

Modelos para escoamento reativo laminar 2D em tubeira com refrigeração regenerativa e radiativa

Códigos Mach2D 6.1 e RHG2D 1.0

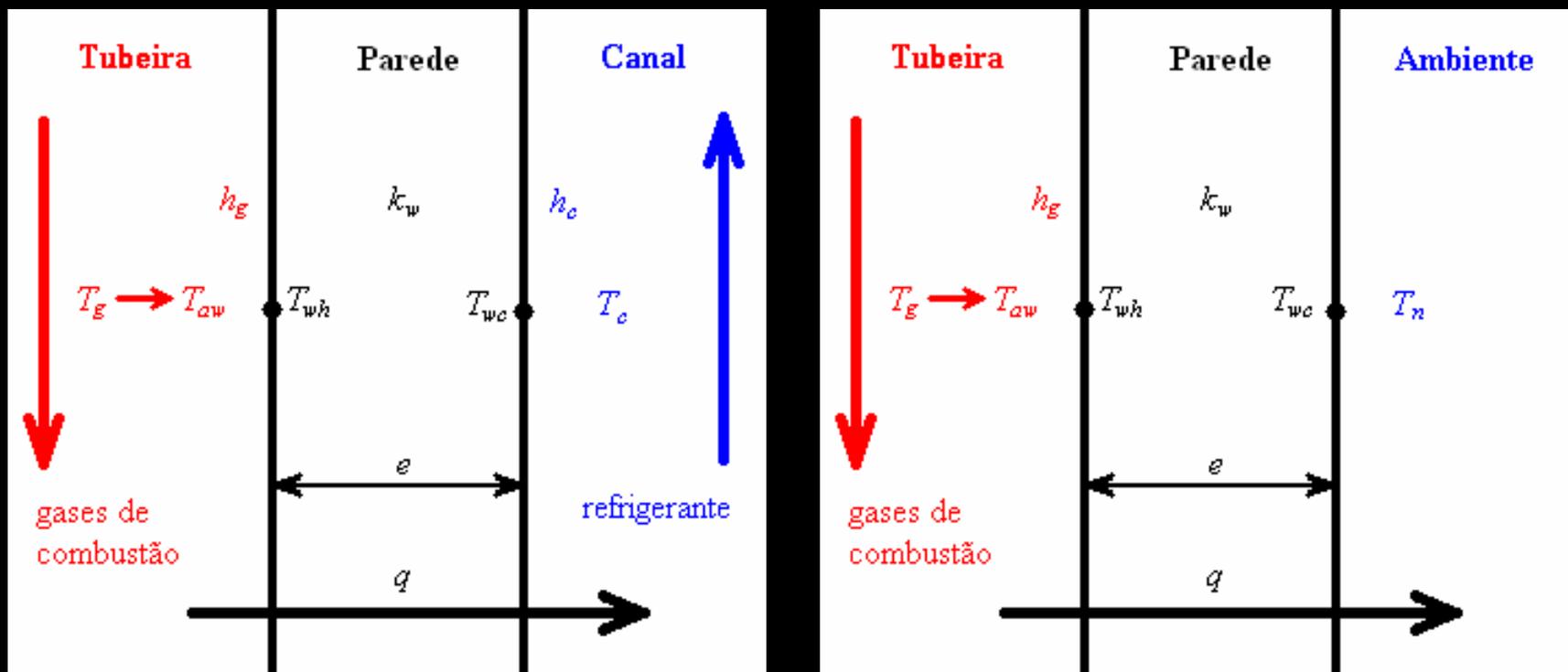
Objetivos

- Implementação de códigos computacionais para solução de escoamento 2D reativo laminar em motores-foguete operando com o sistema H_2/O_2 (código Mach2D 6.1)
- Inclusão de efeitos de transferência de calor para refrigeração regenerativa ou radiativa (código RHG2D 1.0)

Problema

Divisão do problema em três partes:

- Câmara-Tubeira: escoamento reativo, laminar de gases na câmara e tubeira (modelo 2D).
- Parede: condução de calor através da parede entre os gases de combustão e o fluido refrigerante (modelo 1D).
- Canais (refrigeração regenerativa): escoamento turbulento do fluido refrigerante nos canais em torno da tubeira (modelo 1D).
- Radiação para o ambiente (refrigeração radiativa).₃



**Figura 1: Esquemas de transferência de calor
(refrigeração regenerativa à esquerda e refrigeração radiativa à direita).**

Metodologia

- Método dos Volumes Finitos.
- Funções de interpolação de primeira ordem (UDS) e de segunda ordem (CDS), com correção adiada.
- Arranjo co-localizado de variáveis.
- Formulação apropriada a qualquer regime de velocidades.
- Malhas estruturadas, não-ortogonais.

Modelos físicos

- Monoespécie com propriedades constantes
- Monoespécie com propriedades variáveis
- Escoamento congelado
- Escoamento em equilíbrio

Modelos químicos

| Modelo | Número de reações | Número de espécies | Espécies envolvidas |
|--------|-------------------|--------------------|---|
| 0 | 0 | 3 | H ₂ O, O ₂ , H ₂ |
| 1 | 1 | 3 | H ₂ O, O ₂ , H ₂ |
| 2 | 2 | 4 | H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH |
| 3 | 4 | 6 | H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H |
| 4 | 4 | 6 | H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H |
| 5 | 8 | 6 | H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H |
| 7 | 8 | 6 | H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H |
| 10 | 6 | 8 | H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H, HO ₂ , H ₂ O ₂ |
| 9 | 18 | 8 | H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H, HO ₂ , H ₂ O ₂ |

