



Simulação Numérica de Escoamento Reativo em Motor-Foguete com Refrigeração Regenerativa

Projeto CFD-5 apoiado pela Agência Espacial Brasileira (AEB) Anúncio de Oportunidades 01/2004 do Programa UNIESPAÇO Tema: Veículos Espaciais Tópico: Processos de Combustão em Motores-Foguete

Relatório técnico 4 do projeto CFD-5/UFPR: programa RHG1D 3.0

ESCOAMENTO 1D DE MISTURA DE GASES COM REFRIGERAÇÃO

Carlos Henrique Marchi, Dr. Eng. Mec. Luciano Kiyoshi Araki, Eng. Mec.

Universidade Federal do Paraná (UFPR) Departamento de Engenharia Mecânica (DEMEC)

Curitiba, 5 de março de 2007.

<u>SUMÁRIO</u>

LISTA DE FIGURAS	3
LISTA DE TABELAS	4
RESUMO	5
LISTA DE SÍMBOLOS	6
1. INTRODUÇÃO	9
1.1. Programa Mach1D 5.0	10
1.2. Programa CANAL 2.0	12
1.2.1 Condução através das paredes	13
1.3. Programa RHG 3.0	15
1.4. Objetivos do Relatório	15
1.5. Definição do problema	15
1.6. Variáveis de interesse	23
2. MODELOS FÍSICO, MATEMÁTICO E NUMÉRICO	24
2.1. Modelo físico:	24
2.2. Modelo matemático (escoamento do refrigerante)	24
2.3. Modelo numérico (escoamento do refrigerante)	27
2.3.1 Equação da conservação da quantidade de movimento linear	27
2.3.2 Cálculo das velocidades nas faces	
2.3.3 Equação da energia térmica	
2.3.4 Equação da massa global	
2.3.5 Cálculo da massa específica nodal e nas faces	35
2.3.6 Equações de correção com <i>P</i> '	
2.3.7 Algoritmo (Programa CANAL 2.0)	
2.4. Algoritmo de acoplamento (Programa RHG 3.0)	
3. RESULTADOS NUMÉRICOS	40
3.1. Estimativa de erros	40
3.2. Resultados e análise	42
4. CONCLUSÃO	56
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1: Parâmetros geométricos do motor-foguete. Fonte: Marchi et al., 2000	16
Figura 1.2: Motor-foguete bipropelente com refrigeração regenarativa. Fonte: Marchi et al.	
(2000)	17
Figura 1.3: Detalhe dos canais do sistema de refrigeração regenerativa (seção A-A). Fonte:	
Marchi et al. (2000).	17
Figura 1.4: Condições de contorno para o escoamento na tubeira e nos canais de refrigeração	21
Figura 2.1: Fluxo de calor entre os gases de combustão e o líquido refrigerante	26
Figura 3.1: Campo de empuxo (F) ao longo da tubeira.	51
Figura 3.2: Campo de fração mássica de H ₂ O ao longo da tubeira.	51
Figura 3.3: Campo de temperatura (T) ao longo da tubeira.	51
Figura 3.4: Campo de velocidade (u) ao longo da tubeira.	52
Figura 3.5: Fluxo de calor (Q) dos gases de combustão para as paredes, ao longo da tubeira	52
Figura 3.6: Temperatura da parede em contato com os gases de combustão, ao longo da	
tubeira	52
Figura 3.7: Campo de pressão ao longo dos canais de refrigeração.	53
Figura 3.8: Campo de temperaturas ao longo dos canais de refrigeração	53
Figura 3.9: Temperatura dos gases de combustão e coeficiente de transferência de calor por	
convecção ao longo da tubeira	54
Figura 3.10: Temperatura da parede e fluxo de calor para a parede ao longo da tubeira	55

LISTA DE TABELAS

Tabela 1.1: Modelos de reações em equilíbrio químico adotados no programa Mach1D 5.0	11
Tabela 1.2: Modelos de reações em desequilíbrio químico (taxa finita) incluídas no programa	
Mach1D 5.0	11
Tabela 1.3: Parâmetros geométricos, parâmetros físicos e microcomputador utilizados nos	
estudos efetuados.	20
Tabela 3.1: Exemplo de entrada de dados do arquivo "rhg.base.ent", usado para simulação do	
programa RHG 3.0, para obtenção da solução numérica	42
Tabela 3.2: Exemplo de entrada de dados do arquivo "canal.arquivo.ent", usado para	
simulação do programa CANAL 2.0, para obtenção da solução numérica.	43
Tabela 3.3: Exemplo de entrada de dados do arquivo "canal.geral.ent", usado para simulação	
do programa CANAL 2.0, para obtenção da solução numérica.	43
Tabela 3.4: Exemplo de entrada de dados do arquivo "canal.exato.ent", usado para simulação	
do programa CANAL 2.0, para obtenção da solução numérica.	43
Tabela 3.5: Exemplo de entrada de dados do arquivo "canal.numérico_geral.ent", usado para	
simulação do programa CANAL 2.0, para obtenção da solução numérica.	44
Tabela 3.6: Exemplo de entrada de dados do arquivo "canal.numérico_variavel.ent", usado	
para simulação do programa CANAL 2.0, para obtenção da solução numérica	44
Tabela 3.7: Dados gerais das simulações para escoamento reativo unidimensional com	
refrigeração regenerativa, para uma malha de 80 volumes de controle	45
Tabela 3.8: Frações mássicas da mistura de gases de combustão, para diferentes modelos	
físicos e químicos, obtidas utilizando-se os programas RHG, Mach1D (malhas de 80	
volumes) e CEA	47
Tabela 3.9: Quadro comparativo de resultados para coeficiente de descarga, empuxo dinâmico	
adimensional e pressão na saída da tubeira, utilizando os programas RHG, Mach1D	
(malha de 80 volumes) e CEA.	48
Tabela 3.10: Quadro comparativo de resultados para temperatura, velocidade e número de	
Mach, todos na saída da tubeira, utilizando os programas RHG, Mach1D (malha de 80	
volumes) e CEA	48
Tabela 3.11: Propriedades termofísicas do refrigerante e da parede da tubeira.	49

RESUMO

Neste relatório são apresentados os modelos físico, matemático e numérico (bem como os resultados numéricos) do programa RHG, versão 3.0, escrito em linguagem Fortran 95. Quatro capítulos compõem o presente relatório. No primeiro capítulo são apresentadas generalidades sobre o escoamento dos gases ao longo da tubeira, a transferência de calor na parede e o escoamento do refrigerante, bem como a geometria da tubeira utilizada nas simulações.

O segundo capítulo apresenta os modelos físico, matemático e numérico do escoamento do refrigerante. Também são apresentados os algoritmos implementados para o escoamento do refrigerante e o acoplamento entre os escoamentos do refrigerante e dos gases de combustão na tubeira, considerando-se a condução de calor ao longo das paredes da mesma.

No capítulo 3 são apresentados os resultados numéricos para os modelos de escoamento congelado, em equilíbrio químico local e com taxa finita de reação – além do escoamento de monoespécie com propriedades variáveis. Utilizou-se, para todos os modelos, uma malha de 80 volumes de controle, por esta apresentar erros numéricos compatíveis aos erros experimentais. De um modo geral, não se verificou grande variação entre os resultados numéricos de modelos químicos de 6 e de 8 espécies, conforme já visto no Relatório 3.

Em relação à temperatura máxima alcançada na parede da tubeira, observou-se que o modelo de escoamento congelado é o que apresentou a maior temperatura: 628,5 K. A diferença máxima entre as temperaturas obtidas com os diversos modelos físicos, contudo, foi de 8,5 K. Pelos fatos de o modelo de escoamento congelado apresentar o maior valor de temperatura na parede e o menor tempo computacional, tal modelo se mostra o mais adequado ao menos para a obtenção de resultados preliminares.

No último capítulo são apresentadas as conclusões gerais do relatório.

LISTA DE SÍMBOLOS

- ā largura média dos canais de refrigeração [m]
- *b* altura dos canais de refrigeração [m]
- *C_d* coeficiente de descarga [adimensional]
- c_p calor específico à pressão constante [J/kg·K]
- *d* coeficientes de correção da velocidade originados do acoplamento pressão-velocidade
- *D* diâmetro hidráulico [m]
- *e* espessura da parede interna do canal [m]
- *f* coeficiente de atrito de Darcy
- *F*' força viscosa cisalhante [N/m]
- *F** empuxo dinâmico adimensional [adimensional]
- *h* métrica da malha [m]
- h_c coeficiente de convecção entre a parede e o refrigerante [W/m²·K]
- h_g coeficiente de convecção entre a mistura de gases e a parede [W/m²·K]
- k_w condutividade térmica da parede [W/m·K]
- \bar{k}_w condutividade térmica da parede (solução analítica para condução radial unidimensional) [W/m·K]
- k_{wi} coeficientes do polinômio para determinação da condutividade térmica
- *l* posição ao longo dos canais de refrigeração [m]
- *L* número total de reações químicas
- *Lc* comprimento da câmara [m]
- *Ln* comprimento da tubeira [m]
- L_T comprimento total do domínio de cálculo [m]
- *m* número de canais de refrigeração
- \dot{m} fluxo de massa [kg/s]
- *M* número de Mach [adimensional]
- *OF* razão de mistura [adimensional]
- *N* número total de espécies químicas
- *Nu* número de Nusselt [adimensional]
- *Nvol* número total de volumes do domínio espacial (incluindo fictícios)
- *P* pressão total [Pa]

- *P'* correção de pressão
- p_E ordem efetiva do erro
- p_L ordem assintótica do erro
- p_U ordem aparente do erro
- Pr número de Prandtl [adimensional]
- q'_c taxa de transferência de calor da parede para o refrigerante, por unidade de comprimento [W/m]
- q''_h fluxo de calor por convecção, da mistura de gases de combustão para a parede [W/m²]
- q_r'' fluxo de calor por radiação, da mistura de gases de combustão para a parede [W/m²]
- q''_{w} fluxo de calor por condução através da parede [W/m²]
- r raio [m]
- R constante da mistura de gases [J/kg·K]
- r_c raio de curvatura [m]
- Re número de Reynolds [adimensional]
- r_g raio da garganta [m]
- r_{in} raio da câmara [m]
- *rug* rugosidade absoluta [m]
- *s* direção coordenada do refrigerante
- S área da seção transversal de escoamento $[m^2]$
- S_a área das aletas em contato com o refrigerante, para um canal [m²]
- S_b área da base de cada canal [m²]
- S_{wc} área efetiva da parede da tubeira em contato com o refrigerante [m²]
- S_{wc} área da parede da tubeira em contato com os gases de combustão [m²]
- S'_{wh} área interna da parede da tubeira em contato com os gases de combustão, por unidade de comprimento [m]
- *t* espessura das aletas [m]

T temperatura [K]

- T_{aw} temperatura de parede adiabática [K]
- T_{wc} temperatura da parede em contato com o refrigerante [K]
- T_{wh} temperatura da parede em contato com os gases de combustão [K]
- *u* velocidade axial [m/s]
- U_{GCI} estimativa de erro baseada no estimador GCI
- Y_i fração mássica da espécie química *i*

Letras gregas

- β coeficiente de expansão volumétrica
- βc fator do esquema de interpolação utilizado (0: UDS, 1: CDS)
- $\overline{\varepsilon}$ emissividade entre a parede e a mistura de gases [adimensional]
- γ razão entre calores específicos [adimensional]
- η eficiência das aletas [adimensional]
- μ viscosidade absoluta ou dinâmica [Pa·s]
- μ_{ci} coeficientes do polinômio para determinação da viscosidade absoluta (do refrigerante)
- ρ massa específica [kg/m³]
- ρ_{ci} coeficientes do polinômio para determinação da massa específica (do refrigerante)
- σ constante de Stefan-Boltzmann (5,67051·10⁻⁸ W/m²·K⁴)
- ϕ solução numérica da variável de interesse

Subíndices

- 0 propriedades de estagnação
- 1 malha fina
- 2 malha grossa
- 3 malha supergrossa
- *c* propriedade avaliada para o refrigerante
- *e* propriedade na face direita (face leste)
- *E* propriedade no volume à direita (volume leste)
- *ex* propriedades na saída da tubeira
- in propriedade do refrigerante na entrada dos canais
- out propriedade do refrigerante na saída dos canais
- *P* propriedade no volume atual (volume *P*)
- *w* propriedade na face esquerda (face oeste)
- *W* propriedade no volume à esquerda (volume oeste)

1. INTRODUÇÃO

A câmara de empuxo (ou o motor-foguete), composta pela câmara de combustão e pela tubeira (bocal convergente-divergente), é um conjunto fundamental de um foguete, onde os propelentes líquidos são injetados, vaporizados, misturados e consumidos, formando a mistura de gases de combustão (SUTTON e BIBLARZ, 2001). Através da aceleração desses gases, a força de empuxo é obtida, tanto para a definição da órbita quanto para a definição da carga útil do foguete. E, para a determinação da força de empuxo e de outros importantes parâmetros de propulsão (como o coeficiente de descarga), ou de parâmetros estruturais (como a temperatura máxima alcançada nas paredes da tubeira), faz-se necessário o conhecimento das propriedades da mistura de gases de combustão ao longo de todo o escoamento. Neste aspecto, ferramentas computacionais se mostram bastante úteis, seja por sua praticidade (através da possibilidade de avaliação de diversas configurações ou de diversos modelos), ou por seu custo reduzido (quando comparado à montagem e à utilização de um banco de testes). Ressalta-se, contudo, que a qualidade dos resultados obtidos deriva, em grande parte, dos modelos matemático e numérico empregados.

Calor é transmitido para todas as superfícies expostas aos gases de combustão, ou seja, à face dos injetores e às paredes da câmara de combustão e da tubeira. Verifica-se, contudo, que apenas de 0,5 a 5,0% de toda a energia gerada pela combustão é transferida na forma de calor às paredes da tubeira (SUTTON e BIBLARZ, 2001). Tal quantidade de energia, no entanto, pode aumentar a temperatura da parede até sua falha estrutural. Por isso, a maioria dos foguetes apresentam sistemas de refrigeração, que garantem uma maior vida útil para todo o equipamento. E, dentre os diversos sistemas de refrigeração, o mais utilizado para foguetes de grande porte é o de refrigeração regenerativa. A previsão da tranferência de calor em um motor-foguete refrigerado regenerativamente é uma das tarefas mais importantes e mais desafiadoras no projeto de um foguete de alta performance (FRÖHLICH *et al.*, 1993).

