

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ

VINICIUS DAMASCENO VASCONCELOS DE CASTRO

**VALIDAÇÃO DE METODOLOGIA NUMÉRICA PARA AUXÍLIO EM PROJETOS
DE MOTORES FOGUETE**

PATO BRANCO

2023

VINICIUS DAMASCENO VASCONCELOS DE CASTRO

**VALIDAÇÃO DE METODOLOGIA NUMÉRICA PARA AUXÍLIO EM PROJETOS
DE MOTORES FOGUETE**

Validation of numerical methodology to assist in rocket engine projects

Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação apresentado como requisito para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Mecânica do Curso de Bacharelado em Engenharia Mecânica da Universidade Tecnológica Federal do Paraná.

Orientador: Francisco Augusto Aparecido
Gomes

Coorientador: Marcio Tadayuki Nakaura

PATO BRANCO

2023



[4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

Esta licença permite compartilhamento, remixe, adaptação e criação a partir do trabalho, mesmo para fins comerciais, desde que sejam atribuídos créditos ao(s) autor(es). Conteúdos elaborados por terceiros, citados e referenciados nesta obra não são cobertos pela licença.

VINICIUS DAMASCENO VASCONCELOS DE CASTRO

**VALIDAÇÃO DE METODOLOGIA NUMÉRICA PARA AUXÍLIO EM PROJETOS
DE MOTORES FOGUETE**

Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação
apresentado como requisito para obtenção do
título de Bacharel em Engenharia Mecânica
do Curso de Bacharelado em Engenharia
Mecânica da Universidade Tecnológica Federal
do Paraná.

Data de aprovação: 01/dezembro/2023

Francisco Augusto Aparecido Gomes
Doutorado
Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Marcio Tadayuki Nakaura
Mestrado
Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Fabiano Ostapiv
Doutorado
Universidade Tecnológica Federal do Paraná

PATO BRANCO
2023

RESUMO

O objetivo deste trabalho de conclusão de curso é desenvolver um algoritmo capaz de simular numericamente o campo de escoamento compressível de um motor foguete de pequeno porte sem reação química com ênfase na região convergente-divergente através do programa OpenFOAM. O escoamento interno de uma tubeira permite o fluido acelerar de velocidades subsônicas a velocidades supersônicas, regime em que o código numérico “rhoCentralFoam”, aqui empregado, é capaz de lidar para diversos números de Mach, onde a discretização do termo convectivo ocorre mediante esquemas “Central-Upwind” de Kurganov e Tadmor. Através de um caso geral disponível no site da NASA de um bocal convergente-divergente com o objetivo explícito de validar códigos em CFD, foi possível realizar testes de comprovação com três escoamentos diferentes, onde a pressão na câmara de combustão é fixa e varia-se a pressão na saída. Para tal, se faz necessário a discretização espacial, realizada por meio do programa Salome-Meca, para dividir o espaço onde haverá o escoamento em subdomínios simples, neste caso, empregam-se malhas estruturadas, cuja topologia é composta de quadriláteros onde cada elemento tem sempre o mesmo número de elementos vizinhos. Após a simulação, foi possível confrontar os resultados com os dados analíticos fornecidos que mostraram aproximação satisfatória, embora possua divergências em alguns pontos com ondas de choque. Em seguida, para realizar a simulação de um motor foguete de pequeno porte que mais se aproxima das condições reais, o programa PROPEP é utilizado para encontrar as características termofísicas do propelente KNSU assim como, obter a equação estequiométrica da combustão. Obteve-se um empuxo de 67,58 N com apenas 8,54% de afastamento dos testes experimentais desenvolvidos e um regime subsônico de ($Mach = 0,089$) a supersônico ($Mach = 3,276$), demonstrando a capacidade do código em simular regimes em uma ampla faixa de velocidades.

Palavras-chave: bocal convergente-divergente; motor foguete; propelente sólido; knsu; propep.

ABSTRACT

The goals of this work aim to develop a numeric simulation of a compressible flow field in a rocket engine chamber and exit nozzle without chemical reaction with emphasis on studying the convergent-divergent using OpenFOAM software. The nozzle intern field allows the fluid to accelerate from subsonic speeds to supersonic speeds, a regime in which the “rhoCentralFoam” numerical code, used in the present work, is capable of dealing with different Mach numbers, where the discretization of the convective term occurs through “ Central-Upwind” by Kurganov and Tadmor. Through a general case available on the NASA website of a convergent-divergent nozzle, with the explicit objective of validating CFD codes, it was possible to carry out verification tests with three different flows, where the pressure in the combustion chamber is fixed and varies the pressure at the outlet. For this purpose, spatial discretization is necessary, carried out using the Salome-Meca program, in this case, structured meshes were employed, whose topology is composed of quadrilaterals in each element has always the same number of neighboring elements. After the simulation, it was possible to compare the results with the analytical data provided, which showed a satisfactory approximation, although there were divergences in some points with shock waves. Then, to perform the simulation of a small rocket engine that comes closest to real conditions, the PROPEP program is used to find the thermophysical characteristics of the KNSU propellant as well as obtain the stoichiometric combustion equation. A thrust of 67.58 N was obtained with only 8.54% of difference from the experimental tests developed from a subsonic regime (Mach = 0.089) to supersonic (Mach = 3.276), proving the code’s ability to simulate regimes in a wide range of speeds.

Keywords: converging-diverging nozzle; rocket engine; solid propellant - knsu; propep; open-foam.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Perfil de velocidade para escoamento a Mach = 0,05 sobre um cilindro circular infinito.	13
Figura 2 – Distribuição do coeficiente de pressão para escoamento a Mach = 0,05 sobre um cilindro circular infinito.	13
Figura 3 – Diagrama esquemático de um motor pertecente a classe duct propulsion	16
Figura 4 – Diagrama esquemático de um motor pertecente a classe jet propulsion	16
Figura 5 – Esquema de um motor foguete.	17
Figura 6 – Balanço de pressão na câmara de combustão e no interior da tubeira. A pressão interna é maior na câmara (p_1) e decresce até chegar a pressão do bocal de saída(p_2).A pressão atmosférica (p_3) é uniforme. Na garganta a pressão é p_t	21
Figura 7 – Performance da altitude de um motor foguete a propelente líquido modelo RS-27 usado em uma versão anterior no lançamento do veículo Delta	22
Figura 8 – Ilustração da técnica multibloco	25
Figura 9 – Ilustração da técnica Chimera	25
Figura 10 – Ilustração da organização genérica do OpenFOAM	26
Figura 11 – Definição do volume de controle	28
Figura 12 – Ilustração de uma malha estruturada	34
Figura 13 – Ilustração de uma malha não estruturada	35
Figura 14 – Geometria convergente-divergente de uma tubeira para validação	38
Figura 15 – Geometria tipo cunha para simulação	39
Figura 16 – Representação da resolução da malha desenvolvida no programa Salome - Meca.	39
Figura 17 – Representação ampliada da malha na região da garganta.	40
Figura 18 – Perfil de pressão na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 8900 Pa.	41
Figura 19 – Perfil de velocidade na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 8900 Pa.	41

Figura 20 – Distribuição de pressão na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 8900 Pa.	42
Figura 21 – Distribuição de velocidade na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 8900 Pa.	42
Figura 22 – Perfil de pressão na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 7500 Pa.	43
Figura 23 – Perfil de velocidade na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 7500 Pa.	43
Figura 24 – Distribuição de pressão na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 7500 Pa.	44
Figura 25 – Distribuição de velocidade na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 7500 Pa.	44
Figura 26 – Perfil de pressão na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 1600Pa.	45
Figura 27 – Perfil de velocidade na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 1600Pa.	45
Figura 28 – Distribuição da pressão na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 1600Pa.	46
Figura 29 – Distribuição da velocidade na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 1600Pa.	46
Figura 30 – Motor foguete desenvolvido por Cort (2023) usado como referência para simulação.	47
Figura 31 – Janela inicial do PROPEP 3 para obtenção das propriedades termofísicas do escoamento.	49
Figura 32 – Perfil número de Mach do motor foguete do projeto experimental.	53
Figura 33 – Distribuição do número de Mach do motor foguete do projeto experimental.	53
Figura 34 – Perfil de pressão do motor foguete do projeto experimental.	54
Figura 35 – Distribuição da pressão absoluta do motor foguete do projeto experimental.	54
Figura 36 – Distribuição da pressão relativa do motor foguete do projeto experimental.	55

Figura 37 – Perfil de velocidade do motor foguete do projeto experimental.	55
Figura 38 – Perfil de temperatura do motor foguete do projeto experimental.	56
Figura 39 – Relação das razões de pressão, temperatura e área em função do número de Mach	57
Figura 40 – Relação das razões de pressão ao longo do comprimento do motor foguete	57
Figura 41 – Perfil de pressão do motor foguete desenvolvido por Cort (2023) com as características do propelente MODKNERK.	60
Figura 42 – Perfil de empuxo para diferentes composições de propelente	61
Figura 43 – Perfil de pressão do motor foguete desenvolvido por Cort (2023) com as características do propelente MODKNERK + Fe_2O_3.	63
Figura 44 – Distribuição da pressão absoluta para os propelentes KNSU, MODKNERK e MODKNERK + Fe_2O_3 ao longo do motor de estudo deste trabalho.	64
Figura 45 – Distribuição da pressão relativa para os propelentes KNSU, MODKNERK e MODKNERK + Fe_2O_3 ao longo do motor de estudo deste trabalho.	65

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Resultados obtidos dos testes experimentais do motor foguete utilizando o propelente KNSU	48
Tabela 2 – Características dos produtos da combustão do propelente utilizado no motor foguete desenvolvido por Cort (2023) - UTFPR Pato Branco . . .	51
Tabela 3 – Calor específico dos produtos da combustão do propelente utilizado no motor foguete desenvolvido por Cort (2023) - UTFPR Pato Branco . . .	51
Tabela 4 – Razão de pressão na região da câmara de combustão e na garganta da tubeira	57
Tabela 5 – Características dos produtos da combustão do propelente MODKNERK no motor foguete desenvolvido por Cort (2023) - UTFPR Pato Branco .	59
Tabela 6 – Calor específico dos produtos da combustão do propelente MODKNERK no motor foguete desenvolvido por Cort (2023) - UTFPR Pato Branco	60
Tabela 7 – Características dos produtos da combustão do propelente MODKNERK e óxido de ferro II (Fe_2O_3) no motor foguete desenvolvido por Cort (2023) - UTFPR Pato Branco	62
Tabela 8 – Calor específico dos produtos da combustão do propelente MODKNERK e óxido de ferro II (Fe_2O_3) no motor foguete desenvolvido por Cort (2023) - UTFPR Pato Branco	62

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
1.1	Objetivo Geral	11
1.2	Objetivos Específicos	11
1.3	Estrutura do trabalho	11
2	REFERENCIAL TEÓRICO	12
2.1	Mecanismo de um motor foguete	16
2.2	Parâmetros físicos de um motor foguete	18
2.2.1	Impulso	19
2.2.2	Empuxo	20
3	METODOLOGIA NUMÉRICA	24
3.1	Mecânica dos fluidos computacional	24
3.2	Diretrizes do OpenFOAM	26
3.3	Fundamentação teórica	27
3.4	Leis de conservação	27
3.4.1	Equação da continuidade	27
3.4.2	Equação da quantidade de movimento	29
3.4.3	Equação da energia	30
3.5	Sistema das equações de Navier-Stokes	31
3.6	Formulação para um gás perfeito	33
4	DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL	34
4.1	O método dos volumes finitos	36
4.2	Condições de contorno	36
4.2.1	Variáveis primitivas	37
4.2.2	Propriedades termofísicas	37
4.2.3	Discretização temporal	37
4.2.4	Algoritmo de solução	38
4.3	Validação	38
4.3.1	Resultados validação	40
4.4	Simulação de um bocal convergente-divergente de pequeno porte	47
4.4.1	Procedimentos para simulação numérica do motor foguete experimental	48

4.4.2	Resultados da simulação do projeto experimental	52
4.4.3	Otimização do empuxo e sugestões	58
5	CONCLUSÃO	66
	REFERÊNCIAS	67
	ANEXO A ARQUIVOS DO DIRETÓRIO 0	70
	ANEXO B ARQUIVOS DO DIRETÓRIO SYSTEM	74
	ANEXO C ARQUIVOS DO DIRETÓRIO CONSTANT	79
	ANEXO D DISPLAY RESULTS - PROPEP3	83

1 INTRODUÇÃO

Os chineses, há mais de 800 anos, foram os pioneiros em utilizar foguetes como instrumento militar de guerra. A partir de uma mistura de salitre, enxofre e pó de carvão, conseguiam um propelente capaz de produzir impulso suficiente para serem utilizados em flechas contra a invasão dos Mongóis. Os foguetes sofreram grandes evoluções durante séculos como instrumento de guerra até que, em 1857, Konstatini Tsiolkovski observou seu potencial para conquista do espaço, fato confirmado com os primeiros satélites artificiais, em 1957, lançado pelos soviéticos, o Sputnik I, lançado em 4 de outubro de 1957, e Sputnik II, lançado em 3 de novembro de 1957 (NASA 2011- Rockets Educator Guide).

Segundo John D. Anderson Jr.(1995) o estudo da mecânica dos fluidos até 1960, era abordado segundo teoria pura e da experiência. Entretanto, com a chegada do computador digital de alta velocidade combinado com algoritmos numéricos para resolver problemas físicos, tornou-se possível a análise de problemas aerodinâmicos e cálculos preliminares de projeto no campo da engenharia aeroespacial (como em motores de foguete). A vantagem dessa nova forma de abordar o estudo da mecânica dos fluidos é a redução dos custos de experimentos, necessidade de predição e economia do tempo segundo Salvador (2005). O CFD (computacional fluid dynamics) é a ferramenta normalmente utilizada para solução numérica das equações que governam o escoamento de fluidos (ANDERSON, 1995). Existem diversos pacotes comerciais de CFD como o FLUENT, CFX entre outros, a motivação em utilizar o OpenFOAM surge por ser uma ferramenta de código livre gratuita e acesso direto ao código fonte.

Escoamentos que envolvem múltiplas faixas de velocidades com possibilidade de ondas de choque (como encontrado em motores foguete) mostraram a necessidade de esquemas numéricos capazes de simular todas as regiões de escoamento. Existem diversos trabalhos que abordam esse tipo de situação na literatura, como Chorin (1967) que utiliza uma estratégia de compressibilidade artificial para estabilizar métodos de solução desenvolvido para escoamentos compressíveis ou incompressíveis, algoritmos em que a densidade do fluido é a variável desconhecida a ser determinada (density-based) por MacCormack e Beam – Warming, karki e Patankar (1988) com a proposta para o acoplamento através de uma malha escalonada da pressão e velocidade, e mais recentemente, Darwish (2015), Tavelli e Dumbser (2016) e Xiao Fabian Denner (2017).

1.1 Objetivo Geral

O presente trabalho busca o desenvolvimento de um esquema numérico, sem reação química, para o escoamento através de motores foguete com ênfase na região convergente-divergente (Tubeira).

1.2 Objetivos Específicos

Como objetivos específicos podem-ser destacados:

1. Análise da geometria que ofereçam condições de voo ascendente desejadas.
2. Verificação numérica do padrão do escoamento (pressão e velocidade) ao longo da região convergente-divergente.
3. Cálculo do empuxo fornecido pela geometria de interesse.
4. Otimização do empuxo.

1.3 Estrutura do trabalho

No Capítulo 2 será apresentado de forma resumida uma revisão bibliográfica. O objetivo dessa revisão é apresentar as diversas abordagens possíveis e extensão de métodos exclusivos referentes ao objeto de estudo deste trabalho. Uma descrição do funcionamento do mecanismo de um motor foguete, suas classes, suas aplicações gerais e os parâmetros físicos relacionados também sera contemplado neste capítulo.

O capítulo 3 corresponde a metodologia numérica onde será apresentado o estudo da mecânica dos fluidos computacional e a sua evolução. Também são descritas algumas características do OpenFOAM e a fundamentação teórica através das equações que governam o escoamento interno de um motor foguete. Em seguida é explicado a formulação para um gás perfeito, já que assim o foi suposto para solução deste problema.

A discretização espacial, tipo de malha, condições de contorno e métodos e metodologias que serão empregados para o desenvolvimento de um esquema de solução numérica para simulação da geometria de um motor foguete é apresentado no capítulo 4. Neste mesmo capítulo, encontra-se a validação do código utilizado em que, será realizada através de um caso geral de bocal convergente-divergente disponível no site da NASA e a simulação do motor foguete a partir de dados obtidos empíricos por Cort (2023)- UTFPR (Pato Branco). No capítulo 5, os resultados esperados são descritos, levando em consideração as variáveis e objetivos que se espera alcançar e a influência da composição de diferentes propelentes na otimização do empuxo.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

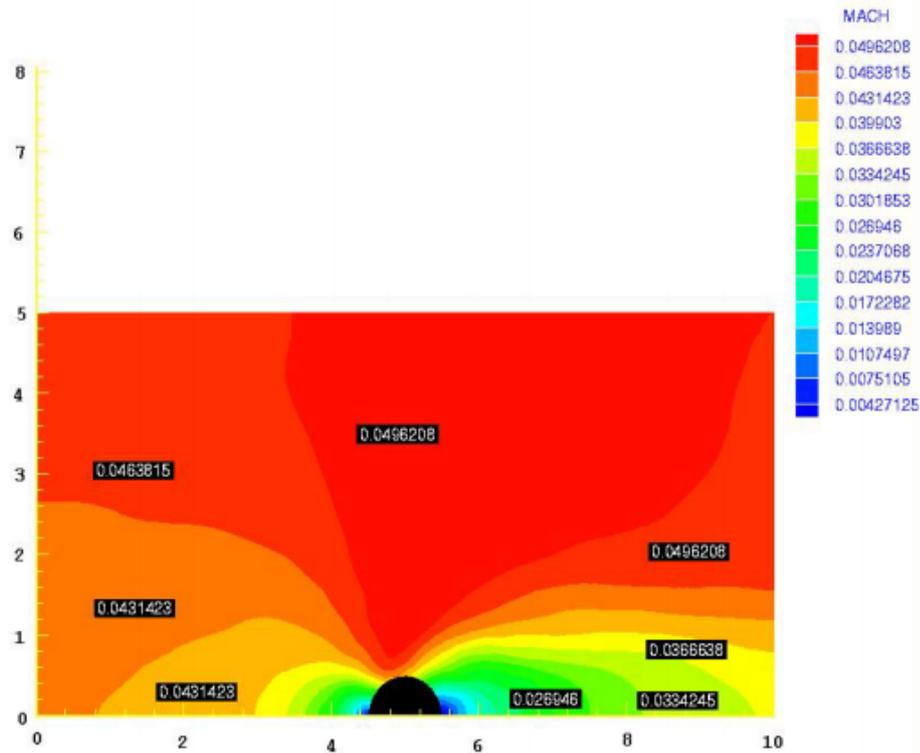
É apresentado nesse capítulo uma breve revisão bibliográfica de trabalhos numéricos que envolvem o estudo e análise do escoamento numa ampla faixa de velocidades (all Mach) e alguns trabalhos que utilizaram o programa OpenFOAM como instrumento de pesquisa para esse fim.

Nicolas Moisés Cruz Salvador (2000) simulou numericamente, utilizando o programa FLUENT, o campo de escoamento na câmara de combustão de um motor foguete a propelente líquido com reação química. Foi empregado um método de volumes finitos que simula o escoamento em diversas faixas de velocidade. Para esse fim, foi utilizado um código existente que seja relevante nessa situação, portanto, variáveis primitivas (pressão, temperatura e velocidade) foram levadas em consideração.

Comparando-se a virtude do código com o resultado teórico de referências de outros códigos já aceitos pela comunidade do CFD, utilizando o escoamento externo em um cilindro circular e uma cunha aerodinâmica. Escoamento interno num canal com seção decrescente e a tubeira convergente-divergente do tipo de Laval. E na parte reativa, empregou-se uma aproximação parabólica da tubeira e no modelo da cinemática, a queima de hidrogênio e oxigênio.

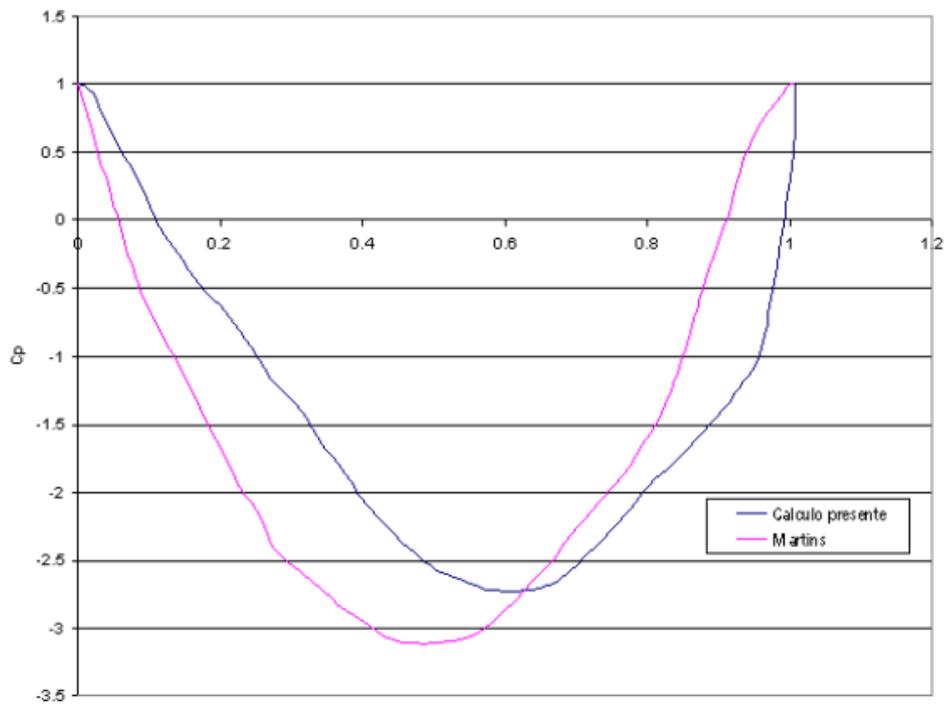
O cilindro circular, considerado um exemplo clássico, permite uma boa representação do campo de escoamento. Para tal, usou-se o caso de um escoamento a baixa velocidade ($M=0,05$). Tomando as condições de fronteiras necessárias, obtiveram-se o perfil de velocidade, Figura 1, e para comparação com a literatura, utilizou-se o trabalho de Martins (1994), de acordo com a Figura 2. As diferenças existentes entre ambos ocorre devido o método de Martins ter sido mais apropriado para registrar o surgimento de oscilações de pressão.

Figura 1 – Perfil de velocidade para escoamento a Mach = 0,05 sobre um cilindro circular infinito.



Fonte: SALVADOR (2000) .

Figura 2 – Distribuição do coeficiente de pressão para escoamento a Mach = 0,05 sobre um cilindro circular infinito.



Fonte: Martins (1994).

Afim de obter uma aproximação de um escoamento totalmente supersônico, considerando números de Mach 2 e 4, foi simulado o escoamento aberto numa cunha aerodinâmica com inclinação $10,2^\circ$. Utilizou-se os métodos de Van Leer de primeira e segunda ordem e malha não estruturada refinada na região do choque. Comparando os resultados com o código de Martins (1994), obteve-se um bom desempenho em relação a solução analítica. Portanto, demonstra-se uma maneira apropriada para simular o problema. A simulação da região da tubeira convergente-divergente do tipo de Laval também foi bem sucedida com boa precisão do comportamento subsônico e supersônico encontrado na mesma. Assim como o perfil de pressão sobre a parede do bocal convergente quando comparado com o de Martins (1994) para o esquema de Van Leer.

A parte reativa, empregou-se o algoritmo de solução VODE utilizado por Chemkin (1992). A simulação da combustão completa de hidrogênio e oxigênio, que ocorre na câmara, também foi bem sucedida, com resultados dentro dos limites esperados.