Mach 2D Laminar

- Equação geral:

$$C^\phi \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u \phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (r \rho v \phi) \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} \left(r \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + P^\phi + S^\phi$$

| Equação | ϕ | C^ϕ | Γ^ϕ | P^ϕ | S^ϕ |
|---------|--------|----------|---------------|---|---|
| Massa | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| QML-x | u | 1 | μ | $-\frac{\partial p}{\partial x}$ | $\frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\mu}{r} \frac{\partial}{\partial y} (r v) \right]$ |
| QML-y | v | 1 | μ | $-\frac{\partial p}{\partial y}$ | $\frac{1}{3r} \frac{\partial}{\partial y} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{4}{3} \lambda \frac{u}{r^2} v - \frac{2}{3r} \lambda v \frac{\partial \mu}{\partial y}$ |
| Energia | T | c_p | k | $\frac{\partial p}{\partial t} - uP^u - vP^v$ | $2\mu \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \lambda \left(\frac{v}{r} \right)^2 \right] + \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \frac{v}{r} \right)^2 + S_{eq} + q''$ |

Mach 2D Laminar

- Termo-fonte da energia (equilíbrio local):

$$S_{eq} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_{i=1}^{N_e} \rho h_i Y_i u \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} \left(\sum_{i=1}^{N_e} r \rho h_i Y_i v \right)$$

- Equação de estado:

$$p = \rho R T$$

- Relações auxiliares:

$$\gamma = \frac{c_p}{c_p - R} \quad M = \sqrt{\frac{u^2 + v^2}{\gamma R T}}$$

Refrigeração

- Termo-fonte da energia (interação com as paredes):

$$q'' = q''_{conv} + q''_{rad}$$

- Fluxo convectivo:

$$q''_{conv} = h_g (T_{wall} - T_{aw})$$

$$T_{aw} = T \left[1 + rec \frac{(\gamma - 1)}{2} M^2 \right]$$

- Fluxo radiativo:

$$q''_{rad} = \bar{\varepsilon} \sigma (T_{wall}^4 - T^4)$$

Refrigeração regenerativa

- Escoamento nos canais:

$$\frac{d}{ds}(\rho_c u_c S_c) = 0$$

$$\frac{d}{ds}(\rho_c u_c S_c u_c) = -S_c \frac{dp_c}{ds} + F'_c$$

$$(c_p)_c \frac{d}{ds}(\rho_c u_c S_c T_c) = \beta T_c u_c S_c \frac{dp_c}{ds} + q'_c$$

$$F'_c = -\frac{\pi}{8} f_c \rho_c u_c |u_c| D_c$$

$$q'_c = |u_c F'_c| + S'_{wc} h_c (T_{wc} - T_c)$$

Refrigeração regenerativa

- Condução através das paredes:

$$q_w'' = \frac{\bar{k}_w}{e} (T_{wh} - T_{wc})$$

- Balanço de energia (refrigeração regenerativa):

$$q = (q_{conv}'' + q_{rad}'') S_{wh} = q_w'' S_{wh} = q_c'' S_{wc}$$

Refrigeração radiativa

- Troca térmica com o ambiente:

$$q''_{r_ext} = \varepsilon \sigma (T_{wc}^4 - T_n^4)$$

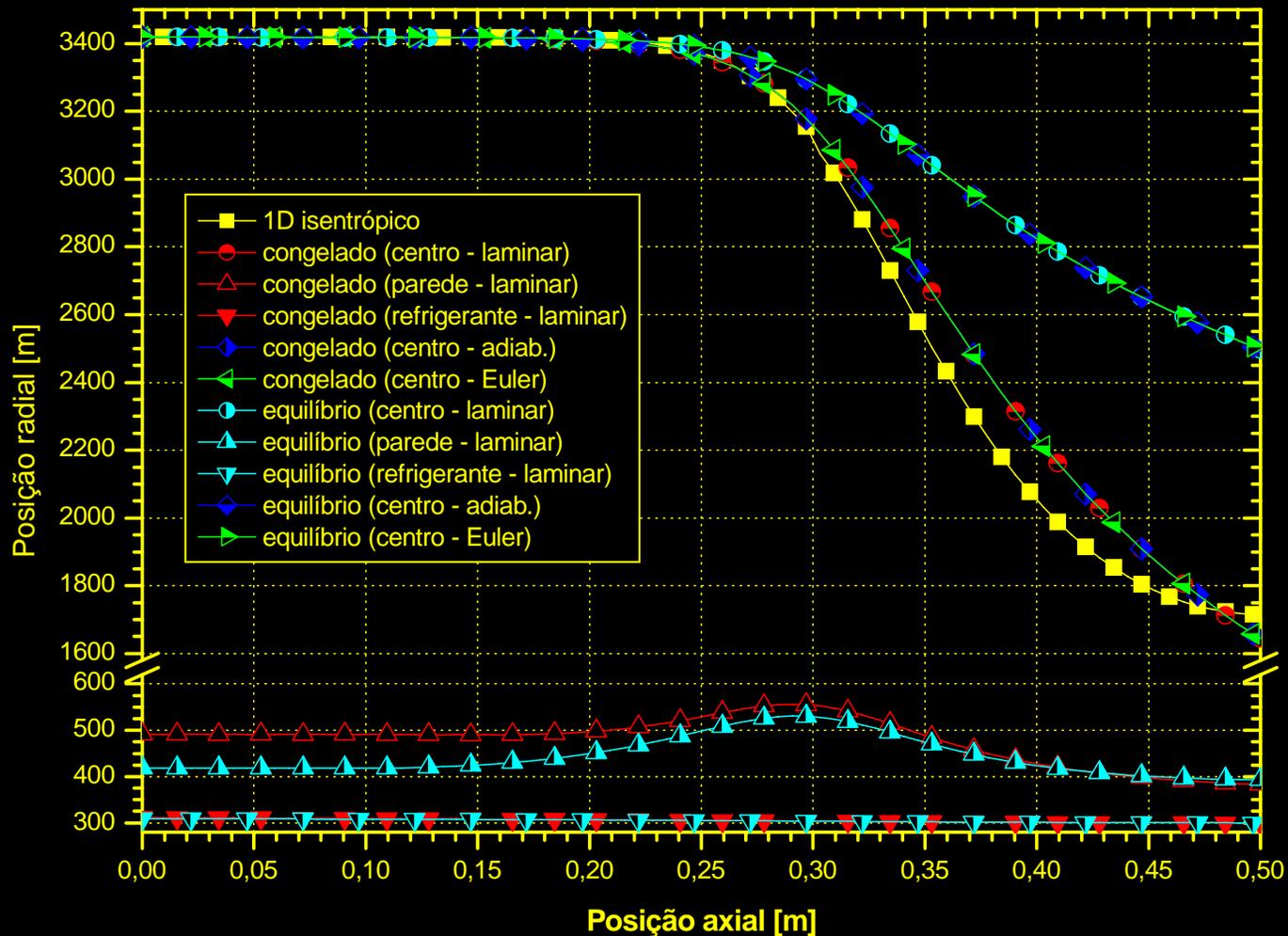
- Balanço de energia (refrigeração radiativa):

