3,10 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$	$0,902 \pm 2 \times 10^{-3}$
Escoamento em equilíbrio químico – mod. 10	$8,3 \times 10^4 \pm 2 \times 10^3$	$2,64 \times 10^3 \pm 1 \times 10^1$	$3,10 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$	$0,902 \pm 2 \times 10^{-3}$
CDS com correção adiada – 2D				
Monoespécie, prop. constantes	$7,14 \times 10^4 \pm 9 \times 10^2$	$1,98 \times 10^3 \pm 1 \times 10^1$	$3,04 \times 10^3 \pm 2 \times 10^1$	---
Monoespécie, prop. variáveis	$7,34 \times 10^4 \pm 9 \times 10^2$	$2,083 \times 10^3 \pm 7$	$3,07 \times 10^3 \pm 1 \times 10^1$	---
Escoamento congelado – mod. 4	$6,90 \times 10^4 \pm 9 \times 10^2$	$1,91 \times 10^3 \pm 2 \times 10^1$	$3,04 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$	0,783686
Escoamento congelado – mod. 10	$6,90 \times 10^4 \pm 9 \times 10^2$	$1,91 \times 10^3 \pm 2 \times 10^1$	$3,04 \times 10^3 \pm 5 \times 10^1$	0,783539
Escoamento em equilíbrio químico – mod. 4	$8,31 \times 10^4 \pm 8 \times 10^2$	$2,6345 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$	$3,113 \times 10^3 \pm 5$	$0,9028 \pm 7 \times 10^{-4}$
Escoamento em equilíbrio químico – mod. 10	$8,31 \times 10^4 \pm 8 \times 10^2$	$2,6347 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$	$3,113 \times 10^3 \pm 5$	$0,9027 \pm 9 \times 10^{-4}$
CDS com correção adiada – 1D (malha de 320 volumes)				
Monoespécie, prop. constantes	$4,7524 \times 10^4 \pm 3$	$1,85506 \times 10^3 \pm 9 \times 10^{-2}$	$3,17550 \times 10^3 \pm 9 \times 10^{-2}$	---
Monoespécie, prop. variáveis	$4,9127 \times 10^4 \pm 3$	$1,95287 \times 10^3 \pm 8 \times 10^{-2}$	$3,20731 \times 10^3 \pm 9 \times 10^{-2}$	---
Escoamento congelado – mod. 4	$4,5413 \times 10^4 \pm 3$	$1,7710 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$	$3,1718 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$	0,783686
Escoamento congelado – mod. 10	$4,5414 \times 10^4 \pm 3$	$1,7710 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$	$3,1718 \times 10^3 \pm 1 \times 10^{-1}$	0,783539
Escoamento em equilíbrio químico – mod. 4	$5,741 \times 10^4 \pm 1 \times 10^1$	$2,557 \times 10^3 \pm 1$	$3,261 \times 10^3 \pm 2$	$0,9136 \pm 5 \times 10^{-4}$
Escoamento em equilíbrio químico – mod. 10	$5,742 \times 10^4 \pm 1 \times 10^1$	$2,557 \times 10^3 \pm 1$	$3,261 \times 10^3 \pm 2$	$0,9136 \pm 5 \times 10^{-4}$

Observa-se, também, que embora o modelo físico adotado influencie na solução numérica (uma vez que a diferença entre os resultados numéricos é superior à incerteza calculada), tal influência é pequena: cerca 2,3% no caso do coeficiente de descarga, 2,7% no empuxo e 5,1% no impulso específico. A variação entre os resultados para os diferentes modelos físicos é mais apreciável quando comparadas algumas variáveis locais, como a

temperatura e a pressão, ambas na saída da tubeira e sobre a linha de simetria da mesma: as diferenças entre os resultados numéricos dos diferentes modelos físicos atingem 37,9% e 20,4%, respectivamente. Nota-se, contudo, que para outras variáveis, como a velocidade axial na saída da tubeira (sobre a linha de simetria da mesma), o efeito do modelo físico escolhido sobre a solução numérica é pequeno: apenas 2,4% ao se comparar os casos-extremos. Isto pode ser observado mais claramente através das Figuras 5.14 a 5.19, cujos modelos físicos estão relacionados na Tabela 5.25.

Tabela 5.25: Modelos físicos apresentados nas Figuras 5.14 a 5.19.

Solução	Modelos
1	Modelo com propriedades constantes
2	Modelo com propriedades variáveis
3	Modelo congelado – modelo químico 4
4	Modelo congelado – modelo químico 10
5	Modelo equilíbrio químico local – modelo químico 4
6	Modelo equilíbrio químico local – modelo químico 10

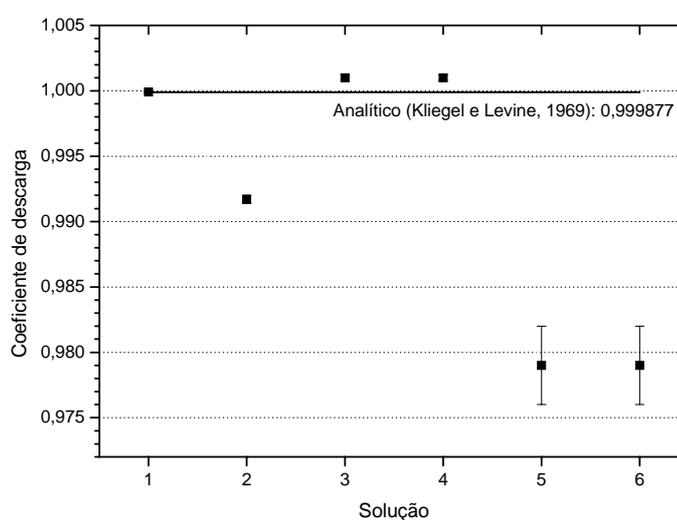


Figura 5.14: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para C_d), para malha de 80x24 volumes de controle.

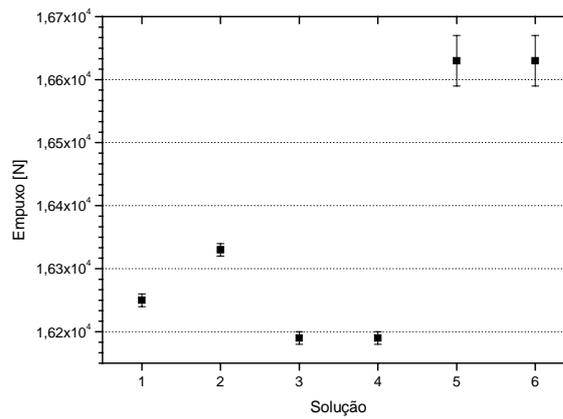


Figura 5.15: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para F), para malha de 80x24 volumes de controle.

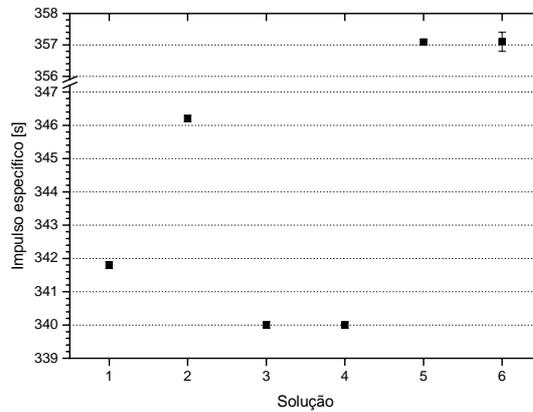


Figura 5.16: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para I_{sp}), para malha de 80x24 volumes de controle.

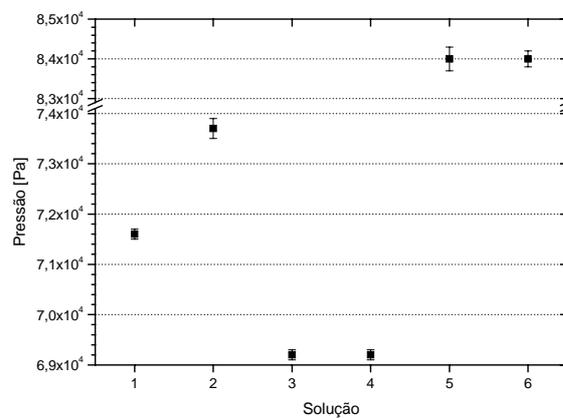


Figura 5.17: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para P_{ex}), para malha de 80x24 volumes de controle.

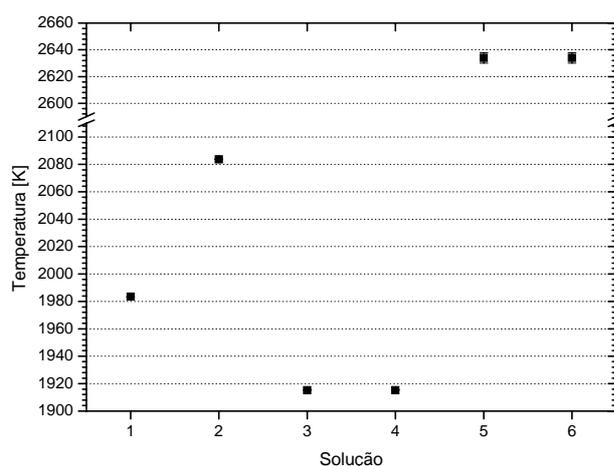


Figura 5.18: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para T_{ex}), para malha de 80x24 volumes de controle.

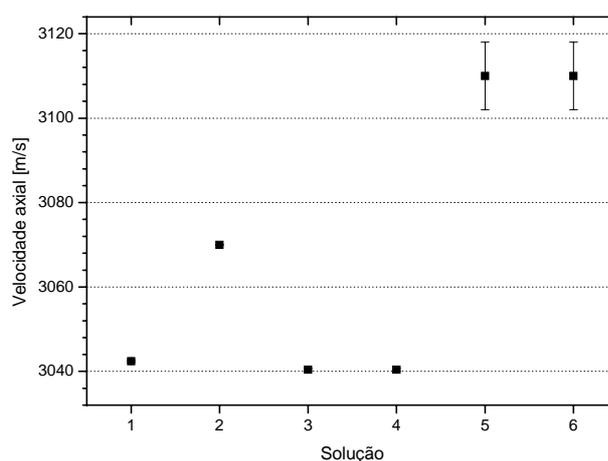


Figura 5.19: Comparação entre resultados numéricos para diversos modelos físicos (para u_{ex}), para malha de 80x24 volumes de controle.

Uma última observação a ser realizada sobre os resultados apresentados na Tabela 5.23 é em relação ao coeficiente de descarga: nota-se que, para ambas as funções de interpolação empregadas (UDS e CDS), a solução para escoamento monoespécie com propriedades constantes (com sua respectiva faixa de incerteza numérica) engloba a solução analítica apresentada por Kliegel e Levine (1969). Este se constitui em mais um indício de que o código Mach2D soluciona corretamente o modelo matemático nele implementado.

As Figuras 5.20 a 5.24, mostradas a seguir, apresentam os campos de temperatura, pressão, fração mássica de vapor de água, além de isolinhas para números de Mach e vetores de velocidade ao longo da tubeira parabólica. Através de tais figuras, pode-se verificar a

variação radial das propriedades termofísicas da mistura de gases em escoamento, especialmente na região divergente da tubeira. Desta forma, assim como observado no caso do modelo de escoamento congelado, nota-se que no escoamento em equilíbrio químico local ocorre a região de velocidade sônica se encontra já após a garganta, na região divergente da tubeira, conforme a Figura 5.23. Observa-se, outrossim, através das Figuras 5.20 e 5.22, que a região em que ocorre a maior concentração de vapor de água (H_2O) ao longo da tubeira corresponde à sua saída, na região próxima à parede, onde são encontradas as menores temperaturas do escoamento.

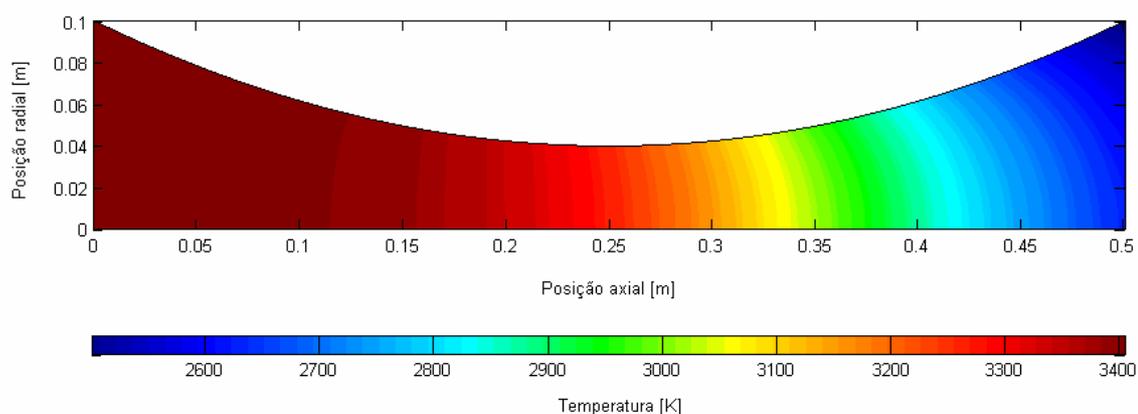


Figura 5.20: Campo de temperaturas ao longo da tubeira parabólica (escoamento em equilíbrio químico local, modelo químico 4, malha de 80x24 volumes).

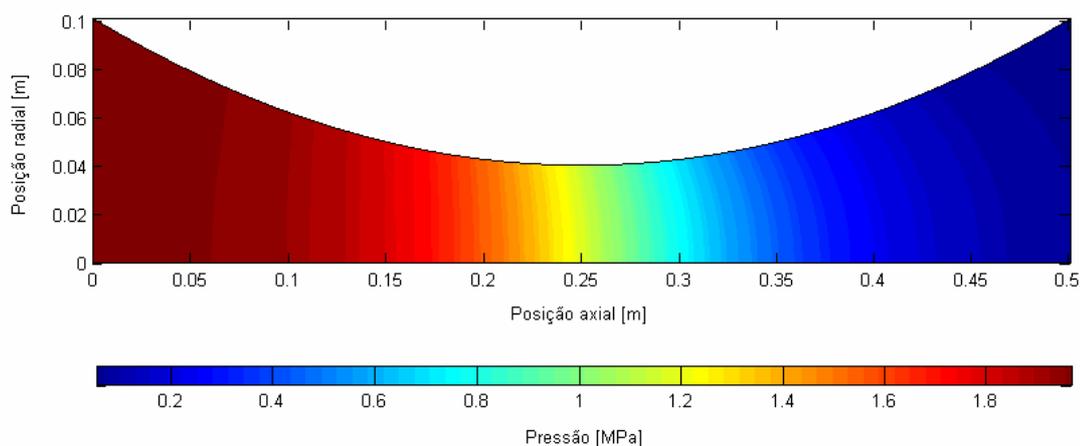


Figura 5.21: Campo de pressões ao longo da tubeira parabólica (escoamento em equilíbrio químico local, modelo químico 4, malha de 80x24 volumes de controle).

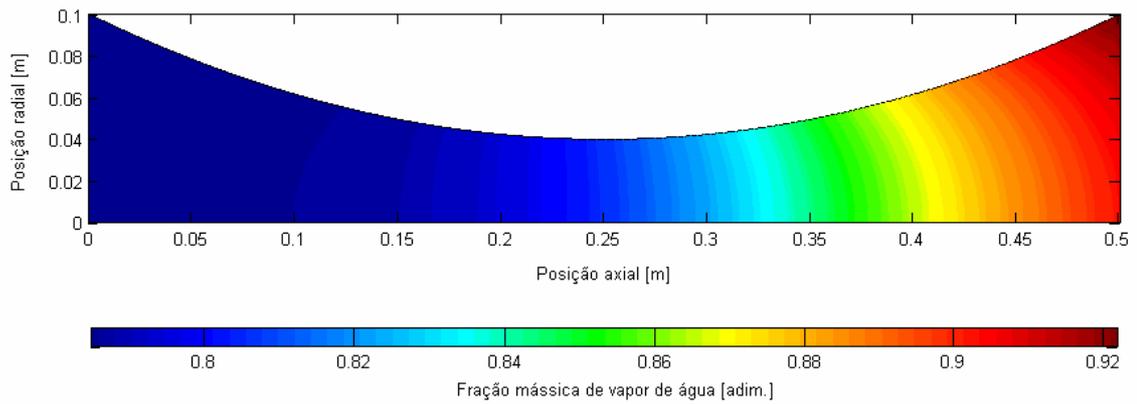


Figura 5.22: Campo de frações mássicas de H_2O ao longo da tubeira parabólica (escoamento em equilíbrio químico local, modelo químico 4, malha de 80×24 volumes).