Os resultados gerais obtidos nas simulações utilizando uma malha não estruturada e refinada nos lugares de maior gradiente, método upwind, de primeira e segunda ordem de Van Leer, demonstram uma boa aproximação geral do que acontece no processo de combustão e uma ideia do comportamento fluidodinâmico que ocorre na câmara de combustão e tubeira de motores foguete. Houve concordância dos valores previstos na parte química, ou seja, o acoplamento químico apresentou uma boa distribuição das espécies químicas. A sugestão do autor para maior aproximação da realidade é usar modelos turbulentos com viscosidade em um sistema tridimensional ou axissimétrico.

Xiao, Denner e Wachem(2017) desenvolvem a simulação de escoamentos em uma ampla faixa de velocidades (all speed), através de um esquemático numérico de acoplamento pressão velocidade para a região de escoamento incompressível utilizando uma malha não estruturada proposta por Denner e van Wachem. Utilizou-se uma extensão do esquema numérico para atender a simulação de variadas regiões complexas de escoamento. Para tal, cria-se uma relação entre a equação da energia dependente do tempo e as variáveis das equação de quantidade de movimento e da continuidade. Afim de, comprovar o esquema numérico foi desenvolvido a simulação do escoamento em um cilindro, num canal com seção decrescente, em uma tubeira convergente-divergente e num cone circular considerando todas as regiões de escoamento, classificados como testes padrões de soluções por Navier Stokes.

No cilindro, cada simulação foi feita respeitando o número Courant inferior a 0,4. Magnitude necessária para escoamentos incompressíveis e para comparação com a literatura. Na seção decrescente, foram feitas duas simulações considerando as reflexões de Mach, ou seja, as interações irregulares das ondas de choques. O escoamento presente na tubeira foi considerado sem viscosidade e sem condutividade térmica, simulando as regiões transônicas, subsônicas, supersônicas e a expansão isoentrópica na parte transiente, com as devidas condições de contorno estabelecidas nesta para abranger todas as velocidades. O último teste foi desenvolvido em um cone tridimensional, onde devido as sua simetrias, é possível conseguir acurácia

nos resultados a partir da ajuda de coordenadas adequadas e transformação de variáveis. Portanto, a equação do escoamento compressível para esse caso particular pode ser deduzida para uma equação diferencial ordinária não linear, chamado de equação de Taylor-Maccoll.

Em todos os casos se empregou uma malha não estruturada de elementos triangulares com refinamento nas fronteiras dos testes da simulação. Os resultados de todos os testes padrões para escoamentos all Mach estiveram em acordo com a literatura utilizada para comparação, mostrando estabilidade numérica sem a necessidade de fatores de sub-relaxamento para convergência. Essa predição robusta do modelo numérico se deu por considerar um método de interpolação momentum-weighted (MWI) na equação de continuidade e a formulação da equação da energia como dependente do tempo para soluções numéricas do tipo pressure-based.

Shen Fengxian Sun (2013), e Xia implementaram uma solução vinculada a densidade para uma ampla faixa de velocidades utilizando o programa OpenFOAM. Houve a adaptação do esquemático de pré-condicionamento AUSM + (P) utilizando o método dual time-stepping (DTS) para completar o processo. Desenvolveu-se também um algoritmo diferente de reconstrução da interface, analisado e comparado em relação a acurácia convectiva. Para avaliar o desempenho da solução numérica para escoamentos diversos, foram usados: uma cavidade onde três lados fixos e um em movimento (lid-driven cavity flow), escoamento num canal com uma protuberância (flow crossing a bump) no caminho e contra um degrau a jusante do mesmo (flow over a forward-facing step).

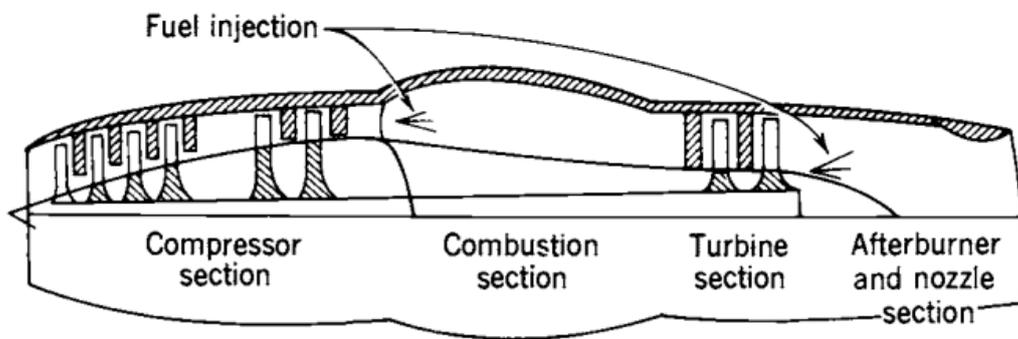
Existem poucas soluções numéricas vinculados a densidade disponíveis no OpenFOAM. As mais conhecidas são “rhoCentralFoam” e “densityBasedTurbo” desenvolvido por Oliver Borm. Ambos conseguem fornecer resultados precisos para regiões de escoamento transônico, supersônico e hipersônico. Para evitar instabilidade nas equações que governam o problema sem métodos vinculados a pressão, esquemas de pré-condicionamento são implementados. Este trabalho desenvolve uma adaptação do “densityBasedTurbo” para situações onde se encontra diversas regiões de velocidade.

Na cavidade quadrada, as regiões de vórtices são registradas com a nova forma de reconstrução multidimensional do que de uma dimensão apenas. O escoamento transônico sobre uma elevação de 10% com função limite de VanLeer também é capaz de registrar com boa concordância para números de Mach = 0,625 e Mach = 0,001. Para o canal com um degrau, o método de pré-condicionamento é adaptado para capturar as características do escoamento dependente do tempo. Todos esses testes da solução numérica proposta apresentaram precisão nos seus resultados e provaram ser capazes de registrar as características principais de escoamento em faixas de velocidade do subsônico ao supersônico.

2.1 Mecanismo de um motor foguete

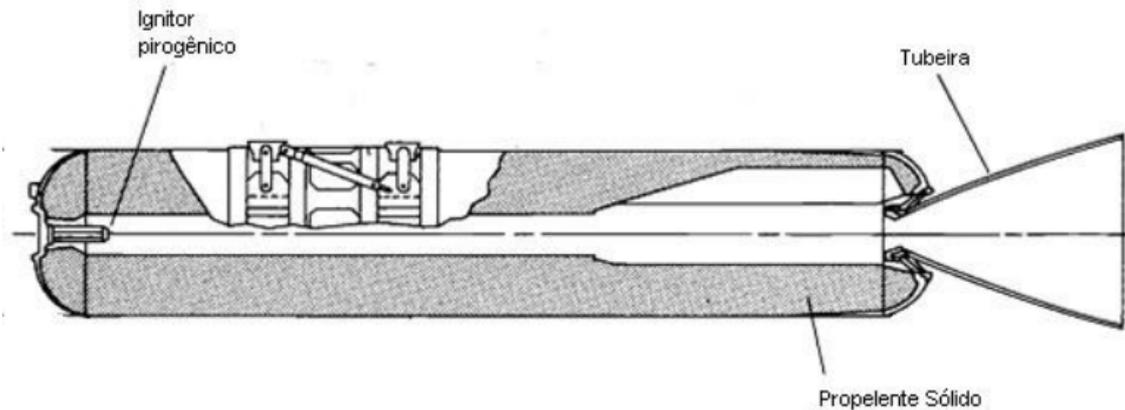
A propulsão se resume a ação de prover movimento de um corpo que esteja inicialmente em repouso ou para superar forças de retardamento. Existem diversas classes de propulsão como: Duct propulsion e jet propulsion. O primeiro são motores que utilizam o ar atmosférico comprimido como fluido de trabalho em conjunto com combustível e o segundo envolve a produção de impulso através da ejeção de um propelente. Na Figura 3 e Figura 4, estão exemplos esquemáticos dessas classes de propulsão (SUTTON; BIBLARZ, 2010).

Figura 3 – Diagrama esquemático de um motor pertecente a classe duct propulsion



Fonte: SUTTON and BIBLARZ(2001) .

Figura 4 – Diagrama esquemático de um motor pertecente a classe jet propulsion

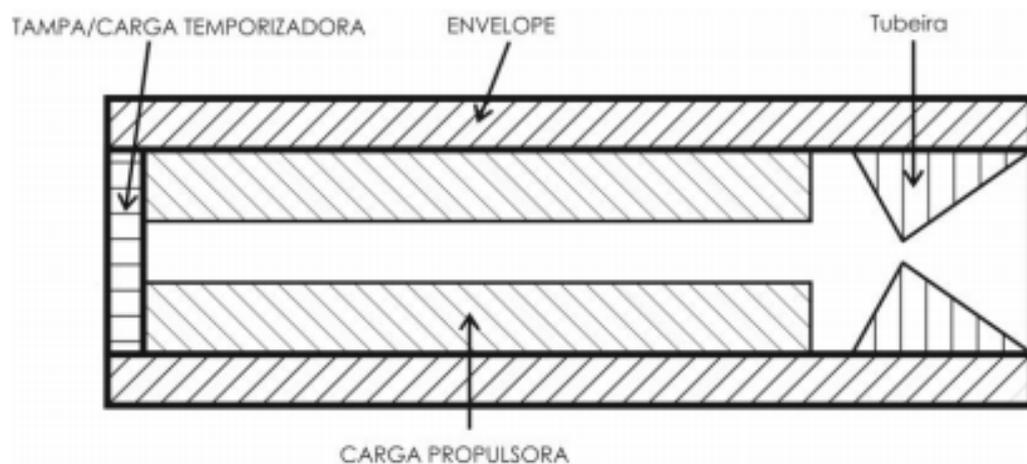


Fonte: SUTTON and BIBLARZ(2001) .

O lançamento de naves espaciais para disposição de satélites tais como: militares, observação do tempo, comunicação e exploração planetárias ocorrem através da propulsão desenvolvida pelos motores foguetes. Dependendo do objetivo, são utilizados múltiplos estágios, ou seja, encontra-se mais de um motor foguete presente. Cada um desempenha uma função no lançamento: na fase inicial utilizam-se boosters para alcançar a órbita terrestre baixa e sustainers que continuam queimando até além da órbita (NASA 2018). Em mísseis militares, de curto e longo alcance, cápsulas de ejeção, jetpacks e torpedos também são outras aplicações dos motores foguetes.

O motor foguete que será analisado nesse trabalho é aquele correspondente a classe jet propulsion. Sendo assim, a força propulsora será produzida a partir da combustão do propelente. De acordo com a Figura 5, o motor foguete é basicamente constituído de um envelope, carga propulsora, tampa com ignitor temporizador e a tubeira. Este último é responsável por aumentar a pressão dos gases da queima do propelente, aumentando assim, o empuxo do motor que possibilita alcançar velocidades supersônicas. O envelope atua como um vaso de pressão precisando suportar as pressões internas exercidas durante a queima deste e o ignitor é utilizado para dar a partida do motor.

Figura 5 – Esquema de um motor foguete.



Fonte: SCHLOSSMACHER (2015) .

2.2 Parâmetros físicos de um motor foguete

Os princípios utilizados para estudar a propulsão dos motores foguete são principalmente aqueles da mecânica, termodinâmica e da química. A propulsão ocorre ao aplicar força a um veículo, ou seja, acelerando-o ou mantendo uma velocidade contrária a uma força de resistência. Como mencionado anteriormente, a força propulsora é obtida pela ejeção dos gases produzidos pela queima de um propelente a alta velocidade, conforme Sutton e Biblarz (2010). A tubeira possui essa principal função de acelerar os produtos da combustão produzidos pela queima do propelente para alcançar velocidades supersônicas.

A análise do escoamento do fluido em uma tubeira envolve um escoamento compressível, unidimensional e regime estacionário de um gás ideal. No caso de um escoamento compressível, é conveniente representar as propriedades como propriedades de estagnação, ou seja, quando o fluido é desacelerado a velocidade zero de forma adiabática. Outra importante condição é a de um escoamento isentrópico dessa maneira as propriedades do escoamento são quase isentrópicas e afetadas somente pela variação da área da seção transversal. Portanto, a temperatura, pressão e entalpia podem ser expressas conforme as equações abaixo:

$$\frac{T}{T_0} = 1 + \left(\frac{K - 1}{2} \right) M_a^2 \quad (1)$$

$$\frac{p}{p_0} = \left[1 + \left(\frac{K - 1}{2} \right) M_a^2 \right]^{\frac{k}{k-1}} \quad (2)$$

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \left[1 + \left(\frac{K - 1}{2} \right) M_a^2 \right]^{\frac{k}{k-1}} \quad (3)$$

$$k = \frac{C_p}{C_p - R} = \frac{C_p}{C_v} \quad (4)$$

$$h_0 = h + \frac{v^2}{2} \quad (5)$$

Na Equação 4 C_p representa o calor específico a pressão constante, C_v o calor específico a volume constante e R a constante universal dos gases.

A partir dessas considerações e da equação da continuidade dada pela Equação 6 para o bocal, é possível construir uma equação que expressa a razão das áreas da seção transversal e a crítica (onde o número de Mach é unitário) em termos do número de Mach conforme Equação 7.

$$\rho Av = \rho^* A^* v^* = \text{constante} \quad (6)$$

$$\frac{A}{A_*} = \frac{1}{M_a} \left(\frac{1 + \frac{k-1}{2} M_a^2}{\frac{k-1}{2} M_a^2} \right)^{\frac{k+1}{2(k-1)}} \quad (7)$$

Ao se construir um gráfico da razão das área versus o número de Mach, claramente é observado que uma passagem convergente-divergente com seção de área mínima é necessário para acelerar o escoamento a velocidade sônica ($M = 1$).

Das Equação 5 e Equação 6 a velocidade do escoamento na saída da tubeira pode ser expressa por:

$$v_e = \sqrt{2(h_x - h_e + v_x^2)} \quad (8)$$

A Equação 8 pode ser reescrita a partir da equação de energia e da definição de K conforme abaixo:

$$v_e = \sqrt{\frac{2kRT_0}{k-1} \frac{R}{M} \left[1 - \left(\frac{P_e}{P_0} \right)^{\frac{k-1}{k}} \right]} \quad (9)$$

Onde R é a constante universal dos gases perfeitos ($R = 8314 \text{ N.m/kmol.K}$), M é a massa molecular efetiva dos produtos de exaustão obtido da análise de combustão, T_0 é a temperatura de combustão do propelente, P_e pressão na saída da tubeira e P_0 a pressão na câmara de combustão.

A seguir, serão apresentados as definições e conceitos básicos da força propulsora e impulso específico entre outros parâmetros.

2.2.1 Impulso

O impulso total I_t ocorre por meio do empuxo total variando no tempo integrado em um tempo de queima t conforme Equação 10

$$I_t = \int_0^t F dt. \quad (10)$$

Considerando empuxo constante e desprezando os efeitos transientes, temos:

$$I_t = Ft \quad (11)$$

onde I_t é proporcional a energia total liberada pela queima do propelente do sistema de propulsão. O impulso específico I_s corresponde ao impulso total por unidade de massa do propelente. É um importante parâmetro que demonstra a performance do sistema de propulsão do foguete, similar ao conceito de quilômetros por litro usado em automóveis. Quanto maior o seu número, melhor o seu desempenho. Se a vazão mássica do propelente é \dot{m} e a aceleração da gravidade $9,8066 \text{ m/sec}^2$ (SUTTON; BIBLARZ, 2010), temos:

$$I_s = \frac{\int_0^t F dt}{g_0 \int \dot{m} dt} \quad (12)$$

A Equação 12 é usada para calcular o valor da variação no tempo do impulso específico (I_s) para qualquer tipo de sistema de propulsão de um foguete, em que o empuxo varia com o tempo. Durante a fase transiente, o I_s pode ser obtido pela integração e determinação dos valores médios de F ou \dot{m} para pequenos intervalos de tempo. Caso o empuxo e a vazão mássica sejam constantes no decorrer do tempo, a equação acima pode ser simplificada pela Equação 13 onde m_p é a massa efetiva do propelente.

$$I_s = I_t / (m_p g_0), \quad (13)$$

2.2.2 Empuxo

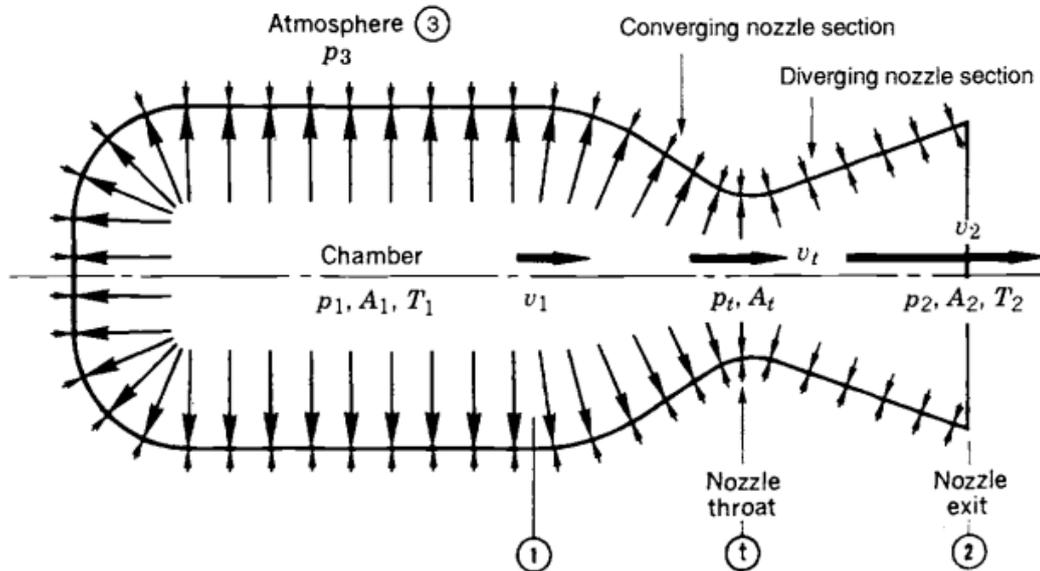
O empuxo corresponde a força produzida por um sistema de propulsão agindo sobre um veículo. É a reação experimentada por este durante a ejeção dos gases e tem similaridade com o recuo devido o disparo de uma arma. Portanto, de acordo com a Figura 6, por ação e reação, a saída dos gases “empurra” o foguete para frente devido o empuxo gerado na direção contrária. No bocal de saída de um foguete, a velocidade de ejeção não é exatamente uniforme por toda a secção da saída deste, portanto, não representa a magnitude do empuxo total ocorrido (Sutton e Biblarz (2010)). Por conveniência, suponha-se uma velocidade axial uniforme como uma média da velocidade de saída dos gases provenientes da queima do propelente.

Na Equação 14 é apresentado o empuxo devido a variação da quantidade de movimento, onde o empuxo e a vazão mássica são constantes e a velocidade axial de saída uniforme:

$$F = \frac{dm}{dt} = \dot{m} v_2 = \frac{\dot{w}}{g_0} v_2. \quad (14)$$

A força F representa a força total de propulsão desenvolvida até que a pressão do bocal de saída seja equivalente a pressão ambiente.

Figura 6 – Balanço de pressão na câmara de combustão e no interior da tubeira. A pressão interna é maior na câmara (p_1) e decresce até chegar a pressão do bocal de saída(p_2). A pressão atmosférica (p_3) é uniforme. Na garganta a pressão é p_t .



Fonte: SUTTON and BIBLARZ(2001) .

De acordo com Sutton e Biblarz (2010), a pressão ambiente (pressão atmosférica) dá origem a uma segunda contribuição que influencia o empuxo. Conforme o esquemático da Figura 6, é possível visualizar a pressão externa agindo uniformemente no exterior da superfície da câmara de combustão e na pressão interna dos gases de um típico motor foguete. O tamanho das flechas equivale à magnitude da força de pressão. O empuxo axial é calculado pela integração de todas as pressões agindo sobre as áreas transversais ao eixo do bocal de saída. As pressões radiais podem ser desprezadas quanto a sua contribuição ao empuxo axial. Sendo assim, de acordo com a Equação 15, o empuxo pode ser representado em função da pressão atmosférica e pressão local do gás de saída:

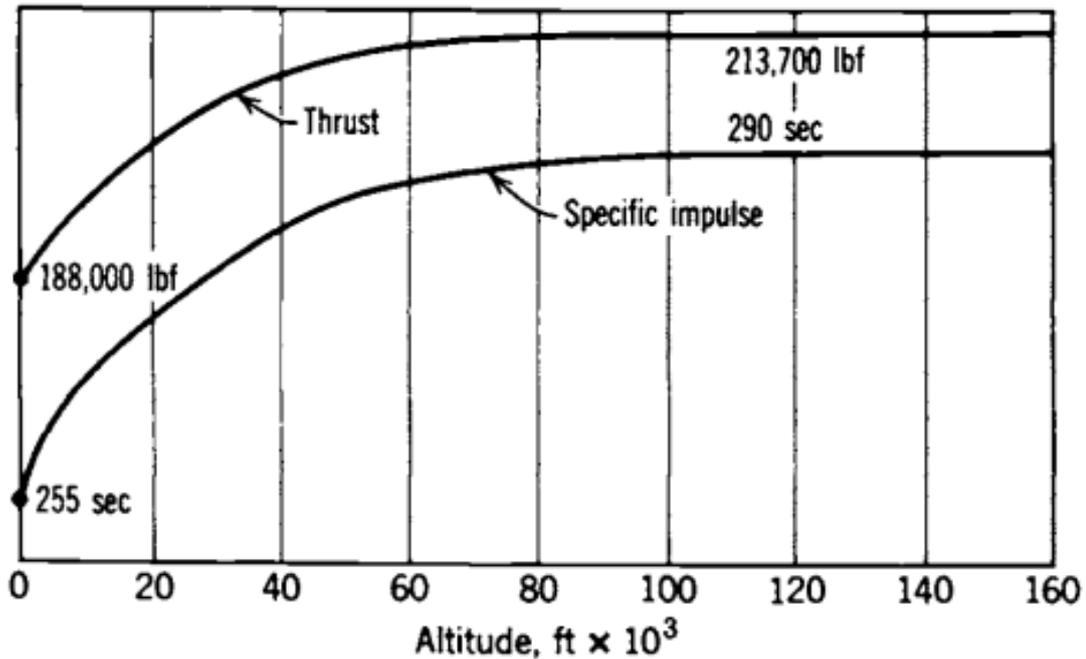
$$F = \dot{m}v_2 + (p_2 - p_3)A_2 \quad (15)$$

O primeiro termo do lado direito da equação acima corresponde a quantidade de momento (vazão mássica multiplicada pela velocidade relativa de saída do veículo). O segundo termo representa a força do empuxo que consiste do produto da secção transversal pela área do bocal de saída A_2 pela diferença entre a pressão de saída (p_2) e ambiente do fluido(p_3).

É possível observar através da Equação 15 que o empuxo de um foguete é independente da velocidade de vôo. Isso é devido pois este varia em função da altitude e dessa forma, a variação de pressão ambiente afeta a pressão de empuxo.

Portanto, com a diminuição da pressão e o ganho de altitude, o empuxo e impulso específico aumentam quando o veículo é impulsionado para altitudes superiores. Essa mudança na pressão do empuxo é devido a altitude se ficar em torno de 10% a 30% do empuxo total conforme motor foguete de propelente líquido, modelo RS - 27, através da Figura 7.

Figura 7 – Performance da altitude de um motor foguete a propelente líquido modelo RS-27 usado em uma versão anterior no lançamento do veículo Delta



Fonte: SUTTON and BIBLARZ(2001) .