$$q = (q''_{conv} + q''_{rad}) S_{wh} = q''_w S_{wh} = q''_{r_ext} S_{we}$$

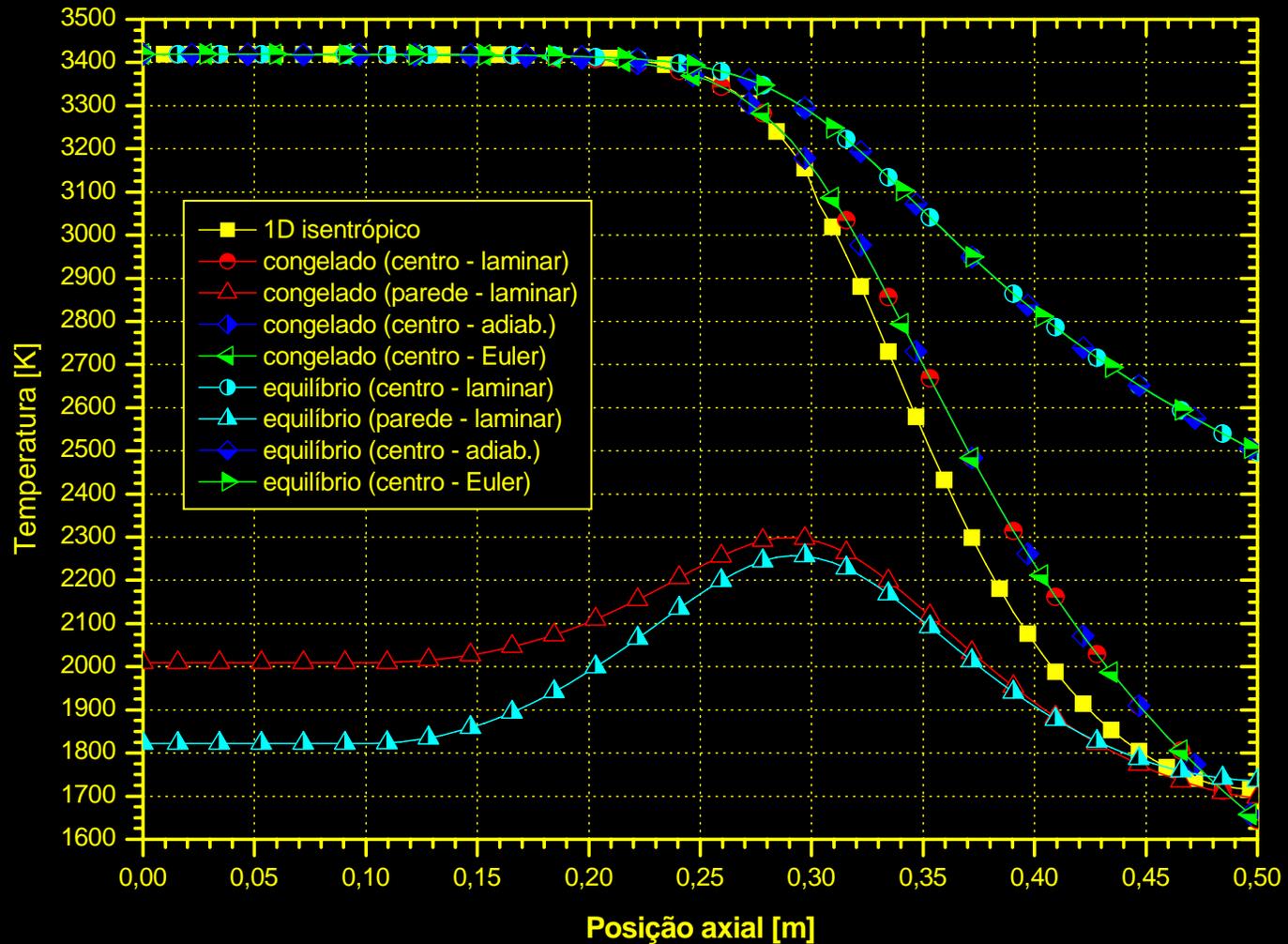
Algoritmo

- 1) Estimativa inicial da distribuição de temperaturas da parede.
- 2) Solução do escoamento laminar reativo 2D.
- 3) Solução do escoamento de refrigerante (caso de refrigeração regenerativa) ou solução da equação de Stefan-Boltzmann (refrigeração radiativa).
- 4) Estimativa da razão entre a taxa de transferência de calor dos gases de combustão e a taxa de transferência de calor do sistema de refrigeração.
- 5) Estimativa da temperatura da parede.
- 6) Estimativa do erro referente à taxa de transferência de calor.
- 7) Retornar ao item 2 até o número desejado de iterações ou até o atendimento de um critério de parada pré-definido.