Embora modelos bi e tridimensionais sejam comumente utilizados, ainda hoje modelos unidimensionais são empregados nos projetos de motores-foguete, sendo corrigidos pelo uso de coeficientes empíricos (FRÖHLICH *et al.*, 1993; SUTTON e BIBLARZ, 2001). Mediante esse quadro, é bastante razoável a implementação de um programa unidimensional, para avaliação de propriedades termodinâmicas da mistura de gases de combustão, bem como dos parâmetros gerais de desempenho de tubeiras.

O problema envolvendo o escoamento de gases de combustão e a transferência de calor para o sistema de refrigeração pode ser dividido em três subproblemas: (1) o escoamento reativo de gases de combustão (desde a câmara de combustão até a saída da tubeira); (2) a condução de calor do lado dos gases de combustão para o refrigerante; e (3) o escoamento turbulento do refrigerante, no interior dos canais de refrigeração. A solução do problema completo é obtida iterativamente, a partir da solução de cada subproblema independentemente, mas em seqüência, até que se atinja um certo parâmetro de convergência (seja uma tolerância ou um número máximo de iterações).

Para cada subproblema listado, um diferente programa foi implementado, utilizando-se, sempre o método de volumes finitos e linguagem Fortran 95. Deste modo, para o escoamento reativo de gases de combustão tem-se o programa Mach1D 5.0, cujas características gerais foram apresentadas no Relatório Técnico 3; o escoamento do refrigerante nos canais é estudado através do programa CANAL 2.0; e o acoplamento entre os programas Mach1D e CANAL é feito pelo programa RHG 3.0.

1.1. Programa Mach1D 5.0

Conforme já apresentado no Relatório Técnico 3, a obtenção das propriedades de termoquímicas da mistura gasosa de combustão, em caráter local, bem como de parâmetros de desempenho (como a velocidade de exaustão dos gases e o coeficiente de descarga) é feita através do programa Mach1D 5.0. Tal programa, escrito em linguagem Fortran 95 (e compilado com o Compaq Visual Fortran 6.6), apresenta 6 modelos físicos distintos:

- escoamento monogás, isentrópico, unidimensional, com propriedades constantes (solução analítica para o escoamento unidimensional isentrópico);
- escoamento monogás com propriedades constantes;
- escoamento monogás com propriedades variáveis;
- escoamento congelado de mistura de gases com propriedades variáveis;
- escoamento de mistura de gases em equilíbrio químico local com propriedades variáveis;
- escoamento de mistura de gases em desequilíbrio químico (taxa finita de reação) com propriedades variáveis.

Deve-se atentar que, em caso de acoplamento entre o programa Mach1D e o programa CANAL, apenas os quatro últimos modelos físicos estão disponíveis. Deste modo, ao se considerar o escoamento reativo dos gases de combustão associado ao sistema de refrigeração regenerativo, há uma opção para escoamento monogás, com propriedades variáveis, e três para escoamento de mistura de gases (escoamentos congelado, em equilíbrio químico local e 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 três primeiros modelos físicos, por se tratarem de escoamentos de monogás,

não são utilizados quaisquer modelos de reações químicas. A presença desses modelos só é observada quando são estudadas misturas gasosas, uma vez que para tais modelos há a necessidade do conhecimento da composição química da mistura para a determinação de suas propriedades termodinâmicas. Desse modo, as Tabelas 1.1 e 1.2 apresentam os modelos de reações químicas empregadas para os modelos físicos de escoamento congelado e em equilíbrio químico local e de escoamento com taxa finita de reação, respectivamente, sendo L o número de reações químicas de dissociação do modelo e N o número de espécies considerado.

	-			21 - 7
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 ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH	
3	4	6	H ₂ O, 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 ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H	modelo de Svehla (1964)
5	8	6	H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H	modelo de Barros et al. (1990)
7	8	6	H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H	modelo de Smith et al. (1987)
10	6	8	H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H, HO ₂ , H ₂ O ₂	4 reações do modelo 3 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	modelo de Kee et al. (1990)

Tabela 1.1: Modelos de reações em equilíbrio químico adotados no programa Mach1D 5.0.

Tabela 1.2: Modelos de reações em desequilíbrio químico (taxa finita) incluídas no programa Mach1D 5.0.

Modelo	L	N	Espécies envolvidas	Observações
3.1	4	6	H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H	4 reações com 3º corpo; modelo de Barros <i>et al.</i> (1990)
3.2	4	6	H ₂ O, O ₂ , H ₂ , OH, O, H	4 reações com 3º corpo; modelo 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 reações do modelo 3.1 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)

Novamente, salienta-se que a combustão é modelada 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 e a atomização do combustível. Considera-se que todos os componentes originários do processo de combustão se apresentem em sua fase gasosa, eletricamente neutros, constituindo-se em uma mistura perfeitamente homogênea.

Salienta-se, também, que no programa Mach1D, o escoamento é solucionado desde velocidades próximas a zero até o regime supersônico, sendo adotado um esquema apropriado a qualquer regime de velocidades (MARCHI e MALISKA, 1994). A temperatura, por sua vez, é obtida diretamente da equação da energia, não sendo necessário obtê-la a partir da entalpia. Para maiores detalhes sobre o programa Mach1D, recomenda-se a leitura do Relatório Técnico 3.

1.2. Programa CANAL 2.0

Com a finalidade de se estudar o escoamento de refrigerante no interior dos canais de refrigeração, bem como a interação entre os efeitos dos canais sobre o escoamento dos gases de combustão (e vice-versa), foi implementado o programa CANAL 2.0, em linguagem Fortran 95, empregando-se o compilador Compaq Visual Fortran 6.6.

Apenas quatro equações são necessárias para o estudo do escoamento unidimensional do refrigerante ao longo dos canais do sistema de refrigeração regenerativa de um foguete: as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento linear e da energia e uma relação constitutiva polinomial para a massa específica, dadas, respectivamente, por:

$$\frac{d}{ds}(\rho_c \, u_c \, S_c) = 0, \qquad (1.1)$$

$$\frac{d}{ds}(\rho_c u_c S_c u_c) = -S_c \frac{dP_c}{ds} + F_c' , \qquad (1.2)$$

$$c_{pc} \frac{d}{ds} \left(\rho_c \, u_c \, S_c \, T_c \right) = \beta \, T_c \, u_c \, S_c \, \frac{dP_c}{ds} + q'_c \,, \tag{1.3}$$

$$\rho_c = \rho_{c1} + \rho_{c2} T_c + \rho_{c3} T_c^2, \qquad (1.4)$$

onde: o índice *c* corresponde à propriedade avaliada para o refrigerante; ρ , *u*, *P* and *T* correspondem, respectivamente, à massa específica, à velocidade, à pressão e à temperatura; *s* refere-se à coordenada axial em que o refrigerante escoa; S_c é a área da seção transversal dos canais

de refrigeração; F'_c , β e q'_c relacionam-se às forças viscosas, ao coeficiente de expansão volumétrica e ao calor recebido pelo refrigerante através das paredes dos canais, nesta ordem; e ρ_{c1} , ρ_{c2} e ρ_{c3} são constantes relacionadas ao refrigerante escolhido.

As parcelas referentes às forças viscosas (F'_c), na Eq. (1.2), e à transferência de calor para o refrigerante (q'_c), Eq. (1.3), são obtidas através das seguintes relações:

$$F_{c}' = -\frac{\pi}{8} f_{c} \rho_{c} u_{c} | u_{c} | D_{c}, \qquad (1.5)$$

$$q'_{c} = |u_{c} F'_{c}| + S'_{wc} h_{c} (T_{wc} - T_{c}), \qquad (1.6)$$

em que o índice *c* representa que a propriedade é avaliada para o refrigerante; *f* é o fator de atrito de Darcy; *D* é o diâmetro hidráulico dos canais; S'_{wc} representa a área de contato entre as paredes do canal e o refrigerante (S_{wc}) por unidade de comprimento, segundo o eixo *s*; h_c o coeficiente de transferência de calor por convecção (entre as paredes e o refrigerante) e T_{wc} a temperatura da parede da tubeira, em contato com o refrigerante.

1.2.1 Condução através das paredes

Devido à alta temperatura dos gases de combustão, calor é transferido dos mesmos para as paredes da tubeira através de mecanismos de convecção e de radiação. Esta energia é, então, conduzida através das paredes da tubeira e transferida para o refrigerante por convecção. O processo completo, em regime permanente, pode ser modelado através das seguintes relações:

$$q = (q_h'' + q_r'') S_{wh} = q_w'' S_{wh} = q_c'' S_{wc}, \qquad (1.7)$$

sendo: q, a taxa de transferência de calor através das paredes; q''_{h} e q''_{r} , os fluxos de calor por convecção e por radiação (nesta ordem) dos gases de combustão para a parede que, agrupados, são representados por q''_{w} ; S_{wh} , a área da parede em contato com os gases de combustão; S_{wc} , a área efetiva de troca térmica entre a parede e o refrigerante; e q''_{c} , o fluxo de calor para o refrigerante, sendo obtido através da seguinte relação:

$$q_{w}^{"} = \frac{\bar{k}_{w}}{e} (T_{wh} - T_{wc}),$$
 (1.8)

em que *e* é a espessura da parede da tubeira; T_{wh} é a temperatura da parede em contato com a mistura de gases de combustão; T_{wc} é a temperatura da parede em contato com o refrigerante; e \overline{k}_w é obtida através da seguinte relação:

$$\bar{k}_{w} = k_{w1} + \frac{k_{w2}}{2}(T_{wc} + T_{wh}) + \frac{k_{w3}}{3}\frac{(T_{wh}^3 - T_{wc}^3)}{(T_{wh} - T_{wc})}, \qquad (1.9)$$

sendo k_{w1} , k_{w2} e k_{w3} os mesmos coeficientes da expressão polinomial quadrática para a determinação da condutividade térmica do material da parede, dada por

$$k_{w} = k_{w1} + k_{w2}T_{w} + k_{w3}T_{w}^{2}.$$
(1.10)

As Eqs. (1.8) e (1.9) representam a solução analítica da condução de calor unidimensional em uma direção radial, quando a condutividade térmica do material k_w é obtida através do polinômio apresentado na Eq. (1.10).

A área efetiva de troca de calor entre as paredes e o refrigerante, constante da Eq. (1.7), é obtida através da seguinte relação:

$$S_{wc} = S_b + S_a \eta , \qquad (1.11)$$

em que S_b é a área da base do canal, em contato com o refrigerante; S_a é a área ds aletas em contato com o refrigerante; e η é a eficiência das aletas. A área da parede externa em contato com o refrigerante, é considerarada adiabática, sendo, desse modo, desprezada na Eq. (1.11).

A eficiência das aletas, presente na Eq. (1.11), é obtida através da seguinte relação apresentada por Bejan (1993), para aletas retangulares com a extremidade isolada termicamente:

$$\eta = \frac{\tanh(U\,b)}{U\,b},\tag{1.12}$$

em que b é a altura média do canal e U é obtido através da seguinte relação:

$$U = \sqrt{\frac{h_c Pa}{k_w S_t}}, \qquad (1.13)$$

sendo Pa o perímetro de troca de calor da aleta com o fluido e S_t a área transversal da aleta.

1.3. Programa RHG 3.0

O programa RHG 3.0 tem por finalidade integrar os programas Mach1D 5.0 e CANAL 2.0 (bem como os programas TUBEIRA 1.2 e PAREDE 1.0, responsáveis, respectivamente, pela obtenção da geometria da tubeira e da geometria dos canais), obtendo-se, assim, resultados tanto para o escoamento reativo de gases de combustão quanto para o escoamento do refrigerante, bem como a temperatura e o fluxo de calor ao longo das paredes da tubeira.

Ao programa RHG 3.0 deve ser informado o número máximo de iterações gerais que serão efetuadas para a solução do problema. Por iteração geral, entende-se a solução do escoamento reativo no interior da tubeira (utilizando-se o código Mach1D) seguido pela solução do escoamento do refrigerante (sendo usado o código CANAL).

1.4. Objetivos do Relatório

Os objetivos essenciais deste relatório são:

- Apresentar os modelos físicos, químicos, matemáticos e numéricos disponíveis no programa RHG 3.0;
- Obter soluções numéricas para um problema específico (tubeira cossenoidal);
- Verificar o efeito do modelo físico adotado sobre a solução do problema abordado;
- Verificar o efeito do modelo químico adotado na solução do problema abordado;
- Verificar o efeito dos modelos físicos e químicos sobre o tempo de computação;
- Fazer comparações entre os resultados numéricos do programa Mach1D 5.0 e CEA/NASA (ambos para paredes adiabáticas).

1.5. Definição do problema

A geometria da câmara-tubeira utilizada nas simulações é a mesma apresentada nos trabalhos de Marchi *et al.* (2000; 2004) e no Relatório Técnico 3; sendo assim, trata-se de uma câmara de seção cilíndrica (de raio r_{in} e comprimento Lc) acoplada a uma tubeira de formato

cossenoidal (de comprimento Ln), cujo perfil pode ser observado através da Figura 1.1. O raio r na tubeira (para $x \ge Lc$) é obtido através da seguinte expressão:

$$r = r_{g} + \frac{(r_{in} - r_{g})}{2} \left\{ 1 + \cos\left[2\pi \frac{(x - Lc)}{Ln}\right] \right\},$$
(1.14)

onde r_g é o raio da garganta. Neste trabalho foi considerada uma única geometria para a tubeira, sendo o raio da câmara (r_{in}) igual a 0,300 m; o comprimento da câmara (Lc), 0,100 m; o comprimento da tubeira (Ln), 0,400 m; o comprimento total (Lc + Ln), 0,500 m; e o raio da garganta (r_g) de 0,100 m.



Figura 1.1: Parâmetros geométricos do motor-foguete. Fonte: Marchi et al., 2000.

Deve-se notar que na Figura 1.1 é mostrada apenas a geometria interna da câmara-tubeira, sem apresentar o sistema de refrigeração regenerativa, que é detalhado na Figura 1.2. Os canais de refrigeração podem ser vistos na seção A-A, Figura 1.3.

A geometria dos canais de refrigeração é dependente do número total de canais (m), da espessura da parede (e), da espessura (t) e da altura (b) das aletas, bem como do raio (r) da tubeira (uma vez que o raio é variável ao longo do comprimento da tubeira). A largura média dos canais (\overline{a}) depende das propriedades anteriormente citadas, sendo calculada através da seguinte expressão:

$$\overline{a} = \frac{\pi}{mb} \left[(r+e+b)^2 - (r+e)^2 \right] - t , \qquad (1.15)$$

que é válida para $m \ge 2$.



Figura 1.2: Motor-foguete bipropelente com refrigeração regenarativa. Fonte: Marchi et al. (2000).