A partir das equações de estagnação, é possível reescrever a expressão da força de empuxo conforme abaixo:

$$F = A^* P_0 \sqrt{\frac{2K^2}{K-1} \left(\frac{2}{K+1}\right)^{\frac{K+1}{K-1}} \left[1 - \left(\frac{P_e}{P_0}\right)^{\frac{K-1}{K}}\right]} + (P_e - P_a) A_e \quad (16)$$

Essa equação ilustra que, caso o segundo termo de empuxo de pressão seja zero, ou seja, $P_e = P_a$ em uma expansão ótima, este será diretamente proporcional à área da garganta A^* e quase diretamente proporcional à pressão de câmara P_0 . Essa relação não é linear, assim, se dobrar a área da garganta ou a pressão na câmara, não envolve o mesmo aumento no empuxo visto que, variações no projeto como a área de queima do grão iriam aumentar e assim, o reforço da estrutura deveriam ser levados em consideração.

Outra maneira de analisar o empuxo ocorre através do conceito de Coeficiente de Empuxo, este permite quantificar o grau com que o empuxo é amplificado pela tubeira e é definido em termos da pressão da câmara e área da garganta, Equação 17. Ambas as formas de calcular o empuxo ou partir do mesmo para definir a geometria de projeto podem ser válidas, possuindo basicamente a mesma precisão.

$$C_f = \sqrt{\frac{2K^2}{K-1} \left(\frac{2}{K+1}\right)^{\frac{K+1}{K-1}} \left[1 - \left(\frac{P_e}{P_0}\right)^{\frac{K-1}{K}}\right]} + \frac{(P_e - P_a)A_c}{P_0 A^*} \quad (17)$$

3 METODOLOGIA NUMÉRICA

Neste capítulo é apresentado a evolução do estudo da mecânica dos fluidos e as características gerais a respeito do programa utilizado para o estudo numérico desse trabalho. Em seguida, detalha-se as equações governantes que farão parte da discretização deste estudo, assim como a malha utilizada, a discretização espacial, o esquema de solução dos termos convectivos e advectivos e condições de contorno que contribuirão para construção do domínio da configuração do motor foguete.

3.1 Mecânica dos fluidos computacional

Segundo Anderson (1995), a fluidodinâmica computacional constitui a terceira nova abordagem no estudo filosófico e desenvolvimento da área de mecânica dos fluidos. Acabou se tornando uma ferramenta da teoria e experimentação pura na solução de problemas que envolvem a dinâmica de fluidos, participando de uma revolução histórica no estudo dessa área. Sua história tem início no começo de 1970.

Nesse tempo a combinação de física, análise numérica e ciência da computação se tornou um acrônimo na simulação de escoamento de fluidos (BLAZEK, 2005). O pioneirismo do CFD (computational fluid dynamics) ocorreu devido a disponibilidade dos computadores e está diretamente interligado com a sua evolução tecnológica.

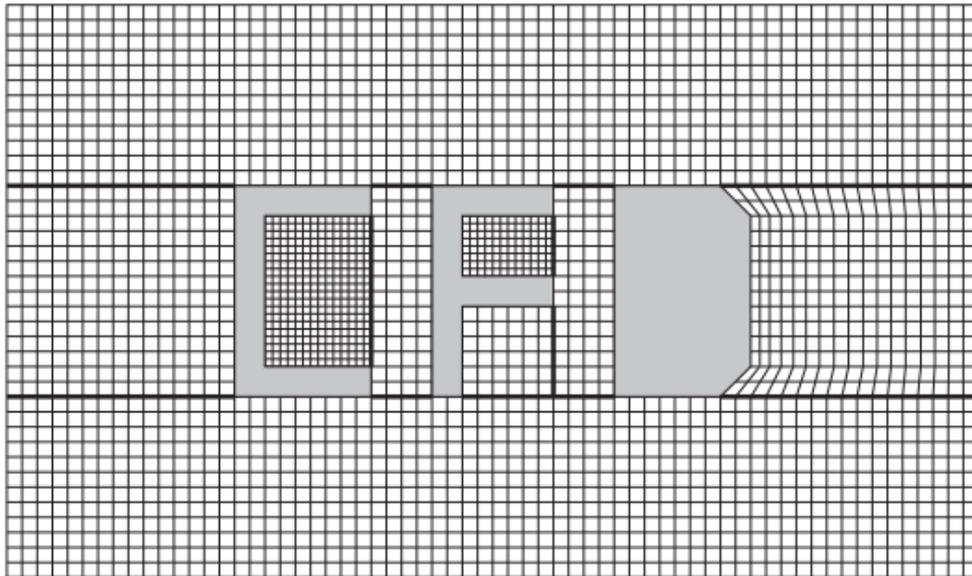
Por volta de 1980, a solução de duas dimensões (2-D) e das equações de Euler em três dimensões (3-D) se tornou factível. Com o desenvolvimento de computadores mais potentes e de técnicas de aceleração numérica como o método multigrid, foi possível avaliar escoamentos completos em configurações de aeronaves e turbo máquinas.

Na metade da década de 80, a atenção foi concentrada para simulação de escoamentos viscosos por meio das equações de Navier-Stokes. Com isso, uma ampla variedade de modelos de escoamentos turbulentos foi desenvolvida com diferentes graus de complexidade de acurácia numérica. No final da década de 80, metodologias numéricas foram evoluindo até que problemas de escoamento envolvendo velocidades supersônicas e gás real com modelos em equilíbrio e não equilíbrio termodinâmico se tornou uma realidade (BLAZEK, 2005).

Com aumento da demanda de fidelidade e complexidade da simulação de escoamentos, métodos de geração de malha se tornaram mais sofisticados. No início, construía-se malhas estruturadas simples por meio de métodos algébricos e equações diferenciais parciais. Porém, com configurações cada vez mais complexas, mesmo utilizando técnicas como multiblock (Figura 8) e Chimera (Figura 9), geometrias muito complicadas exigiam muito tempo para simulação.

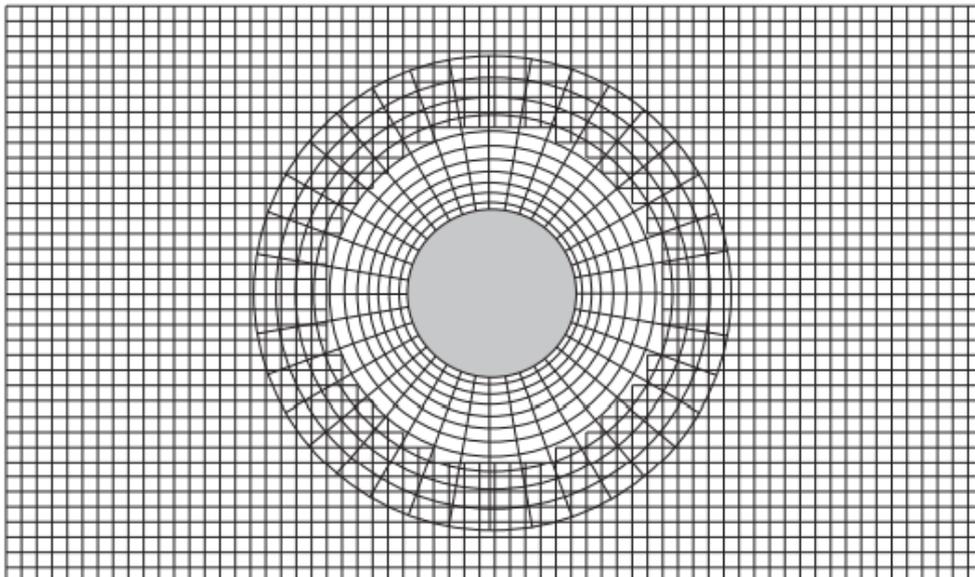
Afim de demandar menos processamento computacional, foi desenvolvido malhas não estruturadas e soluções que diminuiriam consideravelmente o tempo de simulação. A primeira malha não estruturada consistia exclusivamente de tetraedros isotrópicas, que era suficiente para escoamentos não viscosos governados pelas equações de Euler. Contudo, ela começou a ser utilizada na solução das equações de Navier-Stokes em situações de altos números de Reynolds, que tem forte dependência das camadas de cisalhamento.

Figura 8 – Ilustração da técnica multibloco



Fonte: Blazek (2005) .

Figura 9 – Ilustração da técnica Chimera



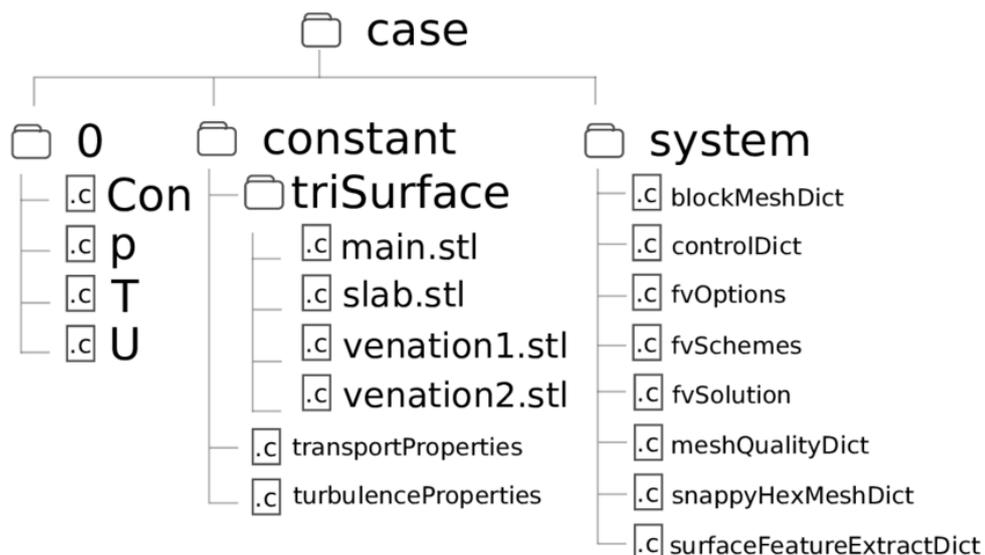
Fonte: Blazek (2005) .

3.2 Diretrizes do OpenFOAM

Existem diversos programas de CFD com ferramentas e modelos matemáticos necessários para investigar os fenômenos de interesse. Muitos deles, são pacotes comerciais pagos como o FLUENT, CFX e outros. A importância dos pacotes CFD tem crescido muito a crescente demanda de maior confiabilidade e rapidez de resultados e economia frente a testes experimentais. Portanto, é interessante que o usuário possa interagir com o pacote, a fim de, aprimorar, estender ou implementar novas formas de solução.

O OpenFOAM é um programa desenvolvido em C++ (linguagem orientada ao objeto) com ferramentas de análise numérica com pré processamento, solução do modelo físico e pós-processamento para solução da mecânica do contínuo. Devido ao fato de ser gratuito, reduz-se o custo de licenças e permite acesso direto ao código fonte, ou seja, é possível conhecer exatamente a ordem e técnica de execução dos cálculos realizados (código Aberto). Outra vantagem é o desenvolvimento colaborativo em ambientes acadêmicos e assim, acesso a ferramentas com estruturas já implementadas, reduzindo o tempo de desenvolvimento e simulação de um problema em comum. Este programa utiliza o sistema operacional de código aberto LINUX, para o presente trabalho, foi utilizado a distribuição desse sistema UBUNTU 14.04. Portanto OpenFOAM surge como uma ótima opção a resolução do estudo deste trabalho. O OpenFOAM utiliza o método dos volumes finitos (MVF) para discretização das equações governantes, discretização espacial e temporal. Um caso de simulação no OpenFOAM é composto por um conjunto de diretórios, conforme a Figura 10 .

Figura 10 – Ilustração da organização genérica do OpenFOAM



Fonte: Caio Martins (2017).

No diretório system, encontra-se os arquivos: controlDict (que contém informação sobre os parâmetros relacionados a discretização temporal, como passo tempo e o intervalo para salvar resultados), fvSchemes (onde existe os esquemas de interpolação para construir o sistema algébrico) e fvSolution (onde se especifica a tolerância do resíduo da solução do sistema algébrico e o método iterativo utilizado). Já no diretório constant, existe quatro arquivos: polyMesh (armazenamento de informações da malha), transportProperties (características constantes do fluido) e turbulenceProperties (tipo de escoamento, i.e., laminar ou turbulento). No diretório zero, contém arquivos para cada variável em análise como: pressão e velocidade. O OpenFOAM é capaz de gerar malhas estruturadas e não estruturadas em função das informações do domínio físico, o blockMeshDict é o arquivo responsável por construir o domínio e a malha.

3.3 Fundamentação teórica

Segundo Blazek (2005) a dinâmica dos fluidos aborda a investigação do movimento de um grande número de partículas individuais em interação. Para tal, assumimos que a densidade do fluido é grande o suficiente para ser aproximado como contínuo. Isso garante que, mesmo um elemento infinitesimal, o fluido contém um número suficiente de partículas e assim, pode-se ser determinado a velocidade, pressão, temperatura, densidade e outras variáveis importantes em cada ponto deste. A derivação das principais equações da fluido dinâmica é baseada no fato de que o comportamento dinâmico do fluido é determinado pelas seguintes leis de conservação:

1. Conservação de massa,
2. Conservação da quantidade de movimento e
3. Conservação de energia.

A seguir, são apresentadas as deduções das equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia para o entendimento do sistema de equações de Navier-Stokes, bem como da aplicação delas em nível discreto para volumes elementares.

3.4 Leis de conservação

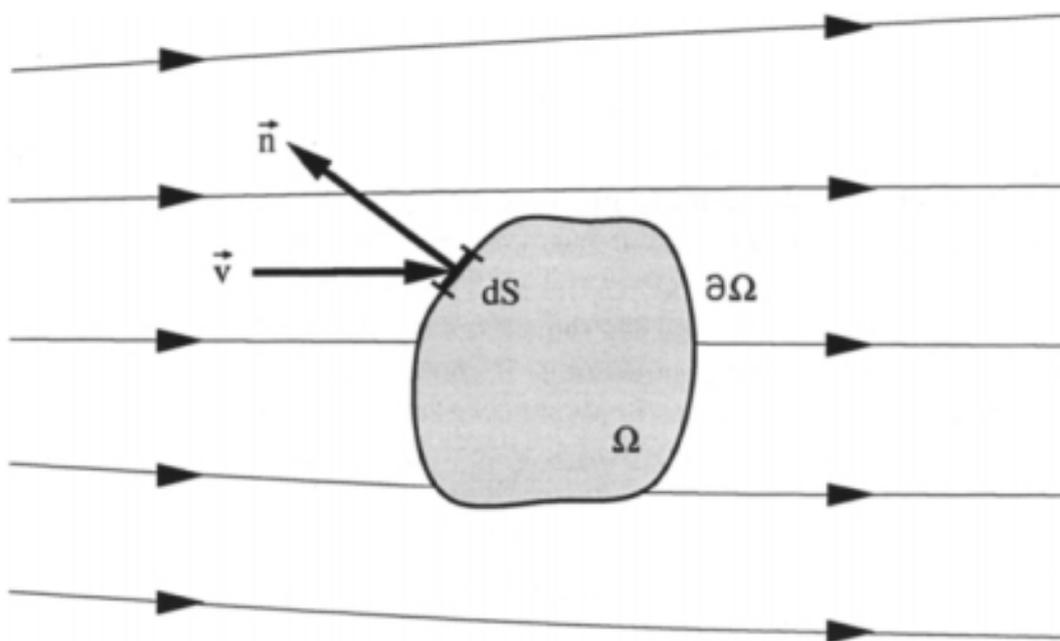
3.4.1 Equação da continuidade

Se nos restringirmos a fluidos com uma fase, a lei da conservação de massa define o fato que, massa não pode ser criada ou eliminada em um sistema fechado. A contribuição do fluxo difusivo na equação da continuidade é desprezível, pois em um fluido em repouso, qualquer variação de massa implicaria em deslocamento de partículas (BLAZEK, 2005). Desconsiderando termos fonte de superfície ou de volume, a Equação 18 representa a forma integral da equação da continuidade— lei da conservação de massa:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho d\Omega + \oint_{\partial\Omega} \rho(\vec{v} \cdot \vec{n}) dS = 0 \quad (18)$$

Onde foi considerado um modelo de um volume de controle finito fixado no espaço, assim como ilustrado na Figura 11. Em um ponto na superfície de controle, a velocidade do escoamento é \vec{v} , o vetor normal unitário é \vec{n} , e dS representa a área de um elemento da superfície. Neste caso, a variável conservada é a densidade ρ . A contribuição do fluxo convectivo através de cada elemento de superfície se dá pelo segundo termo do lado esquerdo da Equação 18.

Figura 11 – Definição do volume de controle



Fonte: Blazek (2005).

3.4.2 Equação da quantidade de movimento

A segunda lei de Newton estabelece que qualquer variação do momento linear é devido ao somatório de todas as forças agindo sobre um elemento de massa. Portanto, a variação no tempo do momento de um volume de controle equivale a Equação 19:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \vec{v} d\Omega \quad (19)$$

Conseqüentemente, as variáveis conservadas são o produto da densidade pela velocidade conforme Equação 20.

$$\rho \vec{v} = [u, \rho v, \rho w]^T \quad (20)$$

A contribuição do tensor convectivo para a conservação da quantidade de movimento pode ser representada conforme abaixo:

$$\oint_{\partial\Omega} \rho(\vec{v} \cdot \vec{n}) dS = 0 \quad (21)$$

O fluxo difusivo é nulo, já que, não existe possibilidade de momento difusivo em um fluido em repouso. As forças em que os elementos do fluido estão expostos são devido a forças de campo, Equação 22, e forças de superfície, Equação 23. A primeira age diretamente na massa do volume de controle como, força gravitacional, empuxo, Coriolis e forças centrífugas. O segundo, age na superfície do volume como distribuição de pressão, tensões normais e de cisalhamento entre o fluido e sua superfície.

$$\int_{\Omega} \rho f_e d\omega \quad (22)$$

$$Q = -pI + \tau \quad (23)$$

Portanto, unindo todas as equações descritas para contribuição da equação geral para a conservação da quantidade de movimento temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho(\vec{v} \cdot \vec{n}) dS = \int +\Omega \rho f_e d\Omega - \oint_{\partial\Omega} p \vec{n} dS + \oint_{\partial\Omega} (\tau \cdot n) dS \quad (24)$$

3.4.3 Equação da energia

Para derivação da equação da energia, utilizaremos a primeira lei da termodinâmica. Esta estabelece que qualquer variação de energia interna dentro do volume de controle equivale a diferença entre a quantidade de calor absorvido pelo sistema e o trabalho realizado por Wylen, Borgnakke e Sonntag (2009). A energia total, E , é obtida pela soma da energia interna pela sua energia cinética por unidade de massa:

$$E = e + \frac{|\vec{v}|^2}{2} = e + \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} \quad (25)$$

A energia total por unidade de volume neste caso é a variável conservada, pE . Sua variação no tempo dentro do volume de controle é expressa conforme abaixo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho E d\Omega \quad (26)$$

E a contribuição do fluxo convectivo :

$$- \oint_{\partial\Omega} \rho E (\vec{v} \cdot \vec{n}) dS \quad (27)$$

No caso da equação da energia, existe agora a contribuição do fluxo difusivo. Ele é proporcional ao gradiente da variável conservada por unidade de massa (lei de Fick). Como este é definido para um fluido em repouso, apenas a energia interna deste se torna presente que em geral é escrita na forma da lei de Fourier (Equação 28):

$$\vec{F}_d = -\kappa \nabla T \quad (28)$$

Na equação acima, κ representa o coeficiente de condutividade térmica e T a temperatura absoluta. Denotando as fontes de calor – variação no tempo da transferência de calor por unidade de massa, q . Em conjunto com o trabalho realizado pelas forças de campo, f_e (mencionado nas equações da quantidade de movimento), temos:

$$Q_v = \rho \vec{f}_e \cdot \vec{v} + \dot{q}_h \quad (29)$$

A última contribuição à conservação de energia são as forças de superfície. Elas correspondem a variação no tempo do trabalho realizado pela pressão, assim como, tensões normais e de cisalhamento (Equação 30)

$$\vec{Q}_s = -p \cdot \vec{v} + \vec{\tau} \cdot \vec{v} \quad (30)$$

Arranjando todas as contribuições mencionadas acima, obtemos a equação geral da energia conforme a Equação 31.

$$\frac{\partial}{\partial \Omega} \int_{\Omega} \rho E d\Omega + \oint_{\partial \Omega} \rho E (\vec{v} \cdot \vec{n}) dS =$$

$$\oint_{\partial \Omega} \kappa (\nabla T \cdot \vec{n}) dS + \int_{\Omega} (\rho \vec{f}_e \cdot \vec{v} + \dot{q}_h) d\Omega + \oint_{\partial \Omega} p (\vec{v} \cdot \vec{n}) dS + \oint_{\partial \Omega} (\vec{\tau} \cdot \vec{v}) \cdot \vec{n} dS \quad (31)$$

3.5 Sistema das equações de Navier-Stokes

No capítulo anterior, foi derivado separadamente as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e de energia. Agora, iremos utilizá-las para construir um sistema de equações que permita uma melhor visualização dos termos envolvidos. Considere dois vetores de fluxo, F_c e F_v , o primeiro está relacionado com o transporte convectivo e o segundo corresponde o vetor de fluxo viscoso onde se encontra as tensões viscosas e difusão de calor. O termo fonte, \vec{Q} , compreende as todas as forças de campo e fontes de calor. Com tudo isso, podemos utilizar as equações gerais de cada lei da conservação para construir a seguinte Equação 32:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \vec{W} d\Omega + \oint_{\partial \Omega} (\vec{F}_c - \vec{F}_v) dS = \int_{\Omega} \vec{Q} d\Omega \quad (32)$$

O vetor W são as variáveis conservadas em três dimensões das cinco componentes abaixo,

$$\vec{W} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{bmatrix}$$

Para o vetor de fluxo convectivo temos:

$$\vec{F}_c = \begin{bmatrix} \rho V \\ \rho u V + n_x p \\ \rho v V + n_y p \\ \rho w V + n_z p \\ \rho H V \end{bmatrix}$$

Onde V , a velocidade normal ao elemento superficial dS , definido como o produto escalar entre o vetor velocidade e o vetor normal unitário,

$$V \equiv \vec{v} \cdot \vec{n} = n_x u + n_y v + n_z w \quad (33)$$

A entalpia total H é

$$H = h + \frac{|\vec{v}|^2}{2} = E + \frac{p}{\rho} \quad (34)$$

E o vetor de fluxo viscoso:

$$\vec{F}_v = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ n_x \tau_{xx} & n_y \tau_{xy} & n_z \tau_{xz} \\ n_x \tau_{yx} & n_y \tau_{yy} & n_z \tau_{yz} \\ n_x \tau_{zx} & n_y \tau_{zy} & n_z \tau_{zz} \\ n_x \Theta_x & n_y \Theta_y & n_z \Theta_z \end{bmatrix}$$

onde

$$\Theta = \begin{bmatrix} \Theta_x = u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz} + \kappa \frac{T}{x} \\ \Theta_y = u\tau_{yx} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz} + \kappa \frac{T}{y} \\ \Theta_z = u\tau_{zx} + v\tau_{zy} + w\tau_{zz} + \kappa \frac{T}{z} \end{bmatrix}.$$

são termos que descrevem o trabalho realizado pelas tensões viscosas e condução de calor no fluido. E o termo fonte pela Equação 3.5

$$\vec{F}_c = \begin{bmatrix} 0 \\ \rho f_{e,x} \\ \rho f_{e,y} \\ \rho f_{e,z} \\ \rho \vec{f}_e \cdot \vec{v} + \dot{q}_h \end{bmatrix}$$

No caso de um fluido Newtoniano, as equações acima são chamadas de equações de Navier-Stokes. Elas descrevem a mudança de massa, quantidade de movimento e energia através da fronteira do volume de controle. Esta é composta de cinco equações com cinco variáveis conservativas p , pu , pv , pw e pE . Porém, estas contêm sete variáveis do campo de fluxo desconhecidas: p , u , v , w , E , p e T . Portanto, são necessárias mais duas equações que estabeleçam relações termodinâmicas entre as variáveis de estado. Por exemplo, pressão, energia interna ou entalpia em função da densidade ou temperatura. Também precisa-se criar relações entre o coeficiente de viscosidade μ e a condutividade térmica com as equações de estado do fluido, para que assim, todo o sistema esteja completo. Estas dependem do tipo de fluido em questão, no nosso caso, um gás perfeito.