Refrigeração regenerativa



Refrigeração radiativa



Coeficiente de descarga [adim.]

| Modelo | Sem refrigeração (tubeira adiabática) | Refrigeração regenerativa | Refrigeração radiativa |
|---|--|---------------------------|------------------------|
| Escoamento invíscido monoespécie | 9,98771E-01 | --- | --- |
| Escoamento laminar monoespécie | 9,98515E-01 | 9,98950E-01 | 9,99148E-01 |
| Escoamento invíscido congelado de mistura de gases (modelo 3) | 9,98789E-01 | --- | --- |
| Escoamento laminar congelado de mistura de gases (modelo 3) | 9,98537E-01 | 9,99297E-01 | 9,99439E-01 |
| Escoamento invíscido de mistura de gases em equilíbrio (modelo 3) | 1,01454E+00 | --- | --- |
| Escoamento laminar de mistura de gases em equilíbrio (modelo 3) | 1,01427E+00 | 1,01492E+00 | 1,01473E+00 |

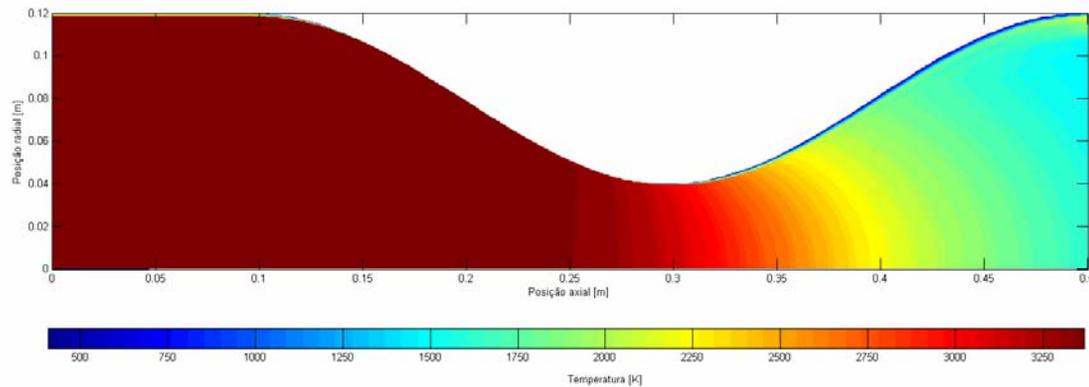
Impulso específico [s]

| Modelo | Sem refrigeração (tubeira adiabática) | Refrigeração regenerativa | Refrigeração radiativa |
|--|--|--------------------------------------|-------------------------------|
| Escoamento invíscido monoespécie | 3,43442E+02 | --- | --- |
| Escoamento laminar monoespécie | 3,43197E+02 | 3,43289E+02 | 3,43004E+02 |
| Escoamento invíscido congelado de mistura de gases (modelo 3) | 3,43541E+02 | --- | --- |
| Escoamento laminar congelado de mistura de gases (modelo 3) | 3,43298E+02 | 3,433104E+02 | 3,43068E+02 |
| Escoamento invíscido de mistura de gases em equilíbrio (modelo 3) | 3,58306E+02 | --- | --- |
| Escoamento laminar de mistura de gases em equilíbrio (modelo 3) | 3,58003E+02 | 3,57733E+02 | 3,57879E+02 |

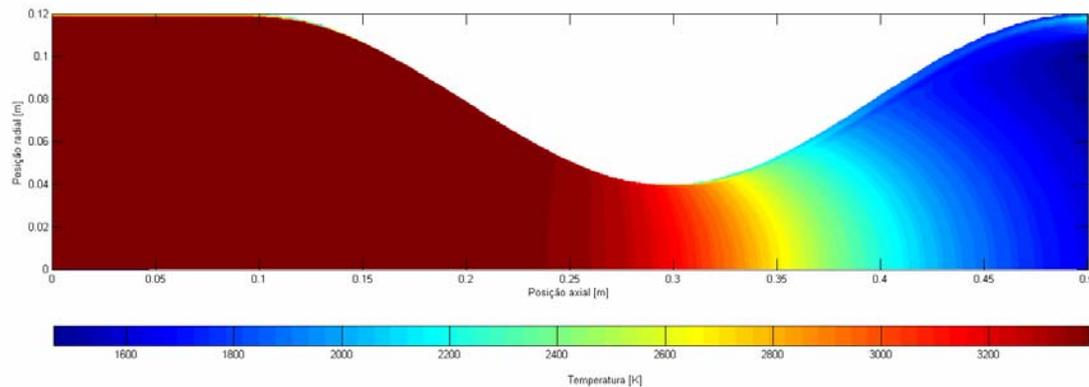
Empuxo total (vácuo) [N]

| Modelo | Sem refrigeração (tubeira adiabática) | Refrigeração regenerativa | Refrigeração radiativa |
|--|--|---------------------------|------------------------|
| Escoamento invíscido monoespécie | 1,63253E+04 | --- | --- |
| Escoamento laminar monoespécie | 1,63095E+04 | 1,63209E+04 | 1,63106E+04 |
| Escoamento invíscido congelado de mistura de gases (modelo 3) | 1,63303E+04 | --- | --- |
| Escoamento laminar congelado de mistura de gases (modelo 3) | 1,63146E+04 | 1,63250E+04 | 1,63157E+04 |
| Escoamento invíscido de mistura de gases em equilíbrio (modelo 3) | 1,73008E+04 | --- | --- |
| Escoamento laminar de mistura de gases em equilíbrio (modelo 3) | 1,72815E+04 | 1,72790E+04 | 1,72806E+04 |

