



Universidade de Brasília - UnB
Faculdade UnB Gama - FGA
Engenharia Aeroespacial

Simulação de escoamento em um motor de foguete híbrido com domínio variável

Autor: Patrick Christian de Melo
Orientador: Dr. Olexiy Shynkarenko

Brasília, DF
2024



Patrick Christian de Melo

Simulação de escoamento em um motor de foguete híbrido com domínio variável

Monografia submetida ao curso de graduação em Engenharia Aeroespacial da Universidade de Brasília, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Aeroespacial.

Universidade de Brasília - UnB

Faculdade UnB Gama - FGA

Orientador: Dr. Olexiy Shynkarenko

Brasília, DF

2024

Patrick Christian de Melo

Simulação de escoamento em um motor de foguete híbrido com domínio variável/
Patrick Christian de Melo. – Brasília, DF, 2024-

103 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Dr. Olexiy Shynkarenko

Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade de Brasília - UnB
Faculdade UnB Gama - FGA , 2024.

1. Combustão. 2. Simulação Numérica. I. Dr. Olexiy Shynkarenko. II. Universidade de Brasília. III. Faculdade UnB Gama. IV. Simulação de escoamento em um motor de foguete híbrido com domínio variável

CDU 02:141:005.6

Patrick Christian de Melo

Simulação de escoamento em um motor de foguete híbrido com domínio variável

Monografia submetida ao curso de graduação em Engenharia Aeroespacial da Universidade de Brasília, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Aeroespacial.

Trabalho aprovado. Brasília, DF, 20 de setembro de 2024:

Dr. Olexiy Shynkarenko
Orientador

Dr. Artur Elias de Moraes Bertoldi
Convidado 1

Dr. Lui Txai Calvoso Habl
Convidado 2

Brasília, DF
2024

*“There are too many people praying for
mountains of difficulty to be removed,
when what they really need is
the courage to climb them!”
- Desconhecido*

Resumo

Este trabalho investiga a dinâmica da combustão em um motor de foguete híbrido por meio de uma simulação de dinâmica de fluidos computacional (CFD), utilizando um domínio variável para modelar a regressão do grão de combustível sólido. O objetivo principal é simular as características do escoamento dentro da câmara de combustão e tubeira do motor híbrido SARA, com foco na aplicação de uma malha dinâmica para contabilizar o consumo de combustível ao longo do tempo. A metodologia inclui o uso de ferramentas CFD para simular o comportamento transiente do processo de combustão, incluindo a distribuição de pressão e temperatura, bem como a regressão do combustível. A simulação é implementada no software Ansys Fluent, com atenção especial à qualidade da malha e à resolução transiente.

Os resultados revelam a regressão progressiva do grão de combustível e seu impacto nas propriedades internas de escoamento do motor. As distribuições de temperatura e pressão ao longo do tempo fornecem informações valiosas sobre os limites operacionais do motor, permitindo a determinação da duração segura de combustão. Esses achados oferecem uma contribuição valiosa para o projeto SARA em andamento, pois orientarão futuros testes de bancada e o desenvolvimento de métricas de segurança para garantir a integridade estrutural do motor. Além disso, o estudo serve como base para futuras pesquisas em sistemas de propulsão híbrida, avançando na compreensão das aplicações de malha dinâmica em simulações de combustão.

Palavras-chaves: combustão. CFD. motor de foguete. malha dinâmica.

Abstract

This work investigates the combustion dynamics within a hybrid rocket engine through a computational fluid dynamics (CFD) simulation, employing a variable domain to model the regression of the solid fuel grain. The primary objective is to simulate the flow characteristics inside the SARA hybrid rocket engine's combustion chamber and nozzle, focusing on applying a dynamic mesh to account for fuel consumption over time. The methodology involves using CFD tools to simulate the transient behavior of the combustion process, including pressure and temperature distribution and fuel regression. The simulation is implemented in the Ansys Fluent software, with special attention to mesh quality and transient resolution.

The results reveal the progressive regression of the fuel grain and its impact on the engine's internal flow properties. Temperature and pressure distributions over time provide insights into the engine's operational limits, enabling the determination of safe combustion duration. These findings offer a valuable contribution to the ongoing SARA project, as they will guide future bench tests and the development of safety metrics to ensure the structural integrity of the engine. Furthermore, the study is a foundation for future research in hybrid propulsion systems, advancing the understanding of dynamic mesh applications in combustion simulations.

Key-words: combustion. CFD. rocket engine. dynamic mesh.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Motores de foguete líquido, sólido e híbrido.	17
Figura 2 – Estrutura de um motor de foguete híbrido.	21
Figura 3 – Esquemático da câmara de combustão de um motor de foguete híbrido.	22
Figura 4 – Chama macroscópica de difusão.	22
Figura 5 – Esquemático da taxa de regressão.	24
Figura 6 – Raio do grão de combustível em função do tempo	25
Figura 7 – Taxa de regressão do grão de combustível em função do tempo	26
Figura 8 – Exemplo de escoamento turbulento.	29
Figura 9 – Modelos de Turbulência	30
Figura 10 – Descrição gráfica da função densidade de probabilidade.	35
Figura 11 – Tabela PDF para escoamento adiabático.	36
Figura 12 – Tabela PDF para escoamento não-adiabático.	37
Figura 13 – Exemplos de assimetria.	38
Figura 14 – Refinamento de malha próximo à parede.	40
Figura 15 – U^+ vs y^+	40
Figura 16 – Método de <i>layering</i>	44
Figura 17 – Geometria completa do motor SARA.	45
Figura 18 – Vista isométrica da geometria do motor SARA.	45
Figura 19 – Vista lateral da geometria do motor SARA.	46
Figura 20 – Vista traseira da geometria do motor SARA.	46
Figura 21 – Entrada de massa de oxidante.	47
Figura 22 – Gráfico da função $X(x)$	48
Figura 23 – Gráfico da função $T(t)$	48
Figura 24 – Condição de contorno de entrada de massa de combustível.	49
Figura 25 – Condição de contorno de simetria.	49
Figura 26 – Condição de contorno de saída.	50
Figura 27 – Condição de contorno de parede.	50
Figura 28 – Malha inicial - vista 1.	51
Figura 29 – Malha inicial - vista 2.	52
Figura 30 – Movimento da malha.	52
Figura 31 – Tratamento de superfícies - Topo.	53
Figura 32 – Tratamento de superfícies - Baixo.	54
Figura 33 – Malha no momento $t = 0s$	55
Figura 34 – Malha no momento $t = 5s$	55
Figura 35 – Malha no momento $t = 10s$	55
Figura 36 – Malha no momento $t = 15s$	55

Figura 37 – MMF para o modelo transiente no tempo $t=0s$	58
Figura 38 – MMF para o modelo transiente no tempo $t=1s$	58
Figura 39 – Temperatura no momento $t = 0s$	59
Figura 40 – Temperatura no momento $t = 5s$	60
Figura 41 – Temperatura no momento $t = 10s$	60
Figura 42 – Temperatura no momento $t = 15s$	60
Figura 43 – Gráfico de temperatura.	62
Figura 44 – Pressão no momento $t = 0s$	62
Figura 45 – Pressão no momento $t = 5s$	62
Figura 46 – Pressão no momento $t = 10s$	63
Figura 47 – Pressão no momento $t = 15s$	63
Figura 48 – Gráfico de pressão.	64
Figura 49 – <i>Mean Mixture Fraction</i> no momento $t = 0$	64
Figura 50 – <i>Mean Mixture Fraction</i> no momento $t = 5$	65
Figura 51 – <i>Mean Mixture Fraction</i> no momento $t = 10$	65
Figura 52 – <i>Mean Mixture Fraction</i> no momento $t = 15$	65
Figura 53 – Linhas de corrente no momento $t = 0$	66
Figura 54 – Linhas de corrente no momento $t = 5$	66
Figura 55 – Linhas de corrente no momento $t = 10$	66
Figura 56 – Linhas de corrente no momento $t = 15$	66
Figura 57 – Gráfico de velocidade.	67
Figura 58 – Gráfico de empuxo e vazão mássica.	67
Figura 59 – Gráfico de principais produtos químicos na saída da tubeira.	68
Figura 60 – Teste de 10 segundos do motor SARA.	69
Figura 61 – Montagem do grão no motor SARA.	70
Figura 62 – Placa injetora após teste frio.	70
Figura 63 – Deterioração das peças impressas em 3D na câmara de combustão.	71
Figura 64 – Deterioração da peça 3D da pré-câmara de combustão	71
Figura 65 – Tratamento térmico sofrido pela placa injetora.	72
Figura 66 – Malha no tempo $t = 0s$	84
Figura 67 – Malha no tempo $t = 1s$	84
Figura 68 – Malha no tempo $t = 2s$	84
Figura 69 – Malha no tempo $t = 3s$	84
Figura 70 – Malha no tempo $t = 4s$	85
Figura 71 – Malha no tempo $t = 5s$	85
Figura 72 – Malha no tempo $t = 6s$	85
Figura 73 – Malha no tempo $t = 7s$	85
Figura 74 – Malha no tempo $t = 8s$	85
Figura 75 – Malha no tempo $t = 9s$	86

Figura 76 – Malha no tempo $t = 10s$.	86
Figura 77 – Malha no tempo $t = 11s$.	86
Figura 78 – Malha no tempo $t = 12s$.	86
Figura 79 – Malha no tempo $t = 13s$.	86
Figura 80 – Malha no tempo $t = 14s$.	87
Figura 81 – Malha no tempo $t = 15s$.	87
Figura 82 – Temperatura no tempo $t = 0s$.	88
Figura 83 – Temperatura no tempo $t = 1s$.	88
Figura 84 – Temperatura no tempo $t = 2s$.	88
Figura 85 – Temperatura no tempo $t = 3s$.	88
Figura 86 – Temperatura no tempo $t = 4s$.	89
Figura 87 – Temperatura no tempo $t = 5s$.	89
Figura 88 – Temperatura no tempo $t = 6s$.	89
Figura 89 – Temperatura no tempo $t = 7s$.	89
Figura 90 – Temperatura no tempo $t = 8s$.	89
Figura 91 – Temperatura no tempo $t = 9s$.	90
Figura 92 – Temperatura no tempo $t = 10s$.	90
Figura 93 – Temperatura no tempo $t = 11s$.	90
Figura 94 – Temperatura no tempo $t = 12s$.	90
Figura 95 – Temperatura no tempo $t = 13s$.	90
Figura 96 – Temperatura no tempo $t = 14s$.	91
Figura 97 – Temperatura no tempo $t = 15s$.	91
Figura 98 – Pressão no tempo $t = 0s$.	92
Figura 99 – Pressão no tempo $t = 1s$.	92
Figura 100 – Pressão no tempo $t = 2s$.	92
Figura 101 – Pressão no tempo $t = 3s$.	92
Figura 102 – Pressão no tempo $t = 4s$.	93
Figura 103 – Pressão no tempo $t = 5s$.	93
Figura 104 – Pressão no tempo $t = 6s$.	93
Figura 105 – Pressão no tempo $t = 7s$.	93
Figura 106 – Pressão no tempo $t = 8s$.	94
Figura 107 – Pressão no tempo $t = 9s$.	94
Figura 108 – Pressão no tempo $t = 10s$.	94
Figura 109 – Pressão no tempo $t = 11s$.	94
Figura 110 – Pressão no tempo $t = 12s$.	94
Figura 111 – Pressão no tempo $t = 13s$.	95
Figura 112 – Pressão no tempo $t = 14s$.	95
Figura 113 – Pressão no tempo $t = 15s$.	95
Figura 114 – <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 0s$.	96

Figura 115– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 1s$	96
Figura 116– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 2s$	96
Figura 117– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 3s$	96
Figura 118– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 4s$	97
Figura 119– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 5s$	97
Figura 120– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 6s$	97
Figura 121– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 7s$	97
Figura 122– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 8s$	98
Figura 123– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 9s$	98
Figura 124– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 10s$	98
Figura 125– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 11s$	98
Figura 126– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 12s$	98
Figura 127– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 13s$	99
Figura 128– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 14s$	99
Figura 129– <i>Mean mixture fraction</i> no tempo $t = 15s$	99
Figura 130–Linhas de corrente no tempo $t = 0s$	100
Figura 131–Linhas de corrente no tempo $t = 1s$	100
Figura 132–Linhas de corrente no tempo $t = 2s$	100
Figura 133–Linhas de corrente no tempo $t = 3s$	100
Figura 134–Linhas de corrente no tempo $t = 4s$	101
Figura 135–Linhas de corrente no tempo $t = 5s$	101
Figura 136–Linhas de corrente no tempo $t = 6s$	101
Figura 137–Linhas de corrente no tempo $t = 7s$	101
Figura 138–Linhas de corrente no tempo $t = 8s$	102
Figura 139–Linhas de corrente no tempo $t = 9s$	102
Figura 140–Linhas de corrente no tempo $t = 10s$	102
Figura 141–Linhas de corrente no tempo $t = 11s$	102
Figura 142–Linhas de corrente no tempo $t = 12s$	103
Figura 143–Linhas de corrente no tempo $t = 13s$	103
Figura 144–Linhas de corrente no tempo $t = 14s$	103
Figura 145–Linhas de corrente no tempo $t = 15s$	103

Lista de tabelas

Tabela 1 – Elementos de um MFH padrão.	21
Tabela 2 – Qualidade de malha por critério de assimetria.	39
Tabela 3 – Resumo das condições de contorno.	51
Tabela 4 – Temperaturas máximas e mínimas na câmara de combustão - Parte 1.	61
Tabela 5 – Temperaturas máximas e mínimas na câmara de combustão - Parte 2.	61
Tabela 6 – Pressão de operação e na saída da tubeira - Parte 1.	63
Tabela 7 – Pressão de operação e na saída da tubeira - Parte 2.	63
Tabela 8 – Comparação entre simulação e RPA.	68
Tabela 9 – Comparação entre simulação e testes experimentais.	72

Lista de abreviaturas e siglas

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CNPq	Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico
CPL	<i>Chemical Propulsion Laboratory</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
EDO	Equação Diferencial Ordinária
EDP	Equação Diferencial Parcial
FAPDF	Fundação de Apoio à Pesquisa do Distrito Federal
LES	<i>Large Eddy Simulations</i>
MFH	Motor de Foguete Híbrido
MFL	Motor de Foguete Líquido
MFS	Motor de Foguete Sólido
PDF	<i>Probability Density Function</i>
RANS	<i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>
RPA	<i>Rocket Propulsion Analysis</i>
SP	Sistema de Propulsão
SST	<i>Shear-Stress Transport</i>
TCC	Trabalho de Conclusão de Curso
UDF	<i>User Defined Function</i>
UnB	Universidade de Brasília

Lista de símbolos

A	Área
a	Velocidade do som
c	Comprimento característico
c_p	Calor específico à pressão constante
c_v	Calor específico à volume constante
e	Energia interna
f	Fração de mistura
F	Força
G_{ox}	Fluxo de massa de oxidante
g_0	Aceleração da gravidade
H	Entalpia
h	Altura de célula
I_s	Impulso específico
L	Tensor de inércia
\dot{m}	Vazão mássica
M	Número de Mach
P	Pressão
p	Densidade de probabilidade
r	Raio do grão
\dot{r}	Taxa de regressão
R	Constante dos gases ideias
Re	Número de Reynolds
S	Termo fonte

t	Tempo
T	Temperatura
u	Velocidade
V	Volume
∂V	Fronteira do volume de controle
\vec{x}	Vetor posição
y^+	Y-plus
Z	Fração de massa elementar
α_s	Fator de divisão de camada
β	Fator de relaxamento
Γ	Termo difusivo
γ	Coefficiente de expansão adiabático
δ_{ij}	Delta de Kronecker
θ	Ângulo de assimetria
λ	Condutividade térmica
μ	Viscosidade
ρ	Massa específica
τ	Tensor de tensões
ϕ	Propriedade extensiva
Φ	Razão de equivalência
ω	Rotação