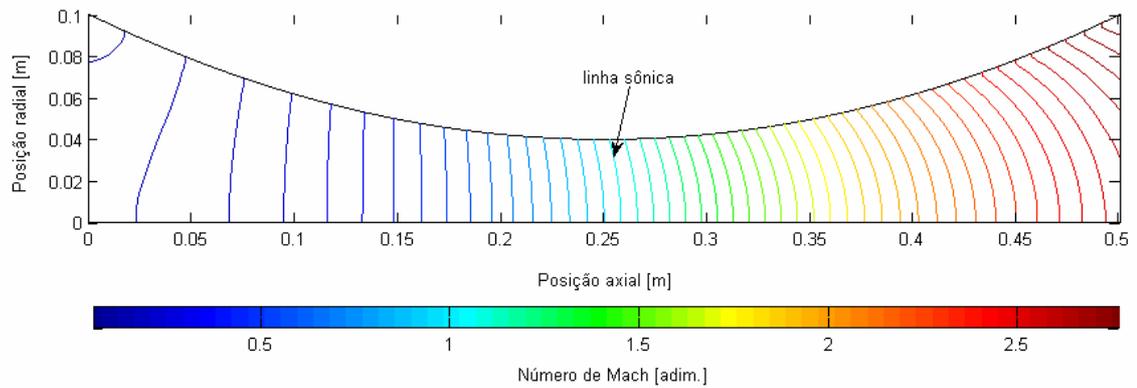


Figura 5.23: Isolinhas de números de Mach ao longo da tubeira parabólica (escoamento em equilíbrio químico local, modelo químico 4, malha de 80×24 volumes).

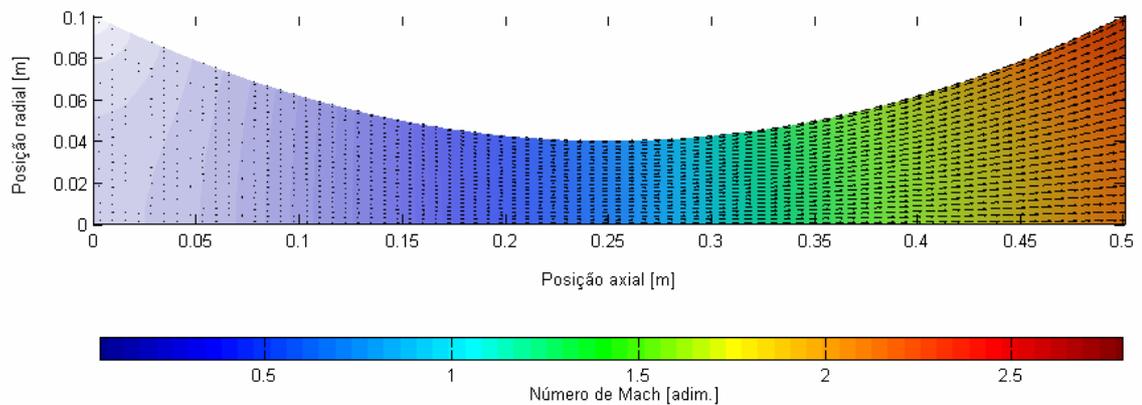


Figura 5.24: Vetores de velocidade e distribuição de números de Mach ao longo da tubeira parabólica (escoamento em equilíbrio químico local, modelo químico 4, malha de 80×24 volumes de controle).

5.6 ESCOAMENTO 2D EM DESEQUILÍBRIO QUÍMICO

O último modelo físico a ser analisado para os casos de escoamento bidimensional é o em desequilíbrio químico (com taxa finita de reação). Para este modelo faz-se necessário a obtenção das taxas de geração de espécies para a solução de cada modelo químico. É indispensável, outrossim, agregar a equação da conservação de massa para cada espécie química ao modelo matemático, o que torna este modelo físico o mais complexo dentre todos os estudados.

A necessidade de solução de um maior número de equações reflete-se no tempo de CPU demandado por este modelo, conforme pode ser visto na Tabela 5.26. Para este modelo, ao ser utilizada uma malha de 320x96 volumes, faz-se necessário mais de 6 dias de computação (6,57 dias), empregando-se o modelo químico 32. No caso do escoamento em equilíbrio químico (para a mesma malha) o tempo de CPU máximo foi de 21,4 h (modelo químico 10, funções de interpolação UDS). A ausência de resultados empregando-se funções de interpolação CDS se deve à divergência das simulações numéricas ao empregá-las. Assim, no caso do escoamento bidimensional em desequilíbrio químico, apenas resultados empregando-se funções de interpolação UDS foram obtidos.

Tabela 5.26: Resultados gerais das simulações com o modelo de escoamento com taxa finita de reação 2D empregando-se a geometria parabólica.

Número de volumes		Δt	Iterações externas efetuadas	Iterações necessárias à convergência	Tempo de CPU	Algarismos significativos
Direção Axial	Direção Radial					
Função de interpolação UDS – modelo 31						
10	3	$5,0 \times 10^{-8}$	300.000	120.000	1,53 min	11
20	6	$5,0 \times 10^{-8}$	300.000	160.000	4,49 min	10
40	12	$2,0 \times 10^{-8}$	500.000	340.000	26,5 min	9
80	24	$2,0 \times 10^{-8}$	1.000.000	570.000	3,25 h	9
160	48	$2,0 \times 10^{-8}$	1.600.000	1.100.000	1,12 dia	8
320	96	$2,0 \times 10^{-8}$	2.000.000	1.900.000	5,92 dias	8
Função de interpolação UDS – modelo 32						
10	3	$2,0 \times 10^{-8}$	700.000	250.000	3,68 min	10
20	6	$2,0 \times 10^{-8}$	1.000.000	750.000	15,7 min	11
40	12	$2,0 \times 10^{-8}$	1.000.000	960.000	51,8 min	11
80	24	$2,0 \times 10^{-8}$	1.200.000	1.000.000	3,96 h	10
160	48	$2,0 \times 10^{-8}$	1.600.000	1.100.000	1,05 dia	9
320	96	$2,0 \times 10^{-8}$	2.300.000	2.000.000	6,57 dias	7

O número de algarismos significativos obtidos ao se empregar o modelo de desequilíbrio químico é, em geral, o menor para uma dada malha, se comparado aos demais modelos físicos para o escoamento bidimensional. Uma possível causa para este comportamento está no elevado número de iterações necessário para que se obtenha a convergência deste modelo: o total de iterações efetuadas para uma determinada malha é pelo menos uma ordem de grandeza superior ao necessário para a obtenção da solução nos demais modelos físicos (como o escoamento em equilíbrio químico local).

Similarmente aos demais modelos físicos estudados para o escoamento bidimensional, para o escoamento em desequilíbrio químico não existe uma solução analítica conhecida. Desta forma, pôde-se analisar apenas a ordem aparente do erro numérico, sendo efetuadas estimativas da incerteza numérica empregando-se o estimador GCI, conforme mostrado nas Tabelas 5.27 e 5.28 para duas variáveis de interesse, apresentadas na seqüência.

Tabela 5.27: Ordem aparente da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (esquema UDS) – tubeira parabólica.

Malha	Solução numérica [adim.]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Modelo 31			
10x3	1,2542168	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	1,1510777	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	1,1034624	1,115	$1,428 \times 10^{-1}$
80x24	1,0795682	$9,948 \times 10^{-1}$	$7,221 \times 10^{-2}$
160x48	1,0674842	$9,836 \times 10^{-1}$	$3,709 \times 10^{-2}$
320x96	1,0613826	$9,858 \times 10^{-1}$	$1,867 \times 10^{-2}$
Modelo 32			
10x3	1,2631326	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	1,1587912	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	1,1109492	1,125	$1,435 \times 10^{-1}$
80x24	1,0869769	$9,969 \times 10^{-1}$	$7,223 \times 10^{-2}$
160x48	1,0748544	$9,837 \times 10^{-1}$	$3,720 \times 10^{-2}$

A partir dos resultados apresentados nas Tabelas 5.27 e 5.28, bem como da Figura 5.25, verifica-se que a ordem aparente do erro numérico tende à assintótica, para todas as variáveis de interesse. Diante desta constatação, pode-se afirmar que o código Mach2D resolve corretamente o modelo matemático implementado, uma vez que este é o critério mais dificilmente atendido e mais sensível a erros de programação em relação à verificação numérica (ROY, 2005).

Tabela 5.28: Ordem aparente da solução numérica para o impulso específico no vácuo (I_{sp}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (esquema UDS) – tubeira parabólica.

Malha	Solução numérica [s]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Modelo 31			
10x3	$2,9976800 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,1065315 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,1846913 \times 10^2$	$4,779 \times 10^{-1}$	$5,971 \times 10^1$
80x24	$3,2313524 \times 10^2$	$7,442 \times 10^{-1}$	$2,074 \times 10^1$
160x48	$3,2568164 \times 10^2$	$8,738 \times 10^{-1}$	9,177
320x96	$3,2701478 \times 10^2$	$9,336 \times 10^{-1}$	4,395
Modelo 32			
10x3	$2,9812417 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,0911437 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,1689897 \times 10^2$	$4,975 \times 10^{-1}$	$5,671 \times 10^1$
80x24	$3,2153468 \times 10^2$	$7,478 \times 10^{-1}$	$2,047 \times 10^1$
160x48	$3,2406358 \times 10^2$	$8,743 \times 10^{-1}$	9,107

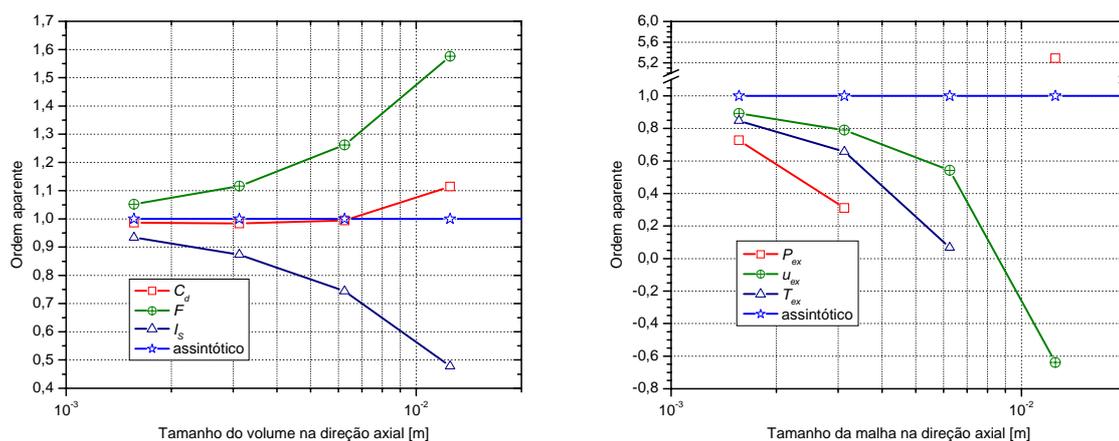


Figura 5.25: Comportamento da ordem aparente para diversas variáveis de interesse (tubeira parabólica, modelo químico 31, função de interpolação UDS).

As Tabelas 5.29 e 5.30, mostradas na seqüência, apresentam os resultados numéricos obtidos para os diferentes modelos físicos estudados, empregando-se uma malha de 80x24 volumes. Nota-se que a incerteza numérica, empregando-se funções de interpolação CDS, apresenta ordem de grandeza similar à incerteza experimental, sendo recomendável sua utilização para projetos em geral, cujo foco não seja o estudo de erros numéricos e/ou a verificação/validação de novos modelos matemáticos.

Comparando-se os resultados numéricos para os modelos químicos de 6 e de 8 espécies (modelos 4 e 10, respectivamente), para as malhas estudadas, observa-se que são

equivalentes (inclusive com a mesma incerteza numérica para a maioria dos casos). Este resultado já fora notado no caso do escoamento unidimensional, sendo novamente visto no caso do escoamento bidimensional. Desta forma, recomenda-se a utilização de modelos químicos de 6 espécies, por sua menor complexidade e menor tempo de CPU necessário, em especial para o modelo de escoamento em equilíbrio químico local.

Tabela 5.29: Quadro comparativo de modelos adotados para o escoamento 2D - variáveis de interesse globais, incluindo incerteza numérica (malha de 80x24 volumes) – tubeira parabólica.

Modelo	C_d [adim.]	F [N]	I_{sp} [s]	I_s [N·s/kg]
UDS – 2D				
Monoespécie, prop. constantes	$1,02 \pm 7 \times 10^{-2}$	$1,64 \times 10^4 \pm 4 \times 10^2$	$3,4 \times 10^2 \pm 2 \times 10^1$	$3,3 \times 10^3 \pm 2 \times 10^2$
Monoespécie, prop. variáveis	$1,02 \pm 7 \times 10^{-2}$	$1,64 \times 10^4 \pm 4 \times 10^2$	$3,4 \times 10^2 \pm 2 \times 10^1$	$3,3 \times 10^3 \pm 2 \times 10^2$
Esc. congelado – mod. 4	$1,02 \pm 7 \times 10^{-2}$	$1,63 \times 10^4 \pm 4 \times 10^2$	$3,3 \times 10^2 \pm 2 \times 10^1$	$3,2 \times 10^3 \pm 2 \times 10^2$
Esc. congelado – mod. 10	$1,02 \pm 7 \times 10^{-2}$	$1,63 \times 10^4 \pm 4 \times 10^2$	$3,3 \times 10^2 \pm 2 \times 10^1$	$3,2 \times 10^3 \pm 2 \times 10^2$
Esc. em equilíbrio – mod. 4	$1,00 \pm 7 \times 10^{-2}$	$1,67 \times 10^4 \pm 3 \times 10^2$	$3,5 \times 10^2 \pm 2 \times 10^1$	$3,4 \times 10^3 \pm 2 \times 10^2$
Esc. em equilíbrio – mod. 10	$1,00 \pm 7 \times 10^{-2}$	$1,67 \times 10^4 \pm 3 \times 10^2$	$3,5 \times 10^2 \pm 2 \times 10^1$	$3,4 \times 10^3 \pm 2 \times 10^2$
Esc. em desequilíbrio – mod. 31	$1,08 \pm 7 \times 10^{-2}$	$1,66 \times 10^4 \pm 4 \times 10^2$	$3,2 \times 10^2 \pm 2 \times 10^1$	$3,1 \times 10^3 \pm 2 \times 10^2$
Esc. em desequilíbrio – mod. 32	$1,09 \pm 7 \times 10^{-2}$	$1,66 \times 10^4 \pm 4 \times 10^2$	$3,2 \times 10^2 \pm 2 \times 10^1$	$3,1 \times 10^3 \pm 2 \times 10^2$
CDS com correção adiada – 2D				
Monoespécie, prop. constantes	$0,99991 \pm 4 \times 10^{-5}$	$1,625 \times 10^4 \pm 1 \times 10^1$	$3,418 \times 10^2 \pm 1 \times 10^{-1}$	$3,352 \times 10^3 \pm 1$
Monoespécie, prop. variáveis	$0,9917 \pm 3 \times 10^{-4}$	$1,633 \times 10^4 \pm 1 \times 10^1$	$3,462 \times 10^2 \pm 1 \times 10^{-1}$	$3,395 \times 10^3 \pm 1$
Escoamento congelado – mod. 4	$1,0010 \pm 2 \times 10^{-4}$	$1,619 \times 10^4 \pm 1 \times 10^1$	$3,400 \times 10^2 \pm 1 \times 10^{-1}$	$3,334 \times 10^3 \pm 1$
Escoamento congelado – mod. 10	$1,0010 \pm 2 \times 10^{-4}$	$1,619 \times 10^4 \pm 1 \times 10^1$	$3,400 \times 10^2 \pm 1 \times 10^{-1}$	$3,334 \times 10^3 \pm 1$
Esc. em equilíbrio – mod. 4	$0,979 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1,663 \times 10^4 \pm 4 \times 10^1$	$3,5709 \times 10^2 \pm 9 \times 10^{-2}$	$3,5018 \times 10^3 \pm 9 \times 10^{-1}$
Esc. em equilíbrio – mod. 10	$0,979 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1,663 \times 10^4 \pm 4 \times 10^1$	$3,571 \times 10^2 \pm 3 \times 10^{-1} **$	$3,502 \times 10^3 \pm 3 **$
Solução analítica 2D de Kliegel e Levine (1969)	0,999877	---	---	
CDS com correção adiada – 1D (malha de 80 volumes)				
Monoespécie, prop. constantes	$0,99997 \pm 8 \times 10^{-5}$	$1,5402 \times 10^4 \pm 8$	$3,239 \times 10^2 \pm 2 \times 10^{-1}$	$3,176 \times 10^3 \pm 2$
Monoespécie, prop. variáveis	$0,9918 \pm 1 \times 10^{-4}$	$1,5429 \times 10^4 \pm 8$	$3,271 \times 10^2 \pm 2 \times 10^{-1}$	$3,208 \times 10^3 \pm 2$
Escoamento congelado – mod. 4	$1,00105 \pm 7 \times 10^{-5}$	$1,5401 \times 10^4 \pm 8$	$3,238 \times 10^2 \pm 2 \times 10^{-1}$	$3,175 \times 10^3 \pm 2$
Escoamento congelado – mod. 10	$1,00106 \pm 7 \times 10^{-5}$	$1,5401 \times 10^4 \pm 8$	$3,235 \times 10^2 \pm 2 \times 10^{-1}$	$3,172 \times 10^3 \pm 2$
Esc. em equilíbrio – mod. 4	$0,979 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1,548 \times 10^4 \pm 3 \times 10^1$	$3,325 \times 10^2 \pm 1 \times 10^{-1} **$	$3,261 \times 10^3 \pm 1 **$
Esc. em equilíbrio – mod. 10	$0,979 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1,548 \times 10^4 \pm 3 \times 10^1$	$3,325 \times 10^2 \pm 1 \times 10^{-1} **$	$3,261 \times 10^3 \pm 1 **$

** Incerteza numérica obtida utilizando-se a ordem assintótica.

Tabela 5.30: Quadro comparativo de modelos adotados para o escoamento 2D - variáveis de interesse locais (saída da tubeira, sobre a linha de simetria da mesma), incluindo incerteza numérica (malha de 80x24 volumes) – tubeira parabólica.