Distribuição de temperaturas – escoamento congelado

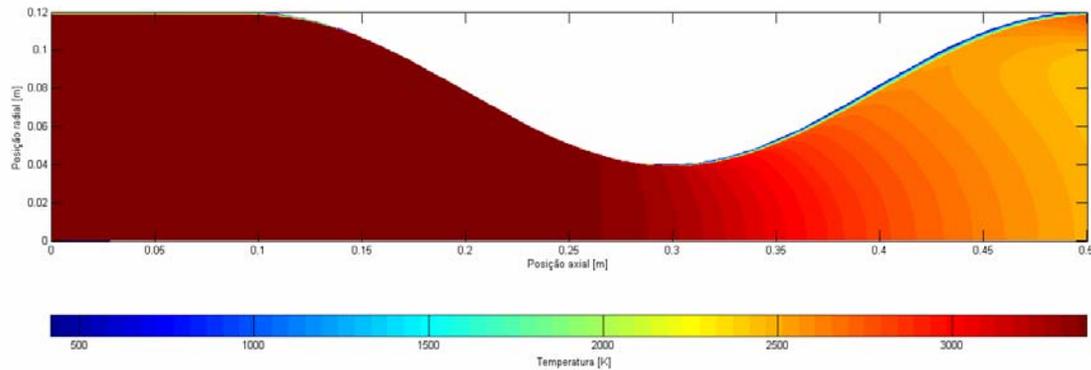


Refrigeração regenerativa

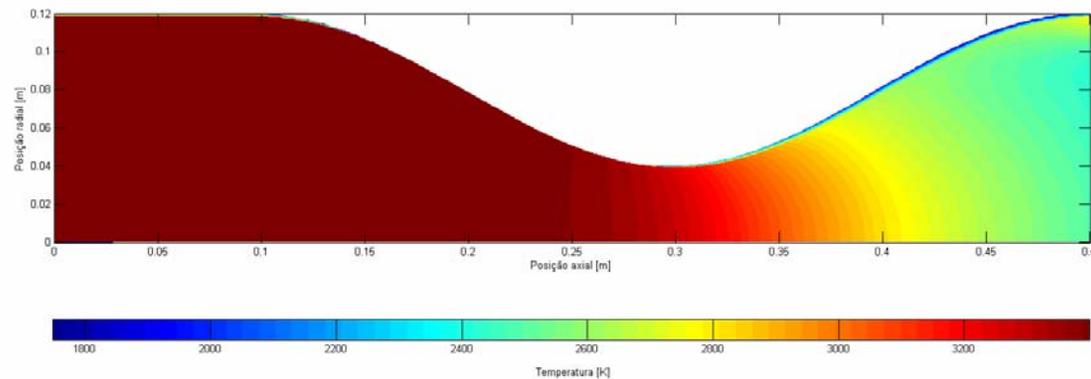


Refrigeração radiativa

Distribuição de temperaturas – escoamento em equilíbrio

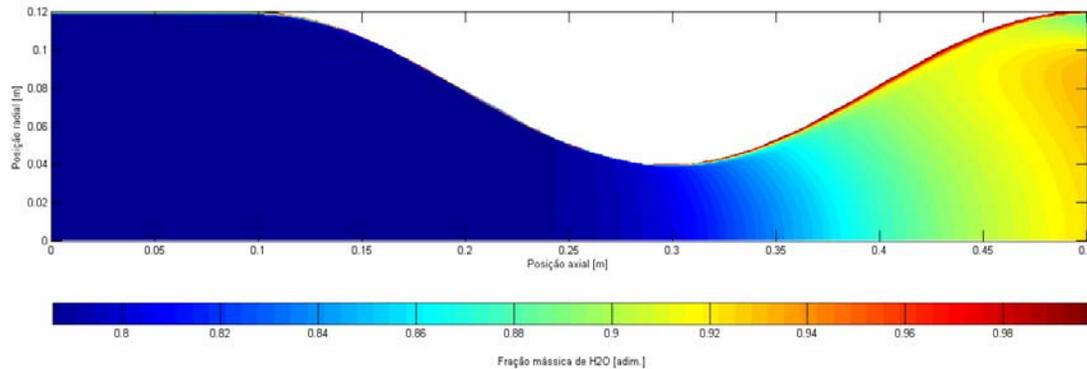


Refrigeração regenerativa

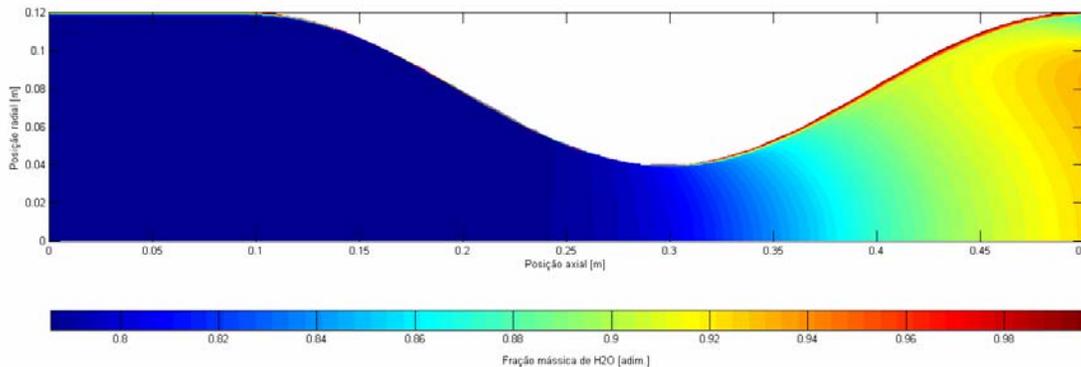


Refrigeração radiativa

Frações mássicas (H_2O) – escoamento em equilíbrio



Refrigeração regenerativa



Refrigeração radiativa

Conclusões

- Ratificação de resultados observados no modelo unidimensional: resultados de modelos de 6 e 8 espécies muito próximos; temperatura máxima da parede (com refrigeração) alcançada com o modelo de escoamento congelado.
- Maior dependência do modelo físico adotado do que do sistema de refrigeração escolhido.
- Temperatura na parede: temperaturas muito superiores quando empregada a refrigeração radiativa em relação à regenerativa.