Sumário

1	INTRODUÇÃO	17
1.1	Objetivo Geral	19
1.2	Objetivos Específicos	19
1.3	Motivação	19
1.4	Organização	20
2	FUNDAMENTOS SOBRE MFH	21
2.1	Taxa de regressão do combustível sólido	24
3	MODELAGEM DE ESCOAMENTOS TURBULENTOS	27
3.1	Leis de conservação	27
3.1.1	Conservação da massa	27
3.1.2	Conservação do momento	27
3.1.3	Conservação da energia	28
3.2	Turbulência	29
3.2.1	Média de Reynolds	31
3.2.2	Modelo k-w SST	32
3.3	Combustão	33
3.3.1	Equações de transporte para a Fração de Mistura	33
3.3.2	Fração de mistura vs Razão de equivalência	34
3.3.3	Função densidade de probabilidade	35
3.3.4	Tabulação química	36
4	MALHA	38
4.1	Parâmetros de qualidade de malha	38
4.1.1	Assimetria	38
4.1.2	Detalhamento da camada limite	39
4.2	Malha Dinâmica	41
4.2.1	Equação de conservação em malha dinâmica	41
4.2.2	Método de solução por seis graus de liberdade	42
4.2.3	Métodos de malha dinâmica	43
4.2.4	Método Laplaciano de Suavização	43
4.2.5	Métodos de remalhamento	44
4.2.6	Layering	44
5	METODOLOGIA	45

5.1	Geometria	45
5.2	Condições de contorno	46
5.2.1	Oxidante	46
5.2.2	Combustível	47
5.2.3	Simetria	49
5.2.4	Saída	50
5.2.5	Parede	50
5.3	Malha Dinâmica	51
5.4	Resolução Transiente vs Permanente	55
5.4.1	Transiente	56
5.4.2	Permanente	56
6	RESULTADOS	58
6.1	Resultados simulação transiente	58
6.2	Resultados simulação permanente	59
6.3	Validação	68
6.4	Comparação modelo Transiente vs modelo Permanente	73
7	CONCLUSÃO	75
	REFERÊNCIAS	77
	APÊNDICE A – CÁLCULO DA TAXA DE REGRESSÃO	79
	APÊNDICE B – UDF PARA MOVIMENTO DE MALHA	82
	APÊNDICE C – MALHA DINÂMICA	84
	APÊNDICE D – DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURA	88
	APÊNDICE E – DISTRIBUIÇÃO DE PRESSÃO	92
	APÊNDICE F – DISTRIBUIÇÃO DE <i>MEAN MIXTURE FRACTION</i>	96
	APÊNDICE G – LINHAS DE CORRENTE	100

1 Introdução

Um motor de foguete híbrido (MFH) é um motor que utiliza oxidante líquido ou gasoso (por exemplo, oxigênio líquido O_2 ou óxido nitroso N_2O) e combustível sólido (por exemplo, parafina CH_4 ou polietileno C_2H_4). Já os motores de foguete sólido (MFS) utilizam tanto o oxidante quanto o combustível na forma de um único grão de propelente sólido, enquanto que os motores de foguete líquido (MFL) utilizam oxidante e combustível líquidos armazenados em tanques separados. As três principais configurações de motores de foguete químicos são ilustradas na Figura 1.

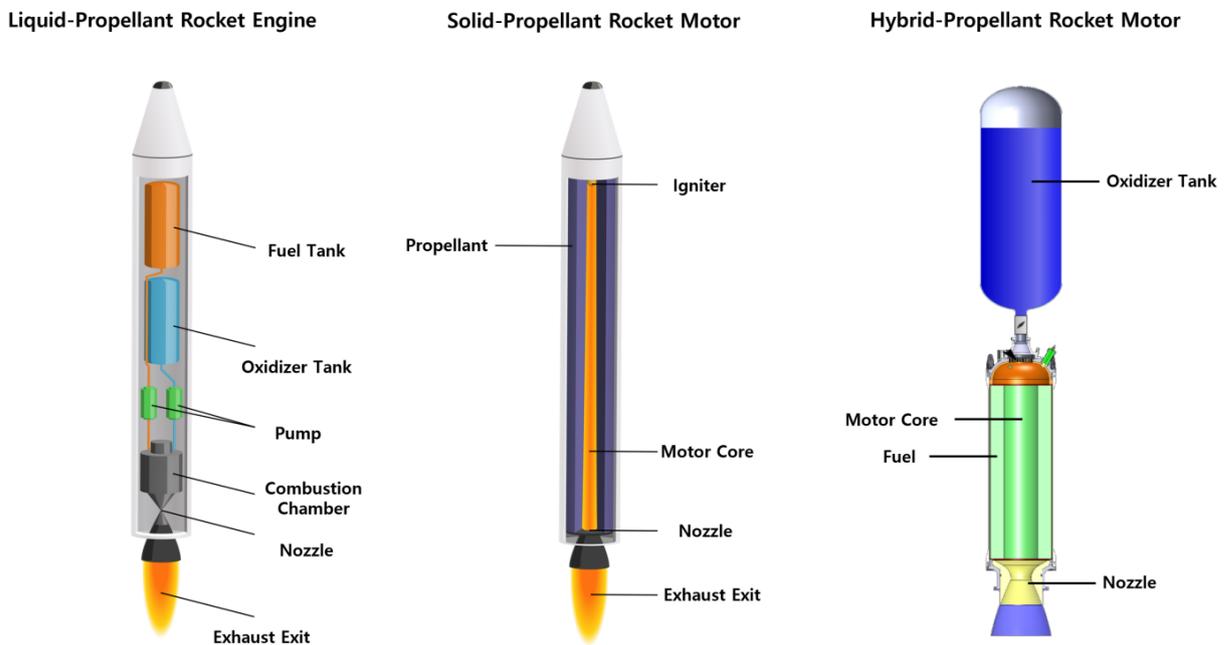


Figura 1 – Motores de foguete líquido, sólido e híbrido (CHA, 2023).

De acordo com (MAZZETTI; MEROTTO; PINARELLO, 2016) e (DAVYDENKO et al., 2006), as vantagens de se usar MFH em comparação a MFS podem ser listadas, principalmente como :

- Segurança intrínseca durante os processos de manufatura, transporte, armazenamento, testes e lançamento, devido à separação física entre o oxidante e o combustível;
- Redução de custos durante os processos de desenvolvimento, produção e operação, devido principalmente à segurança intrínseca do MFH e simplicidade de sua estrutura;
- Maior desempenho em termos de impulso específico;
- Presença de válvula que regula a vazão de oxidante, resultando em maior flexibilidade de missão e melhor acurácia em manobras orbitais;

- Maior robustez em relação ao surgimento de trincas no grão de combustível sólido, podendo resultar em menores custos em controle de qualidade do grão;
- Baixo impacto ambiental por não utilizar sais de perclorato na composição do combustível.

Já as vantagens do MFH em relação ao MFL são listadas como:

- Melhor segurança devido ao baixo risco de incêndio;
- Simplicidade de arquitetura, já que é necessário apenas um sistema de armazenamento/injeção e não necessita de um sistema de resfriamento para a câmara de combustão;
- Maior tolerância para todos os sistemas de alimentação, tanque de oxidante e grupo propulsor em geral.

Este trabalho tem como objetivo realizar a simulação do escoamento interno do MFH Sara v2 (sucessor do motor SARA v1 do qual compartilha mesma geometria interna ([SHYNKARENKO; ANDRIANOV; BERTOLDI, 2015](#))). Para alcançar tal objetivo, foram utilizados os dados do artigo coreano ([KIM; MOON; KIM, 2015](#)) como base para modelar o comportamento do grão de combustível sólido. Tais dados foram adaptados para refletir de maneira apropriada as condições de operação do motor SARA dentro do Laboratório de Propulsão Química (CPL) da UnB - FGA. Por exemplo, o tempo de operação teórico do motor utilizando os dados do grão de combustível da coreia é de cerca de 29 segundos, enquanto que testes em anos anteriores dentro do CPL utilizando um grão de combustível similar alcançaram tempos de operação na faixa de 15 segundos. As adaptações são explicadas conforme a modelagem é desenvolvida ao longo do texto.

Vale notar ainda que ao final deste trabalho é mostrado um exemplo de um teste realizado com o motor SARA v2 dentro do CPL. Tal teste não estava planejado para compor este trabalho de conclusão de curso, e portanto as condições iniciais de operação do motor difere daqueles adotados neste trabalho. Apesar das condições diferentes na qual a simulação deste trabalho é desenvolvida em comparação ao teste experimental, diversos efeitos físicos observados nas simulações também ocorreram nos testes experimentais, o que justifica sua inclusão no trabalho.

Existem diversos exemplos de pesquisas na área de simulação de MFH, como ([DEQUICK, 2022](#)), um projeto de doutorado da Universidade de Bruxelas que visa complementar os testes já existentes de MFH com simulações em CFD. Ou então, ([GIERAS; GORGERI, 2021](#)), que modela numericamente todo o processo de simulação de um MFH.

Quanto à utilização de malha dinâmica (ou algum processo dinâmico de alteração do domínio de cálculo) para computar o comportamento transiente da taxa de regressão do combustível sólido em um MFH, podem ser citados os trabalhos de ([TIAN et al., 2022](#)), ([MENG et al., 2022](#)), ([WEI et al., 2023](#)), ([MENG et al., 2023](#)) entre outros.

Algumas das características similares entre estes trabalhos são: trabalhos publicados recentemente (principalmente entre 2021 e 2023); modificam de alguma maneira a configuração padrão do grão de combustível do MFH, seja em sua geometria (como segmentação do grão (TIAN; GUO; WANG, 2015) e (TIAN; DUAN; ZHU, 2019)), método de injeção do oxidante (por exemplo, injeção rotativa (TIAN et al., 2021)), etc.

1.1 Objetivo Geral

Tem-se como objetivo geral deste trabalho, realizar a simulação com domínio variável do escoamento dentro do motor de foguete SARA, a fim de obter as propriedades dentro da câmara de combustão e tubeira ao longo do tempo.

1.2 Objetivos Específicos

- Desenvolver a programação do movimento da malha dinâmica próxima à fronteira do grão de combustível sólido, de maneira que consiga preservar as boas métricas relacionadas à qualidade da malha e que contabilize de maneira fidedigna a regressão do grão de combustível ao longo do processo de combustão;
- Configurar, executar e processar os dados da simulação da combustão no programa *Ansys Fluent*;
- Encontrar a distribuição de pressão e temperatura ao longo do tempo dentro da câmara de combustão e tubeira, a fim de decidir qual o tempo máximo de combustão o motor pode suportar sem que sua integridade física seja prejudicada.
- Comparar os resultados obtidos com a literatura e com o programa *Rocket Propulsion Analysis (RPA)*.

1.3 Motivação

Este trabalho de TCC é parte do projeto de pesquisa do motor de foguete híbrido SARA, que envolve diversos alunos de graduação em teses de TCC, projetos de iniciação científica, projetos de mestrado, etc. O projeto é desenvolvido com o apoio de profissionais e infraestrutura do *Chemical Propulsion Laboratory (CPL)* da Universidade de Brasília (UnB), com o apoio financeiro da Fundação de Apoio à Pesquisa do Distrito Federal (FAPDF, 00193-00001125/2021-33) e do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq, 405499/2022-1).

1.4 Organização

O trabalho é dividido nos seguintes capítulos:

- 1 Introdução do trabalho;
- 2 Fundamentos sobre MFH: apresenta os principais componentes e fundamentos relacionados à motores de foguetes híbridos, fornecendo ao leitor as informações necessárias para o entendimento da operação do motor;
- 3 Modelagem de escoamentos turbulentos: apresenta as leis de conservação da massa, momento e energia; descreve o modelo de turbulência $k - \omega$ SST; descreve o modelo de combustão não pré-misturado;
- 4 Malha: apresenta o processo de discretização do domínio de cálculo através de uma malha e define os modos no qual o domínio pode ser modificado ao longo da simulação, a fim de computar o processo transiente de regressão do grão sólido;
- 5 Metodologia: apresenta o passos tomados para implementar o efeito da regressão do combustível sólido na malha dinâmica, assim como configurar as condições de contorno e outros modelos da simulação;
- 6 Resultados obtidos a partir das simulações do motor SARA;
- 7 Conclusão do trabalho;

2 Fundamentos sobre MFH

A Figura 2 e a Tabela 1 mostram um esquemático dos elementos que compõem um motor de foguete híbrido convencional. Os conceitos teóricos presentes nessa seção foram baseados em (SUTTON; BIBLARZ, 2010).

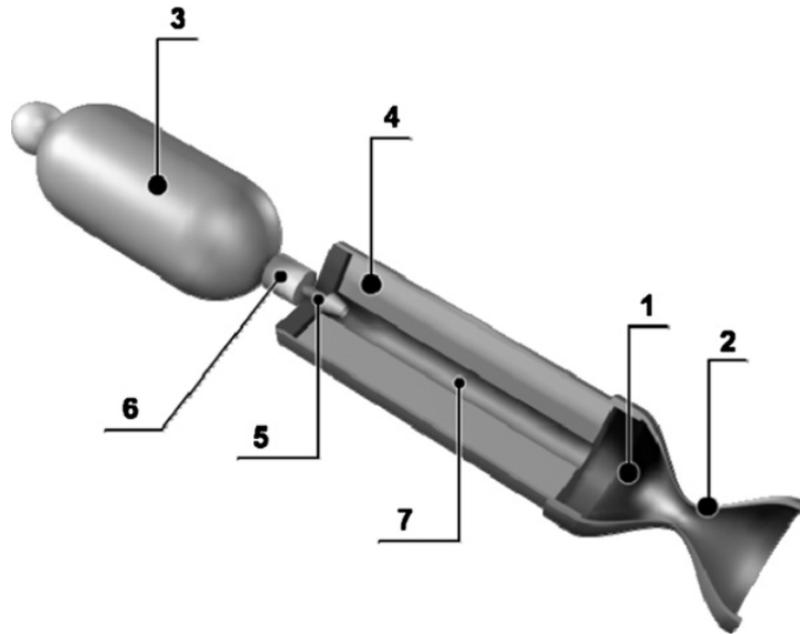


Figura 2 – Estrutura de um motor de foguete híbrido. (CHELARU; MINGIREANU, 2010).

Tabela 1 – Elementos de um MFH padrão.

Nº	Elemento
(1)	Câmara de combustão
(2)	Tubeira
(3)	Tanque de oxidante
(4)	Grão de combustível
(5)	Válvula de injeção
(6)	Cabeça da válvula injetora
(7)	Orifício de queima

Um motor de foguete híbrido (MFH), de forma geral, opera a partir da injeção de um oxidante líquido ou gasoso na câmara de combustão na qual o combustível sólido é armazenado. A injeção pode ocorrer por auto-pressurização ou por turbobombas. Na Figura 3 é mostrado a injeção do oxidante N_2O na pré-câmara de combustão através da placa injetora.

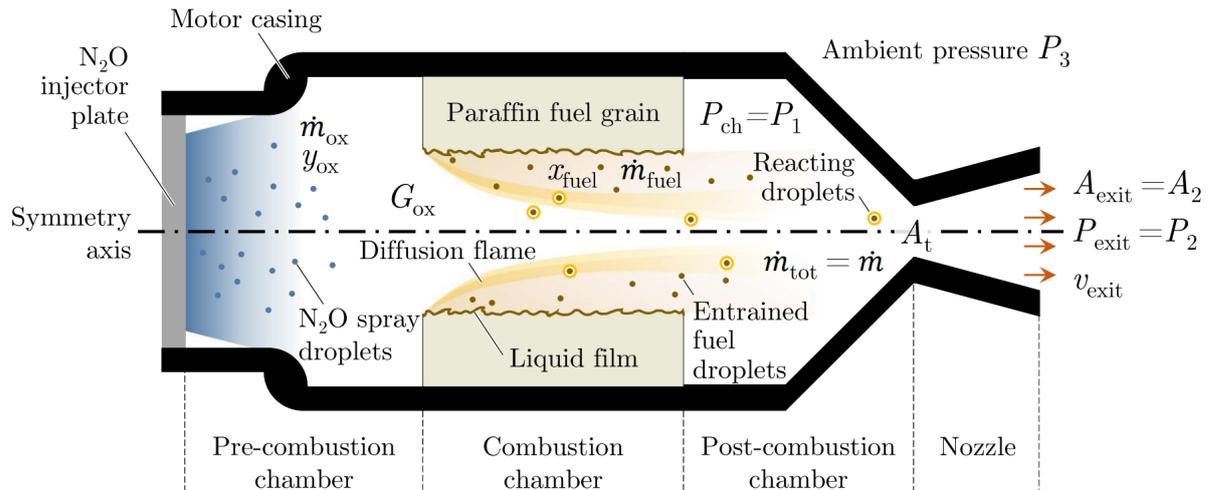


Figura 3 – Esquemático da câmara de combustão de um motor de foguete híbrido. (DEQUICK, 2022).