Figura 1.3: Detalhe dos canais do sistema de refrigeração regenerativa (seção A-A). Fonte: Marchi et al. (2000).

Atenta-se, ainda, que no interior da câmara de combustão, presente na Figura 1.2, não são modelados fenômenos típicos, como a mudança de fase ou a atomização do combustível e do oxidante (como já mencionado anteriormente). O processo de combustão é estudado de modo simplificado, considerando-se uma combustão perfeita, resultando apenas na composição química e

nas propriedades termoquímicas da mistura de gases. Sendo assim, a câmara de combustão serve apenas como um duto cilíndrico, conectado à tubeira (bocal convergente-divergente), no qual ocorre o escoamento do monogás (ou da mistura de gases) proveniente do processo de combustão.

Outras hipóteses, admitidas nos estudos contidos neste relatório, são abaixo relacionadas:

- Escoamento quase-unidimensional (área da seção transversal ao escoamento variável), em regime permanente (o passo de tempo é utilizado apenas como parâmetro de relaxação).
- A condução na parede é considerada unidimensional, sem efeito do raio e com base na área da parede em contato com a mistura de gases de combustão.
- O fator de atrito de Darcy (*f*) é obtido através da equação de Miller (1983), que é válida tanto para o escoamento da mistura de gases de combustão quanto para o escoamento do refrigerante:

$$f = 0.25 \left[\log \left(\frac{rug / D}{3.7} + \frac{5.74}{\text{Re}^{0.9}} \right) \right]^{-2}, \qquad (1.16)$$

em que *rug* é a rugosidade absoluta, *D* é o diâmetro hidráulico da seção transversal e Re é o número de Reynolds local, definido através da seguinte expressão:

$$\operatorname{Re} = \frac{\rho_c \, u_c D}{\mu_c},\tag{1.17}$$

em que ρ é a massa específica, u é a velocidade e μ é a viscosidade absoluta.

- O coeficiente de transferência de calor por convecção entre a mistura de gases de combustão e as paredes da tubeira é estimado através da equação de Bartz (1957) – Eq. (1.12) do Relatório Técnico 3;
- A viscosidade absoluta (μ_c) e a condutividade térmica (k_c) do refrigerante (no caso, água líquida) são obtidas de Reid *et al.* (1987), através das seguintes relações:

$$\mu_{c} = 10^{-3} \exp\left(\mu_{c1} + \frac{\mu_{c2}}{T_{c}} + \mu_{c3} T_{c} + \mu_{c4} T_{c}^{2}\right), \qquad (1.18)$$

$$k_c = k_{c1} + k_{c2} T_c + k_{c3} T_c^2.$$
(1.19)

O coeficiente de transferência de calor por convecção entre as paredes da tubeira e o refrigerante (*h_c*) é obtido através da seguinte relação:

$$h_c = \frac{Nu_D k_c}{D_c}, \qquad (1.20)$$

em que k_c é a condutividade térmica do refrigerante; D_c é o diâmetro hidráulico do canal (na seção avaliada); e Nu_D é o número de Nusselt, que é obtido através da equação de Gnielinski (1976):

$$Nu_{D} = \frac{(f/8)(\operatorname{Re}_{D} - 10^{3})\operatorname{Pr}}{1 + 12,7(f/8)^{1/2}(\operatorname{Pr}^{2/3} - 1)},$$
(1.21)

onde Pr é o número de Prandtl, que é obtido através da seguinte expressão:

$$\Pr = \frac{c_{pc} \ \mu_c}{k_c}, \qquad (1.22)$$

em que c_{pc} é o calor específico (a pressão constante) do refrigerante.

Em todas as simulações foi utilizado um microcomputador dotado de processador Pentium IV, 3400 MHz e 4,00 GB de memória RAM. O sistema operacional empregado foi o Windows XP, Service Pack 2. A Tabela 1.3 apresenta os dados referentes aos parâmetros geométricos, físicos e computacionais utilizados nas simulações. Nota-se que, embora a espessura (t) e a altura (b) das aletas, a espessura da parede (e) e o número de canais (m) seja mantido constante, a razão entre a altura e a largura dos canais (b/\overline{a}) apresenta valores entre 0,62 e 2,8, devido à variação que ocorre no raio da tubeira (r), ao longo do comprimento.

Para finalizar a definição do problema, são necessárias, ainda, as condições de contorno, que são representadas na Figura 1.4 e apresentadas na seqüência.

Na tubeira:

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 câmaratubeira.

$$\begin{cases} T = f(T_0); \quad P = f(P_0) \\ \\ Y_i = f(T, P); \quad \frac{d^2 u}{dx^2} = 0 \end{cases}$$
(1.23)

Tabela 1.3: Parâmetros geométricos, parâmetros físicos e microcomputador utilizados nos estudos efetuados.

Parâmetros geométricos	Comprimento da câmara (Lc)	0,100 m
(câmara e tubeira)	Comprimento da tubeira (Ln)	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
Parâmetros geométricos	Número de canais (<i>m</i>)	200
(canais)	Altura dos canais (<i>b</i>)	5,0 mm
	Espessura da parede interna (e)	2,0 mm
	Espessura das aletas (t)	1,5 mm
Parâmetros físicos	Temperatura de estagnação (T_0)	3420,33 K
(câmara e tubeira)	Pressão de estagnação (P_0)	$2,0.10^{6}$ Pa
	Razão entre calores específicos (γ)	1,1956
	Constante do gás (R)	526,97 J/kg·K
	Razão em massa oxidante/combustível (OF)	7,936682739
	Emissividade média paredes-gases ($\overline{\varepsilon}$)	0,25
Parâmetros físicos	Vazão de refrigerante em cada canal (\dot{m}_c)	1,0 kg/s
(canais)	Temperatura do refrigerante na entrada dos canais	300 K
	Rugosidade absoluta nas paredes dos canais (<i>rug</i>)	5,0·10 ⁻⁶ m
Microcomputador	Processador	Pentium IV, 3400 MHz
	Memória RAM	4,00 GB
	Sistema operacional	Windows XP, service Pack 2

 Condições na saída: 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.

$$\begin{cases} \frac{d^2 T}{dx^2} = 0; & \frac{d^2 P}{dx^2} = 0\\ \frac{d^2 u}{dx^2} = 0; & \frac{d^2 Y_i}{dx^2} = 0 \end{cases}$$
(1.24)

Saída do refrigerante Entrada do refrigerante $\frac{d^2 T_{cout}}{ds^2} = 0; \quad P_{cout} = 0;$ $\frac{d^2 u_{cout}}{ds^2} = 0; \quad \rho_{cout} = f(T_{cout}).$ T_{cin} ; $\rho_{cin} = f(T_{cin})$; $u_{cin}; \ \frac{d^2 P_{cin}}{dc^2} = 0.$ Paredes externas: adiabáticas Paredes internas Paredes em contato com o refrigerante Refrigerante coeficiente de convecção (h_r) coeficiente de convecção (h_{ϵ}) emissividade térmica (\vec{s}) fator de atrito de Darcy (f_c) fator de atrito de Darcy (f)Entrada da tubeira Saída da tubeira = 0; = 0; $T = f(T_0);$ gases de combustão $\frac{d^2P}{d^2}$ $P = f(P_0$ Υ;. = 0; Câmara de combustão Bocal divergente-convergente (tubeira)



Nos canais de refrigeração:

Condições na entrada: A temperatura (T_{c in}) e a velocidade (u_{c in}) de entrada do refrigerante são conhecidas e informadas; a massa específica (ρ_{c in}) é obtida a partir da temperatura local, utilizando-se a Eq. (1.4); e a pressão (P_{c in}) é obtida através de uma extrapolação linear da pressão no interior dos canais.

$$\begin{cases} T_{cin}; \ \rho_{cin} = f(T_{cin}); \\ u_{cin}; \ \frac{d^2 P_{cin}}{ds^2} = 0. \end{cases}$$
(1.25)

• Condições de saída: A temperatura $(T_c \ out)$ e a velocidade $(u_c \ out)$ são extrapoladas linearmente dos valores obtidos para o interior dos canais; a massa específica é obtida a partir da temperatura local, empregando-se a Eq. (1.4); e a pressão $(P_c \ out)$ é definida como nula na saída dos canais, uma vez que o parâmetro de maior interesse é a queda de pressão nos canais, dada pela diferença entre a pressão na entrada e a na saída dos canais.

$$\begin{cases} \frac{d^2 T_{cout}}{ds^2} = 0; \quad P_{cout} = 0; \\ \frac{d^2 u_{cout}}{ds^2} = 0; \quad \rho_{cout} = f(T_{cout}). \end{cases}$$
(1.26)

Nas paredes:

- Condições nas paredes internas da tubeira: As trocas térmicas entre os gases de combustão e a parede da tubeira são reguladas através do coeficiente de convecção (h_g) e da emissividade média paredes-gases (ε); os efeitos viscosos são levados em consideração através do coeficiente de atrito de Darcy (f).
- Condições nas paredes em contato com o refrigerante: As trocas térmicas entre o refrigerante e a parede da tubeira são reguladas através do coeficiente de convecção (*h_c*); os efeitos viscosos são levados em consideração através do coeficiente de atrito de Darcy (*f_c*).
- Condições de contorno nas paredes externas: não há troca de calor (paredes adiabáticas).

1.6. Variáveis de interesse

Dentre as variáveis de interesse deste relatório, citam-se as mesmas sete do Relatório Técnico 3, listadas a seguir:

- variáveis globais coeficiente de descarga (C_d) e empuxo dinâmico adimensional (F^*);
- variáveis locais, na saída da tubeira pressão estática (P_{ex}), temperatura (T_{ex}), velocidade (u_{ex}), número de Mach (M_{ex}) e fração mássica do vapor de água, $Y_{ex}(H_2O)$ apenas para os modelos físicos de escoamento congelado, equilíbrio químico e taxa finita de reação.

Além das variáveis supracitadas, algumas outras passam a ser importantes, quando é considerado o sistema de refrigeração: a temperatura de saída do refrigerante (T_c out); a queda de pressão do refrigerante ao longo dos canais (ΔP_c); a temperatura máxima alcançada na parede da tubeira (T_{max}); e o fluxo de calor máximo na parede da tubeira.

Para análises qualitativas dos dados obtidos, são apresentados gráficos com os campos de temperatura, velocidade e empuxo (gases de combustão). Também a distribuição de temperaturas na parede ao longo da tubeira é apresentada de forma qualitativa, bem como os campos de temperatura e de pressão nos canais de refrigeração.

Os resultados obtidos para os diferentes modelos físicos e químicos são comparados entre si, bem como àqueles provenientes das simulações para escoamento dos gases de combustão sem trocas térmicas (paredes adiabáticas) – tanto para os resultados do programa Mach1D 5.0 quanto para o programa CEA, da NASA (GLENN RESEARCH CENTER, 2005).

2. MODELOS FÍSICO, MATEMÁTICO E NUMÉRICO

Os modelos físico, matemático e numérico para o escoamento dos gases de combustão ao longo de uma tubeira foram apresentados ao longo dos capítulos 3 a 7 do Relatório Técnico 3. Desta forma, é necessário definir apenas os modelos físico, matemático e numérico do escoamento do refrigerante nos canais do sistema regenerativo, bem como o acoplamento dos efeitos térmicos entre o escoamento do refrigerante e o escoamento dos gases de combustão.

2.1. Modelo físico:

O modelo físico para o escoamento do refrigerante ao longo dos canais baseia-se nas seguintes considerações:

- Fluido de trabalho: água, com propriedades variáveis.
- Existência (ou não) de efeitos viscosos.
- Existência (ou não) de efeitos de troca de calor (convecção com as paredes dos canais).
- Temperatura na base do canal constante ou obtida através de interação com o programa Mach1D.
- Eficiência das aletas constante ou obtida segundo a solução analítica para condução de calor em aleta retangular.
- Regime permanente.

2.2. Modelo matemático (escoamento do refrigerante)

O modelo matemático é baseado nas mesmas equações já apresentadas no capítulo 1 deste relatório, ou seja, nas equações da conservação da massa, da conservação da quantidade de movimento linear, da conservação da energia e na relação constitutiva para a massa específica, dadas nesta ordem, por (para a hipótese de regime permanente):

$$\frac{d}{ds}(\rho_c \ u_c \ S_c) = 0, \qquad (2.1)$$

$$\frac{d}{ds}(\rho_c u_c S_c u_c) = -S_c \frac{dP_c}{ds} + F_c' , \qquad (2.2)$$

$$c_{pc} \frac{d}{ds} \left(\rho_c \, u_c \, S_c \, T_c \right) = \beta \, T_c \, u_c \, S_c \, \frac{dP_c}{ds} + q'_c \,, \tag{2.3}$$

$$\rho_c = \rho_{c1} + \rho_{c2} T_c + \rho_{c3} T_c^2, \qquad (2.4)$$

onde: o índice *c* corresponde à propriedade avaliada para o refrigerante; ρ , *u*, *P* and *T* correspondem, respectivamente, à massa específica, à velocidade, à pressão e à temperatura; *s* refere-se à coordenada axial em que o refrigerante escoa; S_c é a área da seção transversal dos canais de refrigeração; F'_c , $\beta \in q'_c$ relacionam-se às forças viscosas (Eq. 1.5), ao coeficiente de expansão volumétrica e ao calor recebido pelo refrigerante através das paredes dos canais (Eq. 1.6), nesta ordem; e ρ_{c1} , $\rho_{c2} \in \rho_{c3}$ são constantes relacionadas ao refrigerante escolhido.

O coeficiente de expansão volumétrica (β) é definido através da seguinte relação:

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{P}, \qquad (2.5)$$

onde o índice *P* refere-se a pressão constante; desta forma, associando-se as Eqs. (2.4) e (2.5), obtém-se a seguinte relação para β :

$$\beta = -\frac{1}{\rho_c} (\rho_{c2} + 2\rho_{c3}T_c).$$
(2.6)

O fluxo de calor dos gases de combustão para o refrigerante deve considerar os mecanismos de transferência de calor citados a seguir e apresentados esquematicamente através da Figura 2.1.