Modelo químico reduzido

Modelo químico 13

Dados gerais

- 5 espécies químicas (H_2O , O_2 , H_2 , O , H)
- 3 reações:



Testes realizados

- Razão OF = 7.936682739 (estequiométrica)
- Condições de equilíbrio químico

| Problema | Temperatura (K) | Pressão total (bar) |
|----------|-----------------|---------------------|
| E1 | 4000 | 200 |
| E2 | 3000 | 20 |
| E3 | 2000 | 2 |
| E4 | 1500 | 0,2 |
| E5 | 600 | 0,02 |

Resultados globais – problema E1

| Modelo | M (kg/kmol) | ρ (kg/m ³) | c congelado (J/kg.K) | γ congelado (adim.) | R (J/kg.K) | C (mol/cm ³) |
|-----------------|------------------|--------------------------------|---------------------------|-------------------------------|-----------------|-------------------------------|
| 0 | 18,015 | 10,8336 | 3295,5 | 1,1629 | 461,53 | 6,0136e-4 |
| 1 | 16,865 | 10,1421 | 3300,0 | 1,1756 | 493,00 | 6,0136e-4 |
| 2 | 16,196 | 9,7395 | 3288,8 | 1,1850 | 513,37 | 6,0136e-4 |
| 3 | 15,536 | 9,3425 | 3293,5 | 1,1940 | 535,19 | 6,0136e-4 |
| 4 | 15,536 | 9,3425 | 3293,5 | 1,1940 | 535,19 | 6,0136e-4 |
| 5 | 15,536 | 9,3425 | 3293,5 | 1,1940 | 535,19 | 6,0136e-4 |
| 7 | 15,536 | 9,3425 | 3293,5 | 1,1940 | 535,19 | 6,0136e-4 |
| 10 | 15,537 | 9,3433 | 3293,6 | 1,1940 | 535,14 | 6,0136e-4 |
| CEA | 15,516 | 9,3309 | 3290,8 | --- | --- | --- |
| 9 | 15,537 | 9,3433 | 3293,6 | 1,1940 | 535,14 | 6,0136e-4 |
| Teqworks | 15,503 | 9,3230 | --- | --- | --- | --- |
| 13 | 16,131 | 9,7008 | 3304,6 | 1,1848 | 515,42 | 6,0136e-4 |

Frações mássicas – problema E1

| Modelo | H ₂ O | O ₂ | H ₂ | OH | O | H | HO ₂ | H ₂ O ₂ | O ₃ |
|-----------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|-------------------------------|------------------|
| 0 | 1,0000e-0 | 0 | 0 | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 1 | 8,6362e-1 | 1,2112e-1 | 1,5260e-2 | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 2 | 7,7532e-1 | 7,7639e-2 | 1,7462e-2 | 1,2958e-1 | --- | --- | --- | --- | --- |
| 3 | 7,5268e-1 | 7,7291e-2 | 1,7347e-2 | 1,2886e-1 | 2,1134e-2 | 2,6914e-3 | --- | --- | --- |
| 4 | 7,5268e-1 | 7,7291e-2 | 1,7347e-2 | 1,2886e-1 | 2,1134e-2 | 2,6914e-3 | --- | --- | --- |
| 5 | 7,5268e-1 | 7,7291e-2 | 1,7347e-2 | 1,2886e-1 | 2,1134e-2 | 2,6914e-3 | --- | --- | --- |
| 7 | 7,5268e-1 | 7,7291e-2 | 1,7347e-2 | 1,2886e-1 | 2,1134e-2 | 2,6914e-3 | --- | --- | --- |
| 10 | 7,5214e-1 | 7,6915e-2 | 1,7376e-2 | 1,2865e-1 | 2,1082e-2 | 2,6935e-3 | 9,2804e-4 | 2,1200e-4 | --- |
| CEA | 7,4839e-1 | 7,4654e-2 | 1,7424e-2 | 1,3508e-1 | 2,0636e-2 | 2,6850e-3 | 9,2359e-4 | 2,0703e-4 | 2,6050e-6 |
| 9 | 7,5214e-1 | 7,6915e-2 | 1,7376e-2 | 1,2865e-1 | 2,1082e-2 | 2,6935e-3 | 9,2804e-4 | 2,1200e-4 | --- |
| Teqworks | 7,478e-1 | 7,8259e-2 | 1,7690e-2 | 1,318e-1 | 2,1167e-2 | 2,7045e-3 | 5,6768e-4 | 5,534e-13 | 1,3402e-6 |
| 13 | 8,3970e-1 | 1,1686e-1 | 1,5445e-2 | --- | 2,5502e-2 | 2,4922e-3 | --- | --- | --- |