O processo de combustão se inicia após a ativação de um mecanismo de ignição, que fornece a quantidade de calor necessária para inflamar a região na qual o oxidante e o combustível inicialmente se encontram. O calor proveniente do processo de combustão faz com que mais combustível sólido evapore ou sublimar para a câmara de combustão, onde ele reage com o oxidante e, dessa forma, estende a área de efeito do processo de combustão para todo o comprimento do grão.

Após encerrar o processo de inflamação, o motor é dito estar em regime, isto é, o motor está operando sob condições estáveis, dentro dos parâmetros para o qual foi projetado e com todos os seus componentes operando como esperado. Quando o motor está em regime, uma chama macroscópica de difusão pode ser observada, que se inicia a montante do grão de combustível e se estende ao longo do comprimento do grão, conforme a Figura 4.

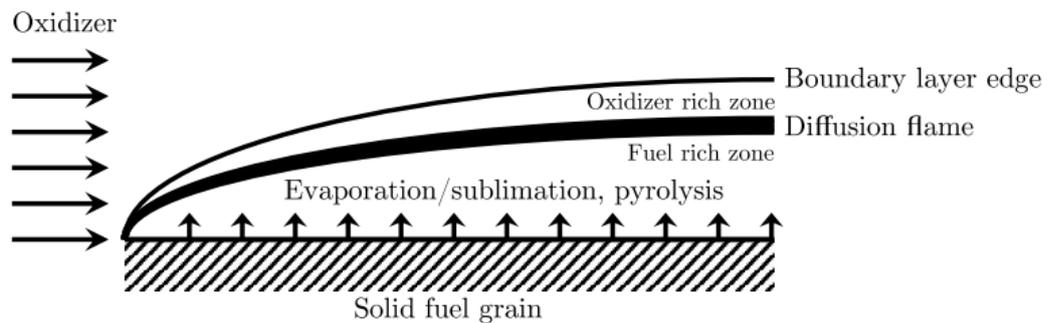


Figura 4 – Chama macroscópica de difusão (DEQUICK, 2022).

Durante o processo de combustão, os gases quentes gerados como produtos da reação escoam para a tubeira através de uma zona convergente (onde são acelerados até $Mach = 1$) e uma zona divergente ($M > 1$). O número de Mach, M , é um parâmetro adimensional que

relaciona localmente a velocidade do escoamento com a velocidade do som:

$$M = \frac{u}{a} \quad (2.1)$$

A velocidade do som a é uma função da temperatura e das propriedades do meio de propagação

$$a = \sqrt{\gamma RT} \quad (2.2)$$

onde γ é o fator de expansão isentrópico, dado pela razão dos calores específicos à pressão constante e calor específico à volume constante, $\gamma = c_p/c_v$. R é a constante do gás ideal e T é a temperatura absoluta medida em Kelvin.

Após passar pela tubeira, os gases quentes são expelidos em alta velocidade e geram uma força resultante no motor. A equação clássica do motor de foguete, dada pela Equação (2.3), relaciona a força de empuxo gerado pelo motor, F , com a vazão mássica do propelente somado ao gradiente de pressão na saída da tubeira.

$$F = \dot{m}_{tot} v_{exit} + (P_{exit} - P_3) A_{exit} \quad (2.3)$$

Na Equação (2.3) e Figura 3: \dot{m}_{tot} é a vazão mássica total do propelente, isto é, a soma das vazões mássicas do oxidante e do combustível $\dot{m}_{tot} = \dot{m}_{ox} + \dot{m}_{fuel}$; v_{exit} , P_{exit} e A_{exit} são a velocidade, pressão e área na saída da tubeira, respectivamente; e P_3 é a pressão ambiente.

A vazão mássica do combustível, \dot{m}_{fuel} , está associada à taxa de regressão do combustível sólido, \dot{r} , que por sua vez está associada à geometria do grão de combustível e ao fluxo de massa do oxidante G_{ox} a partir da Equação (2.4).

$$\dot{m}_{fuel} = \dot{r} S \rho_{fuel} \quad (2.4)$$

onde S é a área da superfície cilíndrica na qual ocorre o processo de combustão e ρ_{fuel} é a densidade do combustível sólido. Detalhes sobre o cálculo da taxa de regressão do combustível, \dot{r} , são apresentados na Seção 2.1.

Um importante parâmetro para o cálculo da performance de um MFH é o impulso específico I_s (unidades em segundos), que mede a quantidade de impulso gerado por um motor por unidade de peso de propelente.

$$I_s = \frac{\int_0^t F dt}{g_0 \int_0^t \dot{m} dt} \quad (2.5)$$

onde g_0 é o valor da aceleração da gravidade a nível do mar, $g_0 = 9,8066 \text{ m/s}^2$. Para uma vazão de massa constante \dot{m} , empuxo constante F e curtos (negligenciáveis) períodos de partida e parada do motor, a Equação (2.5) pode ser escrita como:

$$I_s = \frac{F}{\dot{m} g_0} \quad (2.6)$$

A Equação (2.6) deixa evidente que o impulso específico é um parâmetro que mede a eficiência de um motor de foguete, isto é, I_s mede quanto de força é gerada pela exaustão de uma unidade de peso de combustível por unidade de tempo. Uma analogia ao impulso específico é a “quilometragem por litro” que um automóvel faz, quanto maior é seu valor, maior é a eficiência do motor/veículo.

2.1 Taxa de regressão do combustível sólido

A taxa de regressão, \dot{r} , é a taxa na qual o raio interno do grão de combustível sólido é aumentado por unidade de tempo (ver Figura 5). O fenômeno de regressão do combustível ocorre pela fusão ou sublimação do sólido após absorver energia em forma de calor do processo de combustão.

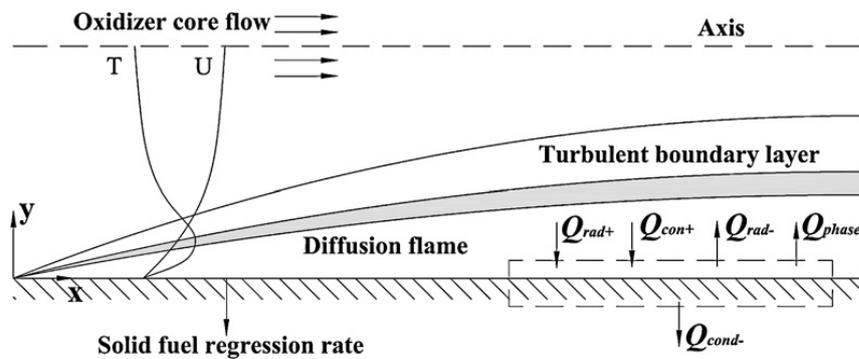


Figura 5 – Esquemático da taxa de regressão (CAI et al., 2011).

A taxa de regressão do combustível sólido pode ser dada pela Equação (2.7) (ZILLIAC; KARABEYOGLU, 2006), onde G_{ox} , dado pela Equação (2.8), é o fluxo de massa do oxidante e x é a distância sobre o comprimento do grão, a partir do final da pré-câmara de combustão. Além disso, a barra sobre as variáveis representa sua média espacial e os coeficientes a , n e m são constantes que dependem das propriedades do combustível, medidos experimentalmente.

$$\bar{r} = a \bar{G}_{ox}^n \bar{x}^m \quad (2.7)$$

$$G_{ox} = \frac{\dot{m}}{\pi r^2} \quad (2.8)$$

Conforme explicitado da introdução deste trabalho, os dados pertinentes às propriedades do combustível sólido foram obtidos de (KIM; MOON; KIM, 2015), para o qual os valores experimentais dos coeficientes a e n para uma mistura de 95% parafina e 5% polietileno são, respectivamente, 0,234 e 0,37. Já o valor da vazão mássica do oxidante \dot{m}_{ox} é definida a partir da condição de operação de projeto do motor SARA v2, como constante e igual a $\dot{m}_{ox} = 0,38\text{kg/s}$. Além disso, os raios inicial e final do grão de combustível sólido são 25mm e 60mm, respectivamente. Tais raios são os valores pretendidos para a operação do motor de foguete SARA.

Será considerado neste trabalho que a taxa de regressão sobre a superfície do propelente não varia ao longo de seu comprimento, isto é, $m = 0$. Substituindo a Equação (2.8) na Equação (2.7), obtemos a Equação Diferencial Ordinária (EDO), Equação (2.9), que pode ser resolvida numericamente para se obter o raio do grão e a taxa de regressão em função do tempo (Apêndice A).

$$\frac{dr}{dt} = a \left(\frac{\dot{m}_{ox}}{\pi r^2} \right)^n \quad (2.9)$$

O raio do grão em função do tempo do motor de foguete SARA é mostrado na Figura 6. Além disso, é possível se esperar que o processo completo de queima do grão sólido ocorra em aproximadamente 29 segundos. Apesar da queima completa do grão acontecer, em teoria, em 29 segundos, este trabalho realiza a simulação de operação do motor para 15 segundos. Esta redução do tempo é devido ao tempo de operação máximo pretendido para o motor SARA v2.

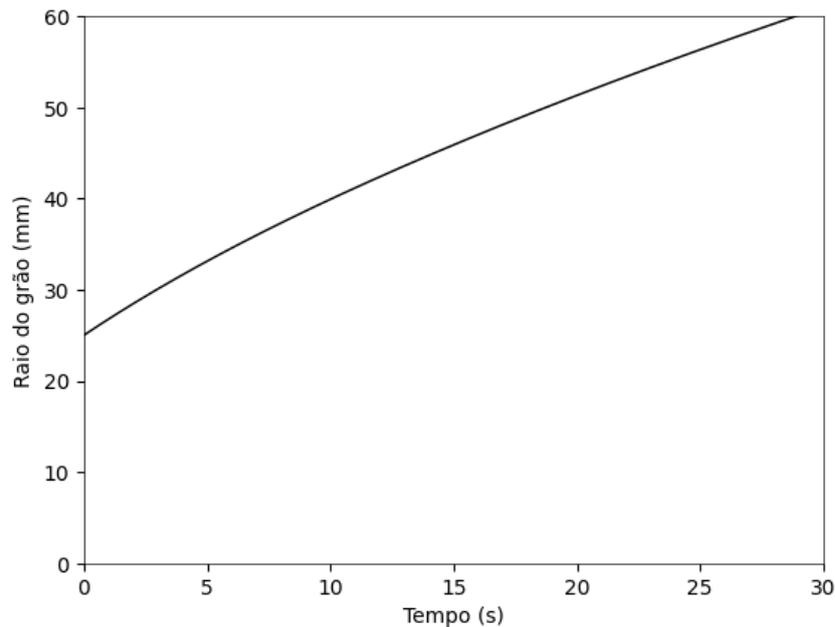


Figura 6 – Raio do grão de combustível em função do tempo

Utilizando os valores calculados numericamente para o raio r do grão de combustível, em conjunto com a Equação (2.9), foram obtidos os valores da taxa de regressão do grão em função do tempo, $\dot{r}(t)$, mostrados na Figura 7.

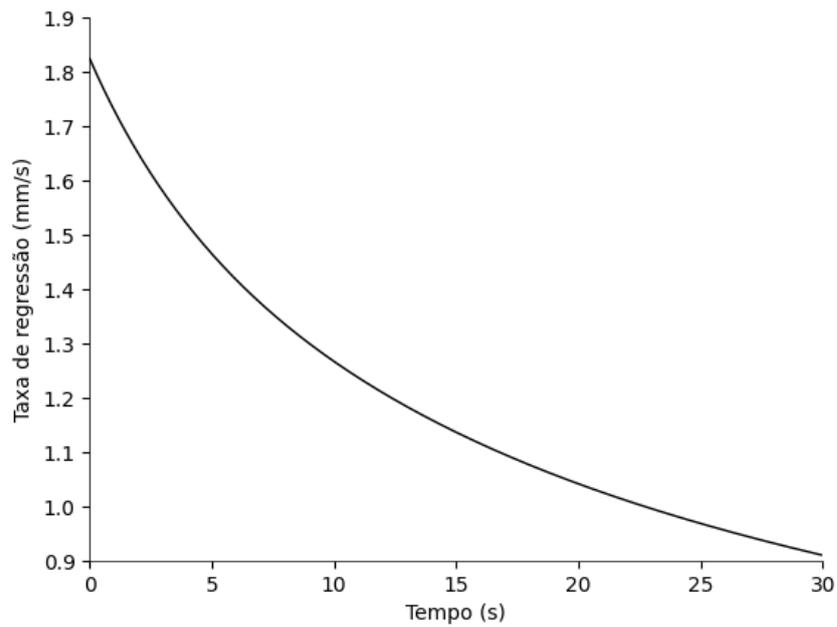


Figura 7 – Taxa de regressão do grão de combustível em função do tempo

A fim de utilizar os valores calculados para r e \dot{r} nas funções do *Ansys Fluent* (*user defined functions*), os valores plotados nas Figuras 6 e 7 foram ajustados às curvas polinomiais das Equações (2.10) e (2.11), respectivamente. Tais equações foram encontradas a partir de um algoritmo de ajuste de curvas de quarta ordem, onde o ajuste de r teve um erro máximo de 1,68% e o ajuste de \dot{r} teve erro máximo de 0,62%.

$$r(t) \approx -9.760 \cdot 10^{-9}t^4 + 8.888 \cdot 10^{-7}t^3 - 3.738 \cdot 10^{-5}t^2 + 1.784 \cdot 10^{-3}t + 0.025 \quad (2.10)$$

$$\dot{r}(t) \approx 1.714 \cdot 10^{-6}t^4 - 1.421 \cdot 10^{-4}t^3 + 4.705 \cdot 10^{-3}t^2 - 8.946 \cdot 10^{-2}t + 1.813 \quad (2.11)$$

3 Modelagem de escoamentos turbulentos

3.1 Leis de conservação

Assumindo que as fases do fluido dentro do motor híbrido são contínuas, de acordo com (ANDERSON, 2017) e (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007), as equações de conservação da massa, do momento e da energia podem ser encontradas ao se aplicar a equação geral do transporte

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\vec{u}\phi) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) + S_\phi \quad (3.1)$$

onde ϕ descreve alguma propriedade extensiva de um volume de controle arbitrário, estacionário e não-deformável.

Da esquerda para a direita, os termos na Equação (3.1) representam as porções transiente, convectiva, difusiva e fonte, respectivamente. Além disso, \vec{u} é a velocidade do fluido, Γ é a difusividade e S_ϕ é a contração de todos os termos responsáveis pela fonte da propriedade ϕ .

3.1.1 Conservação da massa

Se a propriedade na qual a Equação (3.1) for aplicada for a massa, então $\phi = 1$ (massa por unidade de massa) e $\Gamma = S = 0$, resultando em

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u}) = 0 \quad (3.2)$$

também conhecida como a equação da continuidade.

3.1.2 Conservação do momento

Se a propriedade aplicada na Equação (3.1) for o momento, então $\phi = \vec{u}$ (momento por unidade de massa), resultando

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (3.3)$$

onde Γ está associada com a viscosidade do fluido e a equação está escrita em notação indicial (ou notação de Einstein). A parte da direita desta equação é o divergente do tensor de tensões, que pode ser escrito como uma pressão hidrostática somada à um componente de desvio

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \tau_{ij} \quad (3.4)$$

Para fluidos isotrópicos, homogêneos, Newtonianos e Stokianos, pode ser demonstrado que

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (3.5)$$

onde μ é a viscosidade do fluido. A Equação (3.4) também é chamada de equação de Navier-Stokes.

3.1.3 Conservação da energia

A terceira equação de conservação é a conservação da energia total e_0 , dada pela soma da energia interna e e energia cinética

$$e_0 = e + \frac{1}{2}u_k u_k \quad (3.6)$$

Substituindo a Equação (3.6) na Equação (3.1), obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_0) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho e_0 u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial e_0}{\partial x_j} \right) + S_e \quad (3.7)$$

onde Γ está associado com a condução térmica e a fonte de energia S_e está associada, por exemplo, à energia gerada no processo de combustão. A Equação (3.7) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_0) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho e_0 u_j) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(u_j P) + \frac{\partial}{\partial x_j}(u_i \tau_{ij}) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + S_e \quad (3.8)$$

onde λ é a condutividade térmica.