Modelo	P_{ex} [Pa]	T_{ex} [K]	u_{ex} [m/s]	$Y(H_2O)_{ex}$ [adim.]
UDS – 2D				
Monoespécie, prop. constantes	$7,3 \times 10^4 \pm 4 \times 10^3$ **	$2,01 \times 10^3 \pm 7 \times 10^1$ **	$3,0 \times 10^3 \pm 3 \times 10^2$	---
Monoespécie, prop. variáveis	$7,5 \times 10^4 \pm 4 \times 10^3$ **	$2,11 \times 10^3 \pm 6 \times 10^1$ **	$3,0 \times 10^3 \pm 3 \times 10^2$	---
Esc. congelado – mod. 4	$7,1 \times 10^4 \pm 5 \times 10^3$ **	$1,94 \times 10^3 \pm 8 \times 10^1$ **	$3,0 \times 10^3 \pm 5 \times 10^2$	0,783686
Esc. congelado – mod. 10	$7,1 \times 10^4 \pm 5 \times 10^3$ **	$1,94 \times 10^3 \pm 8 \times 10^1$ **	$3,0 \times 10^3 \pm 5 \times 10^2$	0,783539
Esc. em equilíbrio – mod. 4	$8,4 \times 10^4 \pm 4 \times 10^3$ **	$2,65 \times 10^3 \pm 3 \times 10^1$ **	$3,1 \times 10^3 \pm 5 \times 10^2$	$0,901 \pm 6 \times 10^{-3}$ **
Esc. em equilíbrio – mod. 10	$8,4 \times 10^4 \pm 1 \times 10^3$ **	$2,65 \times 10^3 \pm 4 \times 10^1$ **	$3,1 \times 10^3 \pm 1 \times 10^2$ **	$0,901 \pm 6 \times 10^{-3}$ **
Esc. em desequilíbrio – mod. 31	$7,8 \times 10^4 \pm 3 \times 10^3$ **	$2,08 \times 10^3 \pm 6 \times 10^1$ **	$2,9 \times 10^3 \pm 3 \times 10^2$	$0,861 \pm 2 \times 10^{-3}$
Esc. em desequilíbrio – mod. 32	$7,9 \times 10^4 \pm 3 \times 10^3$ **	$2,09 \times 10^3 \pm 6 \times 10^1$ **	$2,8 \times 10^3 \pm 2 \times 10^2$	$0,879 \pm 3 \times 10^{-3}$
CDS com correção adiada – 2D				
Monoespécie, prop. constantes	$7,16 \times 10^4 \pm 1 \times 10^2$ **	$1,9835 \times 10^3 \pm 2 \times 10^{-1}$	$3,0424 \times 10^3 \pm 2 \times 10^{-1}$	---
Monoespécie, prop. variáveis	$7,37 \times 10^4 \pm 2 \times 10^2$ **	$2,08373 \times 10^3 \pm 5 \times 10^{-2}$	$3,06996 \times 10^3 \pm 2 \times 10^{-2}$ **	---
Esc. congelado – mod. 4	$6,92 \times 10^4 \pm 1 \times 10^2$ **	$1,9153 \times 10^3 \pm 2 \times 10^{-1}$	$3,0404 \times 10^3 \pm 3 \times 10^{-1}$	0,783686
Esc. congelado – mod. 10	$6,92 \times 10^4 \pm 1 \times 10^2$ **	$1,9153 \times 10^3 \pm 2 \times 10^{-1}$	$3,0404 \times 10^3 \pm 3 \times 10^{-1}$	0,783539
Esc. em equilíbrio – mod. 4	$8,4 \times 10^4 \pm 3 \times 10^3$	$2,634 \times 10^3 \pm 4$	$3,110 \times 10^3 \pm 8$ **	$0,904 \pm 5 \times 10^{-3}$
Esc. em equilíbrio – mod. 10	$8,4 \times 10^4 \pm 2 \times 10^3$	$2,634 \times 10^3 \pm 4$	$3,110 \times 10^3 \pm 8$ **	$0,904 \pm 5 \times 10^{-3}$
CDS com correção adiada – 1D (malha de 80 volumes)				
Monoespécie, prop. constantes	$4,752 \times 10^4 \pm 1 \times 10^1$ **	$1,855 \times 10^3 \pm 1$	$3,176 \times 10^3 \pm 2$	---
Monoespécie, prop. variáveis	$4,9120 \times 10^4 \pm 5$ **	$1,952 \times 10^3 \pm 1$	$3,208 \times 10^3 \pm 2$	---
Escoamento congelado – mod. 4	$4,540 \times 10^4 \pm 1 \times 10^1$ **	$1,770 \times 10^3 \pm 2$	$3,172 \times 10^3 \pm 2$	0,783686
Escoamento congelado – mod. 10	$4,540 \times 10^4 \pm 1 \times 10^1$ **	$1,771 \times 10^3 \pm 2$	$3,172 \times 10^3 \pm 2$	0,783539
Esc. em equilíbrio – mod. 4	$5,74 \times 10^4 \pm 1 \times 10^2$	$2,555 \times 10^3 \pm 6$	$3,260 \times 10^3 \pm 3$ **	$0,913 \pm 3 \times 10^{-3}$
Esc. em equilíbrio – mod. 10	$5,74 \times 10^4 \pm 1 \times 10^2$	$2,555 \times 10^3 \pm 6$	$3,260 \times 10^3 \pm 3$ **	$0,913 \pm 3 \times 10^{-3}$

** Incerteza numérica obtida utilizando-se a ordem assintótica.

Da comparação entre os resultados apresentados nas Tabelas 5.29 e 5.30, observa-se que mesmo em malhas não muito refinadas, como a de 80x24 volumes, empregando-se funções de interpolação CDS, as diferenças encontradas entre as soluções numéricas são decorrentes dos modelos físicos adotados, uma vez que as incertezas numéricas são superiores a tais diferenças. Nota-se, também, que os efeitos dos diferentes modelos físicos é mais notável com relação a variáveis de interesse local, como a temperatura e a pressão na saída da tubeira. Para as variáveis globais, contudo, os efeitos do modelo físico adotado são menos pronunciados, atingindo no máximo 5,0% no caso do impulso específico (confrontando-se os modelos de escoamento congelado e em equilíbrio químico local). Com relação ao coeficiente de descarga, a diferença entre os modelos físicos atinge 2,2%, enquanto no caso do empuxo, essa variação é de 2,7%, comparando-se os modelos em equilíbrio químico local e congelado.

Deste modo, recomenda-se, ao menos para análises preliminares, a utilização do modelo monoespécie com propriedades constantes, em especial quando se deseja obter os valores de variáveis globais (como coeficiente de descarga e empuxo), uma vez que este é o modelo menos complexo e as diferenças entre os resultados numéricos obtidos é pequena.

5.7 RESUMO DO CAPÍTULO 5

Neste capítulo foram apresentadas as soluções numéricas, bem como suas respectivas incertezas associadas, referentes a simulações empregando-se o código computacional Mach2D, versão 6.0. Nas seções 5.1 e 5.2 foram apresentadas as soluções numéricas para o caso de escoamento monoespécie com propriedades constantes e variáveis, respectivamente. Para ambos os modelos, duas geometrias diferentes de tubeira foram analisadas: a primeira, referente ao trabalho de Back *et al.* (1965) e a segunda, com perfil parabólico. Para a tubeira de Back *et al.* (1965) foram efetuadas simulações de escoamento de ar (considerado gás monoespécie perfeito), comparando-se os resultados numéricos aos experimentais, apresentando boa concordância.

No caso do escoamento monoespécie com propriedades constantes, pôde-se calcular o erro numérico verdadeiro para o coeficiente de descarga, comparando-se os resultados numéricos obtidos à solução analítica apresentada por Kliegel e Levine (1969). A partir dos resultados obtidos, observou-se que as ordens efetivas e aparente tendiam à ordem assintótica, pelo menos para funções de interpolação de primeira ordem (UDS). No caso em que foram empregadas funções de interpolação de segunda ordem (CDS), não se observou uma tendência clara, sendo necessárias simulações em malhas mais refinadas, de modo análogo ao visto nas simulações unidimensionais.

As seções 5.4 a 5.6 foram dedicadas aos escoamentos reativos multiespécies (congelado, em equilíbrio químico local e em desequilíbrio químico, respectivamente). De um modo geral, observou-se a tendência da ordem aparente em se aproximar da assintótica quando empregadas funções de interpolação de primeira ordem (UDS), enquanto ao ser utilizado o esquema de interpolação CDS, tal tendência foi observada apenas para algumas das variáveis de interesse estudadas. A partir da análise de erros e da tendência da ordem aparente para as funções de interpolação UDS, pode-se afirmar, no entanto, que o código Mach2D resolve corretamente o modelo matemático.

Nos modelos de escoamento reativo, ao serem comparados os resultados numéricos obtidos empregando-se os modelos de 6 e de 8 espécies, notou-se que a influência do modelo químico é praticamente nula. O tempo de CPU, contudo, é bastante influenciado pelo modelo adotado, em especial para o escoamento em equilíbrio químico local. Deste modo, recomenda-se a utilização de modelos químicos de 6 espécies, uma vez que apresentam menor complexidade e menor tempo de CPU, apresentando resultados equivalentes aos modelos de 8 espécies. Ao se comparar os resultados numéricos bidimensionais àqueles obtidos com o código Mach1D, observou-se variações de até 7,4% (para o empuxo e o impulso específico, no vácuo, para o modelo de escoamento em equilíbrio químico local). Tais variações, por apresentarem ordem de grandeza superior à incerteza numérica das soluções, podem ser atribuídas, desta forma, aos efeitos bidimensionais do escoamento.

Com relação à malha empregada, notou-se que a incerteza numérica para a malha de 80x24 volumes é equivalente à incerteza experimental. Deste modo, recomenda-se a utilização de tal malha para aplicações gerais (excetuando-se trabalhos cujo foco seja a análise de erros numéricos e/ou a implementação de novos modelos matemáticos). Por fim, ressalta-se, novamente, que poucos são os trabalhos que abordam análise de erros a problemas do tipo hiperbólico (ZHANG, 2001), em especial para casos de escoamento reativo uni e bidimensional, como feito neste trabalho.

6 CONCLUSÃO

Este capítulo apresenta um resumo das principais conclusões e contribuições deste trabalho. São citadas, outrossim, sugestões de temas para trabalhos futuros, a fim de complementar os estudos aqui realizados.

6.1 CONSTATAÇÕES GERAIS

Neste trabalho foram apresentadas soluções numéricas, bem como suas respectivas estimativas de erro, para escoamentos uni e bidimensionais reativos (ou não) em motores-foguete. Para os casos cuja solução analítica é conhecida, como o escoamento unidimensional monoespécie com propriedades constantes, foi possível o cálculo das ordens aparente e efetiva, comparando-as com a ordem assintótica, bem como estimativas da incerteza numérica baseadas nos estimadores de Richardson e GCI (baseado na ordem aparente), confrontando-as ao erro numérico verdadeiro. Observou-se que, de um modo geral, o comportamento das ordens efetiva e aparente convergia à ordem assintótica, ao menos para malhas mais refinadas. Verificou-se, também, que a incerteza numérica, obtida através dos estimadores de Richardson, se mostraram acuradas ($\theta \approx 1$), embora nem sempre confiáveis ($\theta \geq 1$); no caso do estimador GCI, obteve-se praticamente sempre resultados confiáveis, quando o mesmo pôde ser empregado. Por este motivo, optou-se por utilizar tal estimador para as demais simulações.

Nos casos unidimensionais em que a solução analítica não era conhecida, foram obtidas apenas a ordem aparente e a estimativa de erro numérico baseada no estimador GCI. Constatou-se que, de um modo geral, para todos os modelos físicos (à exceção do modelo de desequilíbrio químico ou taxa finita de reação) a ordem aparente tendia à assintótica, conforme esperado. Isto permite afirmar que o código numérico empregado resolve corretamente o modelo matemático, uma vez que este se constitui no critério mais dificilmente atendido na verificação numérica (ROY, 2005). No caso do escoamento unidimensional em desequilíbrio químico, mesmo não havendo uma clara tendência da ordem aparente à assintótica, observou-se que a ordem de grandeza dos erros numéricos estimados

era compatível aos obtidos para os demais modelos físicos estudados, tendo-se assim indícios de que também para este caso o código implementado resolve corretamente o modelo matemático.

Da comparação entre diferentes modelos químicos para os casos de escoamento congelado e em equilíbrio químico local, recomenda-se a utilização de modelos com seis espécies. Isto se deve ao fato de que tais modelos não desprezam espécies químicas cuja fração mássica no escoamento são importantes, como o oxigênio e o hidrogênio monoatômicos. Observa-se, outrossim, que a utilização de modelos químicos com oito espécies não resulta em soluções melhores, uma vez que a diferença entre os resultados dos modelos de seis e de oito espécies (quando existente) é inferior à incerteza numérica a eles relacionados.

Com relação à escolha entre diferentes modelos químicos que apresentam a mesma quantidade de espécies, deve-se dar preferência aos modelos com menor número de reações químicas, em especial no caso do escoamento em equilíbrio químico local. Isto pois, apesar de os resultados numéricos serem equivalentes, o tempo de CPU demandado pelos modelos com maior número de reações é bastante superior e o número total de algoritmos significativos é menor, em decorrência da maior quantidade de equações a serem solucionadas, o que implica em um aumento do número de iterações necessárias à convergência e, conseqüentemente, um aumento no erro de arredondamento cometido.

Resultados semelhantes foram obtidos quando foi estudado o escoamento bidimensional. Para as análises efetuadas, foi possível o cálculo do erro numérico verdadeiro e da ordem efetiva somente no caso de escoamento bidimensional com propriedades constantes e apenas para o coeficiente de descarga, cuja solução analítica foi apresentada por Kliegel e Levine (1969). Observou-se que, para todos os modelos físicos, ao menos para o esquema UDS, é possível afirmar que o código numérico implementado resolve corretamente o modelo matemático, uma vez que a ordem aparente obtida se aproxima da assintótica, à medida que a malha é refinada, sendo este o critério mais dificilmente atendido na verificação numérica (ROY, 2005).

Verificou-se que incertezas numéricas associadas às malhas de 80 volumes de controle, no caso unidimensional, e de 80x24 volumes de controle, no caso bidimensional, apresentam ordens de magnitude equivalentes àquelas obtidas em bancadas experimentais. Deste modo, é recomendável o emprego de tais malhas para aplicações gerais (cujo foco não seja a análise de erros numéricos e/ou a implementação de novos modelos matemáticos),

como forma de evitar a utilização de malhas mais refinadas que o necessário (e, conseqüentemente, maior tempo de processamento e maior esforço computacional).

Confrontando-se os resultados para uma mesma geometria (no caso, a geometria parabólica), observou-se que a variação entre os resultados numéricos para variáveis de interesse globais (empuxo e impulso específico, no vácuo) entre os modelos uni e bidimensionais chega a 7,4% (escoamento em equilíbrio químico local, modelo químico 4). Como tal variação é superior à incerteza numérica associada aos resultados, pode-se afirmar que ela é devida aos efeitos bidimensionais do escoamento. Para outra das variáveis globais de interesse (coeficiente de descarga), a variação entre os modelos uni e bidimensionais é bastante reduzida, chegando a ser nula (também no caso do escoamento em equilíbrio químico local).

Para todos os estudos realizados neste trabalho, foram implementados códigos computacionais em linguagem Fortran 95. Para tanto, foi empregado o método de volumes finitos, com malhas co-localizadas (MALISKA, 1995) e, no caso do código bidimensional, malhas não-ortogonais. Para o acoplamento pressão-velocidade foi empregado o método SIMPLEC (VAN DOORMAAL e RAITBY, 1984). Deve-se ressaltar, também, que foi empregada uma formulação válida para qualquer regime de velocidade (MARCHI e MALISKA, 1994), de modo que o campo de velocidades pôde ser obtido para todo o escoamento, desde a região subsônica até a supersônica (e não apenas na região supersônica, como é comum em trabalhos que se utilizam do método das características). Observa-se, ainda, que a equação da energia empregada é baseada na temperatura e não na entalpia, como é comumente encontrado em outros trabalhos.

Deve-se ressaltar, finalmente, que são poucos os trabalhos que aplicam a análise de erros numéricos a problemas do tipo hiperbólico, embora tais problemas sejam de grande importância em aplicações práticas (ZHANG *et al.*, 2001), em especial para modelos reativos, como feito neste trabalho.

6.2 CONTRIBUIÇÕES

As contribuições do presente trabalho podem ser resumidas nos seguintes pontos:

- São apresentadas soluções de referência associadas às suas respectivas incertezas numéricas para escoamentos uni e bidimensionais, reativos ou não, em motores-foguete,

empregando-se estimadores de erro de Richardson (baseados nas ordens assintótica e aparente) e GCI (baseado na ordem aparente).