3.6 Formulação para um gás perfeito

Na aerodinâmica pura, é razoável admitir que o fluido de trabalho é caloricamente perfeito, onde a equação de estado assume a forma:

$$p = \rho RT \quad (35)$$

em que R denota a constante universal dos gases. E a entalpia:

$$h = c_p T \quad (36)$$

É conveniente expressar a pressão em termo das viariáveis conservativas. Sendo assim, combinando a equação do h com a equação de estado. Substituindo a Equação 35 para entalpia temos:

$$R = c_p - c_v, \gamma = \frac{c_p}{c_v} \quad (37)$$

Obtendo assim para a pressão:

$$p = (\gamma - 1)\rho \left[E - \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} \right]. \quad (38)$$

O coeficiente de viscosidade dinâmica, para um gás perfeito, é fortemente dependente da temperatura do que da pressão. Para o ar resulta a fórmula de Sutherland:

$$\mu = \frac{1,45T^{3/2}}{T + 110} \cdot 10^{-6} \quad (39)$$

Em que a temperatura é dada em Kelvin (K). Em contraste com k, a condutividade é virtualmente constante no caso de líquidos, portanto a relação:

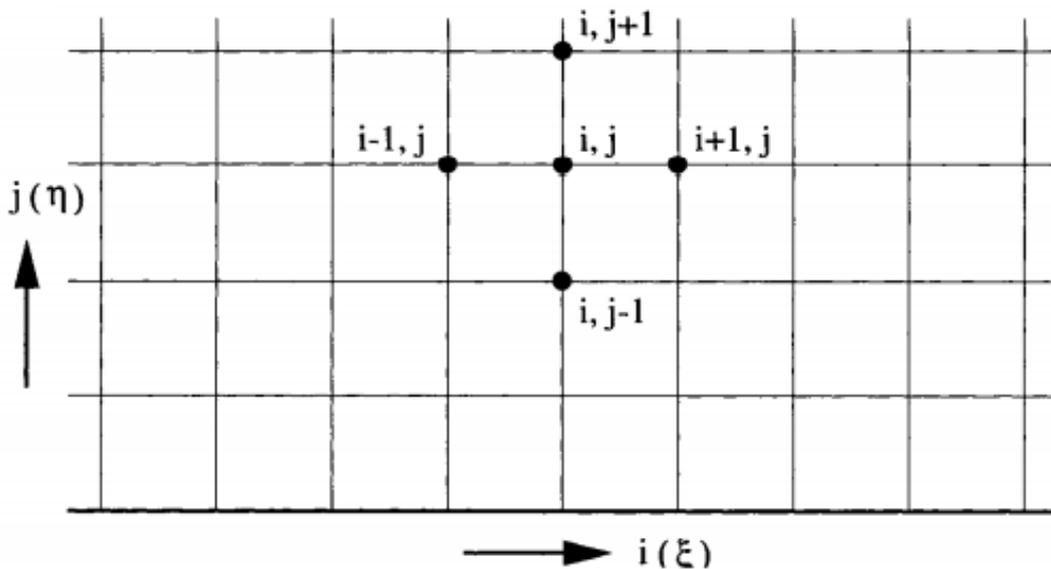
$$\kappa = c_p \frac{\mu}{Pr} \quad (40)$$

É geralmente utilizada para o ar. O número de Prandtl (Pr) é constante para todo o campo de escoamento e tem o valor de Pr = 0,72.

4 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

Antes de partir para a solução das equações de Navier-Stokes, é necessário dividir o espaço (onde haverá o escoamento) em subdomínio simples denominados de elementos, os quais compartilham apenas nós, arestas e faces. O conjunto gerado por esses elementos é a representação discreta do domínio contínuo, chamado de malha. Existem dois tipos básicos em que as malhas são classificadas: estruturada (Figura 12) e não-estruturada (Figura 13). A principal diferença entre elas é segundo a topologia da vizinhança de seus elementos. Em duas dimensões (2-D), a malha não estruturada, consiste em triângulos onde os nós internos não podem ser diretamente identificados pelos seus índices (elemento 6 adjacente ao elemento 119). Hoje em dia, estas são empregadas utilizando uma combinação de triângulos e quadriláteros (hybrid) conforme a Figura 13. Já as malhas estruturadas possuem elementos em que apenas com a coordenadas dos nós, pelo sistema Cartesiano, é possível obter todas as relações de conectividade, simplificando e acelerando o processo de solução.

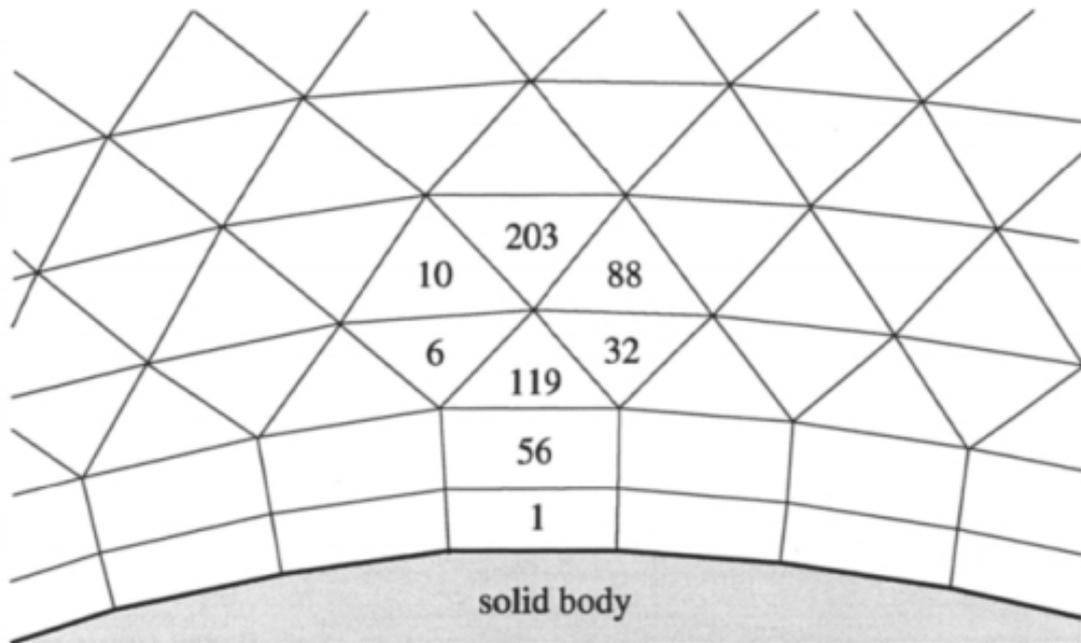
Figura 12 – Ilustração de uma malha estruturada



Fonte: Blazek (2005).

Na geração da malha, sua formação pode ser feita de tal forma que, são construídas adjacentes à fronteira do espaço físico (body-fitted). A principal vantagem dessa construção é que o escoamento é simulado com maior acurácia nos limites do espaço físico. Essa escolha leva um alto grau de complexidade da ferramenta de geração de malha. Grades cartesianas também podem ser utilizadas, mas sua acurácia é reduzida devido a dificuldade de acompanhar geometrias com maior complexidade.

Figura 13 – Ilustração de uma malha não estruturada



Fonte: Blazek (2005).

As exigências mais importantes nas ferramentas de geração de malhas são que, não pode haver vazios entre as células da malha assim como estas não podem se sobrepor. A malha e a razão de aspecto precisam ser suaves sem mudanças abruptas, e seus elementos mais regulares possível (BLAZEK, 2005).

Além disso, existem dois tipos de localização dos vetores das variáveis de interesse (velocidade, pressão e demais escalares). O primeiro, centrado na célula da malha (do inglês "cell center") e nos nós da malha (do inglês "cell vertex") que será utilizado por padrão do programa OpenFOAM para este trabalho.

4.1 O método dos volumes finitos

O método dos volumes finitos (*Finite Volume Method* – FVM) utiliza diretamente as leis de conservação – a formulação integral das equações de Navier – Stokes/Euler. Foi primeiramente implementado por McDonald (1971) para simulação de escoamento sem viscosidade e é hoje a técnica mais empregada em trabalhos relativos à mecânica dos fluidos. Este método discretiza primeiramente as equações governantes pela decomposição do domínio em um número arbitrário de poliedro como elementos do volume de controle. A integral de superfície do lado direito da Equação 32 é aproximado como a soma do fluxo que atravessa as faces individuais do volume de controle.

Um das vantagens de se utilizar o FVM, é que a discretização espacial é realizada diretamente no domínio. Portanto, não há problemas de transformação entre o domínio e o sistema de coordenadas computacional como no caso do método das diferenças finitas. Outra vantagem desse método é a sua flexibilidade – consegue implementar com facilidade malhas estruturadas e não estruturadas – o que o torna apropriado para o tratamento de escoamentos em geometrias complexas.

4.2 Condições de contorno

As condições de contorno influenciam diretamente na qualidade do desempenho do método numérico. Qualquer simulação pode ser considerada apenas uma parte do domínio físico real do sistema. O truncamento dos domínios gera fronteiras artificiais onde descrevemos valores de alguma variável física. Paredes são expostas ao escoamento representam fronteiras naturais do domínio físico, portanto, o desenvolvimento das condições de contorno exige um trabalho minucioso. Uma implementação incorreta pode gerar uma simulação do sistema real sem fidelidade. Além disso, a estabilidade e velocidade de convergência do esquema solução também são comprometidos (BLAZEK, 2005).

O programa utilizado para discretização espacial empregada na geometria deste trabalho foi o Salome-Meca. A motivação dessa escolha também foi pelo fato de ser um programa de código livre. A geometria usada tanto na validação do código, quanto para a tubeira serão do tipo cunha (no inglês *Wedge*) e precisa estar compatibilizada com as condições de contorno e assim, devem receber características topológicas. As regiões que definirão as condições de contorno compreendidas pelo OpenFoam são: entrada e saída do bocal tipo "patch"(um tipo genérico de informação topológica da geometria), duas faces do tipo *wedge* (usado para geometrias tipo cunha de um cilindro de revolução) e a parte superior da cunha representando a parede do bocal como tipo "wall".

4.2.1 Variáveis primitivas

No diretório "0", são definidas as condições de contorno para pressão, velocidade e temperatura. Assim, para pressão, a entrada (inlet) do bocal foi usada a função "TotalPressure", empregada quando apenas as pressões são conhecidas como no caso de bocais convergente-divergente. A pressão escolhida para os três casos utilizados para validação e simulação de uma tubeira será de 10.000 Pa para entrada. A saída terá uma função do tipo "waveTransmissive", responsável por evitar reflexão de ondas indevidas e define a diferença de temperatura ao longo da tubeira.

Em relação à velocidade, a entrada e saída serão ambas do tipo "zeroGradient". Permitindo que a distribuição de velocidades seja extrapolada para as condições de contorno em função da diferença de pressão ao longo da tubeira. Para a parede, será usada a condição do tipo "Slip", visto que a camada limite não é o objetivo da simulação.

Foi definido uma temperatura fixa de 298K (temperatura ambiente) como condição de contorno ("fixedValue") para entrada, "zeroGradient", segundo a mesma premissa para velocidade, ou seja, escoamento isotérmico.

4.2.2 Propriedades termofísicas

No diretório Constant são definidos as propriedades termofísicas do fluido. Afim de simular um escoamento invíscido, a viscosidade foi colocada como zero. O escoamento do gás obedece a formulação de um gás perfeito ("perfectGas") assim, foi definido os seguintes valores para propriedade do ar, na temperatura de 298K, peso molar de 28,96 g/mol e calor específico a pressão constante de 1004,5 J/kg.K.

4.2.3 Discretização temporal

O tempo de simulação foi de 0,5 segundos com passos de tempo de 1e-10 segundos, computando um resultado a cada 1e-04 segundos e número de Courant máximo de 0,5 para manter estabilidade.

4.2.4 Algoritmo de solução

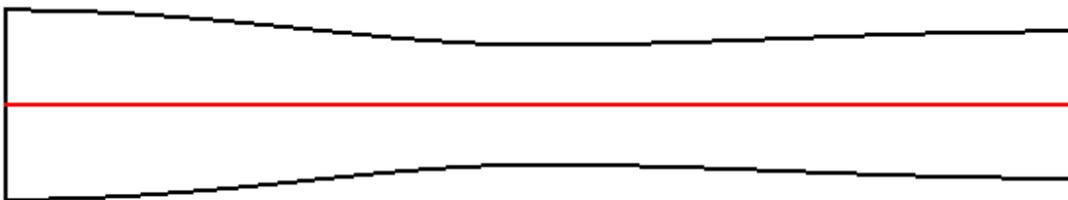
O escoamento interno de uma região convergente-divergente de uma tubeira permite o escoamento do fluido acelerar à velocidades supersônicas. Dessa maneira, é preciso encontrar um esquema de interpolação capaz de lidar com regimes subsônicos ($MACH = 0,05$) ao supersônicos ($MACH > 1$). O rhoCentralFoam é um algoritmo do tipo density-based capaz de lidar com escoamentos compressíveis para diversos regimes de Mach onde a discretização do termo convectivo ocorre mediante esquemas "Central-Upwind" de Kurganov e Tadmor. Os parâmetros de interpolação (fvScheme) e método de solução iterativo usado (fvSolution) são apresentados em anexo.

4.3 Validação

No site da NASA é apresentado um caso geral de bocal convergente-divergente em seu site para validação e comparação com a solução analítica. As condições de contorno apresentadas são: estado estacionário, sem viscosidade e isotérmico ao longo da geometria e gás ideal como fluido de trabalho. Serão simulados três situações de pressão estática para a saída do bocal, 8900 Pa, 7500 Pa e 1600 Pa contemplando os regimes de velocidade do subsônico ao supersônico.

A geometria construída conforme a Figura 14 possui uma área na entrada de $2,5 \text{ in}^2$ ($x = 0 \text{ in}$), área de $1,0 \text{ in}^2$ para região da garganta e $1,5 \text{ in}^2$ na saída do bocal. A variação da parede da tubeira é construída segundo a equação contida em anexo.

Figura 14 – Geometria convergente-divergente de uma tubeira para validação

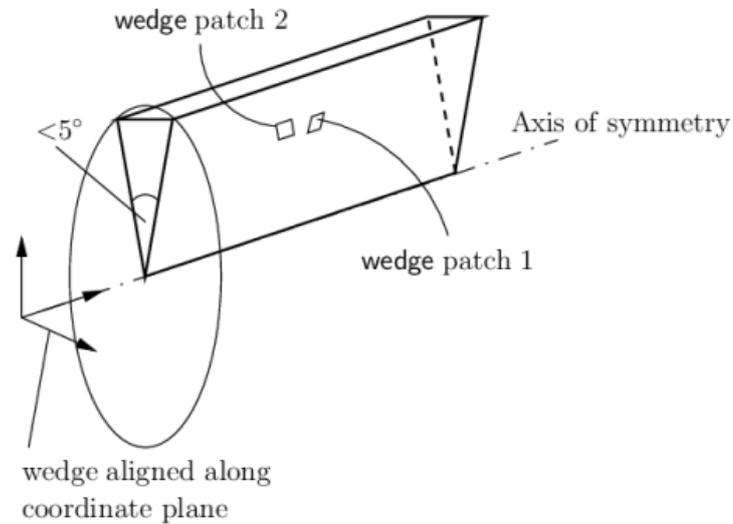


Fonte: NASA.

Uma seção de revolução do cilindro com a distância angular entre as duas faces de $1,25^\circ$, conforme condições de contorno mencionado anteriormente, será usado para simulação no OpenFOAM conforme Figura 15. Esse formato foi escolhido ao invés de um cilindro de revolução completo para reduzir o tempo de simulação e facilitar o processamento da malha.

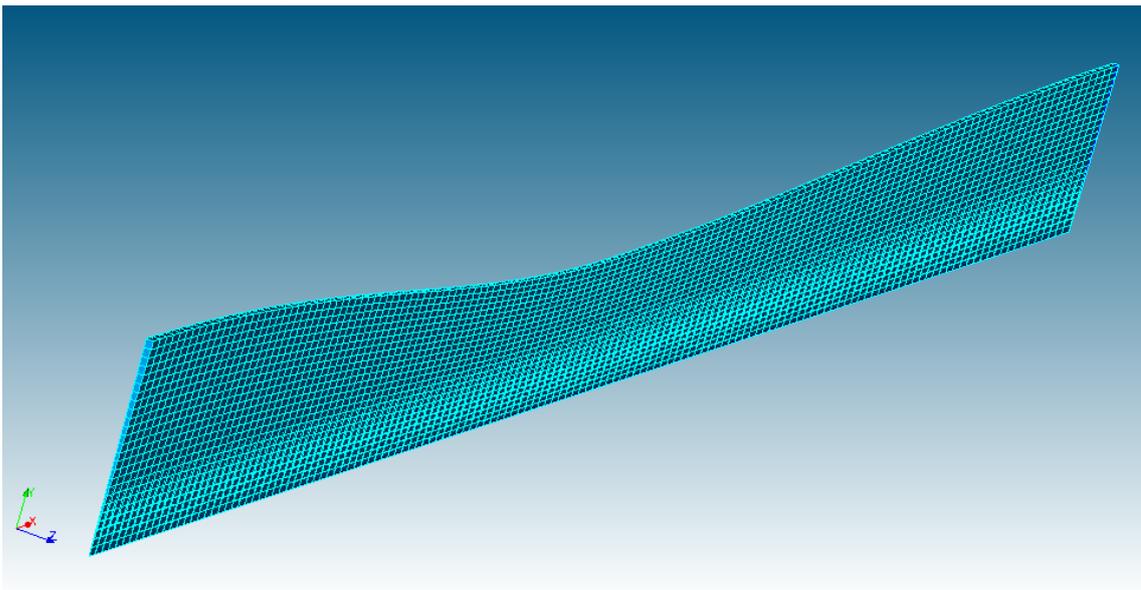
A discretização do modelo geométrico pode ser observada conforme Figura 16 para visualização da estrutura em blocos.

Figura 15 – Geometria tipo cunha para simulação



Fonte: OpenFOAM Foundation.

Figura 16 – Representação da resolução da malha desenvolvida no programa Salome - Meca.

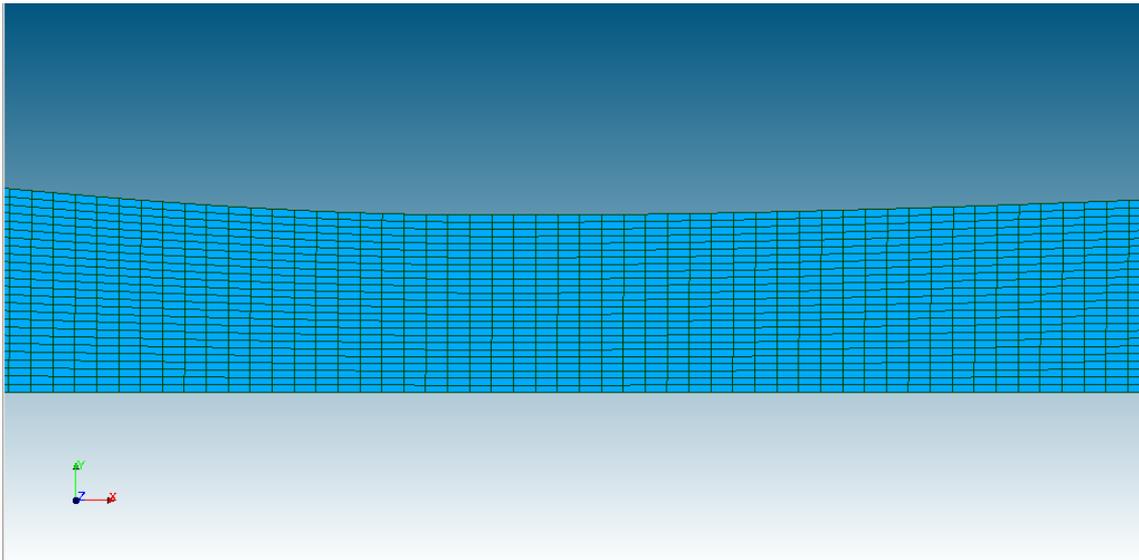


Fonte: Salome-Meca.

O checkMesh é um recurso do OpenFOAM que resume as principais características usadas para verificar a qualidade da malha tais como: razão de aspecto e ortogonalidade. A razão de aspecto é a razão entre a maior e a menor aresta do elemento onde idealmente deveria ser 1 para garantir melhores resultados; o desvio do ângulo entre o vetor que conecta o centro dos volumes adjacentes e o vetor normal à superfície entre eles representa a ortogonalidade que deve estar entre 0,1 e 1,00. Para visualização e clareza, é possível observar através da imagem da malha ampliada na Figura 17.

A discretização do modelo geométrico foi construída no programa Salome-Meca, conforme mencionado anteriormente e possui 4002 células no total. O arquivo da malha foi então

Figura 17 – Representação ampliada da malha na região da garganta.



Fonte: Salome-Meca.

exportado em um formato UNV e convertido em uma pasta no diretório constant chamado de polyMesh com as características topológicas da malha através do comando `ideasUnvToFoam`. Como o OpenFOAM apenas consegue realizar simulações tridimensionais, a distância de uma única célula nas dimensões de entrada e saída, faz com que o OpenFOAM desconsidere uma das dimensões para simulação do escoamento.

4.3.1 Resultados validação

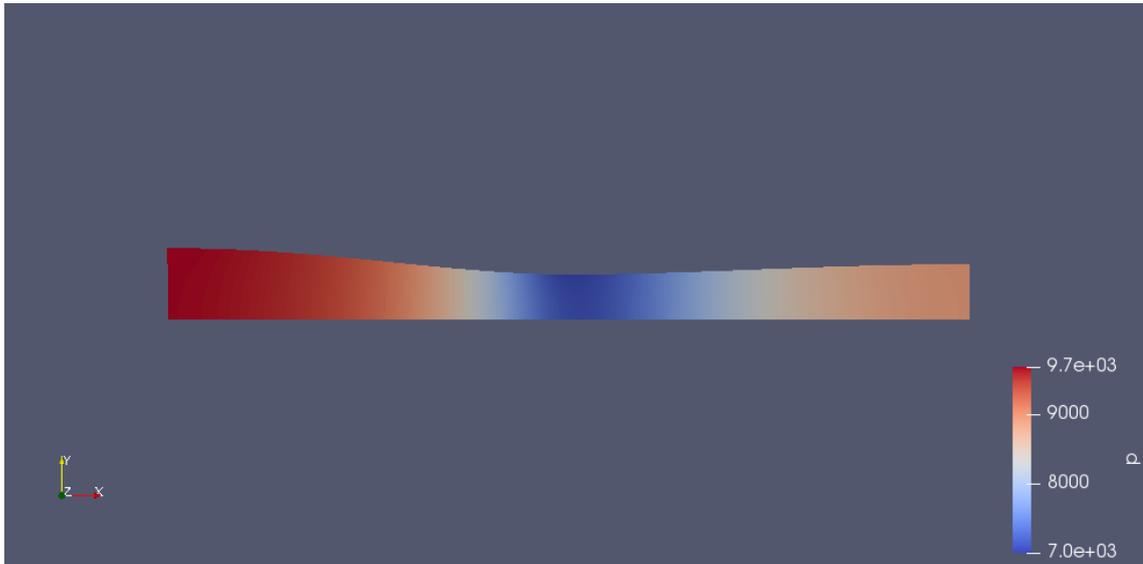
O pós-processamento dos resultados encontrados através da simulação do caso usado neste trabalho para validação do código desenvolvido foi realizado através do programa ParaView, um aplicativo de código aberto para visualização e análise de simulações usado pelo OpenFOAM.

Inicialmente, foi empregado diferentes pressões na saída do bocal para verificar o comportamento do campo de escoamento para analisar discrepâncias com método analítico. Serão simulados as pressões de 8900 Pa, 7500 Pa e 1600 Pa, conforme parâmetros estabelecidos pela NASA para comparação com resultados analíticos.