- Entre os gases de combustão e a parede:
 - o Convecção:

$$q_{h} = h_{g} \left(T_{aw} - T_{wh} \right) \cdot S_{wh} ; \qquad (2.7)$$

sendo: T_{aw} a temperatura adiabática da parede; T_{wh} a temperatura da parede em contato com a mistura de gases de combustão; e S_{wh} a área da parede em contato com os gases de combustão.

o Radiação:

$$q_r = \overline{\varepsilon}\sigma \left(T_g^4 - T_{wh}^4\right) \cdot S_{wh}; \qquad (2.8)$$

onde: T_g é a temperatura dos gases de combustão; $\overline{\varepsilon}$ é a emissividade térmica entre as paredes da tubeira e os gases de combustão; e σ é a constante de Stefan-Boltzmann.

o Total:

$$q_g = q_h + q_r. ag{2.9}$$

• No interior da parede:

$$q_{w} = \frac{k_{w}}{e} \left(T_{wh} - T_{wc} \right) \cdot S_{wh}; \qquad (2.10)$$

sendo: *e* a espessura da parede; e T_{wc} a temperatura da parede em contato com o refrigerante.

• Entre a parede e o refrigerante:

$$q_c = h_c (T_{wc} - T_c) \cdot S_{wc} \cdot m.$$
(2.11)

onde: S_{wc} é a área efetiva de troca térmica entre a parede e o refrigerante; e *m* é o número total de canais de refrigeração (uma vez que a modelagem considera o efeito de um único canal).



Figura 2.1: Fluxo de calor entre os gases de combustão e o líquido refrigerante.

As demais variáveis envolvidas, bem como as condições de contorno empregadas, são definidas no capítulo 1 do presente relatório, não sendo, deste modo, repetidas neste capítulo.

2.3. Modelo numérico (escoamento do refrigerante)

As equações que modelam o escoamento do refrigerante são discretizadas utilizando-se o método de volumes finitos. O canal é dividido em *Nvol* volumes de controle, na direção axial (*s*), sendo feita a integração das equações diferenciais – Eqs. (2.1) a (2.3) – em cada um dos volumes de controle. A malha, constituída pelos volumes de controle, pode ser uniforme ou não, sendo utilizado o esquema de volumes de faces centradas. Deve-se observar, porém, que a discretização dos canais deve refletir a discretização feita para o escoamento dos gases de combustão na tubeira. Assim, o número de volumes existentes nos canais (*Nvol*) é idêntico ao existente na tubeira, bem como as posições de cada um dos volumes.

Na discretização das equações diferenciais são utilizados esquemas de aproximação de segunda ordem (CDS), com correção adiada e arranjo co-localizado de variáveis (MALISKA, 1995). Do processo de integração, resulta um sistema algébrico de equações lineares, cuja solução é alcançada utilizando-se o método TDMA (VERSTEEG e MALALASEKERA,1995; TANEHILL *et al.*, 1997; FERZIGER e PERIĆ, 2001).

A equação da conservação da massa, Eq. (2.1), é utilizada para determinação da correção da pressão (P'), enquanto a equação da conservação da quantidade de movimento linear, Eq. (2.2), é solucionada para a velocidade (u) e a partir da equação da conservação da energia, Eq. (2.3), obtémse a temperatura (T). A massa específica (ρ) é determinada a partir da temperatura, utilizando-se, para tanto, a equação constitutiva para massa específica, Eq. (2.4).

2.3.1 Equação da conservação da quantidade de movimento linear

Ao se discretizar a equação da conservação da quantidade de movimento linear – Eq. (2.2) – utilizando-se o esquema CDS com correção adiada, obtêm-se a seguinte forma linearizada,

$$a_E^u u_E + a_P^u u_P + a_W^u u_W = b_P^u, (2.12)$$

cujos coeficientes e termo-fonte são calculadas através das seguintes expressões:

$$a_W^u = 0$$
, (2.13)

$$a_E^u = \rho_e \, u_e \, S_e, \tag{2.14}$$

$$a_P^u = \rho_P^0 S_P \frac{\Delta l}{\Delta t} - \left(a_W^u + a_E^u\right), \qquad (2.15)$$

$$b_P^u = b_P^{u,UDS} + b_P^{u,\beta c}, \qquad (2.16)$$

sendo Δl , $b_P^{u,UDS}$ e $b_P^{u,\beta c}$ obtidas, respectivamente, através de:

$$\Delta l = l_e - l_w, \tag{2.17}$$

$$b_{P}^{u,UDS} = \rho_{P}^{0} S_{P} \frac{\Delta l}{\Delta t} u_{P}^{0} + \frac{S_{P}}{2} (P_{W} - P_{E}) - \frac{\pi}{4} f_{P} \rho_{P} u_{P} |u_{P}| r_{P} \Delta l , \qquad (2.18)$$

$$b_{P}^{u,\beta c} = \frac{\beta c}{2} [\rho_{w} u_{w} S_{w} (u_{P} - u_{W}) - \rho_{e} u_{e} S_{e} (u_{E} - u_{P})].$$
(2.19)

Nota-se, nas equações anteriores – Eqs. (2.13) a (2.19), a presença do fator de atrito de Darcy (*f*); do raio hidráulico do centro do volume finito P (r_p); e de valores de propriedades durante o passo de tempo anterior (propriedades denotadas com o superíndice "0").

Ressalta-se que, para a obtenção do sistema linearizado, certos coeficientes (como a_W^u) são calculados utilizando-se o valor da iteração anterior. Deste modo, uma não-linearidade do tipo u_W^2 é tratada como o produto de u_W na iteração anterior pelo valor de u_W na iteração atual. Isto, pois, quando alcançada a convergência, ambos os valores devem ser idênticos. Este mesmo recurso é empregado nas equações de conservação da massa e na de conservação da energia, como forma de obter sistemas de equações lineares. O fator βc estabelece qual o esquema de interpolação utilizado: para $\beta c = 0$, tem-se o esquema UDS e, no caso de $\beta c = 1$, tem-se o esquema CDS, com correção adiada. Salienta-se, ainda, a presença da variável *l*, que representa a posição, segundo o eixo *s* de coordenadas para o líquido refrigerante.

As Eqs. (2.13) a (2.19) são válidas para todos os volumes de controle internos ao domínio. Restam, no entanto, as condições de contorno; neste trabalho, conforme já utilizada no Relatório Técnico 3, será empregada a técnica de volumes fictícios (MALISKA, 1995) para avaliação das condições de contorno. Neste caso, a velocidade do último volume de controle corresponde a uma velocidade fictícia, obtida através de extrapolação linear das velocidades no interior do domínio. A velocidade do refrigerante na entrada do domínio, contudo, é obtida a partir da extrapolação do valor da velocidade na face $(u_{c \ in})$ e da velocidade calculada para o volume *Nvol*-1. Observa-se, contudo, que como o escoamento do refrigerante se dá em contracorrente em relação ao escoamento dos gases de combustão, a entrada do refrigerante se faz pelo volume *Nvol* e a saída, pelo volume 1. Sendo assim, tem-se as seguintes coeficientes e termos-fontes nos contornos:

• Para a entrada do domínio (k = Nvol):

$$a_E^u = 0,$$
 (2.20)

$$a_W^u = 0, \qquad (2.21)$$

$$a_P^u = 1, \qquad (2.22)$$

$$b_{P}^{u} = u_{cin} + \beta c \left[u_{cin} - \left(u_{P} \right)_{Nvol-1} \right], \qquad (2.23)$$

em que o índices Nvol-1 indica o penúltimo volume do domínio (último volume real).

• Para a saída do domínio (k = 1):

$$a_E^u = -1,$$
 (2.24)

$$a_W^u = 0$$
, (2.25)

$$a_P^u = 1, \qquad (2.26)$$

$$b_P^u = \left[\frac{2(l_P)_2}{(l_P)_3 - (l_P)_2}\right] [(u_P)_2 - (u_P)_3], \qquad (2.27)$$

em que l_P é a posição do nó do volume de controle e os índices 2 e 3 indicam, respectivamente, o segundo e o terceiro volumes do domínio (primeiro e segundo volumes reais do domínio).

2.3.2 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):

$$u_{e} = \frac{\left[-\Sigma_{P} - \Sigma_{E} + (b_{C})_{P} + (b_{C})_{E} + (b_{f})_{P} + (b_{f})_{E} + \frac{(m_{P} + m_{E})u_{e}^{0}}{\Delta t} - 2S_{e}(P_{E} - P_{P})\right]}{\left[(a_{P})_{P} + (a_{P})_{E}\right]}, \quad (2.28)$$

sendo:

$$\Sigma_P = \left(a_E^u\right)_P u_E + \left(a_W^u\right)_P u_W, \qquad (2.29)$$

$$\Sigma_E = \left(a_E^u\right)_E u_{EE} + \left(a_W^u\right)_E u_P, \qquad (2.30)$$

$$(b_{c})_{p} = \frac{\beta c}{2} [(\rho_{w} S_{w} u_{w})_{p} (u_{p} - u_{w}) - (\rho_{e} S_{e} u_{e})_{p} (u_{E} - u_{p})], \qquad (2.31)$$

$$(b_{C})_{E} = \frac{\beta c}{2} [(\rho_{w} S_{w} u_{w})_{E} (u_{E} - u_{P}) - (\rho_{e} S_{e} u_{e})_{E} (u_{EE} - u_{E})], \qquad (2.32)$$

$$(b_f)_p = -\frac{\pi}{4} f_p \rho_p u_p |u_p| r_p \Delta l_p, \qquad (2.33)$$

$$\left(b_{f}\right)_{E} = -\frac{\pi}{4}f_{P}\rho_{E}u_{E}\left|u_{E}\right|r_{E}\Delta l_{E},$$
(2.34)

$$m_P = \rho_P^0 S_P \Delta l_P, \qquad (2.35)$$

$$m_E = \rho_E^0 S_E \Delta l_E, \qquad (2.36)$$

sendo: *f* o coeficiente de atrito de Darcy; e r_P e r_E os raios hidráulicos do centro do volume finito P e E (nesta ordem). Nota-se, ainda, que Δl é definido através da Eq. (2.17).

A velocidade na face (u_e) , calculada através da Eq. (2.28) é válida para todos os volumes internos do domínio; para as faces de entrada (k = Nvol-1) e de saída (k = 1), no entanto, a velocidade u_e é estimada diferentemente, através das seguintes expressões:

• Para a face de entrada (k = Nvol-1):

$$u_e = u_{cin}. \tag{2.37}$$

• Para a face de saída (k = 1):

$$u_e = \frac{(u_P)_1 + (u_P)_2}{2}.$$
 (2.38)

O cálculo de u_e , apesar de envolver diversas parcelas, é um cálculo direto, sem que haja necessidade da solução de qualquer sistema de equações. Este cálculo envolve as últimas estimativas obtidas através das soluções dos sistemas de equações gerados pelas equações da conservação da massa, da conservação de quantidade de movimento linear e da conservação da energia.

2.3.3 Equação da energia térmica

A discretização da equação da energia - Eq. (2.3) - é bastante similar à da equação da conservação de quantidade de movimento linear, obtendo-se por resultado uma equação linearizada na forma:

$$a_{E}^{T} T_{E} + a_{P}^{T} T_{P} + a_{W}^{T} T_{P} = b_{P}^{T} .$$
(2.39)

cujos coeficientes e termo-fonte são avaliados através das seguintes expressões:

$$a_W^T = 0,$$
 (2.40)

$$a_{E}^{T} = (c_{P})_{P} \rho_{e} u_{e} S_{e}, \qquad (2.41)$$

$$a_{P}^{T} = (c_{P})_{P} S_{P} \rho_{P}^{0} \frac{\Delta l}{\Delta t} - (a_{W}^{T} + a_{E}^{T}) - (a_{W}^{T} + a_{E}^{T}) + (h_{c})_{P} [(S_{b})_{P} + \eta (S_{a})_{P}], \qquad (2.42)$$

$$b_P^T = b_P^{T,UDS} + b_P^{T,\beta c}, (2.43)$$

sendo $b_P^{T,UDS}$ e $b_P^{T,\beta c}$ dados através das seguintes relações:

$$b_{P}^{T,UDS} = (c_{P})_{P} S_{P} \rho_{P}^{0} T_{P}^{0} \frac{\Delta l}{\Delta t} - \frac{\pi}{4} f_{P} \rho_{P} u_{P} u_{P}^{2} r_{P} \Delta l + (q_{c})_{P} + \beta_{P} T_{P} S_{P} \left[\frac{\Delta l}{\Delta t} (P_{P} - P_{P}^{0}) + \frac{u_{P}}{2} (P_{E} - P_{W}) \right]$$
(2.44)

$$b_{P}^{T,\beta c} = \frac{\beta c}{2} (c_{P})_{P} [\rho_{w} u_{w} S_{w} (T_{P} - T_{W}) - \rho_{e} u_{e} S_{e} (T_{E} - T_{P})], \qquad (2.45)$$

em que q_c é obtido através da seguinte expressão:

$$q_{c} = \frac{\left[(T_{aw})_{P} - T_{P} \right]}{(R_{tot})_{P}}.$$
(2.46)

Nas expressões anteriores, verifica-se a presença: de Δl , definido através da Eq. (2.17); do calor específico a pressão constante (c_p); do coeficiente de expansão volumétrica do refrigerante (β); da temperatura adiabática de parede (T_{aw}); e da resistência térmica total (R_{tot}), obtida através da seguinte expressão:

$$R_{tot} = \frac{(T_{aw} - T_{wh})}{[h_g(T_{aw} - T_{wh}) + \bar{\varepsilon}\sigma(T_g^4 - T_{wh}^4)S_{wh}]} + \frac{e}{k_w S_{wh}} + \frac{1}{h_c S_{wc}m},$$
(2.47)

onde: T_{wh} é a temperatura da parede em contato com os gases de combustão; h_g é o coeficiente de transferência de calor por convecção entre os gases de combustão e as paredes da tubeira; $\overline{\varepsilon}$ é a emissividade térmica entre as paredes da tubeira e os gases de combustão; σ é a constante de Stefan-Boltzmann; S_{wh} é a área da parede em contato com os gases de combustão; e é a espessura da parede; k_w é a condutividade térmica da parede; h_c é o coeficiente de transferência de calor por convecção entre as paredes da tubeira e o refrigerante; S_{wc} é a área efetiva de troca de calor entre a parede da tubeira e o refrigerante; m é a quantidade de canais de refrigeração.