- Para os modelos físicos em que o erro numérico verdadeiro foi calculado, mostrou-se que o estimador GCI é confiável ($\theta \geq 1$), podendo ser empregado como estimador de erros numéricos em simulações envolvendo problemas do tipo hiperbólico, como o escoamento supersônico em motores-foguete.
- Através da análise dos resultados obtidos, observou-se a conveniência em se utilizar, no caso de escoamento reativo, modelos químicos com seis espécies por dois motivos: (1) tais modelos levam em consideração espécies monoatômicas cujas frações mássicas são relevantes; (2) não houve vantagens ao se empregar modelos de oito espécies, pois as diferenças entre as soluções numéricas (quando existente) eram menores que as estimativas da incerteza numérica.
- Observou-se que não são necessárias malhas muito refinadas (malhas de 80 volumes no caso unidimensional e 80x24 volumes no caso bidimensional) para que a ordem de grandeza dos erros numéricos seja equivalente à incerteza experimental, sendo tais malhas recomendadas para utilização em aplicações gerais, cujo foco não seja a análise de erros numéricos e/ou a implementação de novos modelos matemáticos.
- Foram implementados códigos numéricos uni e bidimensionais baseados no método de volumes finitos, com arranjo co-localizado de variáveis, para obtenção da solução de escoamentos reativos (ou não) em motores-foguete. Em tais códigos, o campo de velocidades é obtido para todo o escoamento (e não somente para a região de escoamento supersônico, como ocorre quando empregado o método das características). Observa-se, também, que a equação da energia é baseada na temperatura e não na entalpia. No caso do código para escoamento bidimensional, foram empregadas malhas não-ortogonais, coincidentes com a geometria.
- Apresentaram-se resultados para escoamentos em desequilíbrio químico (taxa finita de reação), tema ainda pouco abordado em trabalhos envolvendo escoamentos reativos.

6.3 TRABALHOS FUTUROS

Com a finalidade de aprofundar os estudos realizados neste trabalho, são sugeridos os seguintes temas:

- Análise de erros para o escoamento viscoso bidimensional, empregando-se as equações de Navier-Stokes completas no modelo matemático. Serão obtidos, deste modo, resultados de referência empregando-se um modelo físico mais próximo à realidade, constituindo-se um primeiro passo para o emprego de modelos de turbulência.
- Estudo do processo completo de combustão na câmara, para conseqüente estudo do escoamento da mistura de gases ao longo da tubeira. Será possível, desta forma, analisar os efeitos do processo de combustão sobre os parâmetros de desempenho de um motor-foguete.
- Emprego de modelos de termoelasticidade. Para o projeto de uma tubeira, faz-se necessário o conhecimento das tensões térmicas sobre a estrutura da mesma, o que pode ser obtido ao se acoplar um modelo de termoelasticidade para a estrutura da tubeira ao modelo de escoamento reativo dos gases de combustão.
- Utilização de métodos de aceleração de convergência para sistemas de equações, como o emprego do método “*multigrid*”, com o intuito de reduzir o tempo de CPU demandado pelas simulações e possibilitar o emprego de malhas mais refinadas para o estudo de erros numéricos.

7 REFERÊNCIAS

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

ARRINGTON, L. A.; REED, B. D.; RIVERA Jr., A. A Performance Comparison of Two Small Rocket Nozzles. In: 32nd Joint Propulsion Conference. **Proceedings...** AIAA 1996-2582. Lake Buena Vista, 1996.

BARROS, J. E. M. **Escoamento Reativo em Desequilíbrio Químico em Bocais Convergente-Divergente**. Dissertação de mestrado. Instituto Tecnológico de Aeronáutica. São José dos Campos, SP, 1993.

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.

BEAMS, E. W. Nozzle Design Using Generalized One-Dimensional Flow. **Journal of Propulsion**, v. 8, n. 4, pp. 917 – 920, 1992.

BLOTTNER, F. G. Accurate Navier-Stokes Results for the Hyperbolic Flow over a Spherical Nosetip. **Journal of Spacecraft and Rockets**, v. 27, n. 2, pp. 113 – 122, 1990.

BOLDMAN, D. R.; SCHMIDT, J. F.; GALLAGHER, A. K. Laminarization of a Turbulent Boundary Layer as Observed from Heat-Transfer and Boundary-Layer Measurements in Conical Nozzles. **Nasa TN D-4788**, 1968.

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

BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. **Análise Numérica**. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2003.

CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. **Introduction to Computing for Engineers**. 2 ed. New York: McGraw-Hill, 1994.

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**. 4 ed. Rio de Janeiro: LTC Editora, 1998.

FRÖHLICH, A.; POPP, M.; SCHMIDT, G.; THELEMANN, D. Heat Transfer Characteristics of H₂/O₂ – Combustion Chambers. In: 29th Joint Propulsion Conference. **Proceedings...** AIAA: 1993-1826. Monterrey, 1993.

GLENN RESEARCH CENTER / NASA. **CEA – Chemical Equilibrium with Applications**. Disponível em: <http://www.grc.nasa.gov/WWW/CEA_Web/ceaHome.htm>. Acesso em: 16 fev 2005.

HABIBALLAH, M.; VINGERT, L.; VUILLERMOZ, 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.

Haidn, O. J.; HABIBALLAH, M. Research on High Pressure Cryogenic Combustion. **Aerospace Science and Technology**, v. 7, pp. 473 – 491, 2003.

HALL, I. M. Transonic Flow in Two-Dimensional and Axially-Symmetric Nozzles. **Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mechanics**, v. 15, pp. 487 – 508, 1962.

HUZEL, D. K.; HUANG, D. H. **Modern Engineering for Design of Liquid-Propellant Rocket Engines**. AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics, 1992.

INCROPERA, F. P.; DeWITT, D. P. **Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa**. 4 ed. Rio de Janeiro: LTC Editora, 1998.

KACYNSKI, K. J.; PAVLI, A. J.; SMITH, T. A. Experimental Evaluation of Heat Transfer on a 1030:1 Area Ratio Rocket Nozzle. **Nasa Technical Paper 2726**, 1987.

KEE, R. J.; GRCAR, 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.

KLIEGEL, J. R.; LEVINE, J. N. Transonic Flow in Small Throat Radius of Curvature Nozzles. **AIAA Journal**, v. 7, n. 7, pp. 1375 – 1378, 1969.

KUHL, D.; WOSCHNAK, A.; HAIDN, O. J. Coupled Heat Transfer and Stress Analysis of Rocket Combustion Chambers. In: 34th Joint Propulsion Conference & Exhibit. **Proceedings...** AIAA 1998-3373. Cleveland, 1998.

KUO, K. K. **Principles of Combustion**. New York: John Willey & Sons, 1986.

KUNDU, P. K. **Fluid Dynamics**. San Diego: Academic Press, 1990.

LAROCA, F. **Solução de Escoamentos Reativos em Bocais de Expansão Usando o Método dos Volumes Finitos**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Universidade Federal de Santa Catarina. Florianópolis, SC, 2000.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. Rio de Janeiro: LTD Editora, 1995.

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.

MARCHI, C. H.; LAROCA, F.; SILVA, A. F. C.; HINCKEL, J. N. Numerical Solutions 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.

MARTINS, M. A. **Estimativa de Erros de Iteração em Dinâmica dos Fluidos Computacional**. Dissertação (Mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia). Universidade Federal do Paraná. Curitiba, PR, 2002.

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

NASA. **Rocket**. Disponível em: <http://www.nasa.gov/worldbook/rocket_worldbook.html>. Acesso em: 16 abr 2007a.

NASA. **Drawing of a NERVA Engine**. Disponível em: <<http://grin.hq.nasa.gov/ABSTRACTS/GPN-2002-000144.html>>. Acesso em: 17 mai 2007b.

NASA. **Propulsion Systems**. Disponível em: <<http://aerospacescholars.jsc.nasa.gov/HAS/cirr/em/9/14.cfm>>. Acesso em: 17 mai 2007c.

PAVLI, A. J.; KACYNSKI, K. J.; SMITH, T. A. Experimental Thrust Performance of a High-Area-Ratio Rocket Nozzle. **Nasa Technical Paper 2720**, 1987.

RAO, G. V. R. Exhaust Nozzle Contour for Optimum Thrust. **Jet Propulsion**, v. 28, pp. 377 – 382, 1958.

RAO, G. V. R. Recent Developments in Rocket Nozzle Configurations. **ARS Journal**, v. 31, n. 11, pp. 1488 – 1494, 1961.

RICHARDSON, L. F.; GAUNT, J. A. The Deferred Approach to the Limit. **Phylosophical Proceedings of the Royal Society of London – Serial A**, v. 226, pp. 299 – 361, 1927.

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

ROACHE, P. J. **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.

SCHLEY, C. A.; HAGEMANN, G.; KRÜLLE, G. Towards and Optimal Concept for Numeric Codes Simulating Thrust Chamber Processes in High Pressure Chemical Propulsion Systems. **Acta Astronautica**, v. 38, pp. 427 – 436, 1996.

SCHNEIDER, G. E.; Zedan, M. A Modified Strongly Implicit Procedure for the Numerical Solution of Field Problems. **Numerical Heat Transfer**, v. 4, pp. 1-19, 1981.

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/m² (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: NASA Lewis Research Center, 1964.

SZABÓ, B.; BABUSKA, I. **Finite Element Analysis**. New York: Wiley & Sons. Inc., 1991.

TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. **Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer**. 2 ed. Philadelphia: Taylor & Francis, 1997.

VAN DOORMAAL, J. P.; RAITHBY, G. D. Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Fluid Flow. **Numerical Heat Transfer**, v. 7. pp. 147 – 163, 1984.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics – The Finite Volume Method**. Essex: Prentice Hall, 1995.

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.; TRÉPANIÉ, J.-Y.; CAMARERO, R. Numerical Assessment of Error Estimators for Euler Equations. **AIAA Journal**, v. 39, n. 9, pp. 1706 – 1715, 2001.

ZHU, J. Z.; ZIENKIEWICZ, O. C. Superconvergence Recovery Technique and *a Posteriori* Error Estimates. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 30, pp. 1321 – 1339, 1990.

ZUCROW, M. J.; HOFFMAN, J. D. **Gas Dynamics, vol. 2: Multidimensional Flow**. New York: John Wiley & Sons, 1977.

ANEXO A. Coeficientes (a_{ki}) usados para determinação de propriedades termoquímicas das espécies químicas (c_{pi} , h_i e g_i).

Para temperatura menor do que 1000 K

espécie	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7
H2O	4.19864056E+00	-2.03643410E-03	6.52040211E-06	-5.48797062E-09	1.77197817E-12	-3.02937267E+04	-8.49032208E-01
O2	3.78245636E+00	-2.99673415E-03	9.84730200E-06	-9.68129508E-09	3.24372836E-12	-1.06394356E+03	3.65767573E+00
H2	2.34433112E+00	7.98052075E-03	-1.94781510E-05	2.01572094E-08	-7.37611761E-12	-9.17935173E+02	6.83010238E-01
OH	3.99201543E+00	-2.40131752E-03	4.61793841E-06	-3.88113333E-09	1.36411470E-12	3.61508056E+03	-1.03925458E-01
O	3.16826710E+00	-3.27931884E-03	6.64306396E-06	-6.12806624E-09	2.11265971E-12	2.91222592E+04	2.05193346E+00
H	2.50000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	2.54736599E+04	-4.46682853E-01
HO2	4.30179801E+00	-4.74912051E-03	2.11582891E-05	-2.42763894E-08	9.29225124E-12	2.94808040E+02	3.71666245E+00
H2O2	4.27611269E+00	-5.42822417E-04	1.67335701E-05	-2.15770813E-08	8.62454363E-12	-1.77542989E+04	3.43505074E+00

Para temperatura maior ou igual a 1000 K

espécie	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7
H2O	2.67703787E+00	2.97318329E-03	-7.73769690E-07	9.44336689E-11	-4.26900959E-15	-2.98858938E+04	6.88255571E+00
O2	3.66096083E+00	6.56365523E-04	-1.41149485E-07	2.05797658E-11	-1.29913248E-15	-1.21597725E+03	3.41536184E+00
H2	2.93286579E+00	8.26607967E-04	-1.46402335E-07	1.54100359E-11	-6.88804432E-16	-8.13065597E+02	-1.02432887E+00
OH	2.83864607E+00	1.10725586E-03	-2.93914978E-07	4.20524247E-11	-2.42169092E-15	3.94395852E+03	5.84452662E+00
O	2.54363697E+00	-2.73162486E-05	-4.19029520E-09	4.95481845E-12	-4.79553694E-16	2.92260120E+04	4.92229457E+00
H	2.50000286E+00	-5.65334214E-09	3.63251723E-12	-9.19949720E-16	7.95260746E-20	2.54736589E+04	-4.46698494E-01
HO2	4.17228728E+00	1.88117647E-03	-3.46277408E-07	1.94657853E-11	1.76254294E-16	6.18102964E+01	2.95767746E+00
H2O2	4.57333537E+00	4.04984070E-03	-1.29479479E-06	1.97281710E-10	-1.13402846E-14	-1.80548121E+04	7.04278488E-01

Fonte: McBride *et al.* (1993).

APÊNDICE A. Coeficientes do modelo unidimensional.

ESCOAMENTO MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES CONSTANTES

Equação da conservação da quantidade de movimento linear

Ao se discretizar a equação da conservação da quantidade de movimento linear, utilizando-se o esquema CDS com correção adiada, obtém-se a seguinte forma linearizada,

$$a_E^u u_E + a_P^u u_P + a_W^u u_W = b_P^u, \quad (\text{A.1})$$

cujos coeficientes e termo-fonte são calculadas através das seguintes expressões:

$$a_E^u = 0, \quad (\text{A.2})$$

$$a_W^u = -\rho_w u_w S_w, \quad (\text{A.3})$$

$$a_P^u = \rho_P^0 S_P \frac{\Delta x}{\Delta t} - (a_W^u + a_E^u), \quad (\text{A.4})$$

$$b_P^u = b_P^{u,UDS} + b_P^{u,\beta}, \quad (\text{A.5})$$

sendo Δx , $b_P^{u,UDS}$ e $b_P^{u,\beta}$ obtidas, respectivamente, através de:

$$\Delta x = x_e - x_w, \quad (\text{A.6})$$

$$b_P^{u,UDS} = \rho_P^0 S_P \frac{\Delta x}{\Delta t} u_P^0 + \frac{S_P}{2} (P_W - P_E), \quad (\text{A.7})$$

$$b_P^{u,\beta} = \frac{\beta}{2} [\rho_w u_w S_w (u_P - u_W) - \rho_e u_e S_e (u_E - u_P)]. \quad (\text{A.8})$$

Coefficientes e termos-fontes nos contornos:

- Para a entrada do domínio ($k = 1$):

$$a_E^u = -1, \quad (\text{A.9})$$

$$a_W^u = 0, \quad (\text{A.10})$$

$$a_P^u = 1, \quad (\text{A.11})$$

$$b_P^u = -\left(\frac{2x_{P,2}}{x_{P,3} - x_{P,2}}\right)(u_{P,3} - u_{P,2}), \quad (\text{A.12})$$

em que x_P é a posição do nó do volume de controle e os índices 2 e 3 indicam, respectivamente, o segundo e o terceiro volume do domínio (primeiro e segundo volumes reais).

- Para a saída do domínio ($k = Nvol$):

$$a_E^u = 0, \quad (\text{A.13})$$

$$a_W^u = -1, \quad (\text{A.14})$$

$$a_P^u = 1, \quad (\text{A.15})$$

$$b_P^u = \left[\frac{2(x_{P,Nvol} - x_{P,Nvol-1})}{x_{P,Nvol-1} - x_{P,Nvol-2}}\right](u_{P,Nvol-1} - u_{P,Nvol-2}), \quad (\text{A.16})$$

em que x_P é a posição do nó do volume de controle e os índices $Nvol-1$ e $Nvol-2$ indicam, respectivamente, o penúltimo e o antepenúltimo volume do domínio (último e penúltimo volumes reais do domínio).