Para completar o conjunto de Equações Diferenciais Parciais (EDPs) que descrevem o escoamento, as seguintes equações são válidas para gases ideais

$$P = \rho R T \quad \gamma = \frac{c_p}{c_v} \quad e = c_v T \quad c_p - c_v = R \quad (3.9)$$

3.2 Turbulência

Existem dois tipos básicos de escoamentos viscosos: o escoamento laminar, no qual as linhas de corrente são suaves e regulares e um elemento de fluido se move suavemente ao longo de uma linha de corrente; e o escoamento turbulento, no qual as linhas de corrente se quebram e um elemento fluido se move de maneira aleatória, irregular e tortuosa.

A Figura 8 mostra um exemplo de escoamento que transiciona do regime laminar para o regime turbulento. O escoamento, inicialmente laminar, passa por uma zona de transição, onde diversos vórtices são formados, quebrando a estrutura regular e suave que caracteriza o regime laminar. Essa transição ocorre até que o escoamento finalmente se torne completamente caótico e, portanto, turbulento.

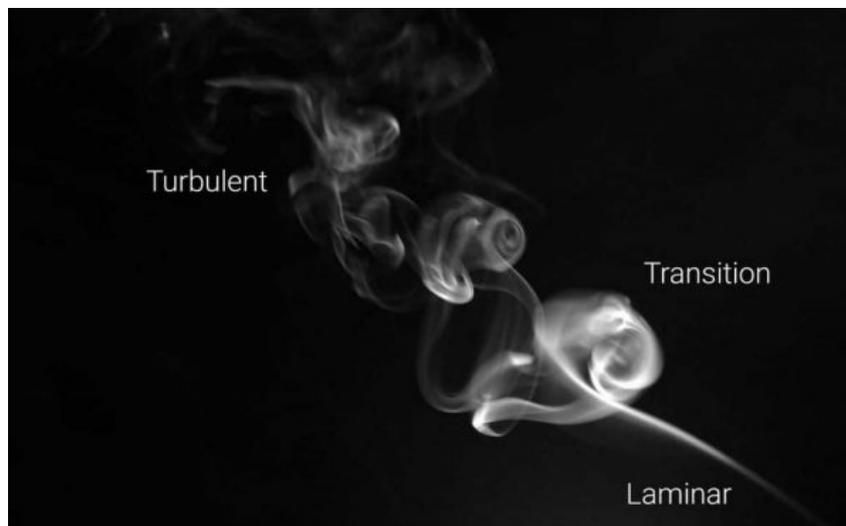


Figura 8 – Exemplo de escoamento turbulento.

O número de Reynolds é um valor adimensional de grande importância no estudo da dinâmica dos fluidos. Se o valor de Re for alto (como regra geral, $Re > 5 \times 10^5$), as forças inerciais são dominantes e o escoamento é turbulento. Caso contrário, as forças viscosas são dominantes e o escoamento é laminar. O número de Reynolds é definido como

$$Re = \frac{\rho u c}{\mu} \quad (3.10)$$

onde c é o comprimento característico da geometria de estudo (por exemplo, diâmetro de um círculo ou comprimento de uma placa plana).

Apesar da turbulência ser um fenômeno comumente encontrado na natureza, a modelagem da turbulência ainda é um problema em aberto que tem se provado ser de grande complexidade e, até o momento de escrita deste trabalho, não há nenhuma previsão de solução. As teorias que circundam o tema são extensas e exigem um estudo aprofundado, o que foge do escopo deste trabalho e, portanto, não serão abordadas. Caso o leitor tenha interesse em uma análise teórica mais profunda sobre o tema, é recomendado a leitura das referências (CEBECCI; SMITH, 1974),

(SCHLICHTING, 1979) e (WHITE, 1974). Dessa forma, o restante desta seção se concentra em descrever como é feito o cálculo da turbulência pelo programa *Ansys Fluent*.

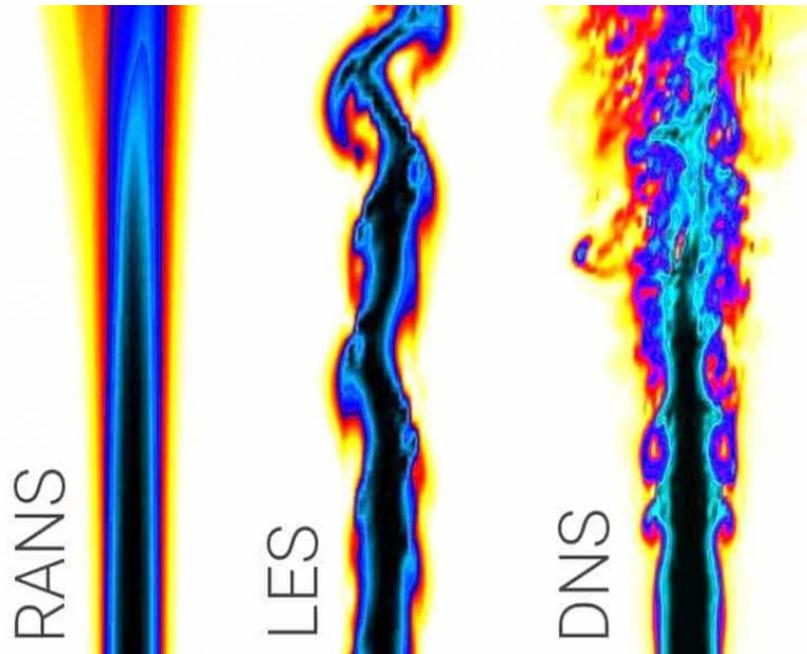


Figura 9 – Modelos de Turbulência

As três principais modelagens numéricas do escoamento podem ser descritas como (ver Figura 9):

- *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS): O modelo RANS é uma abordagem de modelagem que faz a média das equações de Navier-Stokes ao longo do tempo, removendo as flutuações turbulentas em pequena escala. Os efeitos turbulentos são modelados usando equações adicionais, como as equações da média de Reynolds. O RANS é computacionalmente menos dispendioso que o DNS, mas introduz modelos de turbulência baseados em certas suposições sobre o escoamento.
- *Large Eddy Simulation* (LES): O modelo LES resolve as estruturas turbulentas de grande escala no fluxo enquanto modela as escalas menores. É uma abordagem intermediária entre a DNS e o RANS. O modelo LES é computacionalmente mais eficiente que o DNS e consegue capturar características importantes de fluxos turbulentos que o modelo RANS não consegue.
- *Direct Numerical Simulation* (DNS): No modelo DNS, a simulação resolve todas as escalas do movimento do fluido. Isso significa que as vorticidades turbulentas grandes e pequenas são simuladas diretamente, sem modelagem. A modelagem DNS é computacionalmente cara e é geralmente usada para pesquisa acadêmica ou casos em que é necessária uma precisão muito alta.

Dentro do escopo deste trabalho, a simulação RANS, geralmente empregada em trabalhos de engenharia, é a mais adequada e será a opção utilizada. Em um trabalho futuro, caso se mostre necessário o detalhamento da simulação a fim de contabilizar os efeitos turbulentos em menores escalas, uma simulação LES poderá ser desenvolvida utilizando a simulação deste trabalho como base.

3.2.1 Média de Reynolds

Na média de Reynolds, as variáveis da solução que integram as equações de Navier-Stokes em sua forma instantânea (exata) são decompostas em componentes médios (média de um conjunto ou média temporal) e componentes flutuantes. Para os componentes da velocidade:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (3.11)$$

onde \bar{u}_i e u'_i são os componentes médio e flutuante, respectivamente ($i = 1, 2, 3$). De forma semelhante, para outras quantidades escalares:

$$\varphi = \bar{\varphi} + \varphi' \quad (3.12)$$

onde φ denota um escalar, como por exemplo a pressão, energia, concentração das espécies químicas, etc.

Substituindo as Equações (3.11) e (3.12) nas equações da continuidade e conservação do momento instantâneas e tomando uma média temporal ou do conjunto de dados (e omitindo a barra sobre os componentes médios) resulta nas equações do momento médias, que podem ser escritas em coordenadas cartesianas tensoriais como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\overline{\rho u'_i u'_j} \right) \quad (3.14)$$

As Equações (3.13) e (3.14) são chamadas de equações de Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS). Elas têm a mesma forma geral que as equações de Navier-Stokes instantâneas, na qual a velocidade e outras variáveis da solução representam a média temporal ou a média de um conjunto. Um termo adicional aparece, representando o efeito da turbulência, $-\overline{\rho u'_i u'_j}$. Este termo, chamado de tensão de Reynolds, deve ser modelado utilizando algum modelo de turbulência.

Para escoamentos com densidade variável, as Equações (3.13) e (3.14) podem ser interpretadas como equações de Favre-averaged Navier-Stokes (HINZE, 1975), com as velocidades representando valores médios de massa. Dessa forma, tais equações podem ser aplicadas à escoamentos com densidade variável.

3.2.2 Modelo $k - \omega$ SST

Dentre os modelos de turbulência que podem ser empregados numa simulação do tipo RANS (por exemplo, $k - \epsilon$, Spart-Allmaras, RSM, etc.), o modelo $k - \omega$ SST é aquele que foi utilizado neste trabalho.

O modelo $k - \omega$ SST é um modelo empírico baseado no modelo das equações de transporte para energia cinética de turbulência (k) e taxa de dissipação específica (ω) (WILCOX, 1998). Os valores para k e ω são obtidos a partir da aplicação e solução das equações de transporte (Equação (3.1)) com $\phi = k$ e $\phi = \omega$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k - Y_k + S_k + G_b \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \omega u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + G_\omega - Y_\omega + S_\omega + G_{\omega b} \quad (3.16)$$

Nas Equações (3.15) e (3.16): G_k representa a geração de energia cinética turbulenta a partir de gradientes de velocidades médios; G_ω representa a geração de ω ; Γ_k e Γ_ω representam a difusividade de k e ω , respectivamente; Y_k e Y_ω representam a dissipação de k e ω devido ao fenômeno de turbulência. S_k e S_ω são termos de fonte definidos pelo usuário; G_b e $G_{\omega b}$ contabilizam os efeitos de empuxo.

3.3 Combustão

De acordo com o manual do *Ansys*, (ANSYS, 2020), a base da abordagem de modelagem não pré-misturada é que, sob um determinado conjunto de suposições simplificadoras, o estado termoquímico instantâneo do fluido está relacionado a uma quantidade escalar conservada conhecida como fração de mistura (*mixture fraction*), f . A fração de mistura pode ser expressa em termos da fração de massa atômica como

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,ox}}{Z_{i,comb} - Z_{i,ox}} \quad (3.17)$$

onde Z_i é a fração de massa elementar para o elemento i . O subscrito “ox” denota o valor na entrada da corrente de oxidante, e o subscrito “comb” denota o valor na entrada da corrente de combustível. Se os coeficientes de difusão de todas as espécies forem iguais, então a Equação (3.17) é idêntica para todos os elementos, e a definição da fração de mistura é única. A fração de mistura é, portanto, a fração de massa elementar que se originou da corrente de combustível.

3.3.1 Equações de transporte para a Fração de Mistura

Sob a suposição de difusividades iguais, as equações das espécies podem ser reduzidas a uma única equação para a fração de mistura, f . Os termos de fonte de reação nas equações das espécies se cancelam (uma vez que os elementos são conservados em reações químicas), e, portanto, f é uma quantidade conservada. Embora a suposição de difusividades iguais seja problemática para escoamentos laminares, ela é geralmente aceitável para escoamentos turbulentos, onde a convecção turbulenta supera a difusão molecular. A equação da fração de mistura média de Favre (ponderada pela densidade) é

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{f}) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{f}) = \nabla \cdot \left(\left(\frac{k}{c_p} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \nabla \bar{f} \right) + S_m + S_{user} \quad (3.18)$$

onde k é a condutividade térmica laminar da mistura, c_p é o calor específico da mistura, σ_t é o número de Prandtl, e μ_t é a viscosidade turbulenta.

O termo de fonte S_m é devido exclusivamente à transferência de massa para a fase gasosa a partir de gotículas de combustível líquido ou partículas reagentes (por exemplo, óxido nítrico N_2O). S_{user} é qualquer termo de fonte definido pelo usuário.

Além de resolver para a fração de mistura média de Favre, o *Ansys Fluent* resolve uma equação de conservação para a variância da fração de mistura, $\overline{f'^2}$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \overline{f'^2}) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \overline{f'^2}) = \nabla \cdot \left(\left(\frac{k}{c_p} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \nabla \overline{f'^2} \right) + C_g \mu_t \cdot (\nabla \bar{f})^2 - C_d \rho \frac{\varepsilon}{k} \overline{f'^2} + S_{user} \quad (3.19)$$

onde $f' = f - \bar{f}$, $C_g = 2,86$ e $C_d = 2,0$.

3.3.2 Fração de mistura vs Razão de equivalência

A definição da fração de mistura pode ser compreendida em relação a medidas comuns de sistemas de reação. Considere um sistema de combustão simples envolvendo uma corrente de combustível F , uma corrente de oxidante O e uma corrente de produtos P , representado simbolicamente em condições estequiométricas como



onde r é a razão ar-combustível em termos de massa. Denotando a razão de equivalência como Φ , onde

$$\Phi = \frac{(\text{comb/ar})_{\text{real}}}{(\text{comb/ar})_{\text{estequiométrico}}} \quad (3.21)$$

A reação na Equação (3.21), sob condições de mistura mais gerais, pode então ser escrita como



Observando o lado esquerdo da Equação (3.22), a fração de mistura para o sistema como um todo pode então ser deduzida como

$$f = \frac{\Phi}{\Phi + r} \quad (3.23)$$

A Equação (3.23) permite o cálculo da fração de mistura em condições estequiométricas ($\Phi = 1$), em condições ricas em combustível ($\Phi > 1$) ou em condições pobres em combustível ($\Phi < 1$).

A vantagem da abordagem de modelagem da fração de mistura é que a química é reduzida a uma ou duas frações de mistura conservadas. Sob a suposição de equilíbrio químico, todos os escalares termoquímicos (frações de espécies, densidade e temperatura) estão unicamente relacionados às frações de mistura.

Para uma única fração de mistura em um sistema adiabático, os valores instantâneos de frações de massa, densidade e temperatura dependem exclusivamente da fração de mistura instantânea, f :

$$\phi_i = \phi_i(f) \quad (3.24)$$

onde ϕ_i representa a fração de massa das espécies, densidade ou temperatura instantâneas. No caso de sistemas não adiabáticos, o efeito da perda/ganho de calor é parametrizado como

$$\phi_i = \phi_i(f, H) \quad (3.25)$$

onde H é a entalpia instantânea.

3.3.3 Função densidade de probabilidade

A Função Densidade de Probabilidade, escrita como $p(f)$, pode ser entendida como a fração de tempo que o fluido passa nas proximidades do estado f . A Figura 10 mostra o traçado temporal da fração de mistura em um ponto no escoamento (lado direito) e a função densidade de probabilidade de f (lado esquerdo). O valor flutuante de f , representado no lado direito da Figura 10, passa uma fração de tempo no intervalo denotado como Δf . $p(f)$, traçado no lado esquerdo, assume valores tais que a área sob sua curva na faixa denotada, Δf , é igual à fração de tempo que f passa nesse intervalo. Escrito matematicamente,

$$p(f)\Delta f = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_i \tau_i \quad (3.26)$$

onde T é a escala de tempo e τ_i é a quantidade de tempo que f passa na faixa Δf . A forma da função $p(f)$ depende da natureza das flutuações turbulentas em f . Na prática, $p(f)$ é desconhecida e é modelada como uma função matemática que aproxima as formas reais de PDF's observadas experimentalmente.

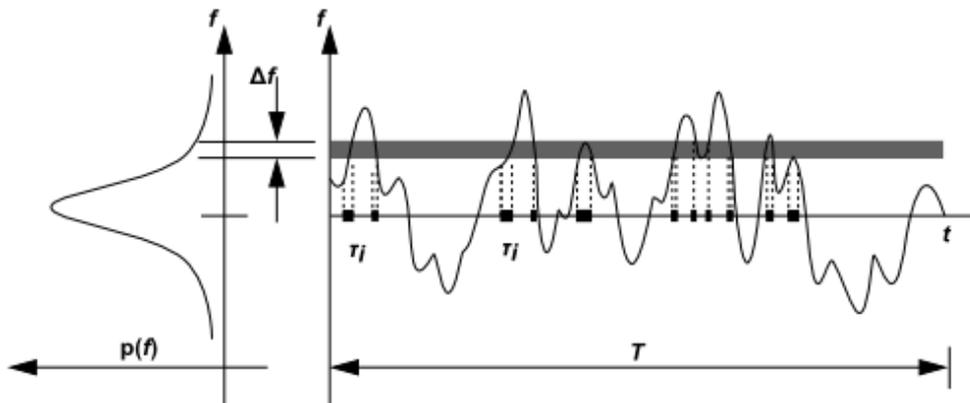


Figura 10 – Descrição gráfica da função densidade de probabilidade.