Temperatura de combustão

| Problema | CEA | Gibbs (mod. 9) | Erro (%) Gibbs (mod. 9) | Gibbs (mod. 13) | Erro (%) Gibbs (mod. 13) | Outra fonte | Erro (%) outra fonte |
|----------|----------------|----------------|-------------------------|-----------------|--------------------------|---------------|----------------------|
| C2 | 1797,78 | 1796,65 | 0,063 | 2067,40 | -15,0 | [Tw] 1798,71 | -0,052 |
| C3 | 2974,69 | 2976,10 | -0,047 | 3208,91 | -7,87 | [Tw] 2986,92 | -0,41 |
| C4 | 3595,43 | 3599,98 | -0,13 | 3862,27 | -7,42 | [Tw] 3610,55 | -0,42 |
| C5 | 3644,31 | 3649,47 | -0,14 | 3918,00 | -7,51 | [Tw] 3658,22 | -0,38 |
| C6 | 3507,10 | 3513,33 | -0,17 | 3810,02 | -8,64 | [Tw] 3523,28 | -0,46 |
| C7 | 3368,28 | 3374,95 | -0,20 | 3688,90 | -9,52 | [Tw] 3385,28 | -0,50 |
| C8 | 3234,72 | 3241,35 | -0,20 | 3563,97 | -10,2 | [Tw] 3251,62 | -0,52 |
| C9 | 3596,61 | 3601,17 | -0,13 | 3863,74 | -7,40 | [Wang] 3639,0 | -1,2 |
| C10 | 3237,61 | 3240,86 | -0,10 | 3385,99 | -7,60 | [Kim] 3300 | -1,9 |
| C11 | 2964,90 | 2970,91 | -0,20 | 3186,87 | -7,49 | [Kim] 3073 | -3,6 |
| C12 | 2998,45 | 3000,31 | -0,062 | 3222,44 | -7,47 | [Huzel] 3013 | -0,49 |
| C13 | 3235,70 | 3238,85 | -0,097 | 3469,01 | -7,21 | [Huzel] 3251 | -0,47 |
| C14 | 2668,70 | 2669,55 | -0,032 | 2900,94 | -8,70 | [Sutton] 2959 | -11 |
| C15 | 2954,33 | 2956,01 | -0,057 | 3178,25 | -7,58 | [Sutton] 2999 | -1,5 |
| C16 | 2946,10 | 2947,75 | -0,056 | 3170,06 | -7,60 | [Sarner] 2977 | -1,0 |

Conclusões

- As temperaturas de mistura de gases são superestimadas.
- De modo geral, os resultados são menos acurados que os do modelo 2 (de 4 espécies).
- A não inclusão do radical hidroxila (OH) não o torna adequado para estudos aprofundados em escoamentos reativos.

**Alterações no transporte de
informações para o escoamento
em equilíbrio**

Código Mach1D 5.0

Modificação proposta

- Transportar informações quanto a frações mássicas e graus de reação de dissociação de uma iteração para outra para as diversas subrotinas do código Mach1D 5.0.

Resultados obtidos

| Modelo químico | 80 volumes | | | 640 volumes | | |
|----------------|------------|------------|---------|-------------|------------|---------|
| | Original | Modificado | Redução | Original | Modificado | Redução |
| Modelo 3 | 1,127 min | 38,47 s | 43,11% | 1,180 h | 44,05 min | 37,78% |
| Modelo 4 | 50,07 s | 29,45 s | 41,18% | 52,96 min | 35,00 min | 33,91% |
| Modelo 5 | 2,974 h | 28,33 s | 99,74% | --- | 40,02 min | --- |
| Modelo 7 | 4,555 h | 37,83 s | 99,77% | --- | 49,29 min | --- |
| Modelo 9 | 1,744 h | 40,28 s | 99,36% | --- | 1,080 h | --- |
| Modelo 10 | 1,474 min | 51,80 s | 41,43% | 1,564 h | 59,97 min | 36,09% |

Resultados obtidos

- Modelo químico 3 (Estimador GCI)

| Variável | 80 volumes | | 640 volumes | |
|-----------------|--------------------------------------|--------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|
| | Original | Modificado | Original | Modificado |
| C_d [adim] | $0,98 \pm 1 \times 10^{-2}$ | $0,980 \pm 5 \times 10^{-3}$ | $0,9784 \pm 6 \times 10^{-4}$ | $0,9784 \pm 5 \times 10^{-4}$ |
| F^* [adim] | $1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$ | $1,013 \pm 5 \times 10^{-3}$ | $1,0116 \pm 1 \times 10^{-4}$ | $1,01159 \pm 3 \times 10^{-5}$ |
| P_{ex} [Pa] | $3,63 \times 10^4 \pm 5 \times 10^2$ | $3,63 \times 10^4 \pm 2 \times 10^2$ | $3,618 \times 10^4 \pm 6 \times 10^1$ | $3,618 \times 10^4 \pm 6 \times 10^1$ |
| T_{ex} [K] | $2461,2 \pm 3 \times 10^{-1}$ | $2461,2 \pm 1 \times 10^{-1}$ | 2460 ± 1 | 2460 ± 1 |
| u_{ex} [m/s] | 3427 ± 2 | $3426,7 \pm 7 \times 10^{-1}$ | 3429 ± 2 | 3429 ± 2 |
| M_{ex} [adim] | $2,911 \pm 2 \times 10^{-3}$ | $2,9111 \pm 6 \times 10^{-4}$ | $2,914 \pm 3 \times 10^{-3}$ | $2,914 \pm 3 \times 10^{-3}$ |

Conclusões

- Redução mínima de 30% do tempo de CPU para determinada malha.
- Para os modelos químicos 3, 4 e 10, não houve mudança significativa do número de algarismos significativos; no caso dos demais modelos, houve aumento do número de algarismos significativos.
- Não houve alteração nos resultados numéricos obtidos, com base na análise de erros numéricos.

Modificação das condições de contorno na entrada da tubeira

**Parede parcialmente catalítica
e não-catalítica**

Definições

- Parede com equilíbrio catalítico: reações químicas ocorrem a uma taxa infinita (equilíbrio químico local).
- Parede parcialmente catalítica: as reações químicas são catalisadas a uma taxa finita. Caso limite: quando não há recombinação na parede – parede não-catalítica.
- Parede totalmente catalítica: todos os átomos (espécies monoatômicas) são recombinados.