Cálculo das velocidades nas faces

Por se trabalhar com o esquema de malhas co-localizadas, faz-se necessária a estimativa da velocidade nas faces de cada um dos volumes de controle reais. A velocidade na face leste do volume de controle (u_e) pode ser avaliada através da seguinte expressão (com u_w sendo calculado similarmente):

$$u_e = \frac{\left[-\Sigma_P - \Sigma_E + b_{C,P} + b_{C,E} + \frac{(m_P + m_E)u_e^0}{\Delta t} - 2S_e(P_E - P_P) \right]}{(a_{P,P} + a_{P,E})}, \quad (\text{A.17})$$

sendo:

$$\Sigma_P = (a_E^u)_P u_E + (a_W^u)_P u_W, \quad (\text{A.18})$$

$$\Sigma_E = (a_E^u)_E u_{EE} + (a_W^u)_E u_P, \quad (\text{A.19})$$

$$b_{C,P} = \frac{\beta}{2} [(\rho_w S_w u_w)_P (u_P - u_W) - (\rho_e S_e u_e)_P (u_E - u_P)], \quad (\text{A.20})$$

$$b_{C,E} = \frac{\beta}{2} [(\rho_w S_w u_w)_E (u_E - u_P) - (\rho_e S_e u_e)_E (u_{EE} - u_E)], \quad (\text{A.21})$$

$$m_P = \rho_P^0 S_P \Delta x_P, \quad (\text{A.22})$$

$$m_E = \rho_E^0 S_E \Delta x_E. \quad (\text{A.23})$$

Velocidade u_e para as faces de entrada ($k = 1$) e de saída ($k = Nvol-1$):

- Para a face de entrada ($k = 1$):

$$u_e = \frac{(u_{P,1} + u_{P,2})}{2}. \quad (\text{A.24})$$

- Para a face de saída ($k = Nvol-1$):

$$u_e = \frac{(u_{P,Nvol-1} + u_{P,Nvol})}{2}. \quad (A.25)$$

Equação da energia térmica

A discretização da equação da energia é bastante similar à da equação da conservação de quantidade de movimento linear, obtendo-se por resultado uma equação linearizada na forma:

$$a_E^T T_E + a_P^T T_P + a_W^T T_P = b_P^T. \quad (A.26)$$

cujos coeficientes e termo-fonte são avaliados através das seguintes expressões:

$$a_E^T = 0, \quad (A.27)$$

$$a_W^T = -(c_P)_P \rho_w u_w S_w, \quad (A.28)$$

$$a_P^T = (c_P)_P S_P \rho_P \frac{\Delta x}{\Delta t} - (a_W^T + a_E^T), \quad (A.29)$$

$$b_P^T = b_P^{T,UDS} + b_P^{T,\beta}, \quad (A.30)$$

sendo $b_P^{T,UDS}$ e $b_P^{T,\beta}$ dados através das seguintes relações:

$$b_P^{T,UDS} = (c_P)_P S_P \rho_P^0 T_P \frac{\Delta x}{\Delta t} + S_P (P_P - P_P^0) \frac{\Delta x}{\Delta t} + \frac{1}{2} S_P u_P (P_E - P_W), \quad (A.31)$$

$$b_P^{T,\beta} = \frac{\beta}{2} (c_P)_P [\rho_w u_w S_w (T_P - T_W) - \rho_e u_e S_e (T_E - T_P)]. \quad (A.32)$$

Coeficientes e termos-fontes nos contornos:

- Para o primeiro volume ($k = 1$):

$$a_E^T = 1, \quad (\text{A.33})$$

$$a_W^T = 0, \quad (\text{A.34})$$

$$a_P^T = 1, \quad (\text{A.35})$$

$$b_P^T = 2 T_{in}. \quad (\text{A.36})$$

- Para o último volume ($k = Nvol$):

$$a_E^T = 0, \quad (\text{A.37})$$

$$a_W^T = -1, \quad (\text{A.38})$$

$$a_P^T = 1, \quad (\text{A.39})$$

$$b_P^T = \left[\frac{2(x_{P,Nvol} - x_{P,Nvol-1})}{(x_{P,Nvol-1} - x_{P,Nvol-2})} \right] (T_{P,Nvol-1} - T_{P,Nvol-2}), \quad (\text{A.40})$$

em que x_P é a posição do nó do volume de controle e os índices $Nvol-1$ e $Nvol-2$ indicam, respectivamente, o penúltimo e o antepenúltimo volume do domínio (último e penúltimo volumes reais do domínio).

Equação da massa global

A discretização da equação da conservação da massa é bastante similar à da equação da conservação de quantidade de movimento linear e à da energia, obtendo-se como resultado uma equação linearizada na forma:

$$a_E^P P'_E + a_P^P P'_P + a_W^P P'_P = b_P^P. \quad (\text{A.41})$$

cujos coeficientes e termo-fonte são determinados através das seguintes relações:

$$a_E^P = -\rho_e S_e d_e, \quad (\text{A.42})$$

$$a_W^P = -u_w S_w \frac{1}{R T_W} - \rho_w S_w d_w, \quad (\text{A.43})$$

$$a_P^P = S_P \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{1}{R T_P} + u_e S_e \frac{1}{R T_P} + \rho_e S_e d_e + \rho_w S_w d_w, \quad (\text{A.44})$$

$$b_P = b_P^{P,UDS} + b_P^{P,\beta}, \quad (\text{A.45})$$

sendo $b_P^{P,UDS}$ e $b_P^{P,\beta}$ obtidas através das seguintes expressões:

$$b_P^{P,UDS} = - \left[S_P \frac{\Delta x}{\Delta t} \rho_P - S_P \frac{\Delta x}{\Delta t} \rho_P^0 + \rho_P S_e u_e - \rho_W S_w u_w \right], \quad (\text{A.46})$$

e

$$b_P^{P,\beta} = -\frac{\beta}{2} [S_e u_e (\rho_E - \rho_P) - S_w u_w (\rho_P - \rho_W)]. \quad (\text{A.47})$$

Nota-se, nos coeficientes da equação discretizada, a presença dos termos d_e e d_w , decorrentes do acoplamento pressão-velocidade. Para tal acoplamento, foi utilizado o método SIMPLEC, sendo os termos d_e e d_w determinados posteriormente.

Coeficientes e termos-fontes para os volumes fictícios:

- Primeiro volume ($k = 1$):

$$a_E^P = 1, \quad (\text{A.48})$$

$$a_W^P = 0, \quad (\text{A.49})$$

$$a_p^P = 1, \quad (\text{A.50})$$

$$b_p = 2 P'_{in}. \quad (\text{A.51})$$

- Último volume ($k = Nvol$):

$$a_E^P = 0, \quad (\text{A.52})$$

$$a_W^P = -1, \quad (\text{A.53})$$

$$a_p^P = 1, \quad (\text{A.54})$$

$$b_p = \left[\frac{2(x_{P,Nvol} - x_{P,Nvol-1})}{(x_{P,Nvol-1} - x_{P,Nvol-2})} \right] (P'_{P,Nvol-1} - P'_{P,Nvol-2}), \quad (\text{A.55})$$

em que x_p é a posição do nó do volume de controle e os índices $Nvol-1$ e $Nvol-2$ indicam, respectivamente, o penúltimo e o antepenúltimo volume do domínio (último e penúltimo volumes reais do domínio).

Cálculo da massa específica nodal e nas faces

A obtenção da massa específica nodal é feita utilizando-se a equação de estado dos gases perfeitos. Neste caso, a massa específica é calculada através da seguinte expressão, para todos os volumes de controle (inclusive os fictícios):

$$\rho_p = \frac{P_p}{R T_p}. \quad (\text{A.56})$$

No caso da estimativa da massa específica nas faces (de todos os volumes, exceto para o último fictício), é feita uma ponderação, com base no fator β :

$$\rho_e = \rho_P + \frac{\beta}{2}(\rho_E - \rho_P), \quad (\text{A.57})$$

tendo-se β variando entre 0 (esquema UDS) e 1 (esquema CDS com correção adiada).

Equações de correção com P'

O acoplamento pressão-velocidade empregado na discretização da equação da conservação da massa permite que a mesma seja transformada em uma equação envolvendo a determinação de pressões (ou de correções de pressão, uma vez que se utilizou o método SIMPLEC neste trabalho). Deste acoplamento, surgem alguns fatores, como d_e e d_w . Define-se, assim, d_e através da seguinte relação (a equação para d_w não será apresentada, por ser análoga à de d_e):

$$d_e = \frac{1}{2}(d_P + d_E), \quad (\text{A.58})$$

sendo d_P calculado por (a relação para d_E é análoga):

$$d_P = \frac{S_P}{a_W^u + a_P^u + a_E^u}. \quad (\text{A.59})$$

O acoplamento pressão-velocidade, obtido através do método SIMPLEC, é feito admitindo-se que a velocidade nodal u_P possa ser avaliada a partir da velocidade já calculada (u_P^{ant}) e de uma correção de pressão, através da seguinte relação:

$$u_P = u_P^{ant} - d_P \frac{(P'_E - P'_W)}{2}, \quad (\text{A.60})$$

em que P'_E e P'_W indicam variações de pressão.

Por analogia, a velocidade nas faces é corrigida através da seguinte expressão:

$$u_e = u_e^{ant} - d_e(P'_E - P'_P). \quad (\text{A.61})$$

Tem-se, deste modo, que a partir da equação da massa é obtida uma equação para correção da pressão ao longo de todo o escoamento. Tal correção é feita sobre a estimativa anterior da pressão (P^{ant}), através da seguinte expressão:

$$P = P^{ant} + P' . \quad (\text{A.62})$$

Como é feita a correção da pressão, há também a necessidade da correção da massa específica, o que é feito através da seguinte expressão:

$$\rho = \rho^{ant} + \frac{P'}{RT} , \quad (\text{A.63})$$

onde ρ^{ant} é a estimativa anterior da massa específica.

ESCOAMENTO MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES VARIÁVEIS

Equação da quantidade de movimento linear

Uma única observação a ser realizada na discretização se deve ao fato de que o fator de atrito de Darcy (f), presente nas equações discretizadas, não é mais constante em todo o domínio, tendo sua magnitude variável ao longo da tubeira. Deste modo, o valor de f deve ser estimado para cada volume de controle.

Cálculo da velocidade nas faces

As equações para o cálculo da velocidade nas faces dos volumes de controle são idênticas em se tratando de monoespécie com propriedades constantes ou variáveis.

Equação da energia térmica

Na discretização da equação da energia, deve-se atentar que o calor específico a pressão constante (c_p), o coeficiente de transferência de calor por convecção entre os gases de combustão e as paredes da tubeira (h_g), o fator de recuperação (rec), a temperatura na parede da tubeira (T_{wall}), a razão entre calores específicos (γ) e o fator de atrito de Darcy (f) são variáveis ao longo do domínio. Sendo assim, para cada uma das propriedades anteriormente citadas, seu valor numérico deve ser estimado para cada volume de controle.

Equação da massa global

O sistema de equações proveniente da discretização da equação da massa é idêntico em se tratando de monoespécie com propriedades constantes ou variáveis.

Cálculo da massa específica nodal e nas faces

Como no caso da discretização da equação da massa global, não existem diferenças no procedimento de cálculo da massa específica nodal e nas faces para monoespécie com propriedades constantes ou variáveis.

Equações de correção com P'

Novamente, nenhuma alteração é requerida nas equações para propriedades variáveis quando comparadas às apresentadas para propriedades constantes.

ESCOAMENTO CONGELADO

Como nos modelos físico e matemático, a única diferença apreciável neste modelo numérico recai no fato de ser considerada uma mistura de gases e não somente uma monoespécie. Desta forma, toda a formulação do modelo numérico apresentada para o escoamento monoespécie com propriedades variáveis é válida para o escoamento congelado, não sendo, portanto, aqui repetido.

ESCOAMENTO EM EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL

A única diferença apreciável entre o modelo físico de escoamento em equilíbrio químico local e o modelo monoespécie com propriedades variáveis é em relação ao termo-fonte da equação da energia térmica, cuja forma discretizada e linearizada é:

$$b_p^T = b_p^{T,UDS} + b_p^{T,\beta} + L[S_{eq}]_p. \quad (\text{A.64})$$

Para a discretização do termo $L[S_{eq}]_p$ é utilizado um esquema de interpolação de primeira ordem (UDS) para as frações parciais (Y_i) e a integração numérica do tipo retângulo para a entalpia de cada espécie (h_i), no interior do volume de controle; obtém-se, assim, a seguinte expressão:

$$L[S_{eq}]_p = -\rho_w u_w S_w \sum_{i=1}^N (h_i)_P [(Y_i)_P - (Y_i)_W]. \quad (\text{A.65})$$

Os demais coeficientes da equação da energia térmica discretizada (bem como os coeficientes e termos-fonte das demais equações) permanecem equivalentes aos modelos apresentados anteriormente.

ESCOAMENTO EM DESEQUILÍBRIO QUÍMICO

Equação da energia térmica

O termo-fonte da equação da energia térmica discretizada e linearizada é dado por:

$$b_p^T = b_p^{T,UDS} + b_p^{T,\beta} + L[S_{tf}]_p. \quad (\text{A.66})$$

Para a discretização do termo $L[S_{tf}]_p$ é utilizada a integração numérica do tipo retângulo para cada espécie i , tanto para a entalpia como para a taxa de geração de massa, no interior do volume de controle; obtém-se, assim, a seguinte expressão:

$$L[S_{if}]_P = -S_P \cdot \Delta x_P \sum_{i=1}^N [(h_i)_P (\dot{w}_i)_P]. \quad (\text{A.67})$$

Os demais coeficientes da equação da energia térmica discretizada (bem como os coeficientes e termos-fonte das equações da conservação da massa e da conservação da quantidade de movimento linear) permanecem equivalentes aos apresentados previamente.

Equação da massa para cada espécie

Ao se discretizar a equação da conservação de massa para cada espécie química utilizando-se o esquema CDS com correção adiada, obtêm-se a seguinte forma linearizada,

$$a_E^Y Y_{i,E} + a_P^Y Y_{i,P} + a_W^Y Y_{i,W} = b_P^Y, \quad (\text{A.68})$$

cujos coeficientes e termo-fonte são calculados através das seguintes expressões:

$$a_E^Y = 0, \quad (\text{A.69})$$

$$a_W^Y = -\rho_w u_w S_w, \quad (\text{A.70})$$

$$a_P^Y = \rho_P^0 S_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t} - a_W^Y \quad (\text{A.71})$$

$$b_P^Y = \frac{\beta}{2} [\rho_w u_w S_w (Y_{i,P} - Y_{i,W}) - \rho_e u_e S_e (Y_{i,E} - Y_{i,P})]. \quad (\text{A.72})$$

APÊNDICE B. Coeficientes do modelo bidimensional.

COEFICIENTES GERAIS

As equações de conservação da quantidade de movimento axial, da quantidade de movimento radial, da energia e de espécies podem ser escritas na seguinte forma:

$$a_p^u \Phi_P + a_w^u \Phi_W + a_e^u \Phi_E + a_s^u \Phi_S + a_n^u \Phi_N = b_P^\Phi, \quad (\text{B.1})$$

sendo:

$$a_e^u = \dot{M}_e \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right), \quad (\text{B.2})$$

$$a_w^u = -\dot{M}_w \left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right), \quad (\text{B.3})$$

$$a_n^u = \dot{M}_n \left(\frac{1}{2} - \alpha_n \right), \quad (\text{B.4})$$

$$a_s^u = \dot{M}_s \left(\frac{1}{2} - \alpha_s \right), \quad (\text{B.5})$$

$$a_p^u = \frac{M_P^0}{\Delta t} - \left(a_w^u + a_e^u + a_s^u + a_n^u \right), \quad (\text{B.6})$$

que são válidas para todas as equações, observando-se que:

$$\alpha_e = \begin{cases} \frac{1}{2}, & \text{se } U_e \geq 0 \\ -\frac{1}{2}, & \text{se } U_e < 0 \end{cases}, \quad (\text{B.7})$$

$$\alpha_w = \begin{cases} 1/2, & \text{se } U_w \geq 0 \\ -1/2, & \text{se } U_w < 0 \end{cases}, \quad (\text{B.8})$$

$$\alpha_n = \begin{cases} 1/2, & \text{se } V_n \geq 0 \\ -1/2, & \text{se } V_n < 0 \end{cases}, \quad (\text{B.9})$$

$$\alpha_s = \begin{cases} 1/2, & \text{se } V_s \geq 0 \\ -1/2, & \text{se } V_s < 0 \end{cases}, \quad (\text{B.10})$$

$$\dot{M}_e = (r \rho U)_e, \quad (\text{B.11})$$

$$\dot{M}_w = (r \rho U)_w, \quad (\text{B.12})$$

$$\dot{M}_n = (r \rho V)_n, \quad (\text{B.13})$$

$$\dot{M}_s = (r \rho V)_s, \quad (\text{B.14})$$

$$M_P^0 = \frac{r_P \rho_P^0}{J_P}. \quad (\text{B.15})$$

Nota-se, entretanto, que os termos-fontes são diferentes, conforme apresentado na seqüência:

$$b_P^u = \frac{M_P^0}{\Delta t} u_P^0 + S_P^u + w_P^u, \quad (\text{B.16})$$

$$b_P^v = \frac{M_P^0}{\Delta t} v_P^0 + S_P^v + w_P^v, \quad (\text{B.17})$$

$$b_P^T = \frac{M_P^0}{\Delta t} T_P^0 + S_P^T + w_P^T + S_{eq/lf}^T, \quad (\text{B.18})$$

$$b_P^Y = \frac{M_P^0}{\Delta t} (Y_i)_P^0 + S_P^Y + \beta \left\{ \dot{M}_e \alpha_e [(Y_i)_P - (Y_i)_E] + \dot{M}_w \alpha_w [(Y_i)_P - (Y_i)_W] \right. \\ \left. + \dot{M}_n \alpha_n [(Y_i)_P - (Y_i)_N] + \dot{M}_s \alpha_s [(Y_i)_P - (Y_i)_S] \right\}, \quad (\text{B.19})$$

$$w_P^u = \beta \left[\dot{M}_e \alpha_e (u_P - u_E) + \dot{M}_w \alpha_w (u_P - u_W) \right. \\ \left. + \dot{M}_n \alpha_n (u_P - u_N) + \dot{M}_s \alpha_s (u_P - u_S) \right], \quad (\text{B.20})$$

$$w_P^v = \beta \left[\dot{M}_e \alpha_e (v_P - v_E) + \dot{M}_w \alpha_w (v_P - v_W) \right. \\ \left. + \dot{M}_n \alpha_n (v_P - v_N) + \dot{M}_s \alpha_s (v_P - v_S) \right], \quad (\text{B.21})$$

$$w_P^T = \beta \left[\dot{M}_e \alpha_e (T_P - T_E) + \dot{M}_w \alpha_w (T_P - T_W) \right. \\ \left. + \dot{M}_n \alpha_n (T_P - T_N) + \dot{M}_s \alpha_s (T_P - T_S) \right]. \quad (\text{B.22})$$

observando-se que β , neste caso, é o coeficiente de mistura entre os esquemas de aproximação UDS ($\beta = 0$) e CDS ($\beta = 1$); além disso, tem-se:

$$S_P^u = \frac{r_P}{2} \left[(P_P + P_N)(r_\xi)_n - (P_S + P_P)(r_\xi)_s + (P_W + P_P)(r_\eta)_w - (P_P + P_E)(r_\eta)_e \right], \quad (\text{B.23})$$

$$S_P^v = \frac{r_P}{2} \left[-(P_P + P_N)(z_\xi)_n + (P_S + P_P)(z_\xi)_s + (P_P + P_E)(z_\eta)_e - (P_W + P_P)(z_\eta)_w \right], \quad (\text{B.24})$$

$$S_P^T = \frac{r_P}{J_P (c_P)_P} \frac{(P_P - P_P^0)}{\Delta t} - \frac{u_P}{(c_P)_P} S_P^u - \frac{v_P}{(c_P)_P} S_P^v, \quad (\text{B.25})$$

$$S_P^Y = \frac{\dot{w}_i}{J_P} r_P, \quad (\text{B.26})$$

$$S_{eq/TF}^T = - \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{(h_i)_P}{(c_p)_P} \left[\dot{M}_e(Y_i)_E - \dot{M}_w(Y_i)_W + \dot{M}_n(Y_i)_N - \dot{M}_s(Y_i)_S \right] \right\}, \quad (\text{B.27a})$$

que é válida para o escoamento em equilíbrio químico local; e

$$S_{eq/TF}^T = - \frac{1}{J_P (c_p)_P} \sum_{i=1}^N [(h_i)_P (\dot{w}_i)_P], \quad (\text{B.27b})$$

que deve ser considerada para o modelo de escoamento com taxa finita de reação.