Deve-se notar que as Eqs. (2.40) a (2.43) são válidas para todos os volumes internos do domínio, havendo ainda a necessidade da definição das condições de contorno (correspondentes aos volumes fictícios). Como é informada a temperatura na entrada do domínio ($T_{c in}$, correspondente à face leste do volume fictício), a temperatura do primeiro volume será extrapolada a partir da temperatura na face e no volume *Nvol*-1; no caso do último volume, também será efetuada uma extrapolação linear, contudo, a partir volumes 2 e 3. Deste modo, têm-se os seguintes coeficientes e termos-fontes nos contornos:

• Para a entrada no domínio (k = Nvol):

$$a_E^T = 0, \qquad (2.48)$$

$$a_W^T = 0, \qquad (2.49)$$

$$a_P^T = 1,$$
 (2.50)

$$b_{P}^{T} = T_{cin} + \beta c \left[T_{cin} - (T_{P})_{Nvol-1} \right].$$
(2.51)

• Para a saída do domínio (k = 1):

$$a_E^T = -1,$$
 (2.52)

$$a_W^T = 0$$
, (2.53)

$$a_P^T = 1,$$
 (2.54)

$$b_{P}^{T} = \left[\frac{2(l_{P})_{2}}{(l_{P})_{3} - (l_{P})_{2}}\right] [(T_{P})_{2} - (T_{P})_{3}], \qquad (2.55)$$

em que l_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 do domínio).

2.3.4 Equação da massa global

A discretização da equação da conservação da massa – Eq. (2.1) – 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:

$$a_E^P P'_E + a_P^P P'_P + a_W^P P'_P = b_P^P.$$
(2.56)

cujos coeficientes e termo-fonte são determinados através das seguintes relações:

$$a_E^P = -\rho_e S_e d_e, \qquad (2.57)$$

$$a_W^P = -\rho_w S_w d_w, \qquad (2.58)$$

$$a_{P}^{P} = -(a_{E}^{P} + a_{W}^{P}), \qquad (2.59)$$

$$b_P^P = -\left[S_P \frac{\Delta l}{\Delta t} \left(\rho_P - \rho_P^0\right) + \rho_P S_e u_e - \rho_W S_w u_w\right], \qquad (2.60)$$

sendo Δl definido através da Eq. (2.17).

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 em seção posterior (seção 2.3.6).

As Eqs. (2.57) a (2.60) são válidas para os volumes internos do domínio. Há a necessidade, ainda, da determinação e da aplicação das condições de contorno. Sendo a pressão informada na entrada do domínio, têm-se que a correção de pressão correspondente à condição de contorno na entrada é nula. No caso da condição de contorno na saída dos canais de refrigeração, prefere-se a condição de derivada nula para a correção de pressão. Têm-se, deste modo, os seguintes coeficientes e termos-fontes para os volumes fictícios:

• Na entrada do domínio (*k* = *Nvol*):

$$a_E^P = 0$$
, (2.61)

$$a_W^P = 0$$
, (2.62)

$$a_P^P = 1,$$
 (2.63)

$$b_p = 0.$$
 (2.64)

• Na saída do domínio (k = 1):

$$a_E^P = 1,$$
 (2.65)

$$a_W^P = 0$$
, (2.66)

$$a_P^P = 1,$$
 (2.67)

$$b_P = 0.$$
 (2.68)

2.3.5 Cálculo da massa específica nodal e nas faces

A obtenção da massa específica nodal é feita utilizando-se a equação constitutiva para massa específica, Eq. (2.4). Neste caso, a massa específica é calculada através da seguinte expressão, para todos os volumes de controle (inclusive os fictícios):

$$\rho_P = \rho_{c1} + \rho_{c2} T_P + \rho_{c3} T_P^2. \tag{2.69}$$

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 βc :

$$\rho_e = \rho_P + \frac{\beta c}{2} \left(\rho_E - \rho_P \right), \qquad (2.70)$$

tendo-se βc variando entre 0 (esquema UDS) e 1 (esquema CDS com correção adiada).

2.3.6 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 , que podem ser encontradas nas Eqs. (2.56) e (2.57). Define-se, assim, d_e através da seguinte relação (a equação para d_w não será apresentada, por ser análoga à de d_e):

$$d_{e} = \frac{1}{2} (d_{P} + d_{E}), \qquad (2.71)$$

sendo d_P calculado por (a relação para d_E é análoga):

$$d_{P} = \frac{S_{P}}{a_{W}^{u} + a_{P}^{u} + a_{E}^{u}}.$$
 (2.72)

O acoplamento pressão-velocidade, obtido através do método SIMPLEC, é feito admitindose 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:

$$u_{P} = u_{P}^{ant} - d_{P} \frac{\left(P_{E}^{\prime} - P_{W}^{\prime}\right)}{2}, \qquad (2.73)$$

em que P'_E e P'_W indicam variações de pressão.

Por analogia, a velocidade nas faces é corrigida através da seguinte expressão:

$$u_e = u_e^{ant} - d_e (P'_E - P'_P).$$
(2.74)

Tem-se, deste modo, 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:

$$P = P^{ant} + P'. (2.75)$$

Relatório técnico 4: programa RHG 3.0

2.3.7 Algoritmo (Programa CANAL 2.0)

É apresentado, na seqüência, o algoritmo para solução do escoamento do refrigerante, ao longo dos canais. Para tanto, foram utilizadas as equações da conservação da quantidade de movimento linear, da conservação da massa e da conservação da energia (já discretizadas), bem como a equação de estado constitutiva para a massa específica, Eq. (2.4). Este é o algoritmo implementado no programa CANAL 2.0.

- Inicialização dos campos no instante de tempo t e leitura dos dados provenientes do programa Mach1D.
- 2. Estimativa dos campos para o tempo $t+\Delta t$.
- 3. Estimativa das propriedades termofísicas no interior de cada um dos volumes de controle: viscosidade (μ); condutividade térmica do refrigerante (k_c) e da parede (k_w); calor específico do refrigerante (c_p); números de Reynolds (Re) e de Prandtl (Pr); fator de atrito de Darcy (f_c) e coeficiente de transferência de calor por convecção (h_c) entre o refrigerante e as paredes da tubeira; coeficiente de expansão térmica do refrigerante (β); e eficiência das aletas (η).
- 4. Cálculo dos coeficientes da velocidade (u_p) com as Eqs. (2.13) a (2.27).
- 5. Solução da velocidade (u_p) , através do método TDMA.
- 6. Cálculo dos coeficientes do método SIMPLEC Eqs. (2.71) e (2.72).
- 7. Cálculo das velocidades nas faces dos volumes (u_e) com as Eqs. (2.28), (2.37) e (2.38).
- 8. Cálculo dos coeficientes e termos-fontes da temperatura (T_p) com as Eqs. (2.40) a (2.55), incluindo o fluxo de calor por convecção (q_c) Eq. (2.46).
- 9. Solução da temperatura (T_p) , através do método TDMA.
- 10. Cálculo das temperaturas da parede em contato com os gases de combustão (T_{wh}) e em contato com o refrigerante (T_{wc}) , através das seguintes expressões, respectivamente:

$$T_{wh} = T_{aw} - q_c \ m \ R_g, \tag{2.76}$$

e

$$T_{wc} = T_{wh} - \frac{q_c \, m \, e}{k_w \, S_{wh}}, \tag{2.77}$$

sendo:

$$R_{g} = \frac{(T_{aw} - T_{wh})}{[h_{g}(T_{aw} - T_{wh}) + \bar{\varepsilon}\sigma(T_{g}^{4} - T_{wh}^{4})S_{wh}]},$$
(2.78)

que é obtido utilizando-se a estimativa da temperatura T_{wh} na iteração anterior.

- 11. Cálculo da massa específica (ρ_p), com a Eq. (2.69), e da massa específica nas faces dos volumes (ρ_e), com a Eq. (2.70).
- 12. Cálculo dos coeficientes e dos termos-fontes da correção de pressão (P_p[']) com as Eqs. (2.57) a (2.68).
- 13. Solução da correção de pressão (P'_p) , utilizando o método TDMA.
- 14. Correção dos valores da pressão (P_p) , da velocidade nas faces dos volumes (u_e) e da velocidade no centro dos volumes (u_p) , utilizando os valores de correção da pressão (P'_p) , através das Eqs. (2.75), (2.74) e (2.73), respectivamente.
- 15. Retornar ao item 2, até a variação de pressão (ΔP) satisfazer um uma determinada tolerância ou até que um número desejado de iterações seja atingido.
- 16. Pós-processamento.

2.4. Algoritmo de acoplamento (Programa RHG 3.0)

O escoamento reativo dos gases de combustão (programa Mach1D 5.0) e o do refrigerante (programa CANAL 2.0) são acoplados através do programa RHG 3.0. Obtém-se, assim, a solução para o escoamento reativo quase-unidimensional, com refrigeração regenerativa, cujo algoritmo geral é apresentado na seqüência.

- 1. Estimativa inicial do escoamento dos gases de combustão, bem como da temperatura da parede em contato com os gases de combustão (T_{wh}) .
- 2. Solução do escoamento reativo dos gases de combustão, utilizando-se o programa Mach1D 5.0, e obtenção da taxa de transferência de calor dos gases de combustão para a parede da tubeira (q_g) através da Eq. (2.9).
- 3. Solução do escoamento do refrigerante, utilizando o programa CANAL 2.0, obtendo-se os valores para as temperaturas da parede em contato com os gases de combustão (T_{wh}) e em contato com o refrigerante (T_{wc}) , bem como da taxa de transferência de calor para o refrigerante (q_c) .
- 4. Avaliação do erro entre as taxas de transferência de calor dos gases de combustão para a parede da tubeira (q_g) e dos gases de combustão para o refrigerante (q_c) , dado em forma percentual e obtido através da seguinte expressão:

$$\Delta q = 100 \frac{\left\{ \sum_{k=1}^{Nvol} [(q_g)_k - (q_c)_k] \right\}}{\sum_{k=1}^{Nvol} (q_c)_k}, \qquad (2.79)$$

em que q_g e q_c são obtidos pelas Eqs. (2.9) e (2.46), nesta ordem, *k* representa cada volume de controle e *Nvol* é o número total de volumes de controle do domínio.

- 5. Retornar ao item 2, até que o erro Δq satisfaça uma determinada tolerância ou até que um número desejado de iterações seja atingido.
- 6. Pós-processamento.

3. <u>RESULTADOS NUMÉRICOS</u>

Para a solução numérica apresentada neste capítulo, foi utilizado o programa RHG 3.0 (versão *Release*, de 22/05/2006), que associa os programas Mach1D 5.0 (versão *Release*, de 30/05/2006) e CANAL 2.0 (versão *Release*, de 15/05/2006). Tem-se, deste modo, a obtenção da solução do escoamento reativo dos gases de combustão no interior da tubeira e do escoamento do refrigerante nos canais de refrigeração, respectivamente. Antes, contudo, fez-se necessário gerar a geometria do problema estudado, para a qual foram utilizados os programas Tubeira 1.2 (versão *Release*, de 15/05/2006) e Parede 1.1 (versão *Release*, de 15/05/2006), responsáveis pela geometria da tubeira e dos canais, respectivamente. Todos os programas foram escritos em linguagem Fortran 95, sendo utilizado o compilador Compaq Visual Fortran 6.6, para projeto do tipo "*Fortran Standard Graphics or QuickWin Application*" e aritmética de dupla precisão.

Os resultados foram obtidos executando-se o programa Mach1D em um microcomputador Pentium IV, 3400 MHz, com memória RAM de 4,00 GB, sob plataforma "*Windows XP*".

3.1. Estimativa de erros

A seguir são apresentadas algumas informações básicas sobre o estimador de erros GCI (ROACHE, 1994), utilizado neste capítulo. Também é feita uma breve introdução às ordens de erro aparente e efetiva (MARCHI e SILVA, 2002), necessárias à utilização dos estimadores de erros numéricos. Maiores detalhes sobre erros numéricos e seus estimadores podem ser encontrados em Tannehill *et al.* (1997), Ferziger e Perić (2001) e Marchi (2001).

Na discretização de um modelo matemático, há a necessidade da utilização de aproximações numéricas, das quais resultam os erros de truncamento (TANNEHILL *et al.*, 1997; FERZIGER e PERIĆ, 2001). Na ausência de outras fontes de erros (arredondamento, iteração, programação), os erros numéricos correspondem aos erros de truncamento (FERZIGER e PERIĆ, 2001), podendo ser expressos como:

$$E(\phi) = b_1 h^{p_L} + b_2 h^{p_2} + b_3 h^{p_3} + \dots, \qquad (3.1)$$

que é conhecida como equação geral do erro de truncamento, na qual: os b_i são coeficientes independentes do tamanho ou métrica da malha (*h*), mas que podem ser funções da variável dependente; e os p_v (isto é, p_L , p_2 , p_3 ...) 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: $p_L \ge 1$.

O tamanho, ou métrica, da malha (h), presente na Eq. (3.1), é obtido através da seguinte expressão (para uma malha unidimensional uniforme, utilizando-se volumes fictícios):

$$h = \frac{L_T}{Nvol - 2},\tag{3.2}$$

em que L_T é o comprimento total do domínio e *Nvol* é o número total de volumes do domínio (incluindo os fictícios).

Entende-se por razão de refino (r_{21}) entre uma malha fina (h_1) e uma malha grosseira (h_2) ao quociente entre o tamanho de seus volumes de controle, ou seja,

$$r_{21} = \frac{h_2}{h_1}.$$
 (3.3)

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

A ordem efetiva (p_E) do erro verdadeiro na malha fina (h_1) é definida como:

$$p_E(h_1) = \frac{\log\left[\frac{E(\phi_2)}{E(\phi_1)}\right]}{\log(r_{21})},$$
(3.4)

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.

A ordem aparente (p_U) do erro estimado na malha fina (h_1) é definida como

$$p_U = \frac{\log\left[\frac{\phi_2 - \phi_3}{\phi_1 - \phi_2}\right]}{\log(r_{21})},$$
(3.5)

para $r_{32} = r_{21}$ e sendo ϕ_3 a solução numérica em uma malha h_3 (supergrossa).

A estimativa $U_{GCI}(\phi_1, p)$ representa o erro estimado da solução numérica (ϕ_1) da malha fina (h_1) com base no estimador GCI e na ordem p, sendo dado por:

$$U_{GCI}(\phi_1, p) = 3 \frac{|\phi_1 - \phi_2|}{(r_{21}^p - 1)}, \qquad (3.6)$$

sendo p o menor valor entre $p_U e p_L$, desde que $p_U > 0$; caso contrário, a Eq. (3.6) não se aplica.

A razão entre a estimativa de erro (U) e o erro verdadeiro (E) é importante para a verificação da acurácia e da confiabilidade das estimativas de erro. A qualidade de uma estimativa de erro pode ser avaliada através do quociente entre o erro estimado (U) e o erro verdadeiro (E): quanto mais próxima da unidade tal razão, mais acurada é a estimativa de erro (MARCHI, 2001), de tal modo que se tenha:

$$\frac{U}{E} \approx 1. \tag{3.7}$$

Por outro lado, para a confiabilidade, é necessário que:

$$\frac{U}{E} \ge 1, \tag{3.8}$$

isto é, quando a razão $U/E \ge 1$, a estimativa de erro é confiável.