Resultados obtidos

Coeficiente de descarga [adim.]

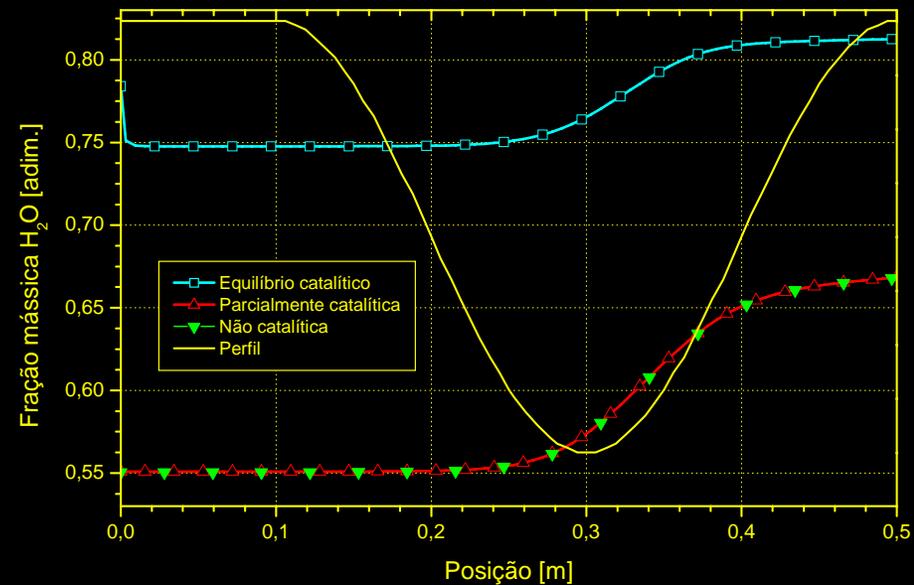
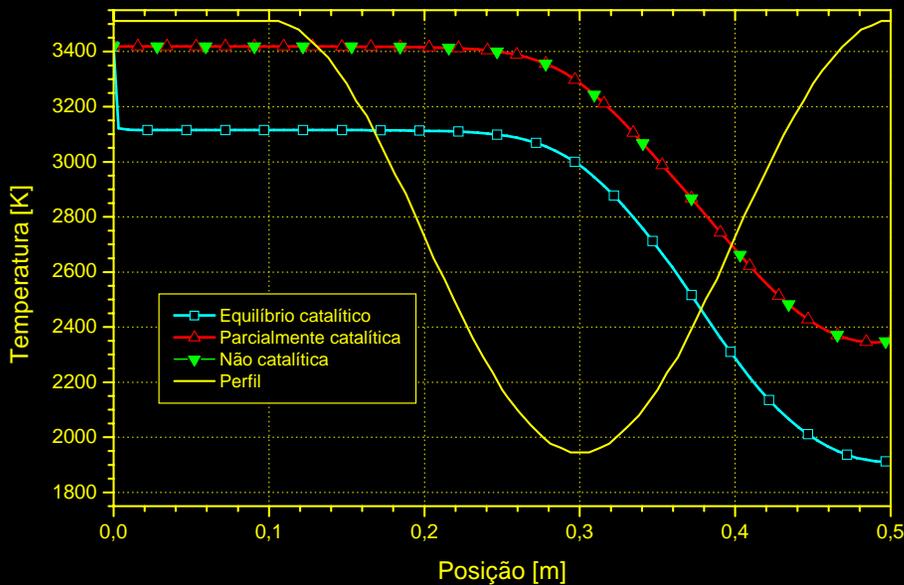
| Modelo químico | Equilíbrio Catalítico | Parcialmente Catalítica | Não Catalítica |
|----------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|
| Modelo 31 | $1,008 \pm 3 \times 10^{-3}$ | $0,891 \pm 5 \times 10^{-3}$ | $0,891 \pm 4 \times 10^{-3}$ |
| Modelo 32 | $1,007 \pm 3 \times 10^{-3}$ | $0,891 \pm 5 \times 10^{-3}$ | $0,890 \pm 3 \times 10^{-3}$ |
| Modelo 5 | $1,007 \pm 3 \times 10^{-3}$ | $0,890 \pm 5 \times 10^{-3}$ | $0,890 \pm 3 \times 10^{-3}$ |
| Modelo 10 | $1,008 \pm 3 \times 10^{-3}$ | $0,891 \pm 5 \times 10^{-3}$ | $0,891 \pm 4 \times 10^{-3}$ |

Temperatura [K]

| Modelo químico | Equilíbrio Catalítico | Parcialmente Catalítica | Não Catalítica |
|----------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|
| Modelo 31 | $1910 \pm 1 \times 10^1$ | $2350 \pm 2 \times 10^1$ | $2350 \pm 1 \times 10^1$ |
| Modelo 32 | $1980 \pm 1 \times 10^1$ | $2440 \pm 1 \times 10^1$ | 2439 ± 8 |
| Modelo 5 | 2059 ± 9 | $2440 \pm 1 \times 10^1$ | 2438 ± 8 |
| Modelo 10 | $1910 \pm 1 \times 10^1$ | $2350 \pm 2 \times 10^1$ | $2350 \pm 1 \times 10^1$ |

Resultados obtidos

Malha de 80 volumes,
modelo químico 31



Conclusões

- Mudanças significativas entre as CC de parede com equilíbrio catalítico e as paredes parcialmente catalítica e não-catalítica. Comparando-se estas últimas duas, não houve variação significativa nos resultados.
- Novas C.C: não há descontinuidade nos perfis (temperatura e frações mássicas, por exemplo).
- Parede parcialmente catalítica: menor número de iterações e maior quantidade de algarismos significativos.
- Número de iterações para as novas CC: superior ao da parede com equilíbrio catalítico.