A equação da conservação da massa é transformada em uma equação de correção da pressão, sendo reescrita na seguinte forma:

$$a_P^P P'_P + a_w^P P'_W + a_e^P P'_E + a_s^P P'_S + a_n^P P'_N = b_P^P, \quad (\text{B.28})$$

sendo:

$$a_w^P = -r_w \rho_w d_w - r_w U_w \left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) g_W, \quad (\text{B.29})$$

$$a_e^P = -r_e \rho_e d_e + r_e U_e \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) g_E, \quad (\text{B.30})$$

$$a_s^P = -r_s \rho_s d_s - r_s U_s \left(\frac{1}{2} + \alpha_s \right) g_S, \quad (\text{B.31})$$

$$a_n^P = -r_n \rho_n d_n + r_n U_n \left(\frac{1}{2} - \alpha_n \right) g_N, \quad (\text{B.32})$$

$$a_P^P = \frac{r_P g_P}{J_P \Delta t} + r_e \rho_e d_e + r_e U_e \left(\frac{1}{2} + \alpha_e \right) g_P + r_w \rho_w d_w - r_w U_w \left(\frac{1}{2} - \alpha_w \right) g_P + r_n \rho_n d_n + r_n U_n \left(\frac{1}{2} + \alpha_n \right) g_P + r_s \rho_s d_s - r_s U_s \left(\frac{1}{2} - \alpha_s \right) g_P, \quad (\text{B.33})$$

$$b_P^P = - \left[\frac{(\rho_P - \rho_P^0)}{J_P \Delta t} r_P + \dot{M}_e - \dot{M}_w + \dot{M}_n - \dot{M}_s \right], \quad (\text{B.34})$$

e

$$g_P = \frac{1}{R_P T_P}. \quad (\text{B.35})$$

A massa específica (ρ), é obtida através da equação de estado, enquanto as velocidades nas faces leste e norte são obtidas mediante as seguintes relações (sendo as velocidades nas faces oeste e sul obtidas por expressões análogas):

$$U_e = \frac{1}{[(a_P^u)_P + (a_P^u)_E]} \left\{ \frac{(M_P^0 + M_E^0)}{\Delta t} U_e^0 + (w_P^u + w_E^u - \Sigma_P^u - \Sigma_E^u)(r_\eta)_e - (w_P^v + w_E^v - \Sigma_P^v - \Sigma_E^v)(z_\eta)_e + 2[S_e^u(r_\eta)_e - S_e^v(z_\eta)_e] \right\}, \quad (\text{B.36})$$

e

$$V_n = \frac{1}{[(a_P^u)_P + (a_P^u)_N]} \left\{ \frac{(M_P^0 + M_N^0)}{\Delta t} V_n^0 + (w_P^v + w_E^v - \Sigma_P^v - \Sigma_N^v)(z_\xi)_n - (w_P^u + w_N^u - \Sigma_P^u - \Sigma_N^u)(r_\xi)_n + 2[S_n^v(z_\xi)_n - S_n^u(r_\xi)_n] \right\}, \quad (\text{B.37})$$

sendo:

$$\Sigma_P^u = (a_w^u)_P u_W + (a_e^u)_P u_E + (a_s^u)_P u_S + (a_n^u)_P u_N, \quad (\text{B.38})$$

$$\Sigma_E^u = (a_w^u)_E u_P + (a_e^u)_E u_{EE} + (a_s^u)_E u_{SE} + (a_n^u)_E u_{NE}, \quad (\text{B.39})$$

$$\Sigma_P^v = (a_w^u)_P v_W^* + (a_e^u)_P v_E^* + (a_s^u)_P v_S^* + (a_n^u)_P v_N^*, \quad (\text{B.40})$$

$$\Sigma_E^v = (a_w^u)_E v_P^* + (a_e^u)_E v_{EE}^* + (a_s^u)_E v_{SE}^* + (a_n^u)_E v_{NE}^*, \quad (\text{B.41})$$

$$\Sigma_N^u = (a_w^u)_N u_{NW} + (a_e^u)_N u_{NE} + (a_s^u)_N u_P + (a_n^u)_P u_{NN}, \quad (\text{B.42})$$

$$\Sigma_N^v = (a_w^u)_N v_{NW}^* + (a_e^u)_N v_{NE}^* + (a_s^u)_N v_P^* + (a_n^u)_N v_{NN}^*, \quad (\text{B.43})$$

$$S_e^u = r_e \left[(r_\xi)_e \frac{(P_N + P_{NE} - P_S - P_{SE})}{4} + (r_\eta)_e (P_P - P_E) \right], \quad (\text{B.44})$$

$$S_e^v = r_e \left[(z_\eta)_e (P_E - P_P) + (z_\xi)_e \frac{(P_S + P_{SE} - P_N - P_{NE})}{4} \right], \quad (\text{B.45})$$

$$S_n^u = r_n \left[(r_\xi)_n (P_N - P_P) + (r_\eta)_n \frac{(P_W + P_{NW} - P_E - P_{NE})}{4} \right], \quad (\text{B.46})$$

e

$$S_n^v = r_n \left[(z_\eta)_n \frac{(P_E + P_{NE} - P_W - P_{NW})}{4} + (z_\xi)_n (P_P - P_N) \right]. \quad (\text{B.47})$$

Para a discretização da equação da conservação da massa, é utilizado o método SIMPLEC para o acoplamento pressão-velocidade. Desse acoplamento, surgem as variáveis d_e , d_w , d_n e d_s . A seguir são apresentadas as formulações para d_e e d_n , sendo d_w e d_s obtidas de forma análoga:

$$d_e = \frac{2 r_e \Delta t}{(M_P^0 + M_E^0)} \left[(r_\eta)_e^2 + (z_\eta)_e^2 \right], \quad (\text{B.48})$$

e

$$d_n = \frac{2 r_n \Delta t}{(M_P^0 + M_N^0)} \left[(z_\xi)_n^2 + (r_\xi)_n^2 \right]. \quad (\text{B.49})$$

Deve-se proceder, também, uma correção das velocidades nodais e nas faces utilizando-se, para tanto, a correção de pressão (P'):

$$u_P = u_P^{ant} + \frac{\Delta t}{M_P^0} S_P^{u'}, \quad (\text{B.50})$$

$$v_P = v_P^{ant} + \frac{\Delta t}{M_P^0} S_P^{v'}, \quad (\text{B.51})$$

$$S_P^{u'} = \frac{r_P}{2} \left[(P'_P + P'_N)(r_\xi)_n - (P'_P + P'_S)(r_\xi)_s + (P'_P + P'_W)(r_\eta)_w - (P'_P + P'_E)(r_\eta)_e \right], \quad (\text{B.52})$$

$$S_P^{v'} = \frac{r_P}{2} \left[(P'_P + P'_E)(z_\eta)_e - (P'_P + P'_W)(z_\eta)_w + (P'_P + P'_S)(z_\xi)_s - (P'_P + P'_N)(z_\xi)_n \right], \quad (\text{B.53})$$

$$U_e = U_e^* + d_e(P'_P - P'_E), \quad (\text{B.54})$$

e

$$V_n = V_n^* + d_n(P'_P - P'_N). \quad (\text{B.55})$$

Também é necessário que sejam corrigidas a pressão e a massa específica ao longo de todo o escoamento. Tais correções são feitas sobre as estimativas anteriores da pressão (P^{ant}) e da massa específica (ρ^{ant}), através das seguintes expressões:

$$P = P^{ant} + P'. \quad (\text{B.56})$$

e

$$\rho = \rho^{ant} + \frac{P'}{RT}. \quad (\text{B.57})$$

CONDIÇÕES DE CONTORNO

São apresentadas a seguir as condições de contorno aplicadas ao modelo numérico bidimensional de escoamento de gases ao longo da tubeira. A entrada e a saída da tubeira correspondem, respectivamente, aos contornos oeste e leste, enquanto a linha de simetria corresponde ao contorno sul e as paredes da tubeira definem o contorno norte. A equação de conservação de espécies só se faz necessária na resolução do modelo de escoamento com taxa finita de reação.

Contorno sul (linha de simetria)

Quantidade de movimento da direção axial:

$$a_p^u = 1, \quad a_n^u = -1, \quad a_w^u = a_e^u = a_s^u = b_p^u = 0. \quad (\text{B.58})$$

Quantidade de movimento da direção radial:

$$a_p^v = a_n^v = 1, \quad a_w^v = a_e^v = a_s^v = b_p^v = 0. \quad (\text{B.59})$$

Energia:

$$a_p^T = 1, \quad a_n^T = -1, \quad a_w^T = a_e^T = a_s^T = b_p^T = 0. \quad (\text{B.60})$$

Massa:

$$a_p^P = 1, \quad a_n^P = -1, \quad a_w^P = a_e^P = a_s^P = 0, \quad b_p^T = \frac{2r_N}{r_{NN} - r_N} (P'_N - P'_{NN}). \quad (\text{B.61})$$

Espécies:

$$a_p^Y = 1, \quad a_n^Y = -1, \quad a_w^Y = a_e^Y = a_s^Y = b_p^Y = 0. \quad (\text{B.62})$$

Contorno norte (parede):

Quantidade de movimento da direção axial:

$$a_p^u = 1, \quad a_s^u = -1, \quad a_w^u = a_e^u = a_n^u = b_p^u = 0. \quad (\text{B.63})$$

Quantidade de movimento da direção radial:

$$a_P^v = 1, a_s^v = -1, a_w^v = a_e^v = a_n^v = b_P^v = 0. \quad (\text{B.64})$$

Energia:

$$a_P^T = 1, a_s^T = -1, a_w^T = a_e^T = a_n^T = b_P^T = 0. \quad (\text{B.65})$$

Massa:

$$a_P^P = 1, a_n^P = -1, a_w^P = a_e^P = a_s^P = 0, b_P^T = \frac{2(r_s - r_S)}{r_S - r_{SS}}(P'_S - P'_{SS}). \quad (\text{B.66})$$

Espécies:

$$a_P^Y = 1, a_s^Y = -1, a_w^Y = a_e^Y = a_n^Y = b_P^Y = 0. \quad (\text{B.67})$$

Contorno leste (saída):

Para todas as equações de conservação os coeficientes e termos-fontes são obtidos através da seguinte expressão:

$$a_P^\Phi = 1, a_w^\Phi = -1, a_e^\Phi = a_s^\Phi = a_n^\Phi = 0, b_P^\Phi = \frac{2(z_w - z_{WW})}{z_W - z_{WW}}(\Phi_W - \Phi_{WW}), \quad (\text{B.68})$$

em que Φ representa as velocidades u e v , a temperatura T , a correção de pressão P' e/ou a fração mássica Y_i da espécie química i .

Contorno oeste (entrada):

Quantidade de movimento da direção axial:

$$a_p^u = 1, \quad a_e^u = -1, \quad a_w^u = a_s^u = a_n^u = 0, \quad b_p^u = \frac{2z_E}{z_{EE} - z_E} (u_E - u_{EE}). \quad (\text{B.69})$$

Quantidade de movimento da direção radial:

$$a_p^v = 1, \quad a_e^v = a_w^v = a_s^v = a_n^v = b_p^v = 0. \quad (\text{B.70})$$

Energia:

$$a_p^T = a_e^T = 1, \quad a_w^T = a_s^T = a_n^T = 0, \quad b_p^T = 2T_{in}. \quad (\text{B.71})$$

Massa:

$$a_p^P = a_e^P = 1, \quad a_w^P = a_s^P = a_n^P = 0, \quad b_p^P = 2P'_{in}. \quad (\text{B.72})$$

Espécies:

$$a_p^Y = a_e^Y = 1, \quad a_w^Y = a_s^Y = a_n^Y = 0, \quad b_p^Y = 2(Y_i)_{in}. \quad (\text{B.73})$$

APÊNDICE C. Outros resultados para escoamento bidimensional.

Nas tabelas apresentadas a seguir, são mostrados os resultados numéricos, bem como suas respectivas análises de erro, para outras variáveis de interesse (empuxo, temperatura e pressão na saída da tubeira, ambas sobre a linha de simetria da tubeira). Deve-se atentar que nos casos em que o estimador GCI baseado na ordem aparente não pôde ser calculado, empregou-se o mesmo estimador, contudo baseado na ordem assintótica. Quando isto ocorre, os resultados são identificados com asteriscos (**) ao lado direto do valor numérico apresentado.

ESCOAMENTO MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES CONSTANTES

Tabela C.1: Ordem aparente da solução numérica para o empuxo no vácuo (F) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento monoespécie com propriedades constantes).

Malha	Solução numérica [N]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	1,7620249718841x10 ⁴	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	1,6778377289714x10 ⁴	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	1,6488662190570x10 ⁴	1,539	8,691x10 ²
80x24	1,6364893061196x10 ⁴	1,227	3,713x10 ²
160x48	1,6307159319004x10 ⁴	1,100	1,732x10 ²
320x96	1,6279053357434x10 ⁴	1,039	8,432x10 ¹
640x192	1,6265304148553x10 ⁴	1,032	4,125x10 ¹
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	1,6676012047850x10 ⁴	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	1,6321919028267x10 ⁴	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	1,6264489345336x10 ⁴	2,624	5,743x10 ¹
80x24	1,6254149879718x10 ⁴	2,474	1,034x10 ¹
160x48	1,6252050928076x10 ⁴	2,300	2,099
320x96	1,6251638354369x10 ⁴	2,347	4,126x10 ⁻¹
640x192	1,6251560949996x10 ⁴	2,414	7,740x10 ⁻²

Tabela C.2: Ordem aparente da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira sobre a linha de simetria (T_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento monoespécie com propriedades constantes).

Malha	Solução numérica [K]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$2,0357722242956 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,0560993245605 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,0320853624305 \times 10^3$	---	$7,204 \times 10^1$ **
80x24	$2,0095708249767 \times 10^3$	---	$6,754 \times 10^1$ **
160x48	$1,9968685754352 \times 10^3$	$8,258 \times 10^{-1}$	$4,933 \times 10^1$
320x96	$1,9889231755187 \times 10^3$	$6,769 \times 10^{-1}$	$3,981 \times 10^1$
640x192	$1,9853095232322 \times 10^3$	1,137	$1,084 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$1,9594106599533 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$1,9793678519738 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,9833849184130 \times 10^3$	2,313	4,017
80x24	$1,9835454216385 \times 10^3$	4,645	$1,605 \times 10^{-1}$
160x48	$1,9830503616398 \times 10^3$	---	$4,951 \times 10^{-1}$ **
320x96	$1,9826053793325 \times 10^3$	$1,539 \times 10^{-1}$	$1,186 \times 10^1$
640x192	$1,9823178667204 \times 10^3$	$6,301 \times 10^{-1}$	1,575

Tabela C.3: Ordem aparente da solução numérica para a pressão na saída da tubeira sobre a linha de simetria (P_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento monoespécie com propriedades constantes).