Os resultados para a pressão de 8900 Pa da distribuição de pressão e número de Mach podem ser vistos na Figura 18 e Figura 19. Conforme é possível verificar, a diferença de pressão não é suficiente para que a condição crítica na garganta seja alcançada e dessa maneira, velocidades supersônicas não ocorreram neste caso.

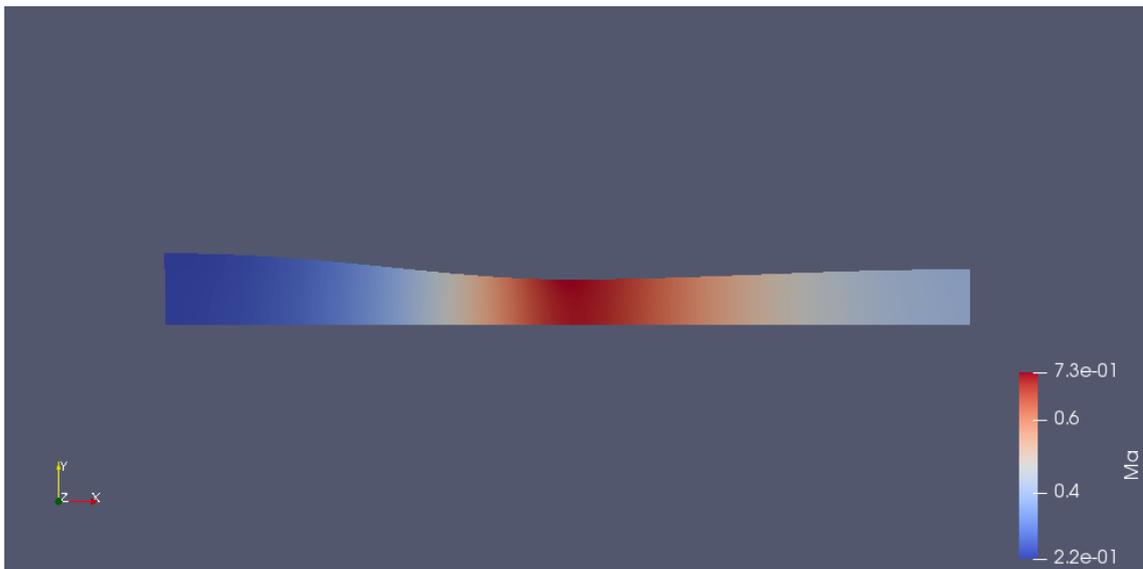
Em seguida, através do programa Scidavis, gráficos foram gerados para verificar as discrepâncias entre os resultados obtidos pela simulação com método analítico.

Figura 18 – Perfil de pressão na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 8900 Pa.



Fonte: Autoria Própria.

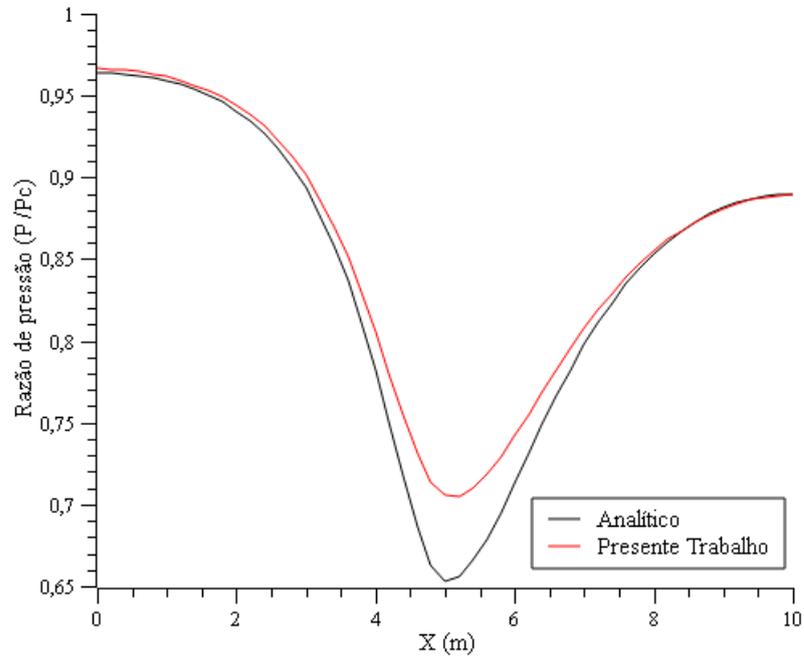
Figura 19 – Perfil de velocidade na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 8900 Pa.



Fonte: Autoria Própria.

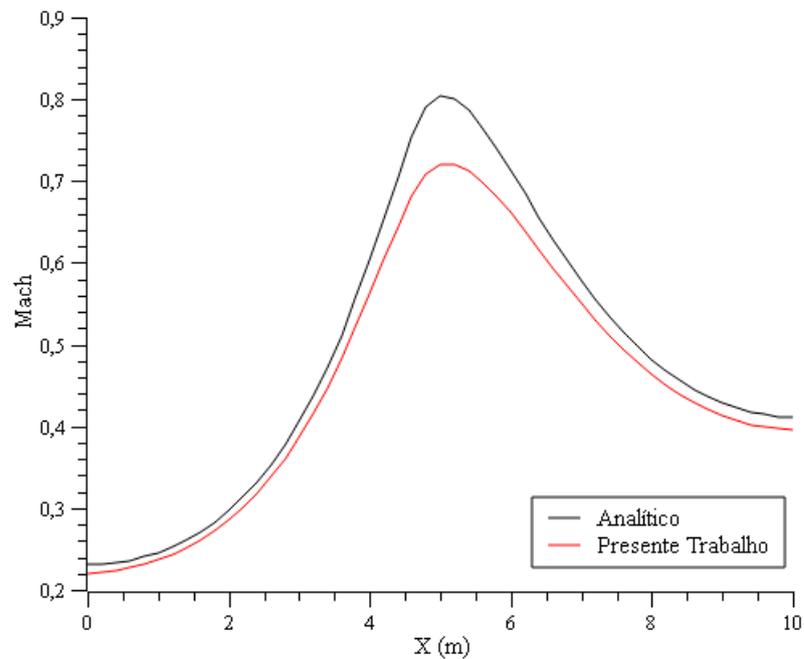
Ao se comparar os resultados mostrados na Figura 20 e na Figura 21, onde a razão de pressão representa a pressão desenvolvida ao longo da geometria dividida pela pressão na câmara de combustão, o escoamento a baixa velocidade é descrito de modo satisfatório e as regiões onde existem as maiores diferenças da solução analítica ocorrem na garganta do bocal, possivelmente devido às mudanças de velocidades que ocorrem nesse local.

Figura 20 – Distribuição de pressão na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 8900 Pa.



Fonte: Autoria Própria.

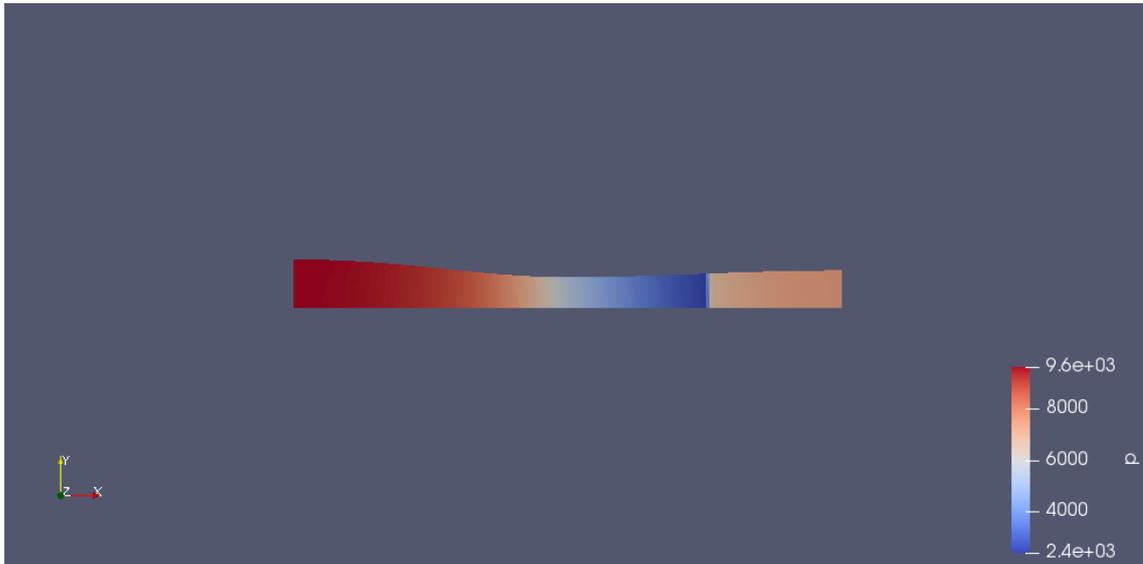
Figura 21 – Distribuição de velocidade na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 8900 Pa.



Fonte: Autoria Própria.

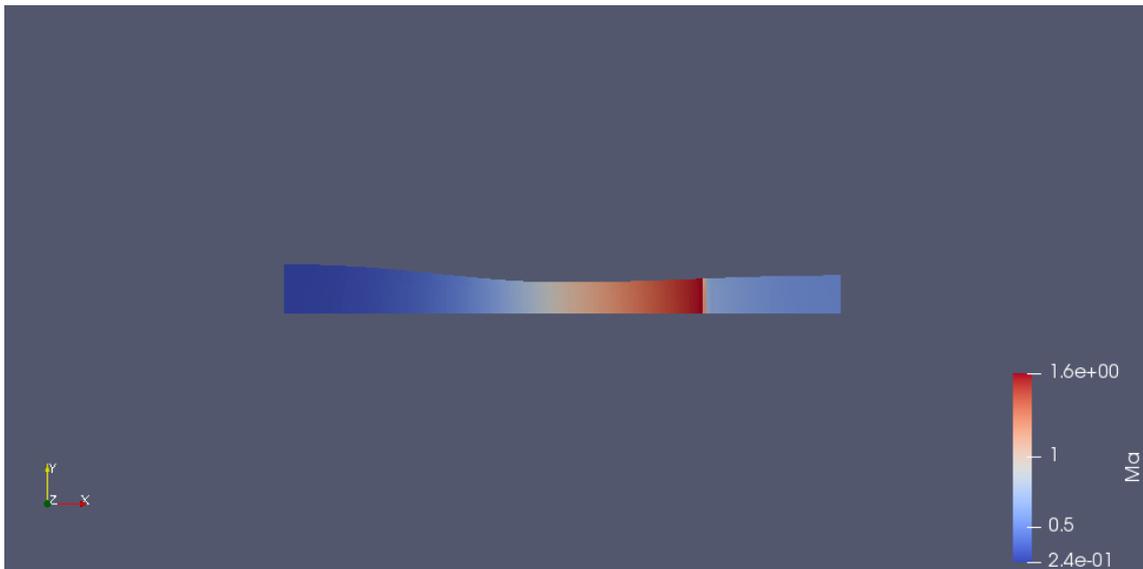
Um escoamento supersônico pode ser encontrado para pressão de saída de 7500Pa, onde a diferença de pressão é suficiente para que uma onda de choque possa ocorrer na simulação conforme Figura 22 e Figura 23.

Figura 22 – Perfil de pressão na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 7500 Pa.



Fonte: Autoria Própria.

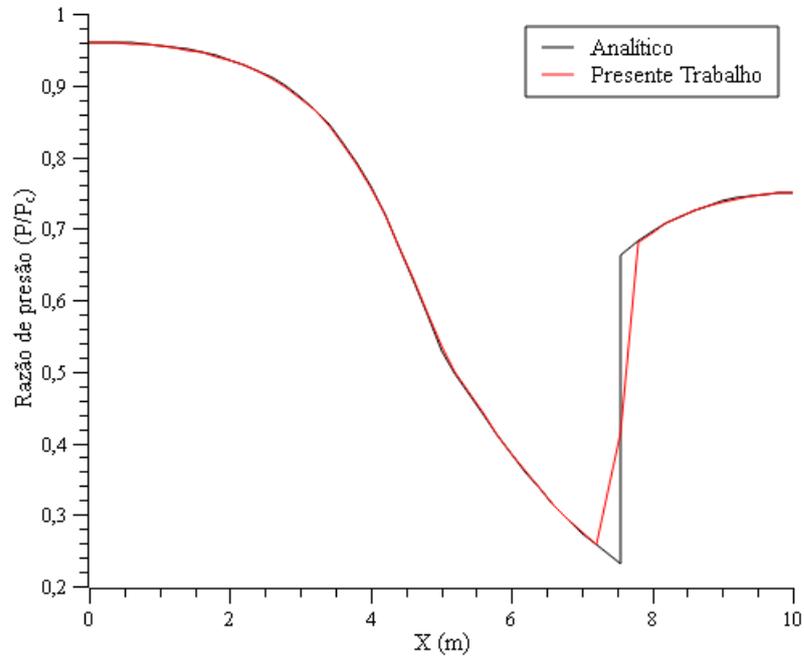
Figura 23 – Perfil de velocidade na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 7500 Pa.



Fonte: Autoria Própria.

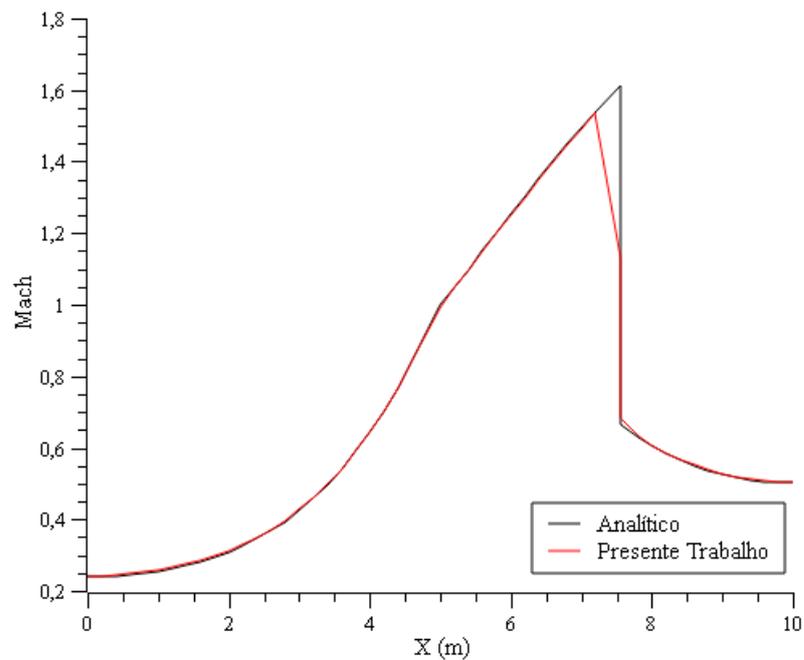
As diferenças dos resultados analíticos e do presente trabalho, conforme Figura 24 e Figura 25, podem ser explicadas pela descontinuidade causada pela onda de choque devido as mudanças abruptas que acontecem nessa região.

Figura 24 – Distribuição de pressão na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 7500 Pa.



Fonte: Autoria Própria.

Figura 25 – Distribuição de velocidade na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 7500 Pa.



Fonte: Autoria Própria.

Na simulação com pressão de saída a 1600 Pa (Figura 26 e Figura 27), uma expansão ótima é encontrada na simulação do perfil de pressão e número de Mach. Onde velocidades

supersônicas são alcançadas na região da garganta que continua a ser acelerada a medida que o escoamento avança ao longo do bocal com aumento na área, sem formação de onda de choque.

Figura 26 – Perfil de pressão na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 1600Pa.

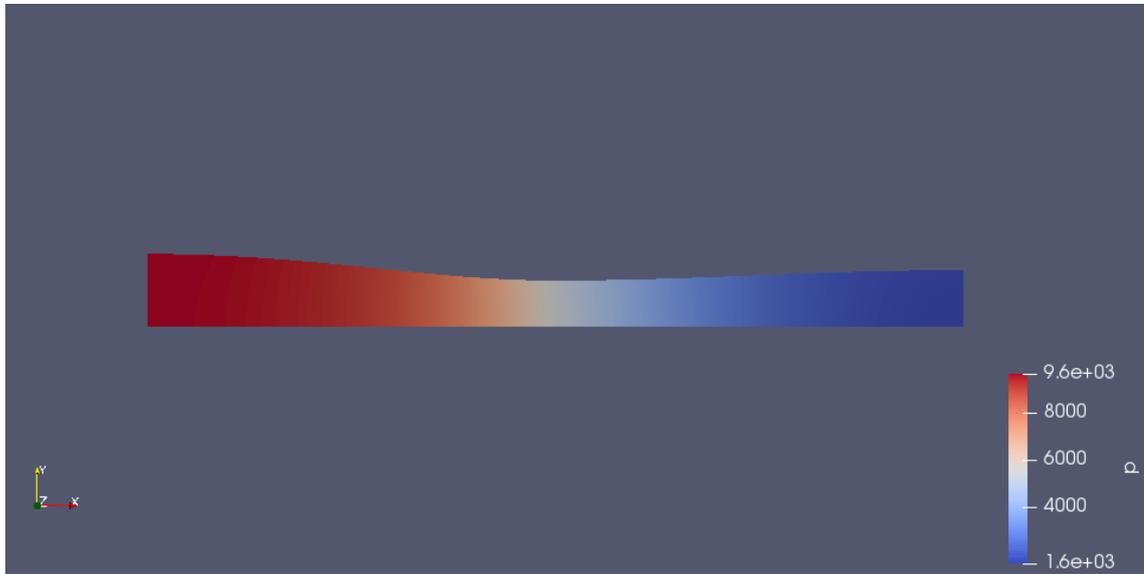
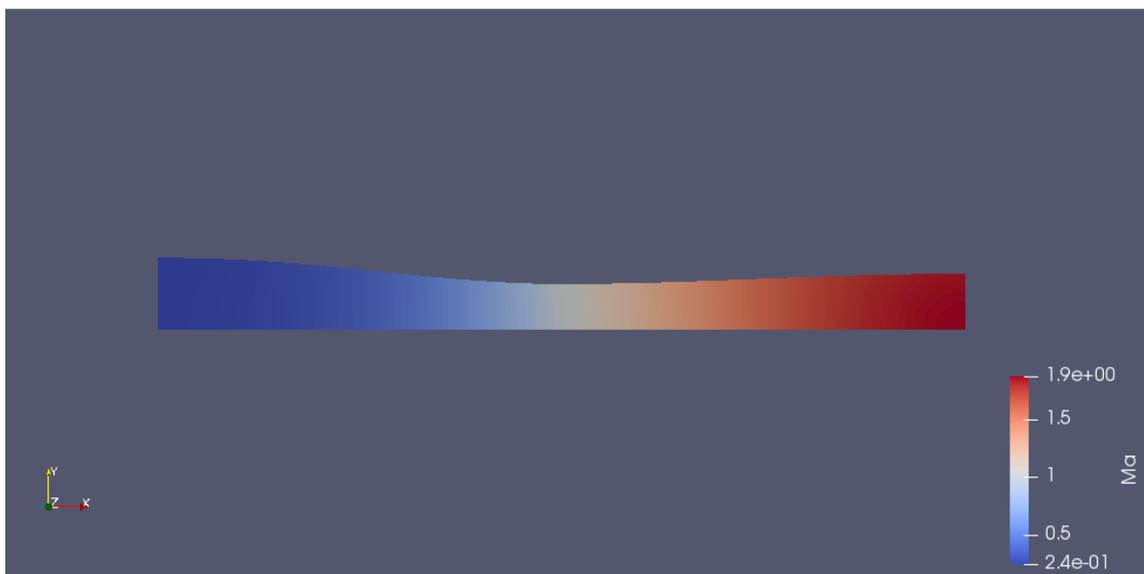


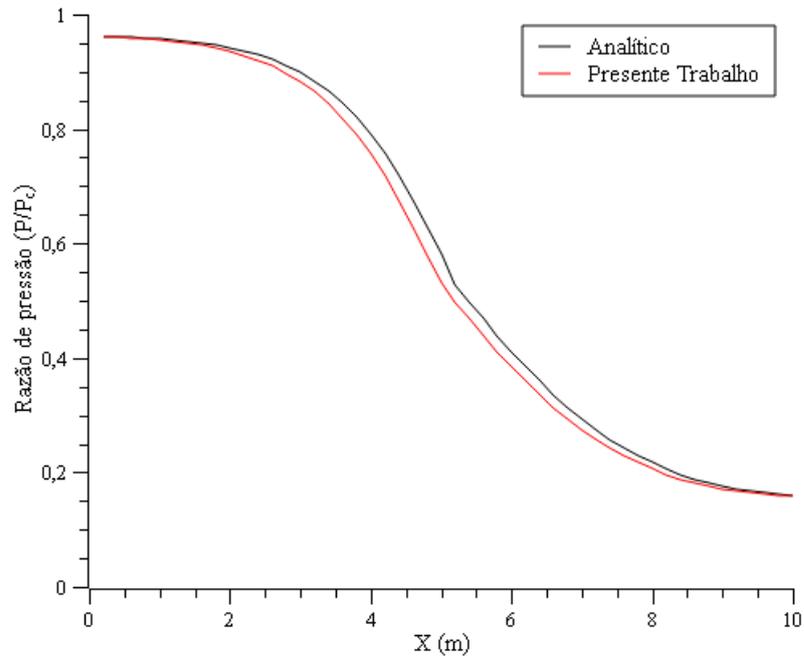
Figura 27 – Perfil de velocidade na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 1600Pa.



Exatamente o comportamento que descreve o efeito encontrado em uma geometria de um bocal convergente-divergente de Laval, em que, para aumentar a velocidade de um fluido em regime subsônico para supersônico, é preciso que o escoamento passe através de uma região de redução de área mínima para que então, o fluido possa acelerar com o aumento de área alcançando velocidades supersônicas.

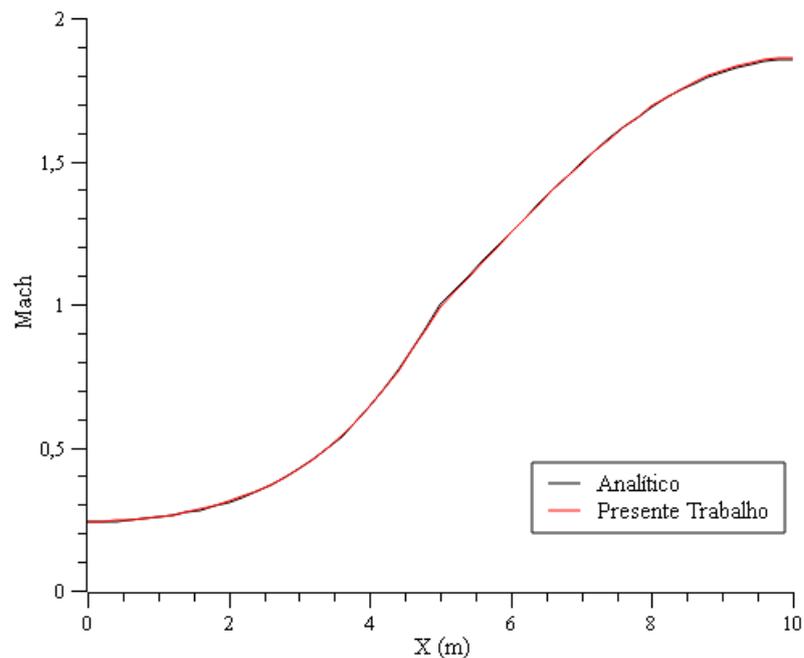
Fenômeno ilustrado na Figura 28 e Figura 29, onde ocorre a diminuição gradual de pressão e aumento da velocidade.

Figura 28 – Distribuição da pressão na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 1600Pa.



Fonte: Autoria Própria.

Figura 29 – Distribuição da velocidade na geometria de validação para o caso de pressão de saída a 1600Pa.