A função densidade de probabilidade $p(f)$, que descreve as flutuações temporais de f no escoamento turbulento, pode ser utilizada para calcular valores médios de variáveis que dependem de f . As frações de massa das espécies e a temperatura médias ponderadas pela densidade podem ser calculadas (em sistemas adiabáticos) como

$$\bar{\phi}_i = \int_0^1 p(f)\phi_i(f)df. \quad (3.27)$$

Da mesma forma, a densidade média do fluido ao longo do tempo, $\bar{\rho}$, pode ser calculada como

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \int_0^1 \frac{p(f)}{\rho(f)}df. \quad (3.28)$$

Muitos sistemas reagentes envolvem transferência de calor através de fronteiras de parede, gotículas e/ou partículas. Em tais escoamentos, o estado termoquímico local não está mais

relacionado apenas à fração de mistura f , mas também à entalpia H . A entalpia do sistema impacta o cálculo do equilíbrio químico, a temperatura e as espécies no escoamento reagente. Conseqüentemente, mudanças na entalpia devido à perda de calor devem ser consideradas ao calcular os escalares a partir da fração de mistura, como na Equação (3.25).

Em tais sistemas não adiabáticos, as flutuações turbulentas devem ser consideradas por meio de uma PDF conjunta, $p(f, H)$. No entanto, o cálculo de $p(f, H)$ não é prático para a maioria das aplicações de engenharia. O problema pode ser simplificado significativamente assumindo que as flutuações de entalpia são independentes do nível de entalpia (ou seja, as perdas de calor não impactam significativamente as flutuações turbulentas de entalpia). Com essa suposição, os escalares médios são calculados como

$$\bar{\phi}_i = \int_0^1 \phi_i(f, H) p(f) df \quad (3.29)$$

A determinação de $\bar{\phi}_i$ em um sistema não adiabático, portanto, requer a solução da equação de transporte modelada para a entalpia média:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{H}) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{H}) = \nabla \cdot \left(\frac{k_t}{c_p} \nabla \bar{H} \right) + S_h \quad (3.30)$$

onde S_h considera os termos fonte devido à radiação, transferência de calor para as fronteiras de parede e troca de calor com a fase dispersa.

3.3.4 Tabulação química

Para um caso de equilíbrio adiabático com uma única fração de mistura, a temperatura média, densidade e fração de espécies são funções apenas de f e f'^2 . Um tempo de computação significativo pode ser economizado calculando essas integrais uma vez, armazenando-as em uma tabela de consulta e recuperando-as durante a simulação no *Ansys Fluent*.

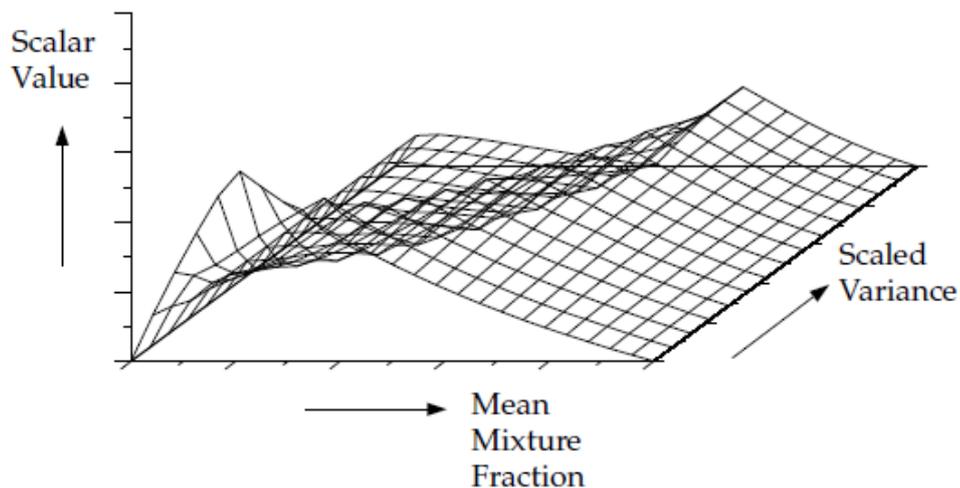


Figura 11 – Tabela PDF para escoamento adiabático.

A Figura 11 ilustra o conceito das tabelas de consulta geradas para um sistema de uma única fração de mistura. Dado o valor previsto pelo *Ansys Fluent* para f e $\overline{f'^2}$ em um ponto no domínio do escoamento, o valor médio das frações de massa, densidade ou temperatura ($\overline{\phi_i}$) naquele ponto pode ser obtido por interpolação na tabela.

Em sistemas não adiabáticos, onde a entalpia não está linearmente relacionada à fração de mistura, mas depende também da transferência de calor para as paredes e/ou radiação, é necessária uma tabela de consulta para cada valor possível de entalpia no sistema. O resultado, para sistemas de uma única fração de mistura, é uma tabela de consulta tridimensional, como ilustrado na Figura 12, que consiste em camadas de tabelas bidimensionais, cada uma correspondendo a uma perda ou ganho de calor normalizado. A primeira camada corresponde à máxima perda de calor do sistema, a última camada corresponde ao máximo ganho de calor para o sistema, e a camada de zero perda/ganho de calor corresponde à tabela adiabática. Camadas interpoladas entre as camadas adiabática e máxima correspondem a ganho de calor, e aquelas interpoladas entre a camada adiabática e a mínima correspondem a perda de calor.

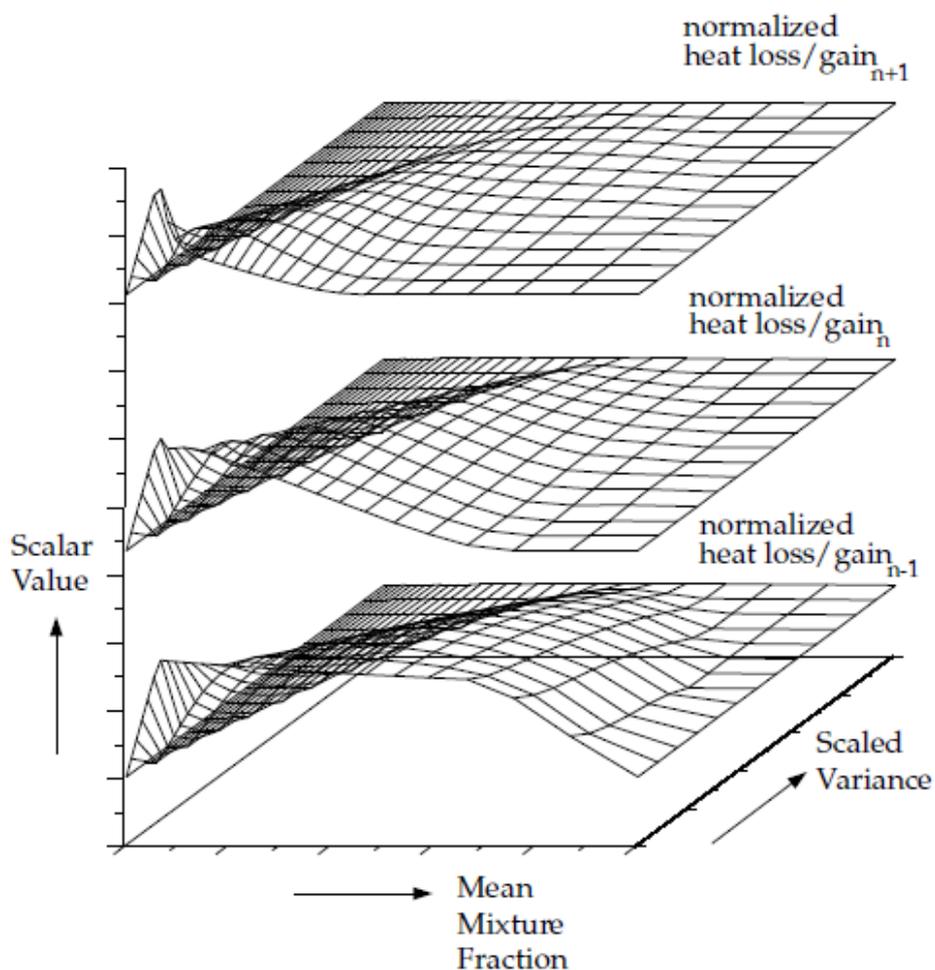


Figura 12 – Tabela PDF para escoamento não-adiabático.

4 Malha

A malha em uma simulação de CFD é a representação discreta de um uma geometria ou domínio contínuo. A malha divide o domínio em pequenos elementos, permitindo que uma solução numérica seja obtida a partir das equações que governantes aplicadas nesses pequenos elementos.

4.1 Parâmetros de qualidade de malha

De acordo com (KNUPP, 2007), o tema “Qualidade de Malha” diz respeito às características de uma malha que permitem que uma simulação numérica particular composta por Equações Diferenciais Parciais (EDPs) possa ser performada de maneira eficiente, com fidelidade à física subjacente, e com a acurácia requerida pelo problema. Dessa forma, se mostra necessário definir parâmetros para medir a qualidade da malha adotada para a resolução do problema deste trabalho. As métricas adotadas foram o parâmetro de assimetria e o detalhamento da camada limite (y^+).

4.1.1 Assimetria

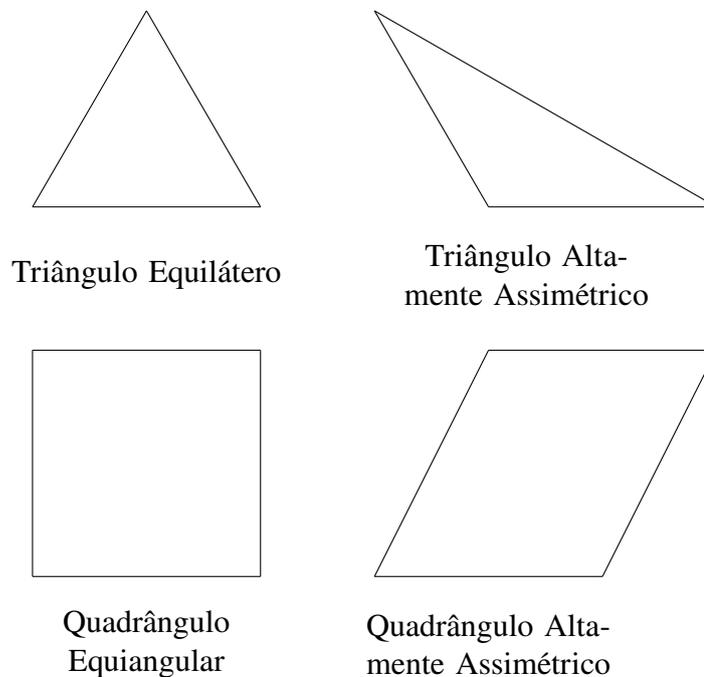


Figura 13 – Exemplos de assimetria.

O parâmetro de assimetria determina o quão próximo do ideal (equilátero ou equiângulo) são as faces de uma célula. Quanto mais próximo de zero é o valor da assimetria, melhor é

a qualidade da malha, isso porque as equações sendo resolvidas pelo software *Ansys Fluent* assumem que as células são relativamente equiláteras/equiangulares.

O cálculo da assimetria pode ser feito a partir de dois métodos:

- Assimetria baseada no volume equilátero, aplicada apenas em triângulos e tetraedros

$$\text{Assimetria} = \frac{\text{Tamanho de Célula Otimizado} - \text{Tamanho da Célula}}{\text{Tamanho de Célula Otimizado}} \quad (4.1)$$

onde o tamanho de célula otimizado é o tamanho de uma célula equilátera com o mesmo raio circunscrito.

- Assimetria baseada no desvio relativo ao ângulo equilátero normalizado, podendo ser aplicada em qualquer formato de célula ou face

$$\text{Assimetria} = \max \left[\frac{\theta_{\max} - \theta_e}{180 - \theta_e}, \frac{\theta_e - \theta_{\min}}{\theta_e} \right] \quad (4.2)$$

onde θ_{\max} é o maior ângulo na face ou célula, θ_{\min} é o menor ângulo na face ou célula e θ_e é ângulo para uma face/célula equiangular (por exemplo, 90° para quadrado, 60° para triângulo).

A Figura 13 mostra exemplos de células que são consideradas de alta qualidade (esquerda) e baixa qualidade (direita). Já a Tabela 2 define qualitativamente a qualidade da malha a partir do valor da assimetria.

Tabela 2 – Qualidade de malha por critério de assimetria.

Valor da assimetria	Qualidade da célula
1	Degenerado
$0.90 - < 1$	Ruim
$0.75 - 0.9$	Pobre
$0.50 - 0.75$	Aceitável
$0.25 - 0.50$	Bom
$> 0 - 0.25$	Excelente
0	Equilátero

4.1.2 Detalhamento da camada limite

Devido à efeitos viscosos, os gradientes de velocidade, temperatura, etc, próximos à interface da parede com o escoamento, são grandes (WHITE, 2016). Dessa forma, se mostra necessário construir uma malha suficientemente refinada próxima à parede para obter uma boa acurácia no cálculo desses gradientes, conforme mostrado na Figura 14.

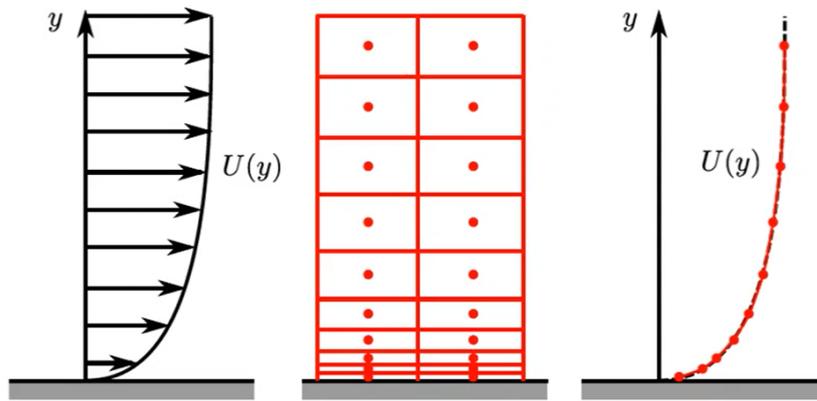


Figura 14 – Refinamento de malha próximo à parede.

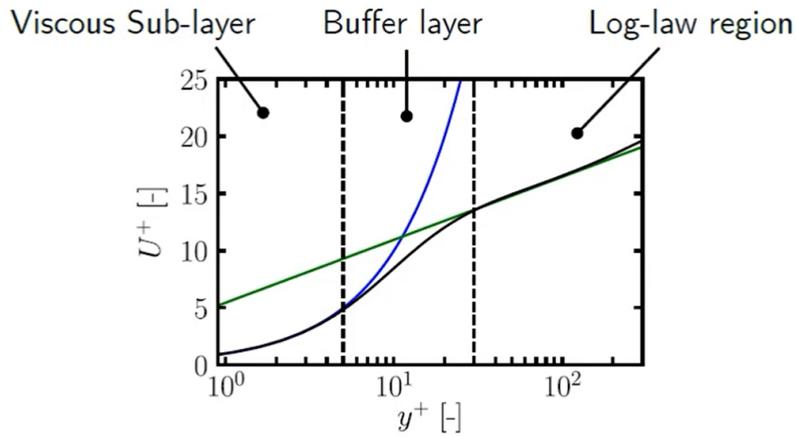


Figura 15 – U^+ vs y^+ .