Malha	Solução numérica [Pa]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$6,2855730183414 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$7,3806930561700 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$7,4186056700089 \times 10^4$	4,852	$1,137 \times 10^3$
80x24	$7,2973741957670 \times 10^4$	---	$3,637 \times 10^3$ **
160x48	$7,2232001364251 \times 10^4$	$7,088 \times 10^{-1}$	$3,507 \times 10^3$
320x96	$7,1637306223204 \times 10^4$	$3,188 \times 10^{-1}$	$7,215 \times 10^3$
640x192	$7,1402058988191 \times 10^4$	1,338	$7,057 \times 10^2$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$7,2662100989739 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$7,1786048911208 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$7,1737499959484 \times 10^4$	4,174	$4,855 \times 10^1$
80x24	$7,1608916373495 \times 10^4$	-1,405	$1,286 \times 10^2$ **
160x48	$7,1462651156657 \times 10^4$	$-1,859 \times 10^{-1}$	$1,463 \times 10^2$ **
320x96	$7,1355008486389 \times 10^4$	$4,423 \times 10^{-1}$	$9,000 \times 10^2$
640x192	$7,1289042667813 \times 10^4$	$7,065 \times 10^{-1}$	$3,132 \times 10^2$

Tabela C.4: Ordem aparente da solução numérica para a velocidade axial na saída da tubeira sobre a linha de simetria (u_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento monoespécie com propriedades constantes).

Malha	Solução numérica [m/s]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$2,8573224668081 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,8940144472669 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,9534407853167 \times 10^3$	$-6,956 \times 10^{-1}$	$1,783 \times 10^2$ **
80x24	$2,9955942631895 \times 10^3$	$4,955 \times 10^{-1}$	$3,086 \times 10^2$
160x48	$3,0185324409921 \times 10^3$	$8,779 \times 10^{-1}$	$8,215 \times 10^1$
320x96	$3,0317833254089 \times 10^3$	$7,917 \times 10^{-1}$	$5,438 \times 10^1$
640x192	$3,0380485656289 \times 10^3$	1,081	$1,880 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$3,0597618664312 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,0456451430749 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,0425872420529 \times 10^3$	2,207	3,058
80x24	$3,0424035203126 \times 10^3$	4,057	$1,837 \times 10^{-1}$
160x48	$3,0429018668988 \times 10^3$	---	$4,983 \times 10^{-1}$ **
320x96	$3,0433674845032 \times 10^3$	$9,800 \times 10^{-2}$	$1,987 \times 10^1$
640x192	$3,0436715036233 \times 10^3$	$6,150 \times 10^{-1}$	1,716

ESCOAMENTO MONOESPÉCIE COM PROPRIEDADES VARIÁVEIS

Tabela C.5: Ordem aparente da solução numérica para o empuxo no vácuo (F) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento monoespécie com propriedades variáveis).

Malha	Solução numérica [N]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$1,7691618521536 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$1,6846921702079 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,6558006485273 \times 10^4$	1,548	$8,667 \times 10^2$
80x24	$1,6435481513648 \times 10^4$	1,238	$3,676 \times 10^2$
160x48	$1,6378707552013 \times 10^4$	1,110	$1,703 \times 10^2$
320x96	$1,6351182455869 \times 10^4$	1,044	$8,258 \times 10^1$
640x192	$1,6337744775583 \times 10^4$	1,034	$4,031 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$1,6758260203869 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$1,6396630583800 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,6337715454804 \times 10^4$	2,618	$5,892 \times 10^1$
80x24	$1,6327037850562 \times 10^4$	2,464	$1,068 \times 10^1$
160x48	$1,6324851588970 \times 10^4$	2,288	2,186
320x96	$1,6324418110488 \times 10^4$	2,334	$4,335 \times 10^{-1}$
640x192	$1,6324335232981 \times 10^4$	2,387	$8,288 \times 10^{-2}$

Tabela C.6: Ordem aparente da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira sobre a linha de simetria (T_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento monoespécie com propriedades variáveis).

Malha	Solução numérica [K]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$2,1296195684094 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,1522384941055 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,1298088388581 \times 10^3$	---	$6,729 \times 10^1$
80x24	$2,1081839455714 \times 10^3$	---	$6,487 \times 10^1$
160x48	$2,0962830316386 \times 10^3$	$8,616 \times 10^{-1}$	$4,370 \times 10^1$
320x96	$2,0886380456971 \times 10^3$	$6,385 \times 10^{-1}$	$4,120 \times 10^1$
640x192	$2,0851542630171 \times 10^3$	1,134	$1,045 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$2,0612303358140 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,0802567821822 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,0837799245373 \times 10^3$	2,433	3,523
80x24	$2,0837262514872 \times 10^3$	---	$5,367 \times 10^{-2}$ **
160x48	$2,0831405083914 \times 10^3$	-3,448	$5,857 \times 10^{-1}$ **
320x96	$2,0826546186868 \times 10^3$	$2,696 \times 10^{-1}$	7,093
640x192	$2,0823476713023 \times 10^3$	$6,626 \times 10^{-1}$	1,580

Tabela C.7: Ordem aparente da solução numérica para a pressão na saída da tubeira sobre a linha de simetria (P_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento monoespécie com propriedades variáveis).

Malha	Solução numérica [Pa]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$6,4876009880972 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$7,5869174073710 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$7,6231290366520 \times 10^4$	4,924	$1,086 \times 10^3$
80x24	$7,4989684024004 \times 10^4$	---	$3,725 \times 10^3$ **
160x48	$7,4283423904474 \times 10^4$	$8,139 \times 10^{-1}$	$2,795 \times 10^3$
320x96	$7,3687391673573 \times 10^4$	$2,448 \times 10^{-1}$	$9,669 \times 10^3$
640x192	$7,3448505963854 \times 10^4$	1,319	$7,167 \times 10^2$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$7,5092005904838 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$7,3997492820029 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$7,3862656051147 \times 10^4$	3,021	$1,348 \times 10^2$
80x24	$7,3694881020658 \times 10^4$	$-3,153 \times 10^{-1}$	$1,678 \times 10^2$ **
160x48	$7,3529800224579 \times 10^4$	$2,336 \times 10^{-2}$	$3,034 \times 10^4$
320x96	$7,3412835065349 \times 10^4$	$4,971 \times 10^{-1}$	$8,530 \times 10^2$
640x192	$7,3342238373463 \times 10^4$	$7,284 \times 10^{-1}$	$3,225 \times 10^2$

Tabela C.8: Ordem aparente da solução numérica para a velocidade axial na saída da tubeira sobre a linha de simetria (u_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento monoespécie com propriedades variáveis).

Malha	Solução numérica [m/s]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$2,8808560019994 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,9185100182409 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,9793437530996 \times 10^3$	$-6,921 \times 10^{-1}$	$1,825 \times 10^2$ **
80x24	$3,0225731955731 \times 10^3$	$4,929 \times 10^{-1}$	$3,185 \times 10^2$
160x48	$3,0457486275043 \times 10^3$	$8,994 \times 10^{-1}$	$8,035 \times 10^1$
320x96	$3,0592753923657 \times 10^3$	$7,768 \times 10^{-1}$	$5,689 \times 10^1$
640x192	$3,0656961207861 \times 10^3$	1,075	$1,926 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$3,0857499417027 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,0725651849771 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,0699380860660 \times 10^3$	2,327	2,627
80x24	$3,0699579135890 \times 10^3$	---	$1,983 \times 10^{-2}$ **
160x48	$3,0705573632871 \times 10^3$	-4,918	$5,994 \times 10^{-1}$ **
320x96	$3,0710749463675 \times 10^3$	$2,118 \times 10^{-1}$	9,817
640x192	$3,0714053130596 \times 10^3$	$6,477 \times 10^{-1}$	1,749

ESCOAMENTO CONGELADO

Tabela C.9: Ordem aparente da solução numérica para o empuxo no vácuo (F) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento congelado, modelo 4).

Malha	Solução numérica [N]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$1,7564579619442 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$1,6720144188985 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,6426854986647 \times 10^4$	1,526	$8,799 \times 10^2$
80x24	$1,6301100036107 \times 10^4$	1,222	$3,773 \times 10^2$
160x48	$1,6242385866532 \times 10^4$	1,099	$1,761 \times 10^2$
320x96	$1,6213776092734 \times 10^4$	1,037	$8,583 \times 10^1$
640x192	$1,6199808639689 \times 10^4$	1,034	$4,190 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$1,6613693534880 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$1,6257317140724 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,6199095784558 \times 10^4$	2,614	$5,822 \times 10^1$
80x24	$1,6188539012898 \times 10^4$	2,463	$1,056 \times 10^1$
160x48	$1,6186381545554 \times 10^4$	2,291	2,157
320x96	$1,6185949356992 \times 10^4$	2,320	$4,322 \times 10^{-1}$
640x192	$1,6185864516813 \times 10^4$	2,349	$8,484 \times 10^{-2}$

Tabela C.10: Ordem aparente da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira sobre alinhamento de simetria (T_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento congelado, modelo 4).

Malha	Solução numérica [K]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$1,9636150530956 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$1,9917873497996 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,9711457054918 \times 10^3$	---	$6,192 \times 10^1$ **
80x24	$1,9449606321519 \times 10^3$	$-3,432 \times 10^{-1}$	$7,856 \times 10^1$ **
160x48	$1,9297400606855 \times 10^3$	$7,827 \times 10^{-1}$	$6,339 \times 10^1$
320x96	$1,9210703974859 \times 10^3$	$8,120 \times 10^{-1}$	$3,442 \times 10^1$
640x192	$1,9171988541387 \times 10^3$	1,163	$1,161 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$1,8877948255723 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$1,9103513600044 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,9150219009975 \times 10^3$	2,272	4,671
80x24	$1,9152658113568 \times 10^3$	4,259	$2,439 \times 10^{-1}$
160x48	$1,9147408589882 \times 10^3$	---	$5,250 \times 10^{-1}$ **
320x96	$1,9142573947799 \times 10^3$	$1,188 \times 10^{-1}$	$1,690 \times 10^1$
640x192	$1,9139810697630 \times 10^3$	$8,070 \times 10^{-1}$	1,106

Tabela C.11: Ordem aparente da solução numérica para a pressão na saída da tubeira sobre a linha de simetria (P_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento congelado, modelo 4).

Malha	Solução numérica [Pa]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$6,0269642892178 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$7,1567524568231 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$7,2493521958822 \times 10^4$	3,609	$2,778 \times 10^3$
80x24	$7,0903764207702 \times 10^4$	---	$4,769 \times 10^3$ **
160x48	$6,9904581931503 \times 10^4$	$6,700 \times 10^{-1}$	$5,071 \times 10^3$
320x96	$6,9283568900298 \times 10^4$	$6,861 \times 10^{-1}$	$3,059 \times 10^3$
640x192	$6,9043487762980 \times 10^4$	1,371	$7,202 \times 10^2$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$7,0237697148008 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$6,9370753238201 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$6,9340820804978 \times 10^4$	4,856	$2,993 \times 10^1$
80x24	$6,9222735587899 \times 10^4$	-1,980	$1,181 \times 10^2$ **
160x48	$6,9082315744071 \times 10^4$	$-2,499 \times 10^{-1}$	$1,404 \times 10^2$ **
320x96	$6,8977879342838 \times 10^4$	$4,271 \times 10^{-1}$	$9,093 \times 10^2$
640x192	$6,8913686872738 \times 10^4$	$7,021 \times 10^{-1}$	$3,072 \times 10^2$

Tabela C.12: Ordem aparente da solução numérica para a velocidade axial na saída da tubeira sobre a linha de simetria (u_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento congelado, modelo 4).

Malha	Solução numérica [m/s]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$2,8558032056388 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,8913371687678 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,9471208631325 \times 10^3$	$-6,506 \times 10^{-1}$	$1,674 \times 10^2$ **
80x24	$2,9916029552285 \times 10^3$	$3,266 \times 10^{-1}$	$5,252 \times 10^2$
160x48	$3,0162163786969 \times 10^3$	$8,538 \times 10^{-1}$	$9,147 \times 10^1$
320x96	$3,0296168060082 \times 10^3$	$8,772 \times 10^{-1}$	$4,804 \times 10^1$
640x192	$3,0359042169943 \times 10^3$	1,092	$1,886 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$3,0580444711423 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,0439035848090 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,0406986978572 \times 10^3$	2,142	3,205
80x24	$3,0404297100834 \times 10^3$	3,575	$2,690 \times 10^{-1}$
160x48	$3,0408895933597 \times 10^3$	---	$4,599 \times 10^{-1}$ **
320x96	$3,0413368630521 \times 10^3$	$4,012 \times 10^{-2}$	$4,758 \times 10^1$
640x192	$3,0416073551489 \times 10^3$	$7,256 \times 10^{-1}$	1,242

Tabela C.13: Ordem aparente da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento congelado, modelo 10).

Malha	Solução numérica [adim.]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	1,19072078949315	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	1,09401000565316	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	1,04794568372977	1,070	$1,382 \times 10^{-1}$
80x24	1,02466775769481	$9,847 \times 10^{-1}$	$7,134 \times 10^{-2}$
160x48	1,01288610394935	$9,824 \times 10^{-1}$	$3,622 \times 10^{-2}$
320x96	1,00694665398808	$9,881 \times 10^{-1}$	$1,811 \times 10^{-2}$
640x192	1,00396434225467	$9,939 \times 10^{-1}$	$9,023 \times 10^{-3}$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	1,0159783879700	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	1,0029443868224	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	1,0012287304299	2,925	$1,716 \times 10^{-3}$
80x24	1,0010024128764	2,922	$2,263 \times 10^{-4}$
160x48	1,0009717063609	2,882	$3,071 \times 10^{-5}$
320x96	1,0009698628203	4,058	$1,844 \times 10^{-6}$
640x192	1,0009715312095	---	$1,668 \times 10^{-6}$ **

Tabela C.14: Ordem aparente da solução numérica para o impulso específico (I_{sp}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento congelado, modelo 10).

Malha	Solução numérica [s]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$3,1015413962201 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,2134275969577 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,2958352889379 \times 10^2$	$4,412 \times 10^{-1}$	$6,911 \times 10^1$
80x24	$3,3449044386341 \times 10^2$	$7,480 \times 10^{-1}$	$2,167 \times 10^1$
160x48	$3,3716236677136 \times 10^2$	$8,769 \times 10^{-1}$	9,583
320x96	$3,3855561732073 \times 10^2$	$9,394 \times 10^{-1}$	4,554
640x192	$3,3926689720383 \times 10^2$	$9,700 \times 10^{-1}$	2,226
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$3,4382038900365 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,4081752520948 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,4017889553516 \times 10^2$	2,233	$6,386 \times 10^{-1}$
80x24	$3,4003406615946 \times 10^2$	2,141	$1,448 \times 10^{-1}$
160x48	$3,3999917682708 \times 10^2$	2,053	$3,489 \times 10^{-2}$
320x96	$3,3999072374544 \times 10^2$	2,045	$8,453 \times 10^{-3}$
640x192	$3,3998837494582 \times 10^2$	1,848	$2,711 \times 10^{-3}$

Tabela C.15: Ordem aparente da solução numérica para o empuxo no vácuo (F) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento congelado, modelo 10).

Malha	Solução numérica [N]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$1,7564608525736 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$1,6720173111226 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,6426885468919 \times 10^4$	1,526	$8,799 \times 10^2$
80x24	$1,6301131173279 \times 10^4$	1,222	$3,773 \times 10^2$
160x48	$1,6242417263979 \times 10^4$	1,099	$1,761 \times 10^2$
320x96	$1,6213898261617 \times 10^4$	1,042	$8,556 \times 10^1$
640x192	$1,6199840241367 \times 10^4$	1,021	$4,217 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$1,6613726377090 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$1,6257348932777 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,6199127606196 \times 10^4$	2,614	$5,822 \times 10^1$
80x24	$1,6188570823989 \times 10^4$	2,463	$1,056 \times 10^1$
160x48	$1,6186413243305 \times 10^4$	2,291	2,158
320x96	$1,6185981005046 \times 10^4$	2,320	$4,322 \times 10^{-1}$
640x192	$1,6185896163611 \times 10^4$	2,349	$8,484 \times 10^{-2}$

Tabela C.16: Ordem aparente da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira sobre a linha de simetria (T_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento congelado, modelo 10).

Malha	Solução numérica [K]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	1,9636524536399x10 ³	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	1,9918230889310x10 ³	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	1,9711813964759x10 ³	---	6,193x10 ¹ **
80x24	1,9449971374712x10 ³	-3,431x10 ⁻¹	7,855x10 ¹ **
160x48	1,9297771786548x10 ³	7,827x10 ⁻¹	6,338x10 ¹
320x96	1,9218823556720x10 ³	9,470x10 ⁻¹	2,553x10 ¹
640x192	1,9172364285932x10 ³	7,649x10 ⁻¹	1,993x10 ¹
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	1,8878337374665x10 ³	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	1,9103894157673x10 ³	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	1,9150596750653x10 ³	2,272	4,670
80x24	1,9153035198917x10 ³	4,259	2,438x10 ⁻¹
160x48	1,9147785551780x10 ³	---	5,250x10 ⁻¹ **
320x96	1,9142950930813x10 ³	1,188x10 ⁻¹	1,690x10 ¹
640x192	1,9139810697630x10 ³	6,225x10 ⁻¹	1,746

Tabela C.17: Ordem aparente da solução numérica para a pressão na saída da tubeira sobre a linha de simetria (P_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento congelado, modelo 10).