Fonte: Autoria Própria.

Portanto, devido a proximidade entre os resultados analíticos e obtidos através da simulação se aproximarem com diferenças satisfatórias, embora o código utilizado possua divergências em alguns pontos para os casos com ondas de choque, o algoritmo de solução e as condições de contorno empregados sugerem que o código é capaz de simular os regimes de velocidade das faixas propostas para validação.

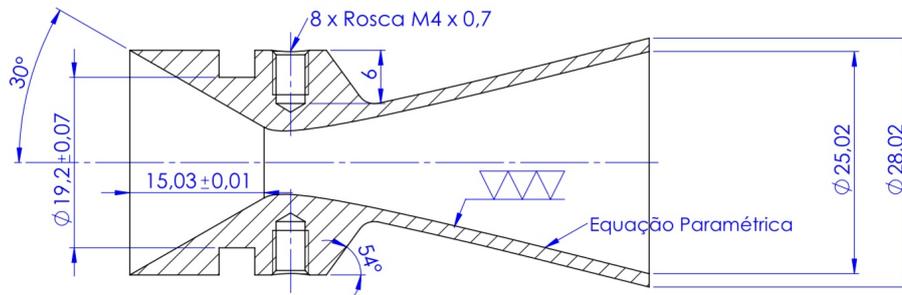
4.4 Simulação de um bocal convergente-divergente de pequeno porte

A tubeira, objetivo de estudo deste trabalho, do tipo De Laval, compõe um projeto desenvolvido por Cort (2023) - UTFPR (Pato Branco) de um motor foguete conforme Figura 30. A região divergente foi construída a partir das equações paramétricas (Equação 41 e Equação 42) onde $t_1 = 2,34614182$ e $t_2 = 107,2515286$:

$$X_t = 0,84 \cdot \ln(t_1) \quad (41)$$

$$Y_t = \left(\frac{0,84}{2} \right) \cdot \left(T + \left(\frac{1}{t_2} \right) \right) \quad (42)$$

Figura 30 – Motor foguete desenvolvido por Cort (2023) usado como referência para simulação.



Fonte: Cort (2023).

4.4.1 Procedimentos para simulação numérica do motor foguete experimental

Com o intuito de realizar uma simulação que mais se aproxima das condições reais da tubeira do motor foguete deste trabalho, cálculos e considerações preliminares foram determinados para encontrar as variáveis de entrada para simulação.

Foram realizados 3 testes experimentais do motor foguete com o objetivo de obter o empuxo produzido em função da quantidade de massa utilizada do propelente conforme Tabela 1 abaixo:

Tabela 1 – Resultados obtidos dos testes experimentais do motor foguete utilizando o propelente KNSU

Testes	Empuxo (N)	Massa propelente (g)
Motor1	62,89	73,36
Motor2	64,01	73,12
Motor3	59,87	73,27

Fonte: Adaptado de Milena Pereira Dalle Cort (2023).

Inicialmente, é preciso determinar as pressões no interior do motor foguete. Uma pressão na câmara de combustão é determinada de forma iterativa até que seja possível encontrar a média dos resultados do empuxo produzido da Tabela 1 ($F = 62,26\text{N}$) e assim, encontrar as propriedades termofísicas do escoamento interno.

O PROPEP 3 é um programa utilizado com o interesse de determinar a composição química em equilíbrio para a combustão de propelentes usados em motores foguete. Este foi empregado para obtenção das propriedades termofísica e da equação teórica do produto da queima. Para este trabalho, uma geometria tubular é empregada na configuração interna do grão (comburente).

Onde, os reagentes da equação acima são a sacarose ($C_{12}H_{22}O_{11}$) e o nitrato de potássio (KNO_3). No produto da queima, foi encontrado o dióxido de carbono (CO_2), o monóxido de carbono (CO), a água (H_2O), o hidrogênio (H_2), o nitrogênio (N_2), o carbonato de potássio (K_2CO_3) e o hidrogênio de potássio (KOH).

A partir da pressão absoluta na câmara de combustão, e da Equação 44 (NASA (1976) pag. 39) é possível calcular a pressão de saída esperada em função da geometria do motor foguete quando $A_e/A_t \geq 2$:

$$\ln \left(\frac{P_c}{P_e} \right) = k + 1,4 \ln \left(\frac{A_e}{A_t} \right) \quad (44)$$

- A_e : área da saída do bocal da tubeira
- A_t : área da garganta
- P_c : pressão na câmara de combustão
- P_e : pressão no plano de saída.
- k : razão de calor específico.

Dessa forma, uma pressão absoluta de 10 atm na câmara de combustão, e portanto $P_e = 0,0925$ atm, razão entre a área de saída e da garganta de 12,56 (ε), a força de empuxo esperada é de 66,30 N (apenas 6% de afastamento da média do resultado experimental) conforme equação abaixo:

$$F = A^* P_0 \sqrt{\frac{2K^2}{K-1} \left(\frac{2}{K+1} \right)^{\frac{K+1}{K-1}} \left[1 - \left(\frac{P_e}{P_0} \right)^{\frac{K-1}{K}} \right]} + \varepsilon \left[\frac{P_e - P_a}{P_c} \right] \quad (45)$$

E por fim, para montar o caso para simulação do motor foguete, conhecido a equação estequiométrica da combustão do propelente utilizado, o calor específico a pressão constante pode ser determinado, ao se considerar apenas os produtos que se encontram na fase gasosa da saída do bocal, dado as premissas deste trabalho. Portanto serão desprezados os produtos como: K (Potássio), K_2CO_3 (Carbonato de potássio) e NH_3 (Amônia), uma vez indicados pelo programa PROPEP 3 como produtos líquidos (*) ou sólidos (&) na equação.

A massa molecular (MW) e os valores de Cp de cada produto foram obtidas fazendo uso das tabelas termoquímicas de JANAF (JANAK Thermochemical Tables) e NIST (Chemistry WebBook) para encontrar a fração molar e a massa de cada produto conforme tabela:

Tabela 2 – Características dos produtos da combustão do propelente utilizado no motor foguete desenvolvido por Cort (2023) - UTFPR Pato Branco

Produtos	MW(g/mol)	mols	Fração molar	Massa (g)
<i>KOH</i>	56,11	0,0620	0,0352	3,4816
<i>CO</i>	28,01	0,3845	0,2179	10,7698
<i>CO₂</i>	44,01	0,3046	0,1726	13,4054
<i>H₂</i>	2,02	0,2239	0,1269	0,4523
<i>H₂O</i>	18,02	0,5573	0,3159	10,0439
<i>N₂</i>	28,02	0,2322	0,1316	6,5062

Fonte: Autoria própria.

Através do número total de mols, 1,7647 e da massa total, 44,6594 g a fração molar de cada produto na fase gasosa da combustão pode ser encontrado. E por fim, o calor específico (Cp) a pressão constante pode ser obtido após interpolação, em função da temperatura da chama adiabática 1635K, de acordo com a Tabela 6 e equação abaixo (NAKKA'S, 2007):

$$C_{pgases} = \frac{m_1}{m_p} C_{p1} + \frac{m_2}{m_p} C_{p2} + \frac{m_3}{m_p} C_{p3} + \dots + \frac{m_i}{m_p} C_{pi} \quad (46)$$

Tabela 3 – Calor específico dos produtos da combustão do propelente utilizado no motor foguete desenvolvido por Cort (2023) - UTFPR Pato Branco

Propriedades	<i>KOH</i>	<i>CO</i>	<i>CO₂</i>	<i>H₂</i>	<i>H₂O</i>	<i>N₂</i>
Cp (J/mol.K)	57,61	35,56	59,04	32,52	48,36	35,22
MW (g/mol)	56,11	28,01	44,01	2,02	18,02	28,02
Cp (J/g.K)	1027	1270	1341	16099	2684	1257
Massa (g)	3,48	10,77	13,41	0,45	10,04	6,51
mi/mp	0,0780	0,2412	0,3002	0,0101	0,2249	0,1457
Cp (J/g.K)	80,03	306,16	402,66	163,06	603,58	183,09

Fonte: Autoria própria.

Onde m_i representa a massa de cada componente químico e m_p a massa total de todos os produtos considerados, obtendo assim, $C_p = 1738,60 \text{ J/g.K}$.

4.4.2 Resultados da simulação do projeto experimental

O mesmo procedimento e código utilizado na validação será aplicado na análise do dispositivo em questão. Dessa forma, foi considerado uma geometria do tipo cunha ao invés de um cilindro de revolução completa com apenas 2,5 graus e linha de simetria na parte inferior. Condições de entrada subsônicas e as de saída supersônicas. Para discretização, uma malha estruturada foi empregada com 2987 volumes.

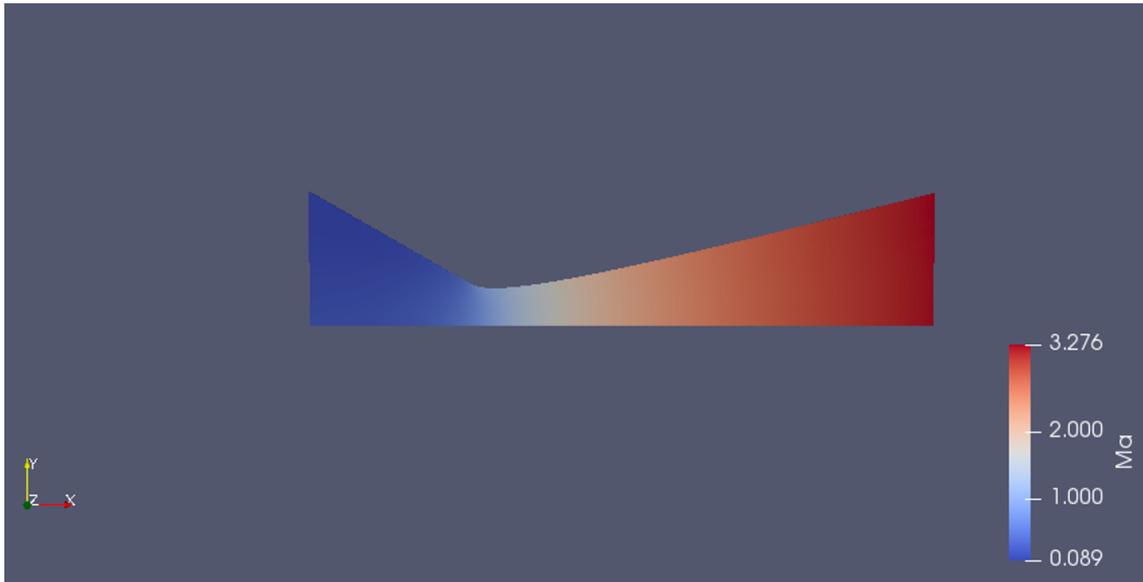
Utilizou-se o método de paralelismo do OpenFOAM responsável por dividir a análise em diferentes núcleos de processamento afim de reduzir o tempo de simulação. Esse recurso exige um arquivo, chamado "DecomposeParDict", no diretório "System", onde são especificados o nível de particionamento por processador e, ao final da simulação, através do comando "reconstructPar", os resultados em paralelo são reconstruídos para visualização da distribuição das variáveis de interesse através do programa Paraview.

A transição na região da garganta foi bem sucedida permitindo o escoamento atingir velocidade supersônica com um número de Mach de 3,276 na saída da tubeira como podemos verificar através da Figura 32 e do gráfico Figura 33. Além disso, é possível verificar que na zona da garganta o número de Mach fica em torno de um, indicando um desempenho aceitável da simulação e da geometria desenvolvida.

Ao partir de uma pressão absoluta na câmara de combustão $P_c = 10$ atm, o desenvolvimento da relação de pressão relativa ao longo da tubeira se mostra satisfatória e a geometria desenvolvida capaz de produzir uma expansão ótima conforme Figura 34 e Figura 35.

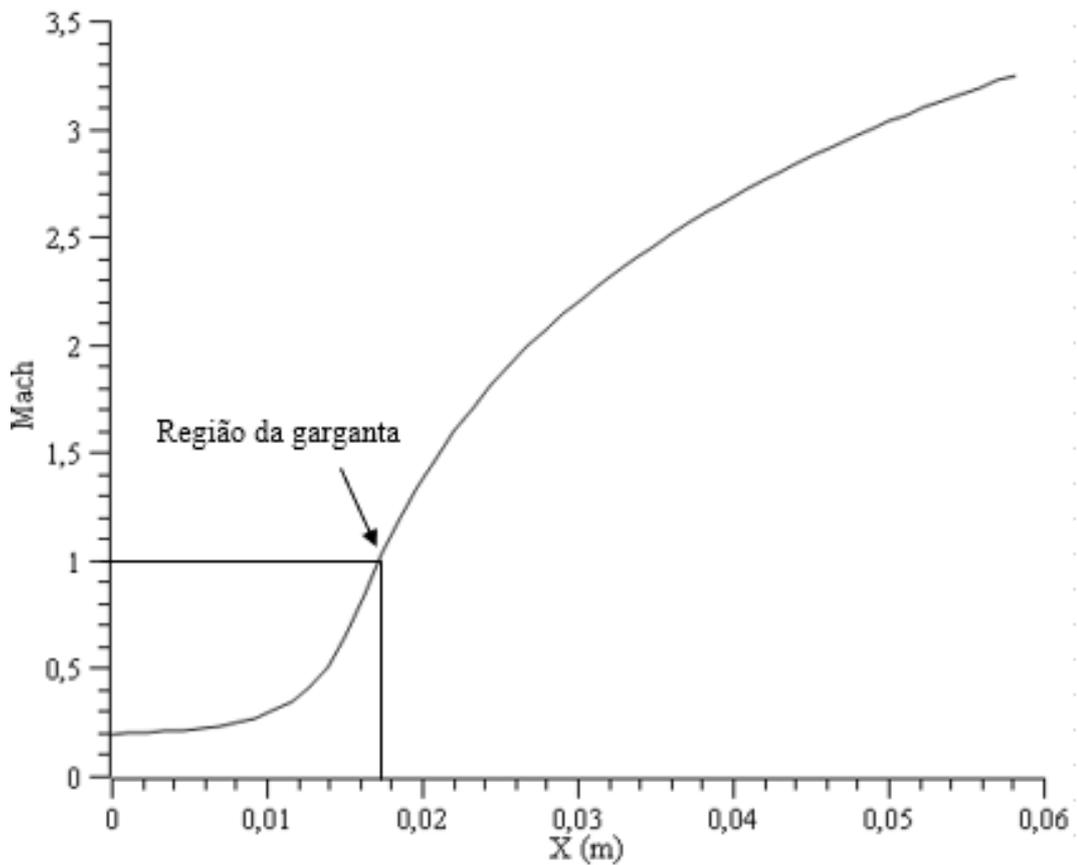
O perfil de velocidade da simulação do motor foguete pode ser observado conforme Figura 37. A Figura 38 exibe o perfil de temperaturas estáticas, mostrando que esta vai de 1636,77 K e cai até 904,65 K na saída do bocal o que demonstra um perfil de acordo com o esperado em escoamentos isentrópicos.

Figura 32 – Perfil número de Mach do motor foguete do projeto experimental.



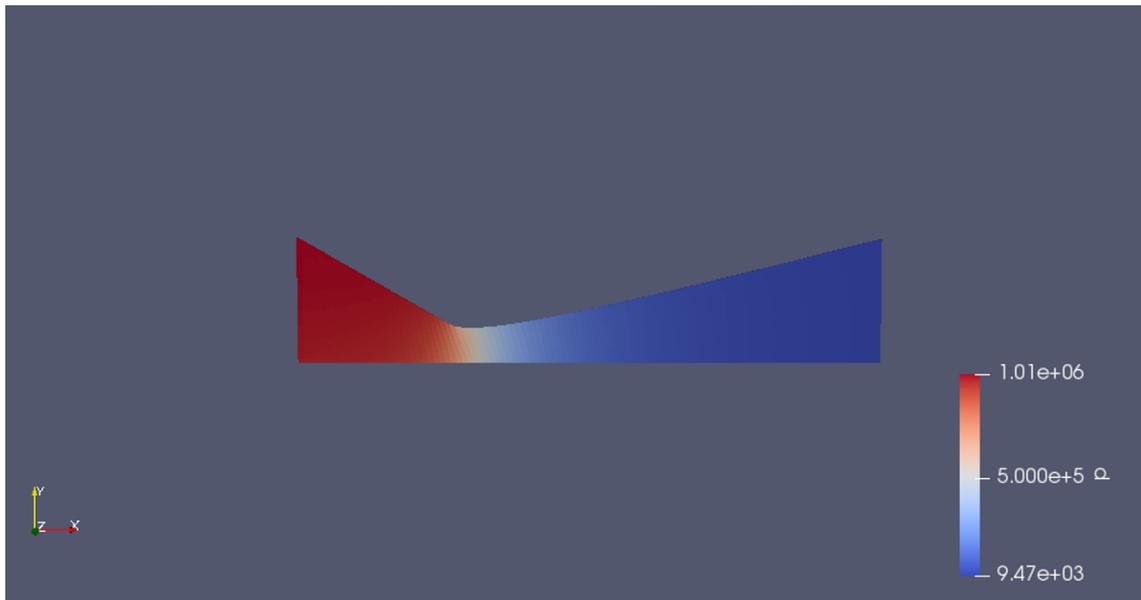
Fonte: Autoria Própria.

Figura 33 – Distribuição do número de Mach do motor foguete do projeto experimental.



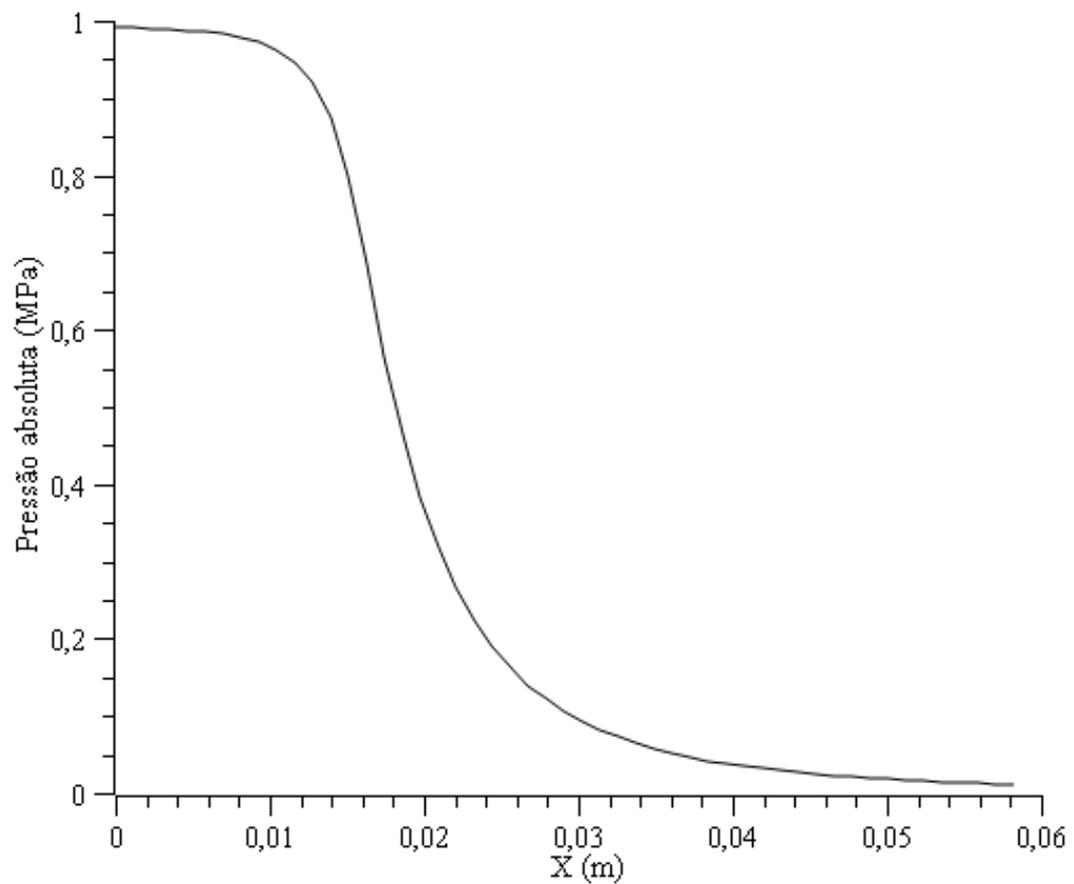
Fonte: Autoria Própria.

Figura 34 – Perfil de pressão do motor foguete do projeto experimental.



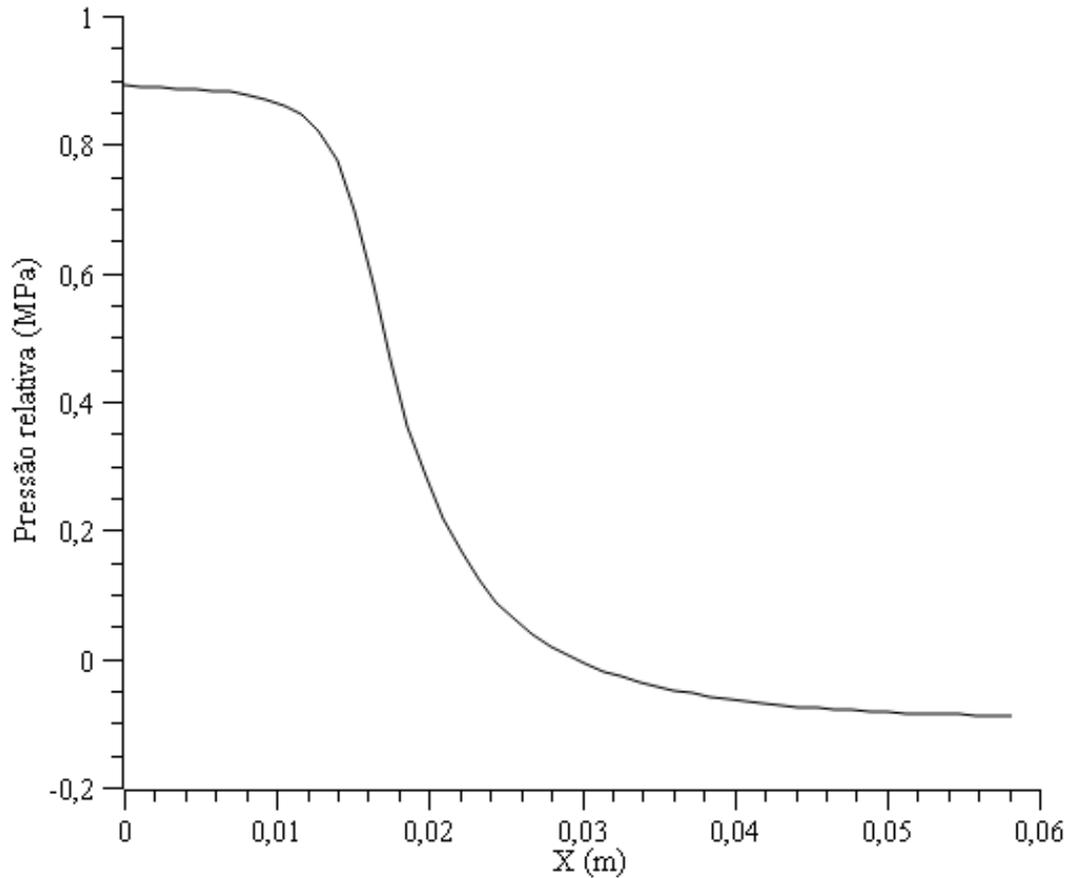
Fonte: Autoria Própria.

Figura 35 – Distribuição da pressão absoluta do motor foguete do projeto experimental.