3.2. Resultados e análise

As Tabelas 3.1 a 3.6, mostradas na seqüência, apresentam dados de entrada dos programas RHG 3.0 e CANAL 2.0. Ao se utilizar o programa RHG, no entanto, há ainda a necessidade de arquivos de entrada de dados do programa Mach1D 5.0; tais arquivos, contudo, não serão aqui apresentados, uma vez que o foram ao longo do Relatório Técnico 3.

Tabela 3.1: Exemplo de entrada de dados do arquivo "rhg.base.ent", usado para simulação do programa RHG3.0, para obtenção da solução numérica.

```
1 iteração inicial (não alterar)
20 número de iterações globais a fazer
arquivo de dados do programa RHG_1D_3p0
```

A Tabela 3.1 se constitui no único arquivo de entrada pertencente somente ao programa RHG 3.0. Nele deve ser especificado o número máximo de iterações com a finalidade de se obter a solução para o problema completo (escoamento dos gases de combustão acoplado ao escoamento do refrigerante, através de mecanismos de transferência de calor).

As Tabelas 3.2 a 3.6 apresentam dados necessários à execução do programa CANAL 2.0. Deve-se informar o nome do caso a se simular, conforme apresentado na Tabela 3.2, bem como o nome do arquivo que apresenta os dados referentes à geometria da parede e a freqüência de saída de dados, segundo apresentado na Tabela 3.3. A temperatura de entrada do refrigerante, sua massa específica e o fluxo de massa total que escoa pelos canais devem ser informados ao programa CANAL 2.0 através do arquivo canal.exato.ent (Tabela 3.4).

Tabela 3.2: Exemplo de entrada de dados do arquivo "canal.arquivo.ent", usado para simulação do programa CANAL 2.0, para obtenção da solução numérica.

<pre>'f:\users\lucaraki\cop_1d_acop drive 'cos\' incluir \ no fim) 'cos_tf_03_mod032'</pre>	lado' nome do diretório onde está instalado o programa, incluindo o nome do diretório para saídas (abaixo do diretório do programa;
arquivo de dados do módulo ARQ	UIVO
Exemplos:	
'd:\meu_diretorio\mach1d'	para nome do diretório
'saidas\'	para diretório de saída
'saidas\caso_1\'	para diretório de saída
'caso_1'	para nome do caso

Tabela 3.3: Exemplo de entrada de dados do arquivo "canal.geral.ent", usado para simulação do programa CANAL 2.0, para obtenção da solução numérica.

'CANAL 1Dp 2.0 / CDS / n = 82 / todos os	efeitos com modelo=032'	título do caso (até 100
caracteres)		
'cos_04.parede.canal.bin' nome do arquiv	vo de dados do programa PAREDE (g	jeometria)
3 modelo: 1=exato; 2=numérico c/prop	ps.constantes; 3=numérico c/pro	ops.variáveis
1 cria listagem do caso (1);	0=não	
1 abre listagem do caso após a simulação	o (1); 0=não	
1 freqüência de escrita da pressão;	0=não escreve	
1 freqüência de escrita da temperatura;	0=não escreve	
1 freqüência de escrita da velocidade;	0=não escreve	
1 freqüência de escrita da massa específ	fica; O=não escreve	
1 mostra gráficos dos resultados (1);	0=não	
2 gráfico da pressão: 0 = não	o; 1 = mostra; 2 = mostra cor	n tubeira
2 gráfico da temperatura: 0 = não	o; 1 = mostra; 2 = mostra cor	n tubeira
2 gráfico da velocidade: 0 = não	o; 1 = mostra; 2 = mostra cor	n tubeira
2 gráfico da massa específica: 0 = não	o; 1 = mostra; 2 = mostra cor	n tubeira
0 abre listagem do arquivo de dados para	ao programa REX (1); 0=não	
arquivo de dados gerais do programa CANAL		

Tabela 3.4: Exemplo de entrada de dados do arquivo "canal.exato.ent", usado para simulação do programa CANAL 2.0, para obtenção da solução numérica.

300.00d+0	temperatura na entrada do canal (K)
1.00d+3	massa específica na entrada do canal (kg/m3)
-2.00d+2	fluxo de massa em todos os canais (kg/s)

arquivo de dados gerais do módulo EXATO_CANAL

Parâmetros associados à obtenção da solução numérica (como escolha das funções de interpolação utilizadas, o intervalo de tempo e o número de iterações no tempo) devem ser fornecidos ao programa CANAL 2.0 através do arquivo canal.numerico_geral.ent, conforme apresesentado na Tabela 3.5. Por último, são fornecidos os dados gerais do modelo físico estudado (como coeficientes de equações de propriedades termodinâmicas do refrigerante e parâmetros de atrito e rugosidade), como é apresentado na Tabela 3.6.

Tabela 3.5: Exemplo de entrada de dados do arquivo "canal.numérico_geral.ent", usado para simulação do programa CANAL 2.0, para obtenção da solução numérica.

1	0 = UDS; $1 = CDS$
5.0d-3	intervalo de tempo (s)
1000	número máximo de iterações no tempo
1	tipo de condição inicial: 1=analítica; 2=reinício
'canal.reinicio	bin' nome do arquivo de dados de reinício: leitura e gravação; para modelo=3.
10	freqüência de escrita de parâmetros ao longo das iterações
1	abre listagem das iterações após a simulação (1); 0=não
1	freqüência de escrita dos campos auxiliares
1	lista arquivo com os campos auxiliares (1); 0=não
arquivo de dados	s do módulo NUMERICO_GERAL

Tabela 3.6: Exemplo de entrada de dados do arquivo "canal.numérico_variavel.ent", usado para simulação do programa CANAL 2.0, para obtenção da solução numérica.

300.00d+0 temperatura na entrada do canal (K)
751.5644d+0 massa específica(ro): coeficiente "a" de ro = a + b*T + c*(T**2), onde
T=temperatura (K)
1.891228d+0 massa específica(ro): coeficiente "b" de ro = a + b*T + c*(T**2), onde
T=temperatura (K)
-3.5873915d-3 massa específica(ro): coeficiente "c" de ro = a + b*T + c*(T**2), onde
T=temperatura (K)
-2.00d+2 fluxo de massa em todos os canais (kg/s)
2 tipo de calor específico (ver abaixo)
4200.00d+0 para tipo = 1, calor específico à pressão constante (J/kg.K)
2 tipo de fator de atrito de Darcy (ver abaixo)
2.00d-2 para tipo = 1, fator de atrito de Darcy (adimensional)
5.00d-6 rugosidade absoluta da parede do canal (m)
2 tipo de coeficiente de convecção (ver abaixo)
50.00d+3 para tipo = 1, coeficiente de convecção (W/m2.K)
2 tipo de viscosidade absoluta (ver abaixo)
1.00d-3 para tipo = 1, viscosidade absoluta (Pa.s)
2 tipo de condutividade térmica (ver abaixo)
0.50d-0 para tipo = 1, condutividade térmica (W/m.K)
2 tipo de temperatura da parede (T_wall) na base do canal (ver abaixo)
500.00d+0 para tipo = 1, temperatura da parede na base do canal (K)
'cos_tf_04_mod032.mach1d.canal.bin' para tipo = 2, nome do arquivo de dados do programa MACH1D para
cálculo de T_wall
2 tipo de eficiência das aletas (ver abaixo)
0.00d-0 para tipo = 1, eficiência das aletas (adimensional)
2 tipo de coeficiente de expansão térmica (ver abaixo)
1.00d-3 para tipo = 1, coeficiente de expansão térmica (1/K)
385.875d+0 condutividade térmica da parede (kw): coef. "a" de kw = a + b*T + c*(T**2), onde
T=temperatura (K)
-2.600d-3 condutividade térmica da parede (kw): coef. "b" de kw = a + b*T + c*(T**2), onde
T=temperatura (K)
-5.006d-5 condutividade térmica da parede (kw): coef. "c" de kw = a + b*T + c*(T**2), onde
T=temperatura (K)
1 0=executa CANAL; 1=executa CANAL acoplado ao MACH1D
'cos_tf_04_mod032.canal.mach1d.bin' nome do arquivo de saída para o programa MACH1D
751.5644d+0 massa específica(ro): coeficiente "a" de ro = a + b*T + c*(T**2), onde
T=temperatura (K)
1.891228d+0 massa especifica(ro): coeficiente "b" de ro = a + b*T + c*(T**2), onde
T=temperatura (K)
-3.58/3915d-3 massa especifica(ro): coeficiente "c" de ro = a + b*T + c*(T**2), onde
'I=temperatura (K)

1000.0d+0 massa específica(ro): coeficiente "a" de ro = a + b*T + c*(T**2), onde T=temperatura (K) 0.0d0 massa específica(ro): coeficiente "b" de ro = $a + b^{T} + c^{T*2}$, onde T=temperatura (K) massa específica(ro): coeficiente "c" de ro = $a + b^{T} + c^{T*2}$, onde 0.040 T=temperatura (K) arquivo de dados do módulo NUMERICO_VARIAVEL tipo de calor específico: 1 = constante 2 = H2O líquido (McBride et al., 1993) tipo de fator de atrito de Darcy: 2 = constante (zero = anula a fricção e aquecimento)
 2 = equação de Miller (gráfico de Moody, escoamento turbulento) tipo de coeficiente de convecção: 1 = constante (zero = anula perda de calor por convecção para a parede) 2 = equação de Gnielinski tipo de viscosidade absoluta: = constante (não pode ser nulo) 2 = H2O líquido (Reid et al., 1987) tipo de condutividade térmica: 1 = constante (não pode ser nulo) 2 = H2O líquido (Reid et al., 1987) tipo de temperatura da parede na base do canal: = constante 2 = arquivo de dados do programa MACH1D para cálculo de T_wall tipo de eficiência das aletas: = constante 2 = solução analítica da condução de calor em aleta retangular tipo de coeficiente de expansão térmica: 1 = constante2 = calculado a partir dos coeficientes da massa específica

Quatro modelos físicos diferentes para o escoamento de gases estão disponíveis no programa RHG 3.0: um modelo monogás, com propriedades variáveis e três modelos para mistura de gases (escoamentos congelado, em equilíbrio químico local e com taxa finita de reação). Tais modelos são os mesmos já apresentados previamente no Relatório Técnico 3, sendo, por tal motivo, os detalhes referentes a tais modelos aqui omitidos. Por questões de tempo de simulação, para os modelos de escoamento congelado e em equilíbrio químico local, foram estudados apenas os modelos químicos 3 (de seis espécies) e 10 (de oito espécies); no caso do escoamento com taxa finita de reação, os modelos estudados foram os 31 e 32 (ambos de seis espécies). O estudo relativo ao refinamento de malhas envolveu apenas 3 malhas: malhas de 20, 40 e 80 volumes reais, sendo a malha de 80 volumes escolhida uma vez que os erros numéricos a ela associados são da mesma ordem de grandeza dos erros experimentais (MARCHI *et al.*, 2004; MARCHI *et al.*, 2005; ARAKI e MARCHI, 2006). A Tabela 3.7 apresenta os dados gerais das simulações para os diversos modelos físicos estudados, sempre para uma malha de 80 volumes de controle.

Tabela 3.7: Dados gerais das simulações para escoamento reativo unidimensional com refrigeração regenerativa,para uma malha de 80 volumes de controle.

Físico	Químico		Escoamento dos gases de combustão	Escoamento do refrigerante	globais	simulação	de CPU
Monoespécie, com propriedades variáveis		cos_var_04	6.000	1.000	20	29/05/2006	23,4 s
Escoamento	3	cos_cong_04_mod03	5.000	1.000	20	24/05/2006	10,6 s
congelado	10	cos_cong_04_mod10	5.000	1.000	20	24/05/2006	12,2 s
Escoamento em	3	cos_eq_04_mod03	15.000	1.000	20	29/05/2006	1,79 h
equilíbrio	10	cos_eq_04_mod10	15.000	1.000	20	25/05/2006	3,49 h
Tava finita	31	cos_tf_04_mod031	5.000.000	1.000	5	01/06/2006	1,06 dia
I axa IIIIIta	32	cos_tf_04_mod032	4.000.000	1.000	5	05/06/2006	20,0 h

Observando-se os dados da Tabela 3.7, verifica-se uma forte dependência do tempo computacional demandado pelas simulações em relação ao modelo físico adotado. Enquanto o tempo necessário para a obtenção da solução numérica foi da ordem de segundos para os modelos de escoamento congelado, para os modelos de equilíbrio local o mesmo apresenta a magnitude de horas, aumentando ainda mais para os modelos de taxa finita (em que a ordem de grandeza do tempo de computação necessário é de dias). Observa-se, no entanto, que as diferenças no tempo computacional é dependente, também, do modelo químico adotado.

Tanto no escoamento congelado quanto no escoamento em equilíbrio químico, o modelo químico 10 apresentou maior tempo computacional que o modelo 3 - 15,1 e 94,5% superior, respectivamente. Observa-se, contudo, que ambos os modelos (3 e 10), para a condição de escoamento congelado, são mais velozes que o modelo de monogás com propriedades variáveis. Com relação ao escoamento com taxa finita de reação, observa-se que os modelos 31 e 32, apesar de contarem com as mesmas reações químicas de dissociação, apresentam diferentes necessidades de tempo computacional. Observa-se pelos dados da Tabela 3.7 que o tempo dispendido pelo modelo químico 31 é cerca de 27,2% maior que o utilizado pelo modelo 32.

Comparando-se os dados da Tabela 3.7 com aqueles provenientes do Relatório Técnico 3, contudo, notam-se inversões no quesito "tempo de CPU demandado": em simulações efetuadas utilizando-se o modelo de escoamento congelado, o modelo 3 apresenta um tempo computacional 1,7% menor que o modelo 10; no caso do escoamento com taxa finita de reação, o tempo necessário ao modelo 32 é 60,6% superior ao do modelo 31. Uma possível explicação para tais diferenças no comportamento do tempo computacional demandado reside no fato de que, para estudar o escoamento acoplado de gases de combustão e refrigerante, novas propriedades devem ser consideradas (e estimadas). Neste caso, tais cálculos devem apresentar diferentes necessidades computacionais dependendo dos modelos físico e químico adotado, interferindo, assim, no comportamento do tempo de CPU demandado pelos modelos químicos.