Malha	Solução numérica [Pa]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	6,0270699957115x10 ⁴	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	7,1568483872333x10 ⁴	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	7,2494431624507x10 ⁴	3,609	2,778x10 ³
80x24	7,0904714378315x10 ⁴	---	4,769x10 ³ **
160x48	6,9905572818038x10 ⁴	6,700x10 ⁻¹	5,071x10 ³
320x96	6,9391727937003x10 ⁴	9,594x10 ⁻¹	1,632x10 ³
640x192	6,9044503536132x10 ⁴	5,655x10 ⁻¹	2,171x10 ³
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	7,0238814150956x10 ⁴	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	6,9371821242941x10 ⁴	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	6,9341865673144x10 ⁴	4,855	2,996x10 ¹
80x24	6,9223768963726x10 ⁴	-1,979	1,181x10 ² **
160x48	6,9083343751317x10 ⁴	-2,498x10 ⁻¹	1,404x10 ² **
320x96	6,8978905008004x10 ⁴	4,271x10 ⁻¹	9,093x10 ²
640x192	6,8914711211296x10 ⁴	7,022x10 ⁻¹	3,072x10 ²

Tabela C.18: Ordem aparente da solução numérica para a velocidade axial na saída da tubeira sobre a linha de simetria (u_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento congelado, modelo 10).

Malha	Solução numérica [m/s]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$2,8557800016568 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,8913142346912 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,9470979744668 \times 10^3$	$-6,506 \times 10^{-1}$	$1,674 \times 10^2$ **
80x24	$2,9915795839149 \times 10^3$	$3,266 \times 10^{-1}$	$5,252 \times 10^2$
160x48	$3,0161926109022 \times 10^3$	$8,538 \times 10^{-1}$	$9,147 \times 10^1$
320x96	$3,0288626955755 \times 10^3$	$9,580 \times 10^{-1}$	$4,032 \times 10^1$
640x192	$3,0358801769707 \times 10^3$	$8,524 \times 10^{-1}$	$2,614 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 2$]			
10x3	$3,0580197222402 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,0438791922169 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,0406744679000 \times 10^3$	2,142	3,205
80x24	$3,0404055458397 \times 10^3$	3,575	$2,689 \times 10^{-1}$
160x48	$3,0408654546203 \times 10^3$	---	$4,599 \times 10^{-1}$ **
320x96	$3,0413127331425 \times 10^3$	$4,017 \times 10^{-2}$	$4,752 \times 10^1$
640x192	$3,0416073551489 \times 10^3$	$6,023 \times 10^{-1}$	1,706

ESCOAMENTO EM EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL

Tabela C.19: Ordem aparente da solução numérica para o empuxo no vácuo (F) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento em equilíbrio químico, modelo 4).

Malha	Solução numérica [N]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$1,79193824 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$1,70958926 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,68275242 \times 10^4$	1,618	$8,051 \times 10^2$
80x24	$1,67211789 \times 10^4$	1,335	$3,190 \times 10^2$
160x48	$1,66714130 \times 10^4$	1,096	$1,493 \times 10^2$
320x96	$1,66476298 \times 10^4$	1,065	$7,135 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 1$]			
10x3	$1,7075488 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$1,6703849 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,6640921 \times 10^4$	2,562	$1,888 \times 10^2$
80x24	$1,6628653 \times 10^4$	2,359	$3,680 \times 10^1$
160x48	$1,6625574 \times 10^4$	1,994	9,236
320x96	$1,6624713 \times 10^4$	1,838	2,583

Tabela C.20: Ordem aparente da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira sobre a linha de simetria (T_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento em equilíbrio químico, modelo 4).

Malha	Solução numérica [K]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$2,6592000 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,6650305 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,6560747 \times 10^3$	---	$2,687 \times 10^1$ **
80x24	$2,6457066 \times 10^3$	$-2,113 \times 10^{-1}$	$3,110 \times 10^1$ **
160x48	$2,6405688 \times 10^3$	1,013	$1,541 \times 10^1$
320x96	$2,6376274 \times 10^3$	$8,046 \times 10^{-1}$	$1,182 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 1$]			
10x3	$2,6199790 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,6290484 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,6326516 \times 10^3$	1,332	$1,081 \times 10^1$
80x24	$2,6340787 \times 10^3$	1,336	4,281
160x48	$2,6344457 \times 10^3$	1,959	1,101
320x96	$2,6345449 \times 10^3$	1,888	$2,974 \times 10^{-1}$

Tabela C.21: Ordem aparente da solução numérica para a pressão na saída da tubeira sobre a linha de simetria (P_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento em equilíbrio químico, modelo 4).

Malha	Solução numérica [Pa]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$7,4403756 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$8,4773017 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$8,5783391 \times 10^4$	3,359	$3,031 \times 10^3$
80x24	$8,4312032 \times 10^4$	---	$4,414 \times 10^3$ **
160x48	$8,3750725 \times 10^4$	1,390	$1,684 \times 10^3$
320x96	$8,3367565 \times 10^4$	$5,508 \times 10^{-1}$	$2,472 \times 10^3$
Função de interpolação CDS [$p_L = 1$]			
10x3	$8,6240357 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$8,4294531 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$8,3857465 \times 10^4$	2,154	$1,311 \times 10^3$
80x24	$8,3540089 \times 10^4$	$4,617 \times 10^{-1}$	$2,525 \times 10^3$
160x48	$8,3296652 \times 10^4$	$3,826 \times 10^{-1}$	$2,405 \times 10^3$
320x96	$8,3143342 \times 10^4$	$6,671 \times 10^{-1}$	$7,823 \times 10^2$

Tabela C.22: Ordem aparente da solução numérica para a velocidade axial na saída da tubeira sobre a linha de simetria (u_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento em equilíbrio químico, modelo 4).

Malha	Solução numérica [m/s]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
10x3	$2,9153963 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,9582467 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,0183013 \times 10^3$	$-4,870 \times 10^{-1}$	$1,802 \times 10^2$ **
80x24	$3,0655460 \times 10^3$	$3,461 \times 10^{-1}$	$5,227 \times 10^2$
160x48	$3,0889597 \times 10^3$	1,013	$7,024 \times 10^1$
320x96	$3,1016502 \times 10^3$	$8,836 \times 10^{-1}$	$4,506 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 1$]			
10x3	$3,1085826 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,1051172 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,1076103 \times 10^3$	---	7,479 **
80x24	$3,1102536 \times 10^3$	$-8,446 \times 10^{-2}$	7,930 **
160x48	$3,1121715 \times 10^3$	$4,628 \times 10^{-1}$	$1,521 \times 10^1$
320x96	$3,1133364 \times 10^3$	$7,193 \times 10^{-1}$	5,407

Tabela C.23: Ordem aparente da solução numérica para o coeficiente de descarga (C_d) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento em equilíbrio químico, modelo 10).

Malha	Solução numérica [adim.]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
20x6	1,0684388	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	1,0236132	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
80x24	1,0011315	$9,956 \times 10^{-1}$	$6,786 \times 10^{-2}$
160x48	$9,8979695 \times 10^{-1}$	$9,880 \times 10^{-1}$	$3,458 \times 10^{-2}$
320x96	$9,8409687 \times 10^{-1}$	$9,917 \times 10^{-1}$	$1,730 \times 10^{-2}$
Função de interpolação CDS [$p_L = 1$]			
10x3	1,0001820	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$9,8343268 \times 10^{-1}$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$9,8005120 \times 10^{-1}$	2,308	$1,014 \times 10^{-2}$
80x24	$9,7907936 \times 10^{-1}$	1,799	$2,916 \times 10^{-3}$
160x48	$9,7870321 \times 10^{-1}$	1,369	$1,128 \times 10^{-3}$
320x96	$9,7853319 \times 10^{-1}$	1,146	$5,101 \times 10^{-4}$

Tabela C.24: Ordem aparente da solução numérica para o impulso específico (I_{sp}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento em equilíbrio químico, modelo 10).

Malha	Solução numérica [s]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
20x6	$3,3643030 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,4564900 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
80x24	$3,5117909 \times 10^2$	$7,373 \times 10^{-1}$	$2,487 \times 10^1$
160x48	$3,5414341 \times 10^2$	$8,996 \times 10^{-1}$	$1,027 \times 10^1$
320x96	$3,5568654 \times 10^2$	$9,418 \times 10^{-1}$	5,027
Função de interpolação CDS [$p_L = 1$]			
10x3	$3,5896103 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,5712874 \times 10^2$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,5701053 \times 10^2$	3,954	$3,546 \times 10^{-1}$
80x24	$3,5709754 \times 10^2$	---	$2,610 \times 10^{-1}$ **
160x48	$3,5717316 \times 10^2$	$2,024 \times 10^{-1}$	1,506
320x96	$3,5721645 \times 10^2$	$8,049 \times 10^{-1}$	$1,738 \times 10^{-1}$

Tabela C.25: Ordem aparente da solução numérica para o empuxo no vácuo (F) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento em equilíbrio químico, modelo 10).

Malha	Solução numérica [N]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
20x6	$1,7096047 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,6827599 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
80x24	$1,6721327 \times 10^4$	1,337	$3,188 \times 10^2$
160x48	$1,6671560 \times 10^4$	1,094	$1,493 \times 10^2$
320x96	$1,6647776 \times 10^4$	1,065	$7,135 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 1$]			
10x3	$1,7075652 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$1,6703997 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,6641051 \times 10^4$	2,562	$1,888 \times 10^2$
80x24	$1,6628601 \times 10^4$	2,338	$3,735 \times 10^1$
160x48	$1,6625733 \times 10^4$	2,118	8,605
320x96	$1,6624859 \times 10^4$	1,715	2,621

Tabela C.26: Ordem aparente da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira sobre a linha de simetria (T_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento em equilíbrio químico, modelo 10).

Malha	Solução numérica [K]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
20x6	$2,6651975 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,6327514 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
80x24	$2,6458735 \times 10^3$	---	$3,937 \times 10^1$ **
160x48	$2,6407370 \times 10^3$	---	$1,541 \times 10^1$ **
320x96	$2,6377974 \times 10^3$	$8,052 \times 10^{-1}$	$1,180 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 1$]			
10x3	$2,6201547 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,6292196 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,6327514 \times 10^3$	1,360	$1,060 \times 10^1$
80x24	$2,6341626 \times 10^3$	1,323	4,234
160x48	$2,6346093 \times 10^3$	1,660	1,340
320x96	$2,6347142 \times 10^3$	2,091	$3,146 \times 10^{-1}$

Tabela C.27: Ordem aparente da solução numérica para a pressão na saída da tubeira sobre a linha de simetria (P_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento em equilíbrio químico, modelo 10).

Malha	Solução numérica [Pa]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
20x6	$8,4780307 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$8,3857064 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
80x24	$8,4316893 \times 10^4$	---	$1,379 \times 10^3$ **
160x48	$8,3755534 \times 10^4$	---	$1,684 \times 10^3$ **
320x96	$8,3372763 \times 10^4$	$5,524 \times 10^{-1}$	$2,461 \times 10^3$
Função de interpolação CDS [$p_L = 1$]			
10x3	$8,6246037 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$8,4299646 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$8,3857064 \times 10^4$	2,137	$1,328 \times 10^3$
80x24	$8,3541088 \times 10^4$	$4,861 \times 10^{-1}$	$2,366 \times 10^3$
160x48	$8,3301144 \times 10^4$	$3,971 \times 10^{-1}$	$2,272 \times 10^3$
320x96	$8,3148085 \times 10^4$	$6,486 \times 10^{-1}$	$8,089 \times 10^2$

Tabela C.28: Ordem aparente da solução numérica para a velocidade axial na saída da tubeira sobre a linha de simetria (u_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento em equilíbrio químico, modelo 10).

Malha	Solução numérica [m/s]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Função de interpolação UDS [$p_L = 1$]			
20x6	$2,9582740 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,1076660 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
80x24	$3,0655920 \times 10^3$	---	$1,262 \times 10^2$
160x48	$3,0890068 \times 10^3$	---	$7,024 \times 10^1$
320x96	$3,1016949 \times 10^3$	$8,840 \times 10^{-1}$	$4,502 \times 10^1$
Função de interpolação CDS [$p_L = 1$]			
10x3	$3,1086246 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$3,1051628 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$3,1076660 \times 10^3$	---	7,509 **
80x24	$3,1103091 \times 10^3$	$-7,851 \times 10^{-2}$	7,929 **
160x48	$3,1122202 \times 10^3$	$4,678 \times 10^{-1}$	$1,497 \times 10^1$
320x96	$3,1133847 \times 10^3$	$7,147 \times 10^{-1}$	5,448

ESCOAMENTO EM DESEQUILÍBRIO QUÍMICO

Tabela C.29: Ordem aparente da solução numérica para o empuxo no vácuo (F) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento em desequilíbrio químico, funções de interpolação UDS).

Malha	Solução numérica [N]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Modelo químico 31			
10x3	$1,7881702 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$1,7007142 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,6713825 \times 10^4$	1,576	$8,800 \times 10^2$
80x24	$1,6591489 \times 10^4$	1,262	$3,670 \times 10^2$
160x48	$1,6535057 \times 10^4$	1,116	$1,693 \times 10^2$
320x96	$1,6507842 \times 10^4$	1,052	$8,165 \times 10^1$
Modelo químico 32			
10x3	$1,7910062 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$1,7036303 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$1,6744261 \times 10^4$	1,581	$8,761 \times 10^2$
80x24	$1,6622605 \times 10^4$	1,263	$3,650 \times 10^2$
160x48	$1,6566502 \times 10^4$	1,117	$1,683 \times 10^2$

Tabela C.30: Ordem aparente da solução numérica para a temperatura na saída da tubeira sobre a linha de simetria (T_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento em desequilíbrio químico, funções de interpolação UDS).

Malha	Solução numérica [K]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Modelo químico 31			
10x3	$2,0880409 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,1156669 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,0951868 \times 10^3$	---	$6,144 \times 10^1$ **
80x24	$2,0756452 \times 10^3$	---	$5,862 \times 10^1$ **
160x48	$2,0632507 \times 10^3$	$6,569 \times 10^{-1}$	$6,448 \times 10^1$
320x96	$2,0563605 \times 10^3$	$8,471 \times 10^{-1}$	$2,588 \times 10^1$
Modelo químico 32			
10x3	$2,1036413 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,1311855 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,1115427 \times 10^3$	---	$5,893 \times 10^1$ **
80x24	$2,0925778 \times 10^3$	---	$5,689 \times 10^1$ **
160x48	$2,0805250 \times 10^3$	$6,540 \times 10^{-1}$	$6,305 \times 10^1$

Tabela C.31: Ordem aparente da solução numérica para a pressão na saída da tubeira sobre a linha de simetria (P_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento em desequilíbrio químico, funções de interpolação UDS).

Malha	Solução numérica [Pa]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Modelo químico 31			
10x3	$6,7557545 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$7,8539462 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$7,8820486 \times 10^4$	5,288	$8,431 \times 10^2$
80x24	$7,7741502 \times 10^4$	---	$3,237 \times 10^3$ **
160x48	$7,6871876 \times 10^4$	$3,112 \times 10^{-1}$	$1,084 \times 10^4$
320x96	$7,6346622 \times 10^4$	$7,274 \times 10^{-1}$	$2,403 \times 10^3$
Modelo químico 32			
10x3	$6,8495875 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$7,9388496 \times 10^4$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$7,9680580 \times 10^4$	5,221	$8,763 \times 10^2$
80x24	$7,8611653 \times 10^4$	---	$3,207 \times 10^3$ **
160x48	$7,7747021 \times 10^4$	$3,060 \times 10^{-1}$	$1,098 \times 10^4$

Tabela C.32: Ordem aparente da solução numérica para a velocidade axial na saída da tubeira sobre a linha de simetria (u_{ex}) e estimativa U_{GCI} para o erro numérico (tubeira parabólica, escoamento em desequilíbrio químico, funções de interpolação UDS).

Malha	Solução numérica [m/s]	Ordem aparente (p_U)	$U_{GCI}(\phi_1, p)$
Modelo químico 31			
10x3	$2,7273849 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,7633637 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,8193853 \times 10^3$	$-6,388 \times 10^{-1}$	$1,681 \times 10^2$ **
80x24	$2,8578514 \times 10^3$	$5,424 \times 10^{-1}$	$2,528 \times 10^2$
160x48	$2,8800919 \times 10^3$	$7,904 \times 10^{-1}$	$9,146 \times 10^1$
320x96	$2,8920697 \times 10^3$	$8,928 \times 10^{-1}$	$4,194 \times 10^1$
Modelo químico 32			
10x3	$2,7085524 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
20x6	$2,7460456 \times 10^3$	<i>não se aplica</i>	<i>não se aplica</i>
40x12	$2,8017227 \times 10^3$	$-5,705 \times 10^{-1}$	$1,670 \times 10^2$ **
80x24	$2,8398102 \times 10^3$	$5,478 \times 10^{-1}$	$2,474 \times 10^2$
160x48	$2,8618298 \times 10^3$	$7,905 \times 10^{-1}$	$9,053 \times 10^1$