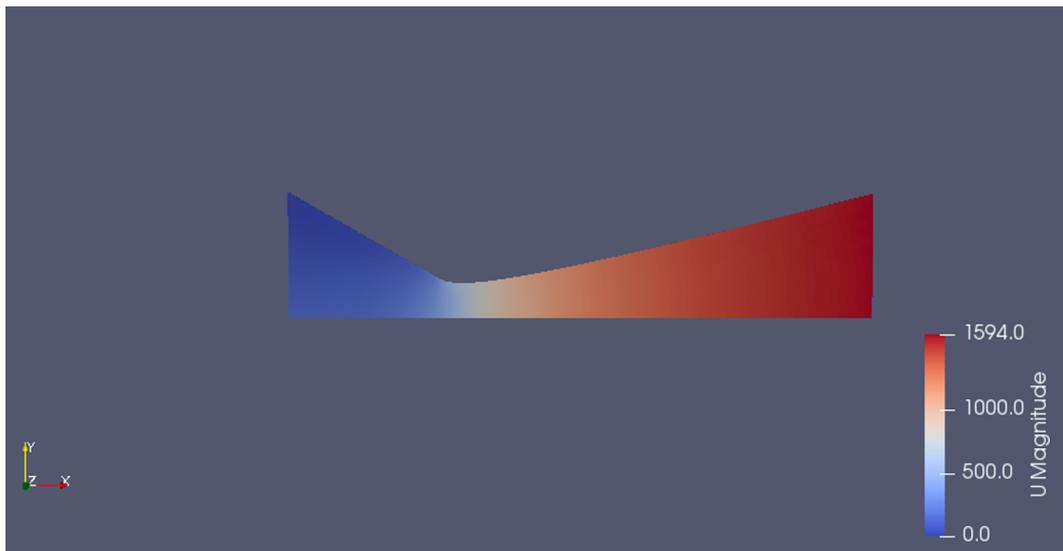
Fonte: Autoria Própria.

Figura 36 – Distribuição da pressão relativa do motor foguete do projeto experimental.



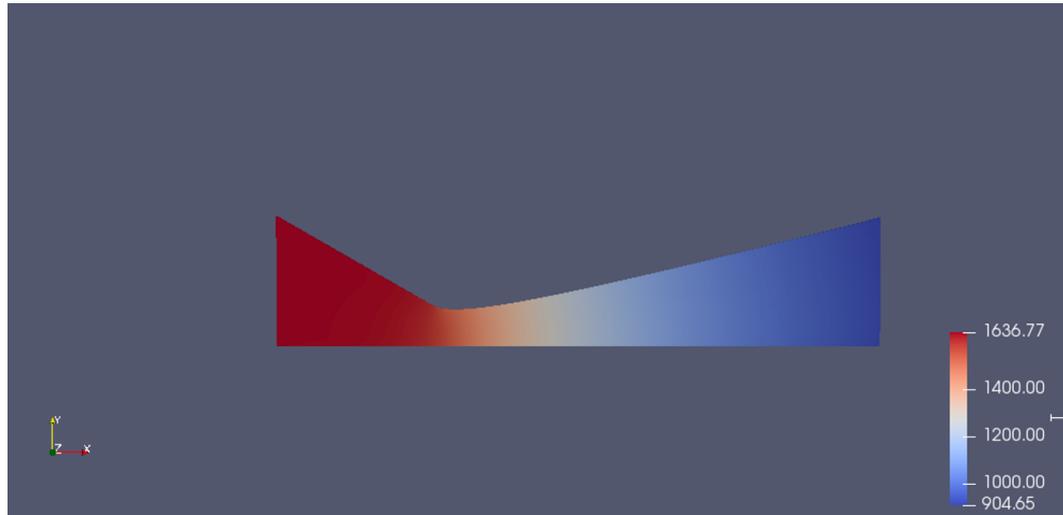
Fonte: Autoria Própria.

Figura 37 – Perfil de velocidade do motor foguete do projeto experimental.



Fonte: Autoria Própria.

Figura 38 – Perfil de temperatura do motor foguete do projeto experimental.



Fonte: Autoria Própria.

A pressão absoluta na saída do bocal (Figura 34) através da simulação foi de 0,0947 atm, uma diferença de 2,37 % em relação àquela encontrada pela Equação 44 (0,0925 atm). O que sugere uma fórmula suficiente para ser empregada com o objetivo de determinar, inicialmente, a pressão de saída necessária para produzir um dado empuxo.

De acordo com os valores encontrados em função da geometria do motor foguete e resultados da simulação numérica,

- $A^* = 40,039 \text{ mm}^2$
- $K : 1,14$
- $P_c : 10 \text{ atm}$
- $P_e : 0,0947 \text{ atm}$
- $A_e : 502,725 \text{ mm}^2$
- $k : 1,14$

o empuxo produzido devido a área de saída do bocal (A_e), área da garganta (A^*), razão de calor específico (k), pressões na câmara de combustão e saída do bocal, pode ser determinado através da Equação 45, neste caso, resultando em 67,58N (8,54% de afastamento da média encontrada do resultados do projeto experimental e apenas 1,93 % do resultado esperado).

A velocidade de saída do motor foguete esperada em função das premissas e valores obtidos acima definidos para simulação é cerca de 1622 m/s, de acordo com a Equação 50, enquanto a simulação resultou em 1594 m/s, levando a uma diferença de 1,76%, onde R representa a constante universal dos gases ($R = 8314 \text{ N}\cdot\text{m}/\text{kmol}\cdot\text{K}$).

$$v_e = \sqrt{2T_0 \left(\frac{R}{M} \right) \left(1 - \left(\frac{P_e}{P_a} \right)^{\frac{k-1}{k}} \right)} \quad (47)$$

Além disso, como podemos verificar conforme os gráficos abaixo e a Tabela 4, a razão de pressão encontrada no trabalho de Cort (2023) na região da garganta foi de 0,57, mesmo ao considerar a pressão de saída atmosférica. Enquanto a razão de pressão encontrada para Mach = 1 da simulação numérica da mesma geometria de estudo foi de 0,55 e portanto, reproduzir o mesmo empuxo com uma diferença de apenas 3%.

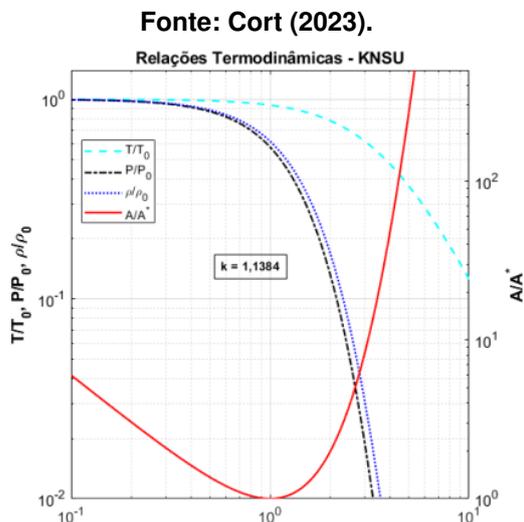


Figura 39 – Relação das razões de pressão, temperatura e área em função do número de Mach

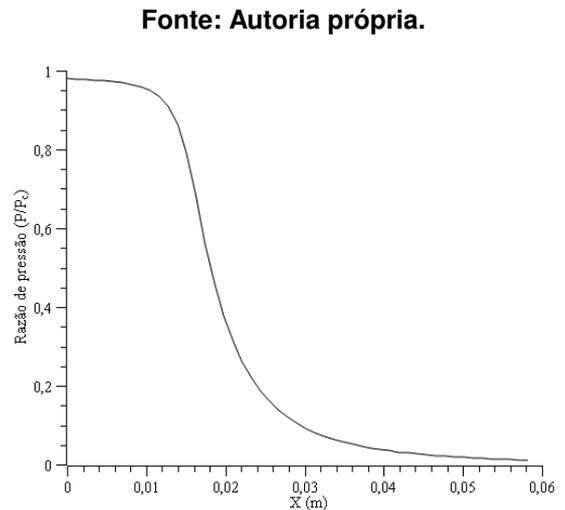


Figura 40 – Relação das razões de pressão ao longo do comprimento do motor foguete

Tabela 4 – Razão de pressão na região da câmara de combustão e na garganta da tubeira

Mach	Analítico (Cort (2023))	Simulação	Diferença
0,1	1	0,98	2%
1	0,57	0,55	3%

Fonte: Autoria própria.

4.4.3 Otimização do empuxo e sugestões

Através dos mesmos procedimentos empregados para validação e simulação do motor foguete de estudo deste trabalho, a partir das propriedades termofísicas e resultados experimentais dos propelentes desenvolvidos por Adeniyi Inkechukwu Nkere e Sholiyi (2021), será apresentado neste capítulo duas simulações afim de, verificar o impacto da utilização de aditivos nas características dos padrões de escoamento na região convergente-divergente.

O empuxo é responsável por caracterizar a capacidade de sustentação de um motor foguete. Conforme mencionado no capítulo 2, este é composto por uma parcela diretamente proporcional a área da garganta e à pressão na câmara de combustão (Equação 45) e o segundo termo, equivale ao empuxo de pressão, representado pela diferença de pressão entre a saída do bocal e a pressão atmosférica.

Segundo Sutton and Biblarz (2008) o empuxo também está diretamente associado ao tipo de propelente utilizado e, de acordo com Miller (1971), as suas características como taxa de queima, densidade e área de queima. Além disso, a maioria dos combustíveis a base de açúcar, para vazão mássica menores, obedecem a equação de Saint Robert (Américo (2015)):

$$r = aP^n \quad (48)$$

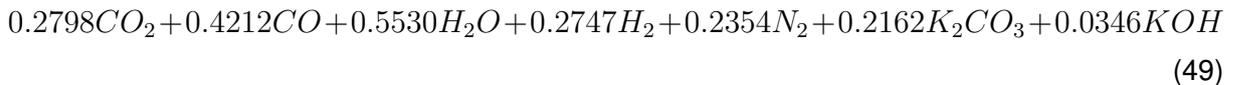
- r representa a taxa de queima,
- P a pressão de estagnação na câmara de combustão,
- a o coeficiente de pressão experimental e
- n o expoente da taxa de queima.

Entre os combustíveis a base de açúcar mais comumente encontrados para motores foguete em pequena escala como: sacarose (KNSU), sorbitol (KNSB) e dextrose (KNDX), aqueles com a adição de catalisadores na mistura do propelente, segundo experimentos realizados por Rodic e Petric (2004), melhoram a decomposição do combustível e oxidante, acelerando a vaporização na fase gasosa da zona de combustão. Alguns catalisadores também são responsáveis por aumentar a taxa de queima ao melhorar o coeficiente ou o expoente da pressão fazendo com que o propelente se torne mais sensível a mudanças de pressão.

Dessa forma, uma das maneiras de melhorar a taxa de queima e assim, aumentar o empuxo sem alterar a geometria do projeto, ocorre através da utilização de propelentes com catalisadores na mistura do propelente que, no caso de Adeniyi Inkechukwu Nkere e Sholiyi (2021), uma combinação de sacarose (24%), sorbitol (10%), nitrato de potássio (65%) e carbono (1%) como aditivo (chamado de MODKNERK pelo autor), se mostrou uma mistura suficiente para superar o empuxo produzido pelo uso de combustíveis a base de açúcar isoladamente.

De acordo com os resultados experimentais de Adeniyi Inkechukwu Nkere e Sholiyi (2021), a pressão máxima obtida pelo propelente MODKNERK foi 45% superior ao KNSU para a mesma massa e condições de experimentação. Portanto, considerando o mesmo aumento em relação a pressão máxima obtida da simulação do projeto experimental, ou seja, de 14,5 atm para a câmara de combustão no motor foguete deste trabalho e através do programa PROPEP, é possível encontrar as características termofísicas deste propelente para simulação.

Através do PROPEP, foram obtidos os valores da razão de calores específicos, $k = 1,1394$, peso molecular de 36,266 g/mol e produtos da combustão conforme equação estequiométrica:



A massa molecular (MW) e os valores de C_p de cada produto também foram obtidas fazendo uso das tabelas termoquímicas de JANAF (JANAK Thermochemical Tables) e NIST (Chemistry WebBook) para encontrar a fração molar e a massa de cada produto conforme tabela:

Tabela 5 – Características dos produtos da combustão do propelente MODKNERK no motor foguete desenvolvido por Cort (2023) - UTFPR Pato Branco

Produtos	MW(g/mol)	mols	Fração molar	Massa (g)
<i>KOH</i>	56,11	0,0346	0,0193	1,9458
<i>CO</i>	28,01	0,4212	0,2342	11,8003
<i>CO₂</i>	44,01	0,2798	0,1555	12,3140
<i>H₂</i>	2,02	0,2747	0,1527	0,5548
<i>H₂O</i>	18,02	0,5530	0,3074	9,9665
<i>N₂</i>	28,02	0,2354	0,1309	6,5959

Fonte: Autoria própria.

Através do número total de mols, 1,7990 e da massa total, 43,1775 g a fração molar de cada produto na fase gasosa da combustão pode ser encontrado. E assim, o calor específico (C_p) a pressão constante pode ser encontrado por meio de interpolação, em função da temperatura da chama adiabática 1608K, de acordo com a Tabela 6 e Equação 46.

Tabela 6 – Calor específico dos produtos da combustão do propelente MODKNERK no motor foguete desenvolvido por Cort (2023) - UTFPR Pato Branco

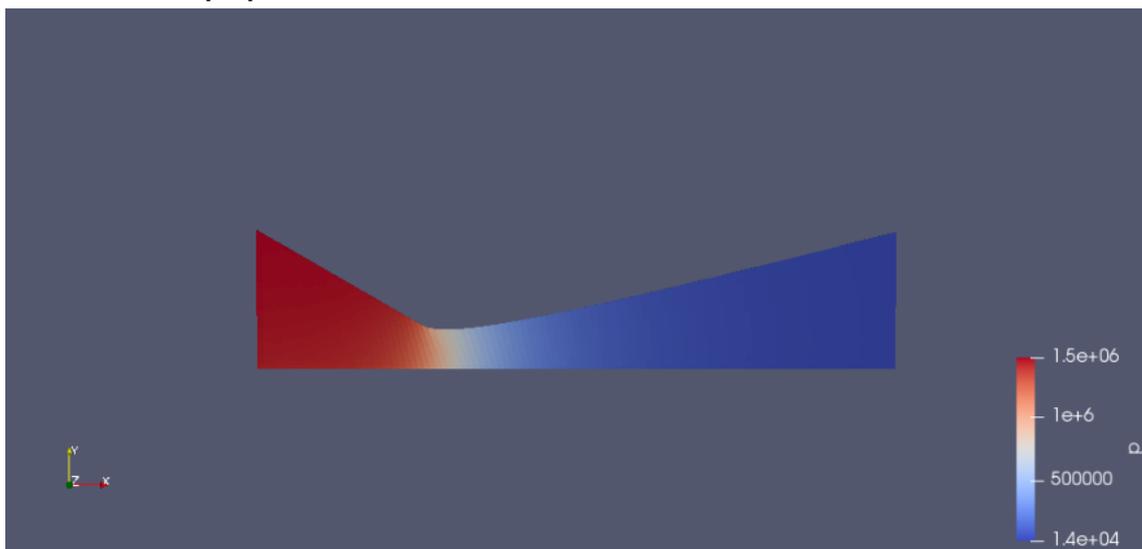
Propriedades	<i>KOH</i>	<i>CO</i>	<i>CO₂</i>	<i>H₂</i>	<i>H₂O</i>	<i>N₂</i>
C_p (J/mol.K)	57,52	35,50	58,92	32,68	48,12	35,15
MW (g/mol)	56,11	28,01	44,01	2,02	18,02	28,02
C_p (J/g.K)	1025	1267	1339	16177	2670	1254
Massa (g)	1,95	11,80	12,31	0,55	9,97	6,60
mi/mp	0,0451	0,2733	0,2852	0,0129	0,2308	0,1528
C_p (J/g.K)	46,2030	346,3635	381,8178	207,9016	616,4060	191,6240

Fonte: Autoria própria.

Onde m_i representa a massa de cada componente químico e m_p a massa total de todos os produtos considerados, obtendo assim, $C_p = 1790,32 \text{ J/g.K}$.

A distribuição de pressão ao longo do motor foguete, considerando as características termofísicas do MODKNERK, pode ser observada conforme Figura 41, onde variação da pressão foi de 14,21 atm a 0,62 atm na câmara de combustão e na saída da tubeira respectivamente. Houve um aumento no empuxo de 42% em relação ao empuxo obtido pela simulação com as características termofísicas do KNSU, resultando em 96,26 N.

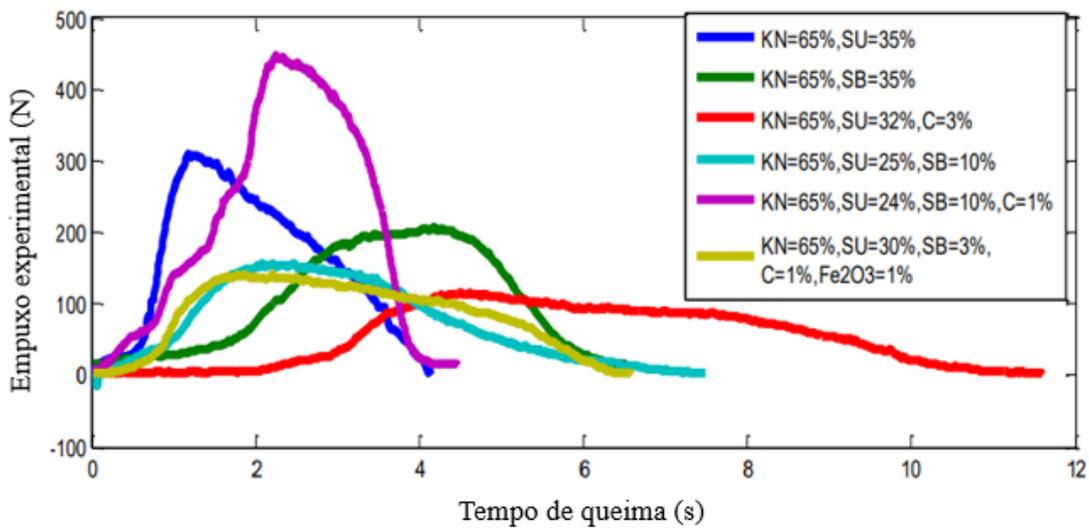
Figura 41 – Perfil de pressão do motor foguete desenvolvido por Cort (2023) com as características do propelente MODKNERK.



Fonte: Autoria Própria.

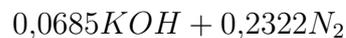
Outro aditivo usado por Adeniyi Inkechukwu Nkere e Sholiyi (2021) como catalisador da combustão para propelentes a base de açúcar é a utilização de óxido de ferro II (Fe_6O_3) no propelente MODKNERK, que causou uma redução de 45% na máxima pressão da câmara em relação ao KNSU e um aumento no tempo de queima da combustão conforme Figura 42. Considerando essa redução para simulação, foram obtidas as características termofísicas, através do PROPEP, razão de calores específicos, $k = 1,1420$ e temperatura adiabática da chama de 1588,583 K para uma pressão de 5,5 atm na câmara de combustão do motor foguete desenvolvido por Cort (2023).

Figura 42 – Perfil de empuxo para diferentes composições de propelente



Fonte: Gbadebo Omoniyi Adeniyi (2021).

Abaixo, podemos observar o produto da combustão do propelente MODKNERK com adição de óxido de ferro II:



O cálculo do C_p também foi realizado considerando somente os produtos gasosos da combustão conforme abaixo:

Tabela 7 – Características dos produtos da combustão do propelente MODKNERK e óxido de ferro II (Fe_2O_3) no motor foguete desenvolvido por Cort (2023) - UTFPR Pato Branco

Produtos	MW(g/mol)	mols	Fração molar	Massa (g)
KOH	56,11	0,0279	0,0164	1,5663
CO	28,01	0,35711	0,2100	10,0027
CO_2	44,01	0,3177	0,1869	13,9820
H_2	2,02	0,2682	0,1578	0,5418
H_2O	18,02	0,4970	0,2923	8,9568
N_2	28,02	0,2322	0,1366	6,5062

Fonte: Autoria própria.

Portanto, número de mols total de 1,7002 e massa total de 41,55 g resultando em um C_p de 1773,43 J/g.K de acordo com a Equação 46 e tabela abaixo:

Tabela 8 – Calor específico dos produtos da combustão do propelente MODKNERK e óxido de ferro II (Fe_2O_3) no motor foguete desenvolvido por Cort (2023) - UTFPR Pato Branco

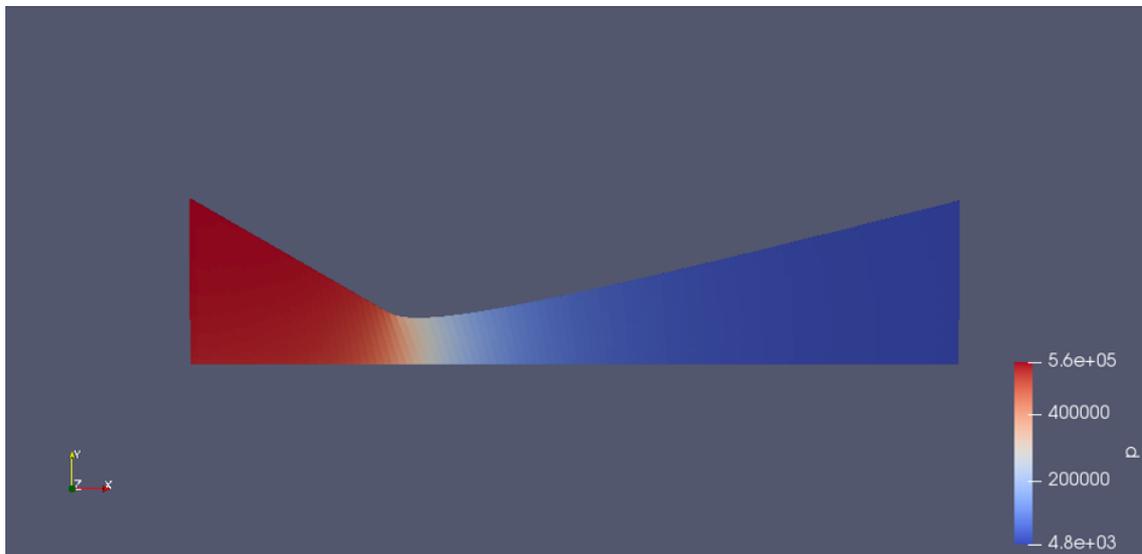
Propriedades	KOH	CO	CO_2	H_2	H_2O	N_2
C_p (J/mol.K)	57,47	35,45	58,83	32,68	47,94	35,10
MW (g/mol)	56,11	28,01	44,01	2,02	18,02	28,02
C_p (J/g.K)	1024	1266	1337	16176	2660	1253
Massa (g)	1,57	10,00	13,98	0,54	8,96	6,51
mi/mp	0,0377	0,2407	0,3365	0,0130	0,2155	0,1566
C_p (J/g.K)	38,605	304,639	449,7486	210,9159	573,415	196,101

Fonte: Autoria própria.

A simulação numérica em função das características termofísicas do propelente MODKNERK e óxido de ferro II (Fe_2O_3) consideradas para o motor foguete de estudo deste trabalho resultou em uma distribuição de pressão de 5,38 atm a 0,059 atm (Figura 44). O empuxo resultante dessa distribuição foi de 34,40 N (Equação 45), o equivalente a uma redução de 51% comparado ao empuxo produzido pelo propelente KNSU.

Segundo os resultados de Adeniyi Inkechukwu Nkere e Sholiyi (2021) o propelente MODKNERK com a adição de Carbono como aditivo foi a formulação com maior eficiência ao aumentar a energia de saída e portanto, entregar um empuxo superior a utilização de propelentes a base de açúcar isoladamente como no caso do KNSU. Já a utilização do aditivo óxido de ferro II, Fe_2O_3 , reduz consideravelmente a máxima pressão assim como, o empuxo, mas permitiu uma maior estabilidade, aumento do tempo de queima do propelente e visualmente, é esperado um modelo de pluma na saída do bocal menos esfumada.