De acordo com (BREDBERG, 2000), as funções de parede padrões são dadas pela Equação (4.3)

$$\begin{cases} U^+ = y^+ & y^+ < 5 \\ U^+ = \frac{1}{\kappa} \log(Ey^+) & 30 < y^+ < 200 \end{cases} \quad (4.3)$$

onde κ e E são coeficientes empíricos que valem 0.4187 e 9.793, respectivamente. Além disso, y^+ é a distância adimensional normal à parede, U^+ é a velocidade adimensional e u_τ é a velocidade de referência baseada na tensão de cisalhamento da parede, τ_w (uma vez que a velocidade na parede é zero)

$$y^+ = \frac{yu_\tau}{\nu} \quad U^+ = \frac{u}{u_\tau} \quad u_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho} \quad (4.4)$$

Neste trabalho, foi adotado como critério de avaliação da qualidade da malha, valor de y^+ menor que ou igual à 2,5 ao longo das paredes da geometria e 20 ao longo da tubeira. Dessa forma, a malha inicial deve conter y^+ adequado e o movimento dinâmico da malha não deve interferir no detalhamento perto da fronteira.

4.2 Malha Dinâmica

Neste trabalho, a malha dinâmica será adotada para contabilizar os efeitos de queima e regressão do grão de combustível sólido, isto é, conforme a combustão ocorre, o raio do grão irá diminuir de acordo com a taxa regressão \dot{r} calculada na Seção 2.1.

4.2.1 Equação de conservação em malha dinâmica

A forma integral em uma malha dinâmica da equação de conservação de um escalar qualquer ϕ , em um volume de controle arbitrário V , cuja fronteira está se movendo, pode ser escrita da seguinte maneira

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho\phi dV + \int_{\partial V} \rho\phi(\vec{u} - \vec{u}_g) \cdot d\vec{A} = \int_{\partial V} \Gamma \nabla \phi \cdot d\vec{A} + \int_V S_\phi dV \quad (4.5)$$

onde \vec{u} é o vetor velocidade do escoamento, \vec{u}_g é vetor velocidade da parte móvel da malha, Γ é o coeficiente de difusão, S_ϕ é o termo fonte de ϕ e ∂V é a fronteira do volume de controle V .

Ao se utilizar a fórmula para diferenças finitas de primeira ordem, o termo derivativo da Equação (4.5) se torna

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho\phi dV = \frac{(\rho\phi V)^{n+1} - (\rho\phi V)^n}{\Delta t} \quad (4.6)$$

onde n e $n+1$ denotam as quantidades em parênteses no tempo atual e no próximo passo de tempo, respectivamente. O volume no passo $(n+1)$ é computado a partir de

$$V^{n+1} = V^n + \frac{dV}{dt} \Delta t \quad (4.7)$$

em que dV/dt é a derivada do volume pertencente ao volume de controle em relação ao tempo. A fim de satisfazer a lei de conservação do volume da malha, a derivada do volume é computada a partir de

$$\frac{dV}{dt} = \int_{\partial V} \vec{u}_g \cdot d\vec{A} = \sum_j^{n_f} \vec{u}_{g,j} \cdot \vec{A}_j \quad (4.8)$$

onde n_f é o número de faces no volume de controle e \vec{A}_j é o j -ésimo vetor área. O produto interno $\vec{u}_{g,j} \cdot \vec{A}_j$ em cada face é calculado conforme

$$\vec{u}_{g,j} \cdot \vec{A}_j = \frac{\delta V_j}{\Delta t} \quad (4.9)$$

em que δV_j é o volume varrido pela j -ésima face em um passo de tempo Δt .

Em contraste à Equação (4.6), ao se utilizar a fórmula para diferenças finitas de segunda ordem, o termo derivativo da Equação (4.5) pode ser escrito como

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho\phi dV = \frac{3(\rho\phi V)^{n+1} - 4(\rho\phi V)^n + (\rho\phi V)^{n-1}}{2\Delta t} \quad (4.10)$$

onde $n + 1$, n e $n - 1$ denotam passos de tempo sucessivos, sendo $n + 1$ o passo de tempo atual.

Para o caso do cálculo a partir de diferenças finitas de segunda ordem, a derivada volumétrica do volume de controle é computada da mesma maneira descrita pela Equação (4.8). Neste caso, porém, o produto interno $\vec{u}_{g,j} \cdot \vec{A}_j$ em cada face do volume de controle é calculado a partir de

$$(\vec{u}_{g,j} \cdot \vec{A}_j)^{n+1} = \frac{3}{2}(\vec{u}_{g,j} \cdot \vec{A}_j)^n - \frac{1}{2}(\vec{u}_{g,j} \cdot \vec{A}_j)^{n-1} = \frac{3}{2} \left(\frac{\delta V_j}{\Delta t} \right)^n - \frac{1}{2} \left(\frac{\delta V_j}{\Delta t} \right)^{n-1} \quad (4.11)$$

onde $(\delta V_j)^n$ e $(\delta V_j)^{n-1}$ são os volumes varridos pelas faces do volume de controle no passo de tempo atual e passo de tempo anterior, respectivamente.

4.2.2 Método de solução por seis graus de liberdade

O método de solução por seis graus de liberdade utilizado pelo *Ansys Fluent* utiliza as forças e os momentos aplicados no objeto para calcular o movimento de translação e rotação do seu centro de gravidade. Apesar de não ter sido utilizado o método de seis graus de liberdade no presente trabalho, o mesmo tem um papel significativo dentre os modelos de malha dinâmica e possivelmente será um próximo passo para o aprofundamento da simulação do motor de foguete SARA.

A equação que governa a translação do centro de gravidade em um sistema de coordenadas inercial é

$$\dot{\vec{v}}_G = \frac{1}{m} \sum \vec{f}_G \quad (4.12)$$

onde $\dot{\vec{v}}_G$ é a aceleração do centro de gravidade, m é a massa e \vec{f}_G é o vetor da força da gravidade.

O movimento de rotação do objeto, $\dot{\vec{\omega}}_B$, pode ser computado utilizando coordenadas centradas no corpo

$$\dot{\vec{\omega}}_B = L^{-1} \left(\sum \vec{M}_B - \vec{\omega}_B \times L \vec{\omega}_B \right) \quad (4.13)$$

onde L é o tensor de inércia, \vec{M}_B é o vetor de momento que age no corpo e $\vec{\omega}_B$ é o vetor velocidade angular do corpo.

Os momentos são transformados de coordenadas inerciais para coordenadas centradas no corpo da seguinte forma

$$\vec{M}_B = R \vec{M}_G \quad (4.14)$$

onde R representa matriz de transformação

$$\begin{bmatrix} C_\theta C_\psi & C_\theta S_\psi & -S_\theta \\ S_\phi S_\theta C_\psi - C_\phi S_\psi & S_\phi S_\theta S_\psi + C_\phi C_\psi & S_\phi C_\theta \\ C_\phi S_\theta C_\psi + S_\phi S_\psi & C_\phi S_\theta S_\psi - S_\phi C_\psi & C_\phi C_\theta \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

onde, em termos genéricos, $C_X = \cos(X)$ e $S_X = \sin(X)$. Os ângulos ϕ , θ e ψ são ângulos de Euler que representam as rotações relativas aos eixos Z , Y e X , respectivamente.

Após o cálculo das acelerações de translação e rotação pelas Equações (4.12) e (4.13), seus valores são integrados numericamente a fim de encontrar as velocidades de translação e rotação. Tais valores são utilizados no cálculo da malha dinâmica a fim de atualizar a posição do corpo rígido.

4.2.3 Métodos de malha dinâmica

O programa *Ansys Fluent* (ANSYS, 2020) disponibiliza de três tipos de ferramentas que permitem a alteração da malha de maneira dinâmica, seja utilizando parâmetros do usuário ou da própria simulação. Tais ferramentas são: métodos de suavização, disposição dinâmica de camadas e remalhamento local.

Nos momentos iniciais deste trabalho de TCC, foram implementados geometrias e malhas que utilizavam os modelos de remalhamento e de suavização de nós, mas conforme a geometria se alterava, a qualidade da malha se deteriorava. Apesar da simplicidade de ambos os modelos, foi escolhido para a versão final do trabalho se utilizar apenas o modelo de disposição dinâmica de camadas (ou *layering*).

4.2.4 Método Laplaciano de Suavização

O método Laplaciano de suavização ajusta a posição de cada vértice da malha para o centro geométrico de seus vértices vizinhos. Para evitar que a nova posição de um vértice diminua a qualidade da malha, a realocação ocorre se, e somente se, ocorre uma melhora no parâmetro de assimetria da malha.

O procedimento do método Laplaciano ocorre da seguinte maneira: primeiro, a Equação (4.16) computa a posição média $\overline{\vec{x}_i^m}$ do nó i , onde \vec{x}_j^m é a posição dos nós vizinhos à \vec{x}_i^m , n_i é a quantidade de nós vizinhos ao nó i e m a o número da iteração atual.

$$\overline{\vec{x}_i^m} = \frac{\sum_j^{n_i} \vec{x}_j^m}{n_i} \quad (4.16)$$

Em seguida, a nova posição \vec{x}_i^{m+1} do nó é computada segundo a Equação (4.17)

$$\vec{x}_i^{m+1} = \vec{x}_i^m (1 - \beta) + \overline{\vec{x}_i^m} \beta \quad (4.17)$$

onde β é o fator de relaxamento da fronteira. Por fim, a atualização da posição do nó ocorre apenas se o valor máximo da assimetria de todas as faces adjacentes à \vec{x}_i^{m+1} é melhorada em comparação com \vec{x}_i^m .

4.2.5 Métodos de remalhamento

Quando o deslocamento da fronteira é demasiado grande quando comparado ao tamanho local das células, a qualidade das células pode se deteriorar e a célula pode se degenerar. Isto irá invalidar a malha e, conseqüentemente, resultará em problemas de convergência quando a solução for computada no próximo passo de tempo.

Para contornar esse problema, *Ansys Fluent* aglomera as células que violam os critérios de assimetria ou tamanho e localmente as remalha. Se as novas células satisfazem o critério de assimetria, a malha é então localmente atualizada com as novas células (cuja solução é interpolada a partir das células antigas). Caso contrário, as novas células são descartadas.

Cada célula é avaliada individualmente e são marcadas caso pelo menos um dos seguintes critérios é satisfeito: a assimetria da célula é maior que a assimetria máxima especificada; a célula é menor que a escala de tamanho mínimo especificada; a célula é maior que a escala de tamanho máximo especificada; sua altura não corresponde à escala de tamanho especificada.

4.2.6 Layering

Em zonas de malha prismática (poliedral, hexaédrica e/ou cunha em 3D, ou quadrilateral em 2D), pode ser utilizado o método de *layering* para adicionar ou remover camadas de células adjacentes a uma superfície móvel, com base na altura da camada adjacente à superfície móvel. O modelo de malha dinâmica no *Ansys Fluent* permite especificar uma altura ideal da camada em cada superfície móvel. A camada de células adjacentes à superfície móvel (camada *j* na Figura 16) é dividida ou fundida com a camada de células próxima a ela (camada *i* na Figura 16) com base na altura (*h*) das células na camada *j*.

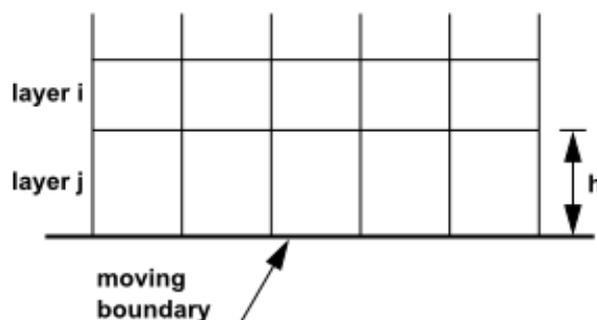


Figura 16 – Método de *layering*.

Se as células na camada *j* estão se expandindo, as alturas das células são permitidas a aumentar até

$$h_{min} > (1 + \alpha_s)h_{ideal} \quad (4.18)$$

onde h_{min} é a altura mínima das células da camada *j*, h_{ideal} é a altura ideal das células, e α_s é o fator de divisão da camada.

5 Metodologia

5.1 Geometria

A geometria interna do motor SARA, isto é, o domínio de cálculo do escoamento, é formado a partir de 18 injetores, uma pré-câmara de combustão, o meio da câmara de combustão, pós-câmara de combustão e tubeira convergente/divergente, conforme a Figura 17.

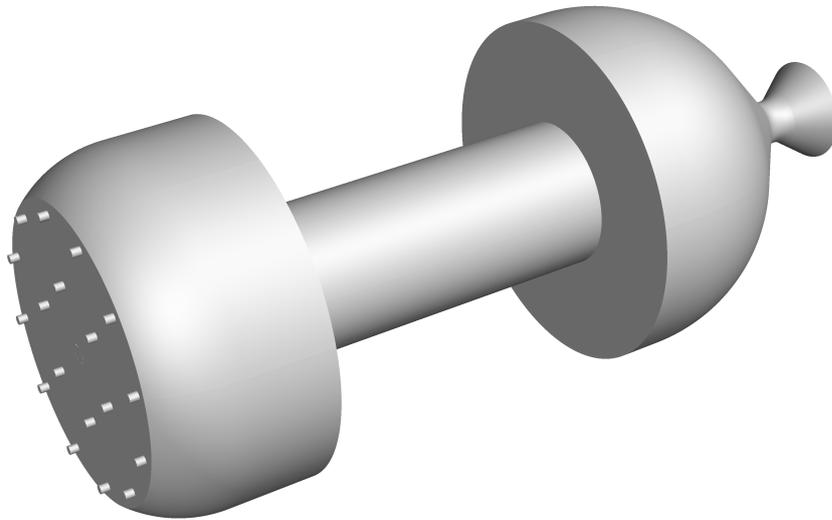
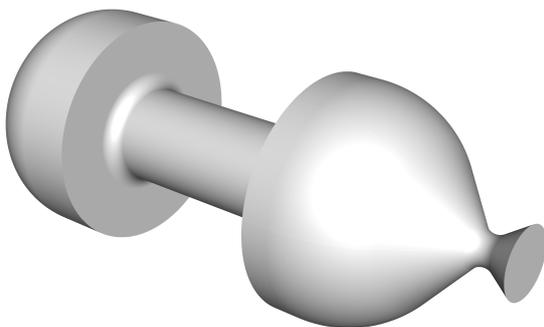
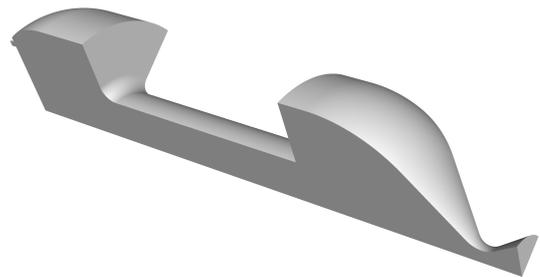


Figura 17 – Geometria completa do motor SARA.

O meio da câmara de combustão é modelado como tendo um raio menor que o resto da câmara de combustão, a fim de contabilizar a presença do grão sólido. Conforme o grão sólido é consumido ao longo do processo de combustão, o raio da geometria nessa região tende a aumentar, necessitando assim uma variação da geometria. Tal variação é obtida a partir da aplicação de um modelo de malha dinâmica, utilizando-se as ferramentas descritas no Capítulo 4. O restante da geometria permanece inalterada ao longo do tempo.



(a) Vista isométrica da geometria completa.



(b) Vista isométrica de 1/6 da geometria.

Figura 18 – Vista isométrica da geometria do motor SARA.

A fim de economizar esforço computacional desnecessário, aproveitou-se a simetria radial da geometria do motor SARA para simular apenas um sexto da geometria. A geometria fatiada utilizada é mostrada nas Figuras 18 a 20 em comparação com a geometria completa.

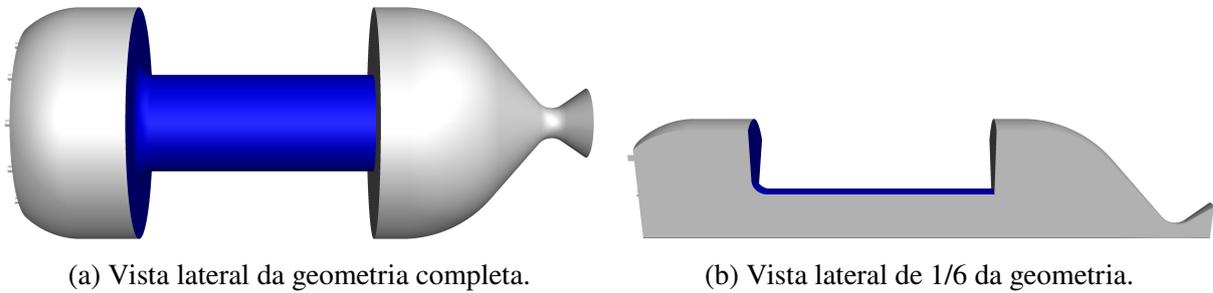


Figura 19 – Vista lateral da geometria do motor SARA.