As Tabelas 3.8 a 3.11, apresentadas a seguir, mostram os resultados numéricos para os escoamentos dos gases de combustão e do refrigerante, bem como as respectivas estimativas de erro obtidas através do estimador GCI, baseadas na ordem aparente. Exceção é feita para a Tabela 3.8, em que são apresentadas as frações mássicas das espécies constituintes da mistura de gases de combustão. Apenas nos casos em que a ordem aparente é indefinida, optou-se pelo cálculo do estimador GCI baseado na ordem assintótica.

Tabela 3.8: Frações mássicas da mistura de gases de combustão, para diferentes modelos físicos e químicos, obtidas utilizando-se os programas RHG, Mach1D (malhas de 80 volumes) e CEA.

Modelo		H ₂ O	O ₂	H_2	ОН	0	Н	HO ₂	H_2O_2	03
Escoamento congelado, sem transferência de calor	3	0,78369	0,07754	0,01565	0,10276	0,01790	0,00247			
	10	0,78354	0,07743	0,01565	0,10272	0,01789	0,00247	0,00027	0,00004	
	CEA	0,77987	0,07515	0,01570	0,10900	0,01751	0,00246	0,00027	0,00004	<0,00001
Escoamento em equilíbrio químico, sem transferência de calor	3	0,92742	0,03659	0,00606	0,02687	0,00259	0,00047			
	10	0,92736	0,03661	0,00606	0,02689	0,00260	0,00047	0,00001	9,79·10 ⁻⁷	
	CEA	0,92548	0,03579	0,00611	0,02956	0,00257	0,00047	0,00001	<0,00001	<0,00001
Taxa finita, sem transferência de calor	31	0,81253	0,10023	0,01709	0,05351	0,01592	0,00072			
	32	0,82375	0,09475	0,01600	0,05132	0,01349	0,00068			
Escoamento congelado, com transferência de calor	3	0,78369	0,07754	0,01565	0,10276	0,01790	0,00247			
	10	0,78354	0,07743	0,01565	0,10272	0,01789	0,00247	0,00027	0,00004	
Escoamento em equilíbrio químico, com transferência de calor	3	0,93600	0,03279	0,00540	0,02339	0,00205	0,00038			
	10	0,93595	0,03281	0,00540	0,02340	0,00205	0,00038	0,00001	<0,00001	
Taxa finita,com transferência de calor	31	0,81681	0,09883	0,01680	0,05189	0,01504	0,00062			
	32	0,82832	0,09342	0,01570	0,04929	0,01269	0,00059			

Conforme pode ser observado na Tabela 3.8, há pouca variação nas frações mássicas entre as simulações envolvendo, ou não, os efeitos de transferência de calor. A associação da transferência de calor ao refrigerante apresenta efeitos mais significativos, entretanto, sobre a fração mássica de vapor de água (H₂O), cuja participação é aumentada na mistura de gases (escoamentos em equilíbrio químico local e com taxa finita de reação). Isto ocorre devido às menores temperturas encontradas na saída da tubeira, conforme pode ser observado a partir dos dados da Tabela 3.10. Uma menor temperatura na saída dos dados beneficia as reações químicas de recombinação, reduzindo os valores das demais frações mássicas e tornando a composição química da mistura de gases mais próxima à ideal (100% de vapor de água, para a razão oxidante/combustível adotada).

Não se nota uma grande variação dos resultados numéricos para as variáveis de interesse globais (coeficiente de descarga e empuxo dinâmico adimensional) quando o escoamento dos gases

de combustão é acoplado ao escoamento do refrigerante, conforme pode ser visto na Tabela 3.9. Observa-se que os efeitos da associação da transferência de calor são menores que a estimativa de erro numérico no caso do empuxo dinâmico adimensional (as soluções numéricas apresentadas são equivalentes); para o coeficiente de descarga, os efeitos são superiores à estimativa de erro, sendo a diferença entre os resultados, contudo, inferior a 1%.

Resultados sem transferência de calor							
Modelo	C _d [adim.]	<i>F</i> * [adim.]	P_{ex} [Pa]				
Analítico (R1)	1,0	1,0	2,917342 10 ⁴				
Monoespécie, propriedades variáveis (R2)	$1,060 \pm 3 \cdot 10^{-3}$	$1,004 \pm 4 \cdot 10^{-3}$	$3,005 \cdot 10^4 \pm 4 \cdot 10^1$				
Escoamento congelado – mod. 3, 4, 5 e 7	$1,001 \pm 3 \cdot 10^{-3}$	$1,000 \pm 4 \cdot 10^{-3}$	$2,74 \cdot 10^4 \pm 1 \cdot 10^2$				
Escoamento congelado – mod. 9 e 10	$1,001 \pm 3 \cdot 10^{-3}$	$1,000 \pm 4 \cdot 10^{-3}$	$2,74 \cdot 10^4 \pm 1 \cdot 10^2$				
CEA (modelo congelado)	1,000580	0,998992	2,7448 10 ⁴				
Escoamento em equilíbrio – mod. 3, 4, 5 e 7	$0,98 \pm 1.10^{-2}$	$1,01 \pm 1.10^{-2}$	$3,63 \cdot 10^4 \pm 5 \cdot 10^2$				
Escoamento em equilíbrio - mod. 9 e 10	$0,98 \pm 1.10^{-2}$	$1,01 \pm 1.10^{-2}$	$3,63 \cdot 10^4 \pm 5 \cdot 10^2$				
CEA (modelo em equilíbrio)	0,977372	1,011553	3,6178 10 ⁴				
Taxa finita – mod. 31	$1,008 \pm 3 \cdot 10^{-3}$	$1,012 \pm 5 \cdot 10^{-3}$	$3,175 \cdot 10^4 \pm 7 \cdot 10^1$				
Taxa finita – mod. 32	$1,007 \pm 3 \cdot 10^{-3}$	$1,014 \pm 5 \cdot 10^{-3}$	$3,254 \cdot 10^4 \pm 6 \cdot 10^1$				
Resultados com transferência de calor							
Modelo	C_d [adim.]	F* [adim.]	P_{ex} [Pa]				
Monoespécie, propriedades variáveis (R2)	$1,070 \pm 3 \cdot 10^{-3}$	$1,004 \pm 4.10^{-3}$	$2,942 \cdot 10^4 \pm 8 \cdot 10^1$				
Escoamento congelado – mod. 3	$1,011 \pm 3 \cdot 10^{-3}$	$0,999 \pm 4.10^{-3}$	$2,67 \cdot 10^4 \pm 1 \cdot 10^2$				
Escoamento congelado - mod. 10	$1,011 \pm 3 \cdot 10^{-3}$	$0,999 \pm 4.10^{-3}$	$2,67 \cdot 10^4 \pm 1 \cdot 10^2$				
Escoamento em equilíbrio - mod. 3	$0,98 \pm 1.10^{-2}$	$1,01 \pm 1.10^{-2}$	$3,59 \cdot 10^4 \pm 5 \cdot 10^2$				
Escoamento em equilíbrio – mod. 10	$0,98 \pm 1.10^{-2}$	$1,01 \pm 1.10^{-2}$	$3,59 \cdot 10^4 \pm 5 \cdot 10^2$				
Taxa finita – mod. 31	$1,012 \pm 3 \cdot 10^{-3}$	$1,012 \pm 5 \cdot 10^{-3}$	$3,10.10^4 \pm 2.10^2$				
Taxa finita – mod. 32	$1,011 \pm 3 \cdot 10^{-3}$	$1,013 \pm 3 \cdot 10^{-3}$	$3,18 \cdot 10^4 \pm 2 \cdot 10^2$				

Tabela 3.9: Quadro comparativo de resultados para coeficiente de descarga, empuxo dinâmico adimensional e pressão na saída da tubeira, utilizando os programas RHG, Mach1D (malha de 80 volumes) e CEA.

(R1): $R_g = 526,97 \text{ J/kg} \cdot \text{K};$ (R2): $R_g = 461,5254384083019 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$ (equivalente à mistura de gases de combustão para o modelo ideal)

Os efeitos da associação do sistema de refrigeração na solução do escoamento dos gases de combustão são maiores quando observadas as variáveis de interesse locais. Três variáveis de interesse – temperatura, pressão e velocidade na saída da tubeira – apresentam redução em seus valores numéricos decorrentes da transferência de calor ao refrigerante. O número de Mach na saída da tubeira, em contrapartida, apresenta incremento, apesar do decréscimo na velocidade; isto decorre da redução, também, da temperatura, o que afeta na velocidade local do som, sendo tal efeito mais expressivo que a diminuição da velocidade na saída da tubeira, com um conseqüente aumento no número de Mach local.

Tabela 3.10: Quadro comparativo de resultados para temperatura, velocidade e número de Mach, todos na saída da tubeira, utilizando os programas RHG, Mach1D (malha de 80 volumes) e CEA.

Resultados sem transferência de calor							
Modelo	<i>T_{ex}</i> [K]	<i>u_{ex}</i> [m/s]	M _{ex} [adim.]				
Analítico (R1)	1712,7409	3316,7150	3,1928346				
Monoespécie, propriedades variáveis (R2)	1800 ± 7	3142 ± 6	$3,15 \pm 1.10^{-2}$				
Escoamento congelado – mod. 3, 4, 5 e 7	1606 ± 9	3312 ± 7	$3,24 \pm 1.10^{-2}$				
Escoamento congelado – mod. 9 e 10	1606 ± 9 3312 ± 7		$3,24 \pm 1.10^{-2}$				
CEA (modelo congelado)	1607,91	3311,4519	3,231				
Escoamento em equilíbrio – mod. 3, 4, 5 e 7	$2461,2 \pm 3 \cdot 10^{-1}$	3427 ± 2	$2,911 \pm 2 \cdot 10^{-3}$				
Escoamento em equilíbrio – mod. 9 e 10	$2461,4 \pm 3 \cdot 10^{-1}$	3427 ± 2	$2,911 \pm 2 \cdot 10^{-3}$				
CEA (modelo em equilíbrio)	2462,41	3432,7056	2,986				
Taxa finita – mod. 31	1910 ± 1.10^{1}	3332 ± 6	$3,05 \pm 1.10^{-2}$				
Taxa finita – mod. 32	1980 ± 1.10^{1}	3338 ± 6	$3,02 \pm 1.10^{-2}$				
Resultados com transferência de calor							
Modelo	<i>T_{ex}</i> [K]	u_{ex} [m/s]	M _{ex} [adim.]				
Monoespécie, propriedades variáveis (R2)	1730 ± 7	3112 ± 6	$3,18 \pm 1.10^{-2}$				
Escoamento congelado – mod. 3	1534 ± 9	3278 ± 7	$3,27 \pm 2 \cdot 10^{-2}$				
Escoamento congelado – mod. 10	1534 ± 9	3278 ± 7	$3,27 \pm 2 \cdot 10^{-2}$				
Escoamento em equilíbrio – mod. 3	$2425,4 \pm 8 \cdot 10^{-1}$	3409 ± 2	$2,922 \pm 2 \cdot 10^{-3}$				
Escoamento em equilíbrio – mod. 10	$2425,6 \pm 8 \cdot 10^{-1}$	3409 ± 2	$2,922 \pm 2 \cdot 10^{-3}$				
Taxa finita – mod. 31	1860 ± 1.10^{1}	3315 ± 6	$3,08 \pm 1.10^{-2}$				
Taxa finita – mod. 32	1924 ± 9	$3320\pm2{\cdot}10^1$	$3,05 \pm 1.10^{-2}$				

(R1): $R_g = 526,97 \text{ J/kg-K}$; (R2): $R_g = 461,5254384083019 \text{ J/kg-K}$ (equivalente à mistura de gases de combustão para o modelo ideal)

Tabela 3.11: Propriedades termofísicas do refrigerante e da parede da tubeira.

Modelo	Δ <i>P</i> [Pa]	T _{c out} [K]	Q_{max} [W/m ²]	T_{max} [K]
Monoespécie, propriedades variáveis (R2)	$8,4\cdot 10^5 \pm 3\cdot 10^4$	$311,36 \pm 2 \cdot 10^{-2}$	$3,197 \cdot 10^7 \pm 5 \cdot 10^4$	$620,0 \pm 3 \cdot 10^{-1}$
Escoamento congelado - mod. 3	$8,4.10^5 \pm 3.10^4$	$311,6 \pm 2 \cdot 10^{-1}$	$3,28 \cdot 10^7 \pm 1 \cdot 10^5$	$628,5 \pm 7.10^{-1}$
Escoamento congelado – mod. 10	$8,4.10^5 \pm 3.10^4$	$311,6 \pm 2 \cdot 10^{-1}$	$3,28 \cdot 10^7 \pm 1 \cdot 10^5$	$628,5 \pm 7.10^{-1}$
Escoamento em equilíbrio – mod. 3	$8,4.10^5 \pm 3.10^4$	$311,9 \pm 2 \cdot 10^{-1}$	$3,23 \cdot 10^7 \pm 4 \cdot 10^5$	623 ± 3
Escoamento em equilíbrio – mod. 10	$8,4 \cdot 10^5 \pm 3 \cdot 10^4$	$311,9 \pm 2 \cdot 10^{-1}$	$3,23 \cdot 10^7 \pm 4 \cdot 10^5$	623 ± 3
Taxa finita – mod. 31	$8,4.10^5 \pm 3.10^4$	$311,40 \pm 2 \cdot 10^{-2}$	$3,235 \cdot 10^7 \pm 9 \cdot 10^4$	$624,0 \pm 4.10^{-1}$
Taxa finita – mod. 32	$8,4.10^5 \pm 3.10^4$	$311,46 \pm 2 \cdot 10^{-2}$	$3,240 \cdot 10^7 \pm 9 \cdot 10^4$	$624,5 \pm 4.10^{-1}$

(R2): $R_g = 461,5254384083019$ J/kg·K (equivalente à mistura de gases de combustão para o modelo ideal)

De acordo com os resultados apresentados na Tabela 3.10, a alteração no valor da velocidade de saída da mistura de gases de combustão é de 15 a 35 m/s (dependendo do modelo físico considerado), o que corresponde a, no máximo, 1% de variação. A queda nos valores de pressão são entre 400 e 750 Pa (Tabela 3.9), correspondendo, a no máximo, 2,6% de variação. A maior alteração nos valores das variáveis de interesse, entretanto, se dá para a temperatura: observase uma redução nos valores entre 35 e 72 K, sendo a variação correspondente a até 4,5% (observada para o modelo de escoamento congelado).