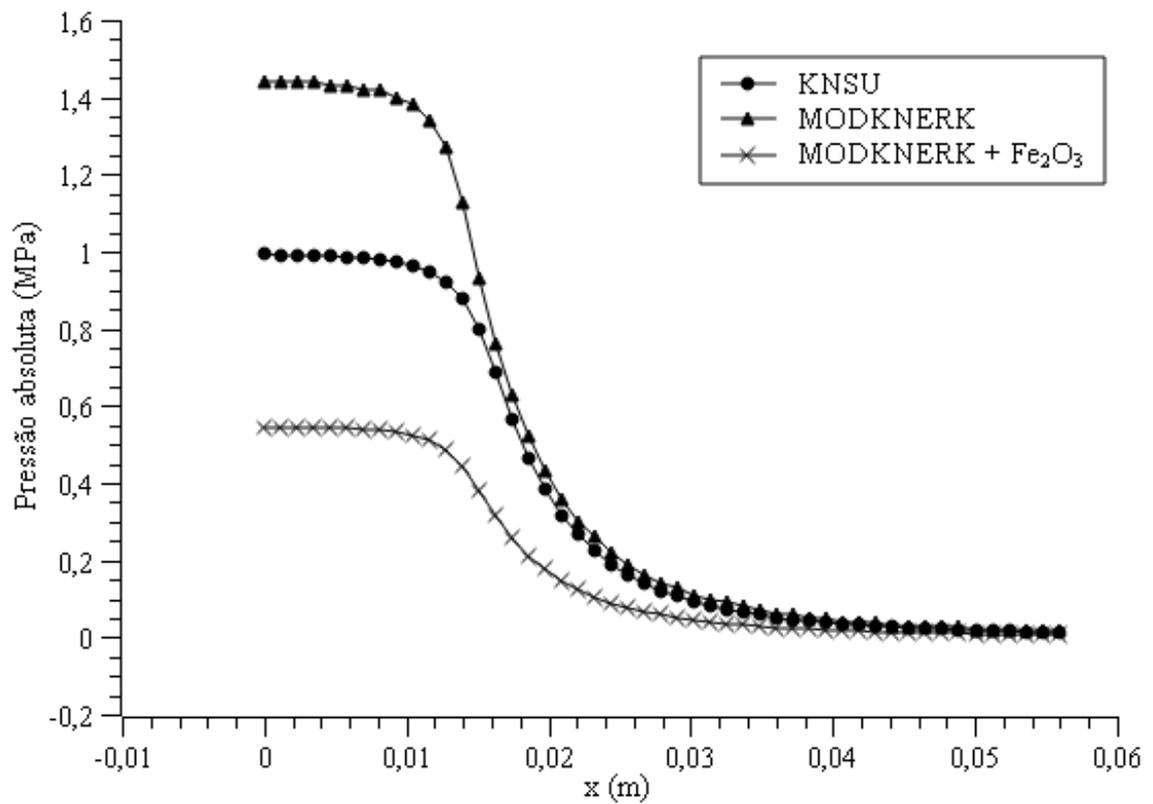
Figura 43 – Perfil de pressão do motor foguete desenvolvido por Cort (2023) com as características do propelente MODKNERK + Fe_2O_3 .



Fonte: Gbadebo Omoniyi Adeniyi (2021).

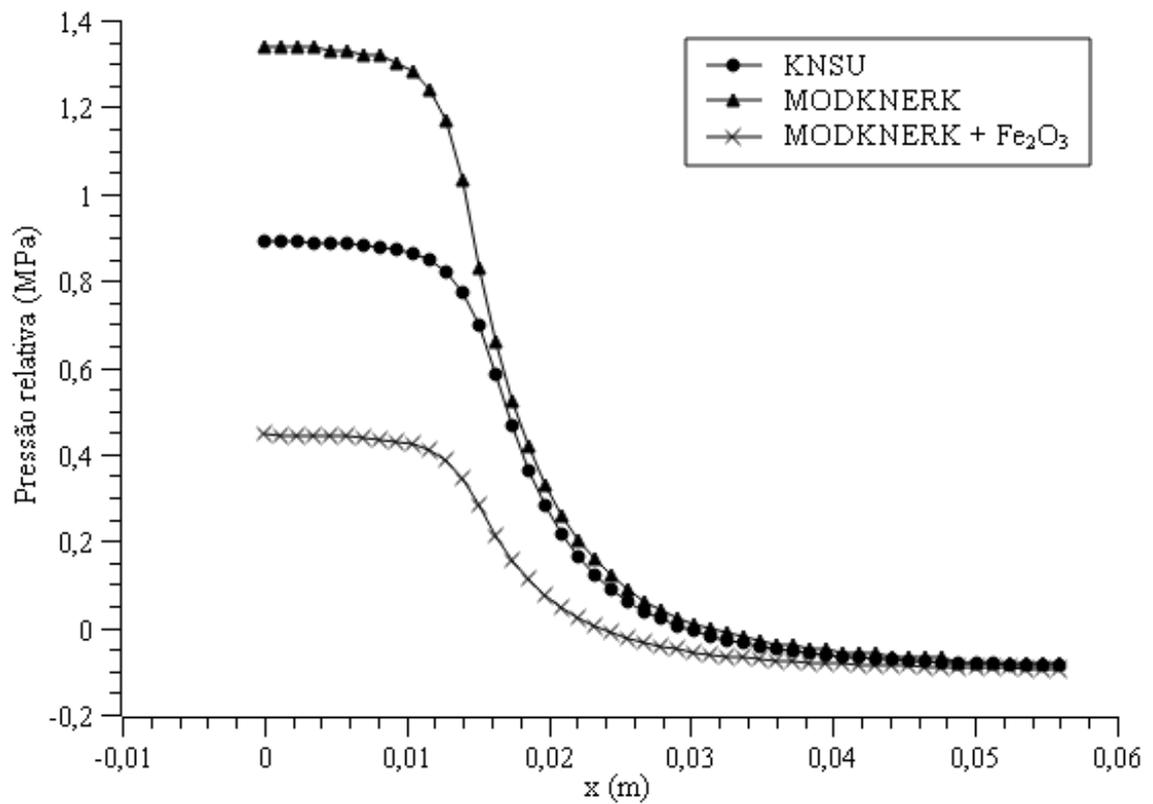
Portanto, a utilização de aditivos e misturas de sorbitol e sacarose, como objetos de otimização do empuxo, podem ser consideradas sem alterar a geometria do projeto e assim, é esperado conforme gráfico abaixo, para o propelente MODKNERK, apenas com carbono como aditivo, produzir uma pressão máxima na câmara de combustão do motor foguete deste estudo de 14,5 atm para a mesma massa utilizada no projeto experimental, neste caso, 72,25 g.

Figura 44 – Distribuição da pressão absoluta para os propelentes KNSU, MODKNERK e MODKNERK + Fe_2O_3 ao longo do motor de estudo deste trabalho.



Fonte: Gbadebo Omoniyi Adeniyi (2021).

Figura 45 – Distribuição da pressão relativa para os propelentes KNSU, MODKNERK e MODKNERK + Fe_2O_3 ao longo do motor de estudo deste trabalho.



Fonte: Gbadebo Omoniyi Adeniyi (2021).

5 CONCLUSÃO

Através de uma malha estruturada com o método co-localizado e as devidas escolhas para discretização do termo convectivo e das condições de contorno, foi possível obter a distribuição de pressão, velocidade e temperatura por toda a região de interesse (câmara de combustão e tubeira) do motor foguete deste trabalho.

A validação da solução numérica realizada através de um caso geral de bocal convergente-divergente de uma tubeira disponível no site da NASA mostrou o bom desempenho do código, ao se comparar com os resultados analíticos, em simular escoamentos que vão de um regime de velocidades subsônicas a supersônicas de motores foguete.

Através da média dos resultados experimentais realizados na UTFPR - Pato Branco, neste caso o empuxo, foi possível determinar a pressão na câmara de combustão e assim, fazendo uso do programa PROPEP 3, encontrar as características termofísicas e equação estequiométrica do propelente a base de sacarose (conhecido como KNSU).

Portanto, por meio dos resultados encontrados, é possível observar a necessidade de uma geometria convergente divergente para obtenção de um regime de velocidades supersônico onde, através de uma diminuição de área até a região crítica da tubeira, há a diminuição da pressão seguido de um aumento de velocidade conforme uma variação positiva de área até a saída do bocal.

REFERÊNCIAS

- ADENIYI INKECHUKWU NKERE, L. M. A. G. O.; SHOLIYI, O. S. Performance analysis of a dual-fuel sugar based solid rocket propellant. ASME, 2021.
- AMÉRICO, C. E. Development of a ballistic evaluation motor for knsu burn rate measurements. ASME, 2015.
- ANDERSON, J. **Computational Fluid Dynamics**. McGraw-Hill Education, 1995. (Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications). ISBN 9780070016859. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=dJceAQAIAAJ>.
- BLAZEK, J. **Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications**. Elsevier Science, 2005. ISBN 9780080529677. Disponível em: https://books.google.com.br/books?id=IKuR2Z-9_rAC.
- CORT, M. P. D. Estudo experimental de um bocal convergente-divergente utilizando a curva catenária para motor-foguete a propelente sólido. 2023.
- DARWISH, F. M. M. **A Fully Coupled Navier-Stokes Solver For Fluid Flow At All Speeds**. [S.l.]: Springer International Publishing, 2015. ISBN 9783319168746.
- MCDONALD, P. W. The computation of transonic flow through two-dimensional gas turbine cascades. ASME, 1971.
- MILLER, W. Solid rocket motor performance analysis and prediction. ASME, 1971.
- NAKKA'S, R. Solid rocket motor theory – introduction. ASME, 2007. Disponível em: <https://www.nakka-rocketry.net/>.
- NASA. NASA SP-273, 1976. ISBN 19780009781. Disponível em: <https://ntrs.nasa.gov/citations/19780009781>.
- RODIC, V.; PETRIC, M. The effect of additives on solid rocket propellant characteristics. ASME, 2004.
- SALVADOR, N. M. C. Simulação numérica do escoamento em um motor foguete com reação química. Trabalho de Conclusão de Curso, 2005.
- SHEN FENGXIAN SUN, X. X. C. Implementation of density-based solver for all speeds in the framework of openfoam. ScienceDirect, ago. 2013. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465514002136>.
- SUTTON, G.; BIBLARZ, O. **Rocket Propulsion Elements**. John Wiley & Sons, 2010. ISBN 9780470080245. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=1Sf6eV6CgtEC>.
- TAVELLI, M.; DUMBSER, M. A pressure-based semi-implicit space–time discontinuous galerkin method on staggered unstructured meshes for the solution of the compressible navier–stokes equations at all mach numbers. ScienceDirect, p. pp. 341–376, dez. 2016. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999117302255>.
- WYLEN, G. V.; BORGNACKE, C.; SONNTAG, R. **Fundamentos da termodinâmica**. Edgard Blucher, 2009. (Série Van Wiley). ISBN 9788521204909. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=YgkfPwAACAAJ>.

XIAO FABIAN DENNER, B. G. v. W. C.-N. Fully-coupled pressure-based finite-volume framework for the simulation of fluid flows at all speeds in complex geometries. *Journal of Computational Physics*, jan. 2017. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999117302255>.

ANEXO A – Arquivos do diretório 0

```

/*-----* C++ *-----*/
|=====|
| \ \ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
| \ \ / O p e r a t i o n | Version: 5.x
| \ \ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org
| \ \ / M a n i p u l a t i o n |
/*-----*/

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        volScalarField;
    location     "0";
    object       p;
}
// ***** //

dimensions      [1 -1 -2 0 0 0];

internalField   uniform 1013250;

boundaryField
{
    asym1
    {
        type       wedge;
    }
    asym2
    {
        type       wedge;
    }
    inlet
    {
        type       totalPressure;
        rho        none;
        psi        thermo:psi;
        gamma      1.14;
        p0         uniform 1013250;
        value      uniform 1013250;
    }
    nozzle
    {
        type       zeroGradient;
    }
    outlet
    {
        type       waveTransmissive;
        gamma      1.14;
        fieldInf   101325;
        lInf       0.025;
        value      uniform 101325;
    }
}

// ***** //

```

```

/*-----*-- C++ -*-----*/
|=====|
|  \ \ /  /  F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
|  \ \ /  /  O p e r a t i o n | Version: 5.x
|  \ \ /  /  A n d           | Web:      www.OpenFOAM.org
|  \ \ /  /  M a n i p u l a t i o n |
|-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        volScalarField;
    location     "0";
    object       T;
}
// ***** //

dimensions      [0 0 0 1 0 0 0];

internalField   uniform 1635;

boundaryField
{
    asym1
    {
        type      wedge;
    }
    asym2
    {
        type      wedge;
    }
    inlet
    {
        type      fixedValue;
        value     uniform 1635;
    }
    nozzle
    {
        type      zeroGradient;
    }
    outlet
    {
        type      zeroGradient;
    }
}

// ***** //

```

```

/*-----* C++ -*-----*/
|=====|
| \ \ / / | F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
| \ \ / / | O p e r a t i o n | Version: 5.x
| \ \ / / | A n d | Web: www.OpenFOAM.org
| \ \ / / | M a n i p u l a t i o n |
|-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        volVectorField;
    location     "0";
    object       U;
}
// ***** //

dimensions      [0 1 -1 0 0 0 0];

internalField   uniform (0 0 0);

boundaryField
{
    asym1
    {
        type      wedge;
    }
    asym2
    {
        type      wedge;
    }
    inlet
    {
        type      zeroGradient;
    }
    nozzle
    {
        type      slip;
    }
    outlet
    {
        type      zeroGradient;
    }
}

// ***** //

```

ANEXO B – Arquivos do diretório System

```

/*----- C++ -----*/
| ===== |
| \ \ / / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
| \ \ / / O p e r a t i o n | Version: 5
| \ \ / / A n d | Web: www.OpenFOAM.org
| \ \ / / M a n i p u l a t i o n |
/*-----*/

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       fvSchemes;
}
// ***** //

fluxScheme      Kurganov;

ddtSchemes
{
    default      Euler;
}

gradSchemes
{
    default      Gauss linear;
}

divSchemes
{
    default      none;
    div(tauMC)   Gauss linear;
}

laplacianSchemes
{
    default      Gauss linear corrected;
}

interpolationSchemes
{
    default      linear;
    reconstruct(rho) vanAlbada;
    reconstruct(U) vanAlbadaV;
    reconstruct(T) vanAlbada;
}

snGradSchemes
{
    default      corrected;
}

// ***** //

```

```

/*-----* C++ *-----*/
|=====|
|  \ \ /  /  F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
|  \ \ /  /  O p e r a t i o n | Version: 5
|  \ \ /  /  A n d           | Web:      www.OpenFOAM.org
|  \ \ /  /  M a n i p u l a t i o n |
|-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       fvSolution;
}
// ***** //

solvers
{
    "(rho|rhoU|rhoE)"
    {
        solver      diagonal;
    }

    U
    {
        solver      smoothSolver;
        smoother    GaussSeidel;
        nSweeps     2;
        tolerance   1e-09;
        relTol      0.01;
    }

    h
    {
        $U;
        tolerance   1e-10;
        relTol      0;
    }
}

// ***** //

```

```

/*-----* C++ -*-----*/
|=====|
| \ \ \ \ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
| \ \ \ \ / O p e r a t i o n | Version: 5
| \ \ \ \ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org
| \ \ \ \ / M a n i p u l a t i o n |
|-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       controlDict;
}
// ***** //

application    rhoCentralFoam;

startFrom      latestTime;

startTime      0;

stopAt         endTime;

endTime        0.1;

deltaT         1e-10;

writeControl   adjustableRunTime;

writeInterval  1e-04;

cycleWrite     0;

writeFormat    ascii;

writePrecision 12;

writeCompression off;

timeFormat     general;

timePrecision  6;

runTimeModifiable true;

adjustTimeStep yes;

maxCo          0.5;

maxDeltaT      1;

functions
{
    libs        ("libfieldFunctionObjects.so");

    Ma
    {
        type            MachNo;
        executeControl  writeTime;
        writeControl    writeTime;
    }
}

// ***** //

```

```

/*-----*- C++ -*-----*/
| ===== |
|  \ \ / /  F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
|  \ \ / /  O p e r a t i o n | Version: 5
|  \ \ / /  A n d           | Web:      www.OpenFOAM.org
|  \ \ / /  M a n i p u l a t i o n |
/*-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       decomposeParDict;
}
// ***** //

numberOfSubdomains 4;

method          simple;

simpleCoeffs
{
    n             (2 2 1);
    delta        0.001;
}

hierarchicalCoeffs
{
    n             (2 2 1);
    delta        0.001;
    order        xyz;
}

// ***** //

```

ANEXO C – Arquivos do diretório Constant

```

\*------* C++ *------*\
|=====|
|  \ \ /  F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
|  \ \ /  O p e r a t i o n | Version: 5.x
|  \ \ /  A n d           | Web:      www.OpenFOAM.org
|  \ \ /  M a n i p u l a t i o n |
\*------*\

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        polyBoundaryMesh;
    location     "constant/polyMesh";
    object       boundary;
}
// *****

5
(
    asym1
    {
        type            wedge;
        nFaces          3090;
        startFace       6047;
    }
    asym2
    {
        type            wedge;
        nFaces          3090;
        startFace       9137;
    }
    inlet
    {
        type            patch;
        nFaces          30;
        startFace       12227;
    }
    nozzle
    {
        type            wall;
        nFaces          103;
        startFace       12257;
    }
    outlet
    {
        type            patch;
        nFaces          30;
        startFace       12360;
    }
)
// *****

```

```

/*-----*- C++ -*-----*/
|=====|
|  \ \ /  /  F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
|  \ \ /  /  O p e r a t i o n | Version: 5
|  \ \ /  /  A n d           | Web:      www.OpenFOAM.org
|  \ \ /  /  M a n i p u l a t i o n |
|-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "constant";
    object       thermophysicalProperties;
}
// ***** //

thermoType
{
    type          hePsiThermo;
    mixture       pureMixture;
    transport     const;
    thermo        hConst;
    equationOfState perfectGas;
    specie        specie;
    energy        sensibleInternalEnergy;
}

mixture
{
    specie
    {
        molWeight      36.69;
    }
    thermodynamics
    {
        Cp              1738.60;
        Hf              2.544e+06;
    }
    transport
    {
        mu              0;
        Pr              1;
    }
}

// ***** //

```

```

/*-----*- C++ -*-----*/
|=====|
|  \ \ /  /  F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
|  \ \ /  /  O p e r a t i o n | Version: 5
|  \ \ /  /  A n d           | Web:      www.OpenFOAM.org
|  \ \ /  /  M a n i p u l a t i o n |
|-----|
/*-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "constant";
    object       turbulenceProperties;
}
// ***** //

simulationType laminar;

// ***** //

```

ANEXO D – Display results - PROPEP3

Code	WEIGHT	D-H	DENS	COMPOSITION
0 POTASSIUM NITRATE	46,960	-1167	0,00001	1 N 3 O 1 K
0 SUCROSE (TABLE SUGAR)	25,290	-1550	0,00001	22 H 12 C 11 O

THE PROPELLANT DENSITY IS 0,00001 LB/CU-IN OR 0,0003 GM/CC
 THE TOTAL PROPELLANT WEIGHT IS 72,2500 GRAMS

NUMBER OF GRAM ATOMS OF EACH ELEMENT PRESENT IN INGREDIENTS

1,625378 H
 0,886570 C
 0,464454 N
 2,206051 O
 0,464454 K

*****CHAMBER RESULTS FOLLOW *****
 *****EXHAUST RESULTS FOLLOW *****

T(K)	T(F)	P(ATM)	P(PST)	ENTHALPY	ENTROPY	CP/CV	GAS	RT/V
1635	2484	10,00	147,00	-94,00	126,58	1,1412	1,772	5,643

SPECIFIC HEAT (MOLAR) OF GAS AND TOTAL = 10,512 14,451
 NUMBER MOLS GAS AND CONDENSED = 1,772 0,197

5,573772e-001 H2O	3,844972e-001 CO	3,046068e-001 CO2	2,322010e-001 N2
2,239337e-001 H2	1,974234e-001 K2CO3*	6,204605e-002 KHO	6,921050e-003 K
2,991824e-004 K2H2O2	2,035488e-005 KH	1,558099e-005 H	1,246571e-005 NH3
4,54885E-06 KCN	4,54885E-06 KCN	4,54885E-06 KCN	

THE MOLECULAR WEIGHT OF THE MIXTURE IS 36,686

Code		WEIGHT	D-H	DENS	COMPOSITION		
0	POTASSIUM NITRATE	47,610	-1167	0,00001	1 N	3 O	1 K
0	SUCROSE (TABLE SUGAR)	17,580	-1550	0,00001	22 H	12 C	11 O
0	SORBITOL	7,300	-1776	0,00001	6 C	14 H	6 O
0	CARBON BLACK	0,730	0	0,00001	1 C		

THE PROPELLANT DENSITY IS 0,00001 LB/CU-IN OR 0,0003 GM/CC
 THE TOTAL PROPELLANT WEIGHT IS 73,2200 GRAMS

NUMBER OF GRAM ATOMS OF EACH ELEMENT PRESENT IN INGREDIENTS

1,690850 H
 0,917489 C
 0,470883 N
 2,218002 O
 0,470883 K

*****CHAMBER RESULTS FOLLOW *****

T(K)	T(F)	P(ATM)	P(PSI)	ENTHALPY	ENTROPY	CP/CV	GAS	RT/V
1608	2435	14,49	213,00	-95,77	126,92	1,1394	1,803	8,037

SPECIFIC HEAT (MOLAR) OF GAS AND TOTAL = 10,269 14,506
 NUMBER MOLS GAS AND CONDENSED = 1,803 0,216

5,530894e-001 H2O	4,212972e-001 CO	2,798918e-001 CO2	2,747541e-001 H2
2,354077e-001 N2	2,162541e-001 K2CO3*	3,468303e-002 KHO	3,320135e-003 K
1,690792e-004 K2H2O2	2,602950e-005 NH3	1,237142e-005 KH	1,093310e-005 H
6,055425e-006 KCN	1,272697e-006 CH4	9,037201e-007 HO	7,592188e-007 CNH

THE MOLECULAR WEIGHT OF THE MIXTURE IS 36,266

Code	WEIGHT	D-H	DENS	COMPOSITION
0 POTASSIUM NITRATE	46,960	-1167	0,00001	1 N 3 O 1 K
0 SUCROSE (TABLE SUGAR)	21,670	-1550	0,00001	22 H 12 C 11 O
0 SORBITOL	2,160	-1776	0,00001	6 C 14 H 6 O
0 CARBON BLACK	0,720	0	0,00001	1 C
0 IRON OXIDE	0,720	-1230	0,00001	3 O 2 FE

THE PROPELLANT DENSITY IS 0,00001 LB/CU-IN OR 0,0003 GM/CC

THE TOTAL PROPELLANT WEIGHT IS 72,2300 GRAMS

NUMBER OF GRAM ATOMS OF EACH ELEMENT PRESENT IN INGREDIENTS

1,558714 H
0,890751 C
0,464454 N
2,174387 O
0,464454 K
0,009017 FE

*****CHAMBER RESULTS FOLLOW *****

T(K)	T(F)	P(ATM)	P(PSI)	ENTHALPY	ENTROPY	CP/CV	GAS	RT/V
1589	2400	5,44	80,00	-93,11	126,68	1,1421	1,753	3,104

SPECIFIC HEAT (MOLAR) OF GAS AND TOTAL = 10,415 14,324
NUMBER MOLS GAS AND CONDENSED = 1,753 0,202

5,166671e-001 H2O	3,947170e-001 CO	3,031829e-001 CO2	2,322037e-001 N2
2,280505e-001 H2	1,928011e-001 K2CO3*	6,853741e-002 KHO	9,665293e-003 K
8,986028e-003 FeO&	3,037197e-004 K2H2O2	1,975014e-005 KH	1,787554e-005 FeH2O2
1,303911e-005 H	7,947654e-006 NH3	3,987454e-006 KCN	2,368534e-006 K2
1,14614E-06 HO			

THE MOLECULAR WEIGHT OF THE MIXTURE IS 36,942