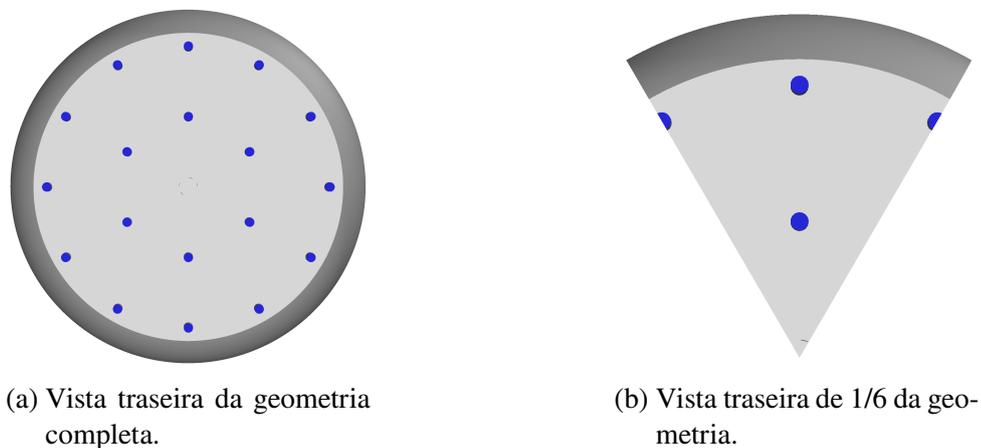


Figura 20 – Vista traseira da geometria do motor SARA.

5.2 Condições de contorno

As condições de contorno do problema para um sexto de geometria são:

5.2.1 Oxidante

A injeção de óxido nítrico gasoso N_2O (oxidante) foi feita a partir de dois modelos:

- Condição de contorno de “entrada de massa” (*mass flow inlet*) a partir das faces dos injetores como vazão mássica $0,0627\text{kg/s}$ (99% da vazão total de oxidante), à temperatura de 200K ($-73,15^\circ\text{C}$);
- Injeção de partículas líquidas de óxido nítrico a partir do “modelo de fase discreta” (ou *Discrete Phase Model*, DPM). As partículas líquidas de N_2O foram injetadas perpendicularmente à face dos injetores à uma velocidade inicial de 30m/s , numa distribuição uniforme ao longo de cada injetor à uma taxa de $0,0006\text{kg/s}$ (1% da vazão total de oxidante),

também à temperatura de 200K e com diâmetro de cada partícula variando no intervalo entre 10^{-4} m e 10^{-6} m no momento de injeção.

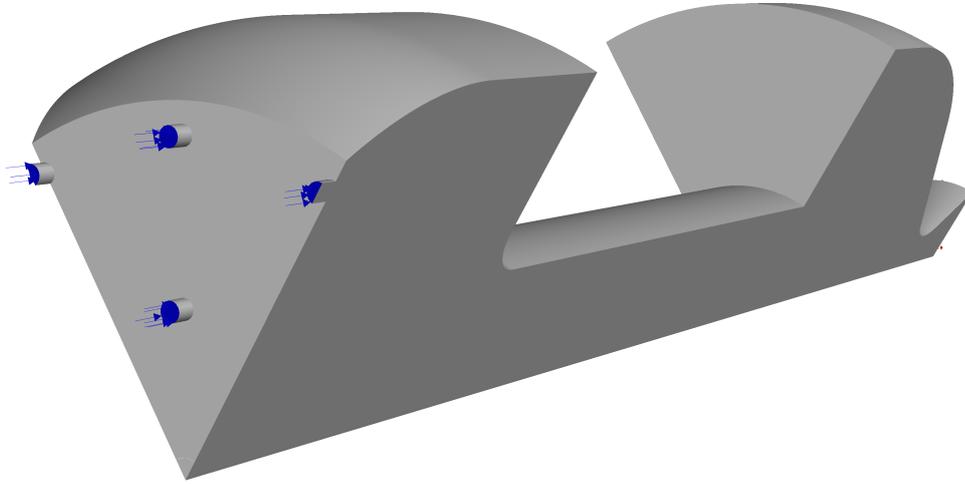


Figura 21 – Entrada de massa de oxidante.

5.2.2 Combustível

Injeção de parafina em estado gasoso C_2H_4 à temperatura de 350K (76,85°C) com vazão mássica média de 0,008g/s.

A injeção de combustível foi modelada com os seguintes objetivos: garantir que a injeção ocorra majoritariamente na face inferior do grão, onde o fenômeno de regressão ocorre de maneira mais acentuada; evitar que ocorra uma descontinuidade ao longo do grão da superfície do grão devido à diferentes condições de contorno aplicadas (injeção + parede). Uma pequena fração de combustível é injetada na face esquerda do grão a fim de se amenizar um problema em que ocorre velocidade zero nesta face ao se injetar zero combustível e que por sua vez provoca um acúmulo indesejado de óxido nitroso nesta região, diminuindo consideravelmente a temperatura próximo à esquerda do grão.

A fim de garantir que tais objetivos sejam alcançados e que o efeito temporal da variação da taxa de regressão do grão na injeção de combustível seja computado apropriadamente, a função que descreve a “entrada de massa” (*mass flow inlet*) foi formulada contendo uma porção dependente do espaço, e outra dependente do tempo,

$$\dot{m}_{C_2H_4}(x,t) = X(x) \cdot T(t) \quad (5.1)$$

onde $X(x)$ é a porção da função dependente do comprimento ao longo do motor x e $T(t)$ é a porção da função dependente do tempo t .

A função $X(x)$ é modelada como uma função que varia de 0,05 a 1 (5% a 100%) a qual dita a distribuição espacial da injeção de combustível ao longo do grão. $X(x)$ assume formato

polinomial para $0,0566\text{m} \leq x < 0,0641\text{m}$ e valor unitário para $0,0641\text{m} \leq x \leq 0,1766\text{m}$. A forma polinomial é dada a partir das seguintes restrições:

$$X(0,0566) = 0;$$

$$X(0,0641) = 1;$$

$$\dot{X}(0,0566) = \dot{X}(0,0641) = 0,$$

as quais por sua vez resultam na expressão da Equação (5.2) abaixo:

$$X(x) = \begin{cases} -4503703x^3 + 815395x^2 + -49019x + 979, & 0,0566 \leq x < 0,641 \\ 1, & 0,0641 \leq x \leq 0,1766 \end{cases} \quad (5.2)$$

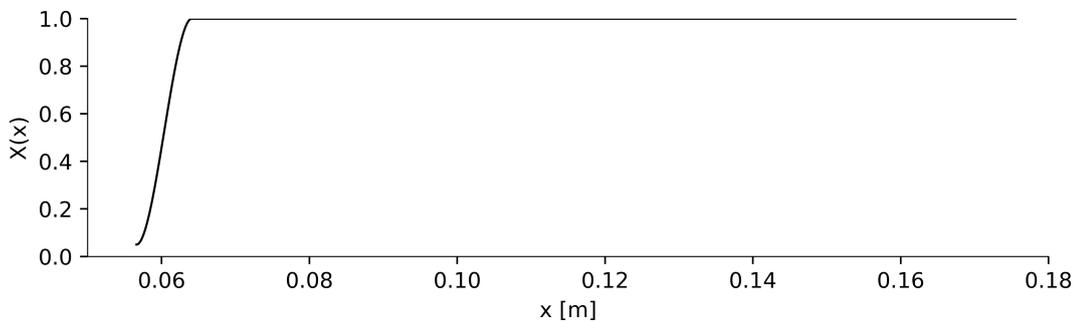


Figura 22 – Gráfico da função $X(x)$.

Enquanto a $X(x)$ descreve a distribuição espacial da injeção de combustível, a função $T(t)$ descreve o real valor de combustível injetado ao longo do tempo. O valor de $T(t)$ é encontrado a partir da Equação (2.4), onde a área S para um sexto de geometria é dada por

$$S = \frac{\pi}{3}lr(t) \quad (5.3)$$

Substituindo a Equação (5.3) na Equação (2.4) e substituindo os valores de $l = 0,12\text{m}$, $\rho_{\text{fuel}} = 911\text{kg/m}^3$ e aplicando um ajuste de 1,4155, é obtida uma expressão para $T(t)$, em sua forma polinomial:

$$T(t) = -1,258 \cdot 10^{-9}t^4 + 1,097 \cdot 10^{-7}t^3 - 4,079 \cdot 10^{-6}t^2 + 1,107 \cdot 10^{-4}t + 7,396 \cdot 10^{-3} \quad (5.4)$$

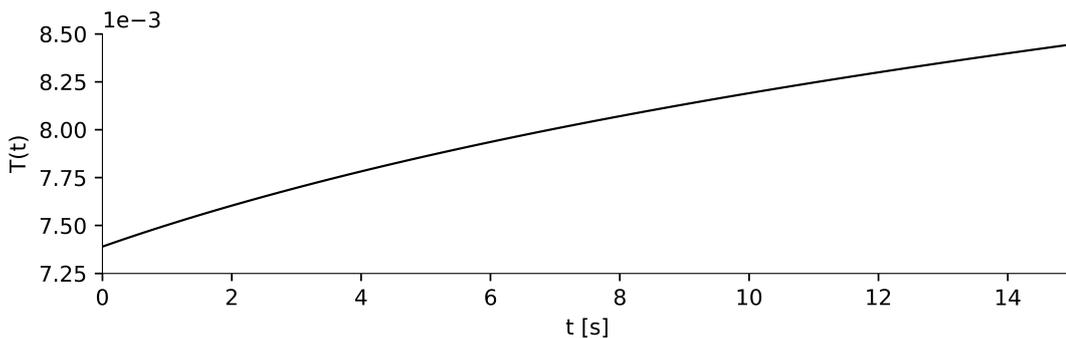


Figura 23 – Gráfico da função $T(t)$.

O ajuste de 1,4155 é necessário para adequar o valor médio de regressão do combustível do artigo (KIM; MOON; KIM, 2015) para o valor médio de regressão do grão obtido experimentalmente no CPL. Existem diversos fatores que colaboram para essa diferença no comportamento do grão, como condições de armazenamento da parafina, umidade, homogeneização na mistura da parafina com o polietileno, diferenças nas propriedades físicas para cada fornecedor de parafina, etc.

Por fim, o valor de $\dot{m}_{C_2H_4}(x,t)$ é inserido como condição de contorno de *mass-flow-inlet* no programa *Ansys Fluent* a partir da seguinte expressão¹:

$$\text{IF}(x < 0.0641[\text{m}] , - (x/1[\text{m}])^3 * 4740740.74074 [\text{kg s}^{-1}] + (x/1[\text{m}])^2 * 858311.11111 [\text{kg s}^{-1}] - (x/1[\text{m}]) * 51599.07556 [\text{kg s}^{-1}] + 1030.45474 [\text{kg s}^{-1}] , 1 [\text{kg s}^{-1}]) * (- 1.258*10^{-9} * (t/1[\text{s}])^4 + 1.097*10^{-7} * (t/1[\text{s}])^3 - 4.079*10^{-6} * (t/1[\text{s}])^2 + 0.0001107 * (t/1[\text{s}]) + 0.007396)$$

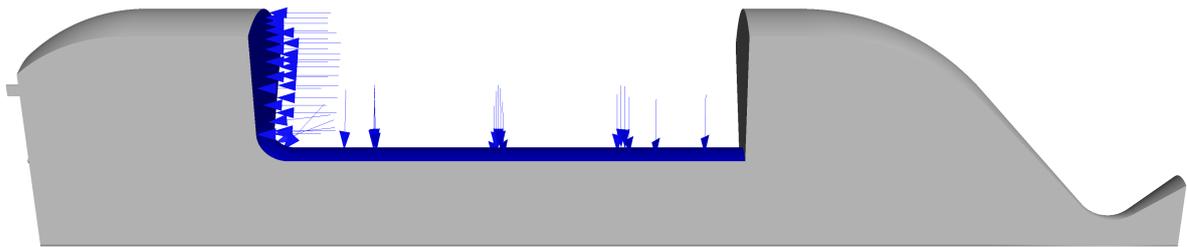


Figura 24 – Condição de contorno de entrada de massa de combustível.

5.2.3 Simetria

A condição de contorno de simetria foi aplicada nas paredes laterais da geometria do motor, no mesmo local onde o corte para gerar um sexto de geometria foi feito, conforme a Figura 25. Tal condição de contorno implica em velocidade normal ao plano de simetria igual a zero e gradiente de todas as variáveis igual a zero na direção normal ao plano de simetria.

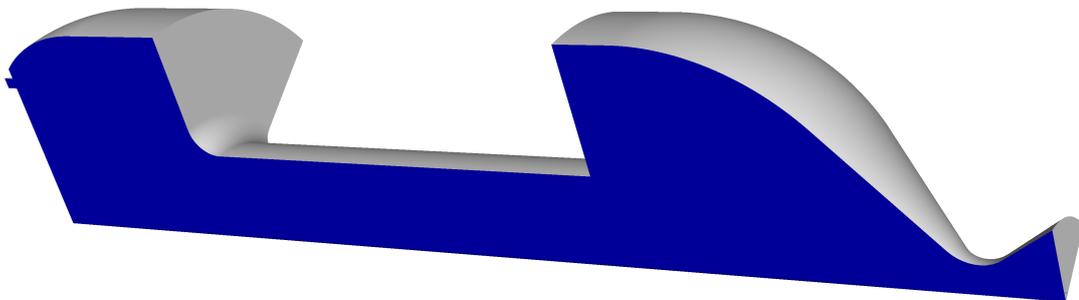


Figura 25 – Condição de contorno de simetria.

¹ Para utilizar a função no *Ansys Fluent*, basta copiar e colar a expressão como está escrita e retirar as quebras de linhas que surgirem, de forma que todo o comando esteja em apenas uma única linha.

5.2.4 Saída

A superfície ao fim da tubeira é configurada como condição de contorno de saída do escoamento com pressão manométrica igual a 0.

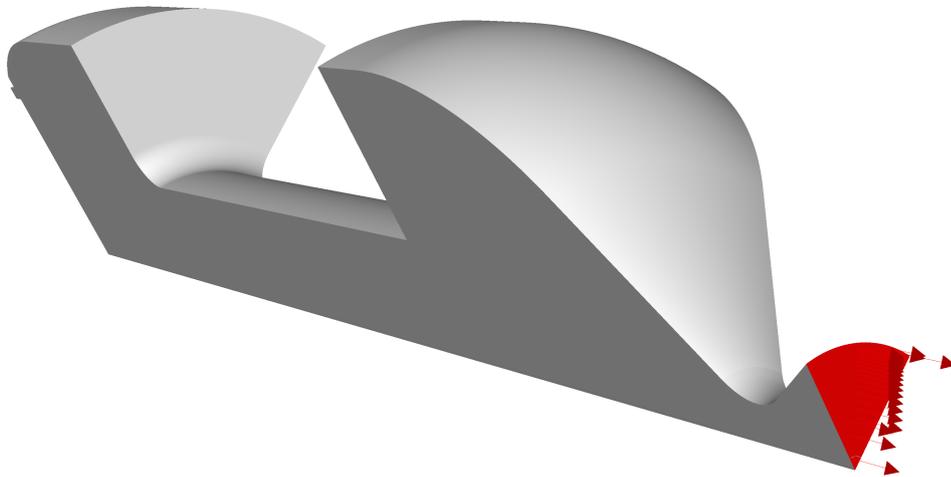


Figura 26 – Condição de contorno de saída.

5.2.5 Parede

Por fim, o restante das superfícies da geometria são configuradas como condição de contorno de parede, onde é aplicada a condição de não deslizamento.