O acoplamento do escoamento do refrigerante ao escoamento reativo dos gases de combustão permite que sejam obtidos, também, valores de propriedades físicas referentes tanto ao refrigerante quanto às paredes da tubeira, conforme é apresentado na Tabela 3.11. Observa-se que, em relação à queda de pressão nos canais de refrigeração, a escolha por qualquer dos modelos

físicos ou químicos é indiferente, uma vez que todos os resultados numéricos são exatamente iguais (incluindo a estimativa de erro numérico). Ao se comparar a temperatura de saída do refrigerante, nota-se uma diferença superior à estimativa de erro, contudo, inferior a 0,6 K. Deste modo, a escolha do modelo de escoamento reativo para os gases de combustão é praticamente indiferente, do ponto de vista dos resultados numéricos.

Maiores diferenças entre os diversos modelos físicos são notadas para o fluxo máximo de calor na parede: a diferença atinge o valor de $8,3 \cdot 10^5$ W/m², equivalente a 2,60% (comparando-se os modelos de escoamento de monogás com propriedades variáveis e escoamento congelado). Observa-se, no entanto, que os efeitos dessa diferença entre os fluxos de calor torna-se bastante reduzida quando comparadas as temperaturas máximas alcançadas na parede da tubeira: enquanto a temperatura máxima da parede é de 620 K para o modelo de escoamento de monogás, a temperatura máxima no caso do modelo de escoamento congelado é de 628,5 K – apenas 8,5 K superior (equivalente a um incremento de 1,37%).

Da comparação entre os resultados numéricos obtidos e do tempo computacional demandado (Tabela 3.7), recomenda-se a utilização do modelo de escoamento congelado, ao menos para análises preliminares. Tal modelo físico, além de apresentar os maiores valores para a temperatura máxima alcançada na parede da tubeira (correspondendo, assim, ao caso de maior risco estrutural), é também o mais rápido em termos de tempo de simulação (demandando um tempo de CPU inferior, inclusive, que o do modelo de escoamento de monogás).

As Figuras 3.1 a 3.8, apresentadas na seqüência, mostram perfis relacionados a propriedades de interesse ao longo da tubeira. Em todas as figuras, a posição de abscissa zero corresponde à posição de entrada da mistura combustível na tubeira. Desta forma, quando a propriedade apresentada se refere ao refrigerante, deve-se atentar que a entrada do refrigerante ocorre na abscissa 0,5 m (correspondente à posição de saída dos gases de combustão).



Figura 3.1: Campo de empuxo (F) ao longo da tubeira.



Figura 3.2: Campo de fração mássica de H₂O ao longo da tubeira.



Figura 3.3: Campo de temperatura (T) ao longo da tubeira.



Figura 3.4: Campo de velocidade (u) ao longo da tubeira.



Figura 3.5: Fluxo de calor (Q) dos gases de combustão para as paredes, ao longo da tubeira.



Figura 3.6: Temperatura da parede em contato com os gases de combustão, ao longo da tubeira.



Figura 3.7: Campo de pressão ao longo dos canais de refrigeração.



Figura 3.8: Campo de temperaturas ao longo dos canais de refrigeração.

Nota-se, a partir da Figura 3.1, que o campo de empuxo ao longo da tubeira é pouco afetado seja pelo modelo físico, seja pela presença (ou não) dos efeitos de transferência de calor, uma vez que os resultados são praticamente coincidentes no gráfico. Pouco afetado pela escolha do modelo físico e presença de efeitos de trocas térmicas, também, é o perfil de velocidades (Figura 3.4): apenas nas proximidades da saída da tubeira as linhas correspondentes aos diferentes modelos deixam de ser coincidentes.

Os campos de fração mássica de H₂O (Figura 3.2) e de temperatura (Figura 3.3) apresentam uma maior variação das propriedades quando há efeitos de transferência de calor com o refrigerante. A associação do escoamento do refrigerante gera uma redução nas temperaturas da

mistura de gases de combustão ao longo de todo o escoamento, o que ocasiona um incremento nas frações mássicas de vapor de água, conforme pode ser visto ao se comparar as Figuras 3.2 e 3.3.

As Figuras 3.7 e 3.8 apresentam, respectivamente, os campos de pressão e de temperatura ao longo dos canais de refrigeração. Verifica-se que, com relação à pressão, não há diferença significativa com relação ao modelo físico adotado. As diferenças na temperatura ao longo do escoamento nos canais, contudo, são maiores, conforme pode ser observado na Figura 3.8. Observa-se, entretanto, que na saída dos canais, a diferença máxima atinge 0,54 K (correspondente a 0,17%) entre os modelos de escoamento em equilíbrio químico local e o escoamento monogás, com propriedades constantes.

As Figuras 3.5 e 3.6 apresentam, respectivamente, o fluxo de calor e a temperatura na parede da tubeira. Como era esperado, os maiores valores numéricos de fluxo térmico e de temperatura na parede ocorrem na região da garganta. Observa-se, contudo, que mesmo o modelo de escoamento em equilíbrio térmico apresentando maiores valores para a tempeatura da mistura de gases ao longo do escoamento, a maior temperatura na parede é obtida para o modelo de escoamento congelado. Para se explicar tal fenômeno, foram analisados os coeficientes de transferência de calor por convecção e o fluxo térmico de ambos os modelos, apresentados nas Figuras 3.9 e 3.10.



Figura 3.9: Temperatura dos gases de combustão e coeficiente de transferência de calor por convecção ao longo da tubeira.

Observa-se através da Figura 3.9 que os valores relativos ao coeficiente de transferência de calor por convecção são superiores para o modelo de escoamento congelado, quando comparado ao modelo de escoamento em equilíbrio químico local. Como no início na parte convergente da tubeira as temperaturas da mistura de gases de combustão são praticamente iguais para ambos os modelos

físicos, os efeitos de transferência de calor por radiação são equivalentes; desta forma, o maior valor para o coeficiente de transferência de calor por convecção do modelo de escoamento congelado é o responsável pelos maiores valores para o fluxo de calor e para a temperatura na parede.



Figura 3.10: Temperatura da parede e fluxo de calor para a parede ao longo da tubeira.

Na região da garganta, a diferença com relação à temperatura da mistura de gases amplia-se. O mecanismo de transferência de calor por radiação, então, torna-se mais importante no modelo de escoamento em equilíbrio em relação ao escoamento congelado (devido à maior temperatura da mistura de gases apresentada por aquele modelo). No entanto, como corresponde a apenas cerca de 5% do total de calor transferido à parede na região da garganta, ainda assim o modelo congelado apresenta um maior fluxo de calor (e conseqüentemente, maior temperatura na parede) na região da garganta. Isto decorre, também, devido às diferenças entre os coeficientes de transferência de calor por convecção (conforme Figura 3.10), que também se tornam maiores, de modo que o fluxo de calor (e na maior temperatura na parede) para o modelo de escoamento congelado, na região da garganta, continuam superiores que os obtidos para o modelo em equilíbrio químico.

Ao longo da região divergente da tubeira, observa-se que as diferenças entre os coeficientes de transferência de calor por convecção diminuem. Isto, associado a um aumento na diferença da temperatura da mistura de gases para ambos os modelos físicos, ocasiona a inversão na temperatura da parede (com relação aos resultados do modelos físicos). Desta forma, as temperaturas obtidas para a região divergente com o modelo de escoamento em equilíbrio químico são superiores àquelas obtidas com o modelo de escoamento congelado.

4. <u>CONCLUSÃO</u>

Foram apresentados, neste relatório, os modelos físico, matemático e numérico do escoamento unidimensional reativo no interior de um motor-foguete, com refrigeração regenerativa. Quatro modelos físicos diferentes foram utilizados: um monogás (monogás com propriedades variáveis) e três de misturas de gases (escoamento congelado, escoamento em equilíbrio químico local e escoamento com taxa finita de reação). Para os modelos físicos de mistura de gases, diferentes modelos de reações químicas foram empregados. Tais modelos apresentam de três a oito espécies químicas e de nenhuma a dezoito equações de dissociação (para os modelos de escoamento congelado e em equilíbrio químico local); no caso do escoamento com taxa finita de reação apenas modelos de seis e oito espécies foram considerados. Os modelos físicos e químicos empregados são os mesmos implementados no programa Mach1D 5.0, apresentado no Relatório Técnico 3.

A solução do escoamento do refrigerante no interior dos canais de refrigeração é obtido através do programa CANAL 2.0, apresentado em detalhes no Capítulo 2 do corrente relatório. Os programas CANAL 2.0 e Mach1D 5.0 são associados através do programa RHG 3.0, em que é solucionado tanto o escoamento reativo da mistura de gases de combustão quanto o escoamento do refrigerante ao longo dos canais, bem como o mecanismo de transferência de calor através da parede da tubeira. O algoritmo do acoplamento realizado pelo programa RHG 3.0 foi apresentado no Capítulo 2, seção 2.4, deste relatório.

Diferentes modelos físicos e químicos foram empregados no Capítulo 3 para avaliar o efeito dos diferentes modelos sobre a solução numérica. Para os modelos envolvendo mistura de gases de combustão (escoamento congelado e em equilíbrio químico local), apenas dois modelos foram estudados: um modelo de seis espécies químicas (modelo 3) e um envolvendo oito espécies (modelo 10). Conforme já observado no Relatório Técnico 3, os modelos apresentam resultados numéricos muito semelhantes entre si. A escolha por apenas dois modelos químicos foi efetuada baseada em resultados anteriores que mostram que, para os escoamentos congelado e em equilíbrio químico local, modelos que apresentam as mesmas espécies químicas fornecem os mesmos resultados numéricos (MARCHI *et al.*, 2005; ARAKI e MARCHI, 2006). Observa-se, também, que a escolha pela malha de 80 volumes de controle se deveu ao fato de que, para tal malha, a magnitude dos erros numéricos é equivalente àquela observada para os erros experimentais (MARCHI *et al.*, 2004; ARAKI e MARCHI, 2006).

Atenta-se que a formulação utilizada para a solução do problema de escoamento reativo é apropriada para qualquer regime de velocidades (MARCHI e MALISKA, 1994); também a equação da energia térmica é solucionada diretamente para obtenção da temperatura, conforme já mencionado no Relatório Técnico 3.

De um modo geral, observou-se uma grande variação no tempo computacional em função do modelo físico adotado. Dentre todos os quatro modelos físicos, o que apresentou os menores tempos de CPU foi o de escoamento congelado, sendo mais veloz, inclusive, que o modelo de escoamento monogás com propriedades variáveis. Enquanto simulações envolvendo o modelo de escoamento congelado demandam segundos, para os modelos de escoamento em equilíbrio químico local necessitam horas e, no caso de escoamento com taxa finita de reação, o tempo necessário é da ordem de dias.

O maior valor para a temperatura máxima na parede da tubeira foi observada utilizando-se o modelo de escoamento congelado (628,5 K). Deve-se ressaltar, contudo, que a diferença entre as temperaturas máximas foi de apenas 8,5 K e que, com relação às variáveis de interesse para o escoamento do refrigerante (variação de pressão e temperatura na saída dos canais), qualquer dos modelos físicos de escoamento dos gases de combustão pode ser adotado.

Apesar de a temperatura dos gases de combustão ao longo da tubeira ser superior no caso do modelo de escoamento em equilíbrio químico local, é para o modelo de escoamento congelado que foi verificada a maior temperatura na parede da tubeira. Isto se deve ao maior coeficiente de transferência de calor por convecção que é observado no caso do modelo de escoamento congelado, o que compensa a menor temperatura dos gases de combustão e permite que o fluxo de calor entre os gases de combustão e a parede da tubeira seja maior. Os efeitos dos valores mais elevados do coeficiente de transferência de calor por convecção, contudo, se reduzem na parte divergente da tubeira, fato pelo qual as temperaturas observadas na parede da tubeira são superiores para o modelo de escoamento em equilíbrio em relação ao modelo congelado, no divergente da tubeira.

Comparando-se os resultados numéricos para as diversas variáveis de interesse, bem como o tempo de CPU demandado por cada um dos modelos, observa-se que, ao menos para a geometria de tubeira adotada, o modelo de escoamento congelado é o mais indicado quando se deseja realizar estudos preliminares. Isto se deve à combinação de menor tempo de CPU e maior temperatura alcançada na parede da tubeira obtidas pelas simulações utilizando-se tal modelo físico.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ARAKI, L. K.; MARCHI, C. H. Numerical solution of an one-dimensional reactive flow in a regeneratively rocket engine nozzle. Paper submitted to 11th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering, ABCM, Curitiba, Brasil, 2006.

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.

BARTZ, D. R. A simple equation for rapid estimation of rocket nozzle convective heat transfer coefficients. Jet Propulsion, v. 37, pp. 49-51, 1957.

BEJAN, A.Heat Transfer. NewYork: John Wiley & Sons, 1993.

FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. Computational Methods for Fluid Dynamics. Berlin: Springer-Verlag, 2001.

FRÖHLICH, A.; POPP, M.; SCHMIDT, G.; THELEMANN, D. Heat transfer characteristics of H2/O2 – combustion chambers. In: 29th Joint Propulsion Conference. **Proceedings...** Monterrey, 1993. AIAA: 1993-1826.

GLENN RESEARCH CENTER. **CEA – Chemical Equilibrium with Applications**. Disponível em: <<u>http://www.grc.nasa.gov/WWW/CEA Web/ceaHome.htm</u>>, accesso em: 16 Fev 2005.

GNIELINSKI, V. New Equations for Heat and Mass Transfer in Turbulent Pipe and Channel Flow. **International Chemical Engineering**, v.16, pp. 359 – 368, 1976.

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

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.

MALISKA, C. R. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional. Rio de Janeiro: LTC, 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.; ARAKI, L. K.; LAROCA, F. Evaluation of thermochemical properties and combustion temperatures for LOX/LH₂ reaction schemes. In: XXVI Iberian Latin American Congres on Computational Methods in Engineering. **Proceedings...**, Guarapari, 2005.

MARCHI, C. H.; LAROCA, F.; SILVA, A. F. C.; HINCKEL, J. N. Solução numérica de escoamentos em motor-foguete com refrigeração regenerativa. In: XXI Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering. **Proceedings...**, Rio de Janeiro, 2000.

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.

MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C.. Unidimensional numerical solution error estimation for convergent apparent order. Numerical Heat Transfer, Part B, v. 42, pp. 167 – 188, 2002.

McBRIDE, B. J.; GORDON, S.; RENO, M. A. Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species. Cleveland: NASA Lewis Research Center. NASA Technical Memorandum 4513, 1993.

MILLER, R. W. Flow Measurement Engineering Handbook. 2 ed. New York: McGraw-Hill, 1983.

REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; POLING, B. E. **The Properties of Gases & Liquids**. 4 ed. New York: McGraw-Hill, 1987.

ROACHE, P. J. Perspective: A method for uniform reporting of grid refinament studies. Journal of Fluids Engineering, v. 116, p. 405 – 413, 1994.

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.

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

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