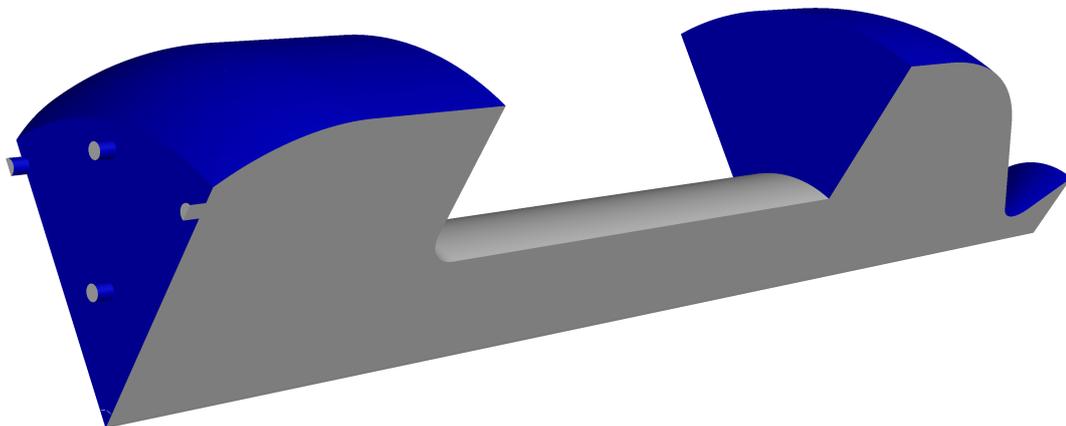


Figura 27 – Condição de contorno de parede.

A Tabela 3 resume as condições de contorno explicitadas nesta seção.

Tabela 3 – Resumo das condições de contorno.

Condição de contorno	Local	Valor	Temperatura
Oxidante gasoso	Injetores	0,0627kg/s	200K
Oxidante líquido (DPM)	Injetores	0,0006kg/s	200K
Combustível	Superfície do grão	0,008kg/s	350K
Saída	Saída da tubeira	–	–
Simetria	Superfícies laterais	–	–
Parede	Superfícies restantes	–	–

5.3 Malha Dinâmica

Para a aplicação do método de malha dinâmica, primeiramente é necessário a criação de uma malha inicial que satisfaça os critérios de qualidade descritos no Capítulo 4. Para isso, foi criada uma malha tridimensional estruturada, com aproximadamente 5 milhões de nós, que conta com maior detalhamento próximo à parede do motor e em especial próximo à tubeira, onde a alta velocidade do escoamento tende a aumentar o valor do y^+ . Além disso, mais nós na direção radial foram incluídos na pré-câmara de combustão, para melhorar os resultados do cálculo da dispersão do oxidante logo após dele ser injetado no motor.

Dessa forma, após diversas iterações entre a construção e refinamento da malha e análise dos resultados, foi obtida a malha apresentada nas Figuras 28 e 29.

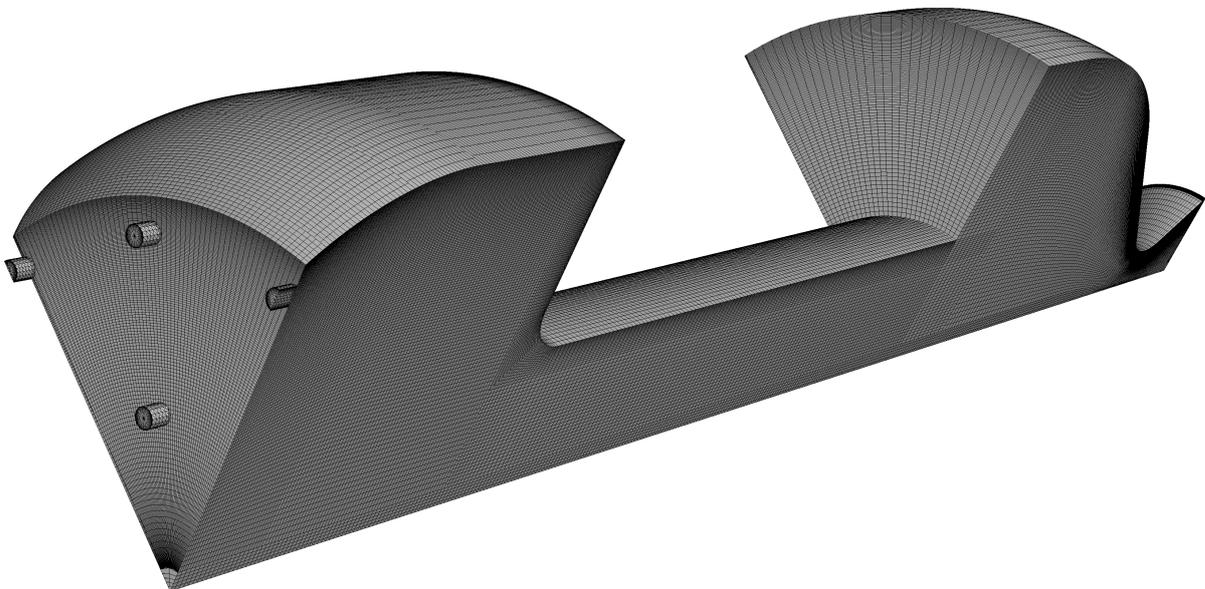


Figura 28 – Malha inicial - vista 1.

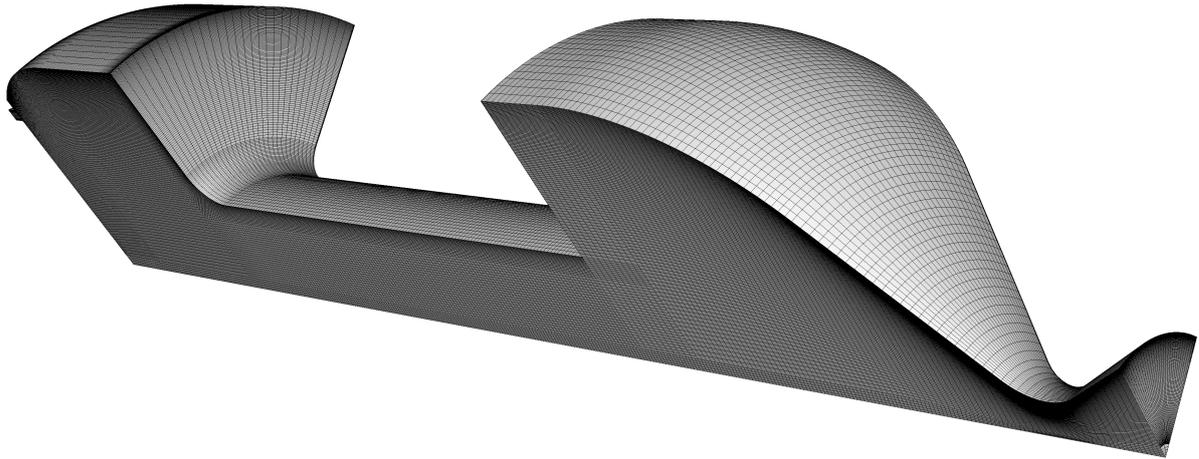


Figura 29 – Malha inicial - vista 2.

Para programar o movimento da malha, primeiramente foi feito o cálculo da taxa de regressão, descrita na Seção 2.1, o qual fornece informações sobre o raio do grão a cada instante de tempo. Dessa forma, o movimento da malha é programado como sendo um movimento da superfície do grão na direção radial no sentido de aumento de seu raio.

Em seguida, a geometria foi preparada para o movimento. Um volume na parte inferior do grão foi destacado para que o mesmo faça todo o movimento de regressão do grão, conforme ilustrado em vermelho pela Figura 30. Na Figura 30 é mostrado uma seção bidimensional do motor para ilustrar o movimento dos nós naquela região, o qual se repete para os nós em outras seções do motor. Conforme a região em vermelho se move, os nós nas camadas logo acima irão desaparecer e novos nós serão formados nas camadas abaixo de tal região, segundo o método de *Layering* descrito na Seção 4.2.6.

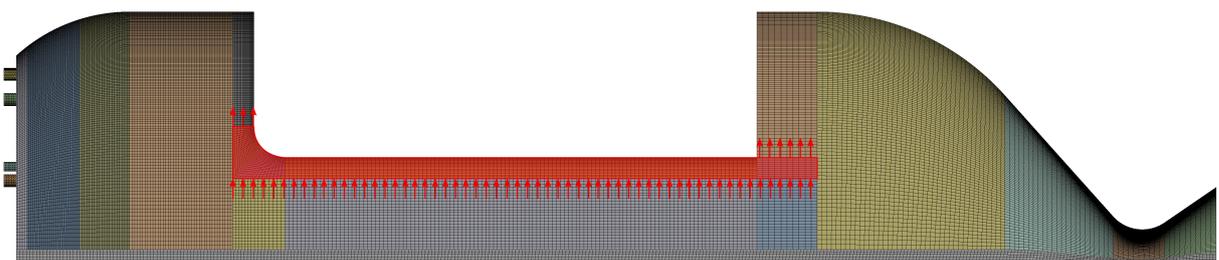


Figura 30 – Movimento da malha.

Antes de aplicar o algoritmo de movimento de malha na simulação, é necessário configurar as faces do volume que irá se mover. As Figuras 31 e 32 mostram como tais faces foram configuradas:

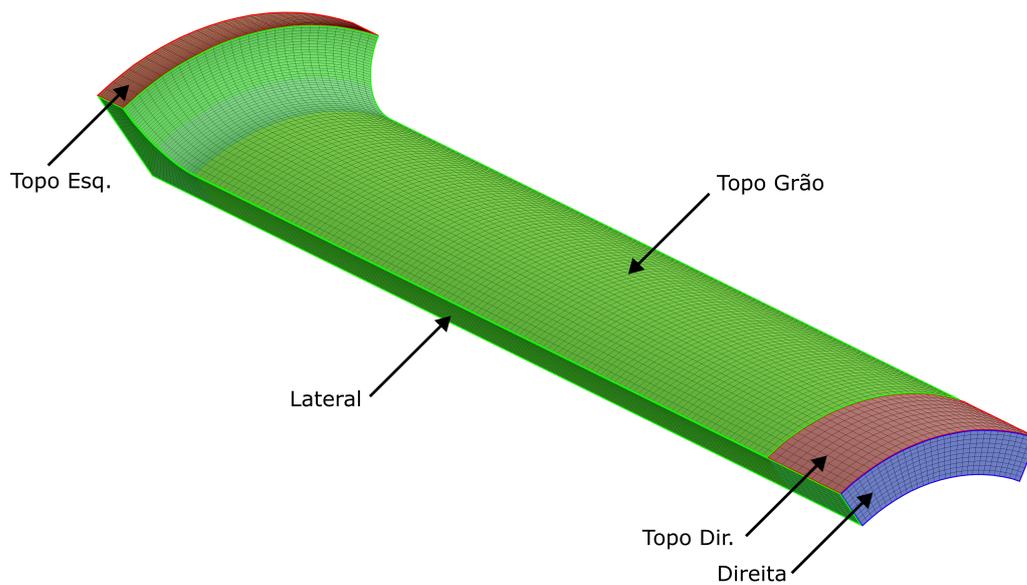


Figura 31 – Tratamento de superfícies - Topo.

- As faces das regiões em vermelho foram fundidas² com as faces coincidentes dos volumes adjacentes. Isso ocorre para as faces “Topo Esq.”, “Topo Dir.”, “Baixo 1”, “Baixo 2”, “Baixo 3”, “Interior 1”, “Interior 2” e “Interior 3”, totalizando 8 faces com esta configuração³. Isso é necessário para garantir que as duas faces dos volumes adjacentes (agora apenas uma única face unida) se movam como uma só. Além disso, as faces em vermelho do topo e de baixo são configuradas com o método *layering* com altura de célula de $6 \times 10^{-4}m$.
- As faces das regiões em azul, “Direita” e “Esquerda”, foram configuradas como sendo deslizantes (*sliding mesh*) para que seu movimento não interfira com a posição dos nós e células dos volumes adjacentes.
- As faces em verde, “Topo Grão” e “Lateral”, não exigem uma configuração prévia, apenas a criação de uma *named selection* para a aplicação do programa de movimento de malha.
- O volume interno como um todo também deve ter uma *named selection* associada, a fim de aplicação do programa de malha dinâmica nos nós internos do volume.

² Uma vez que uma face é fundida, todas as outras interfaces da geometria são excluídas e devem ser reconfiguradas manualmente.

³ Cada face deve ser fundida individualmente, por isso a parte de baixo contém 3 regiões distintas.

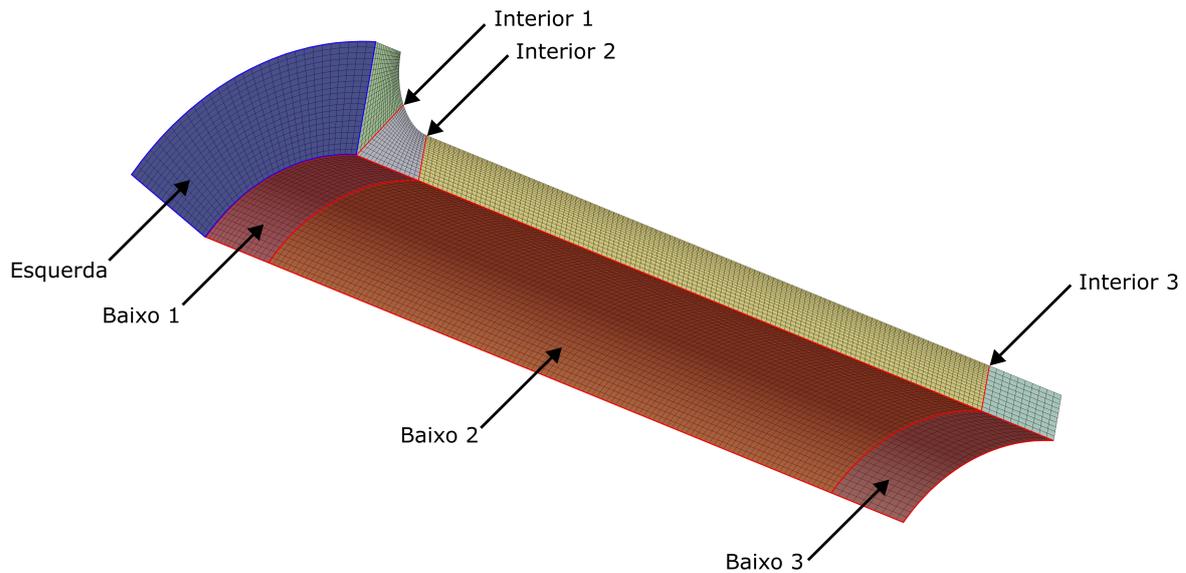


Figura 32 – Tratamento de superfícies - Baixo.

Após a configuração da geometria, o programa de malha dinâmica (Apêndice B) deve ser carregado e compilado dentro do *Ansys Fluent* para a criação da UDF. O modelo de malha dinâmica deve ser ativado dentro do *Fluent* e a opção de *layering* deve ser assinalada. Em seguida, a UDF deve ser aplicada nas 12 faces e no volume configurados previamente.

O código que dita o movimento da malha foi escrito na linguagem de programação C, mostrado no Apêndice B, e funciona da seguinte maneira: a partir de um laço de repetição, cada nó da região onde o código é aplicado irá se mover na direção radial uma quantidade referente à diferença do valor do raio entre o passo de tempo atual e o passo de tempo anterior. Apesar do código conter poucas linhas, o mesmo utiliza diversos comandos únicos do próprio *Ansys Fluent*, o que agiliza o processo de programação, mas em contrapartida dificulta a leitura e interpretação do código. Para maiores informações sobre cada comando utilizado, recomenda-se a leitura do manual do *Ansys*, estudo dos códigos internos do *Ansys* (destacando-se o “udf.h”), leitura de fóruns de CFD referentes à UDF’s e leitura dos manuais da casos do *Ansys*.

Com a simulação configurada no regime transiente, a malha dinâmica é habilitada e deve se mover ao decorrer da simulação. Vale ressaltar que a posição dos nós da malha não voltam à sua posição inicial ao se inicializar uma simulação, ou seja, caso precise reiniciar uma simulação, toda a configuração deve ser efetuada novamente. Caso se deseje simular no regime permanente em algum tempo específico, basta ativar a opção transiente, utilizar o comando *preview mesh motion* para passar o tempo⁴ até o momento desejado e depois ativar a opção de simulação permanente.

As Figuras 33 a 36 mostram uma vista lateral da malha em 4 momentos de tempo dis-

⁴ Deve-se utilizar um passo de tempo suficientemente pequeno para que o método de *layering* funcione corretamente, evitando que dois volumes se interseccionem.

tintos.



Figura 33 – Malha no momento $t = 0s$.

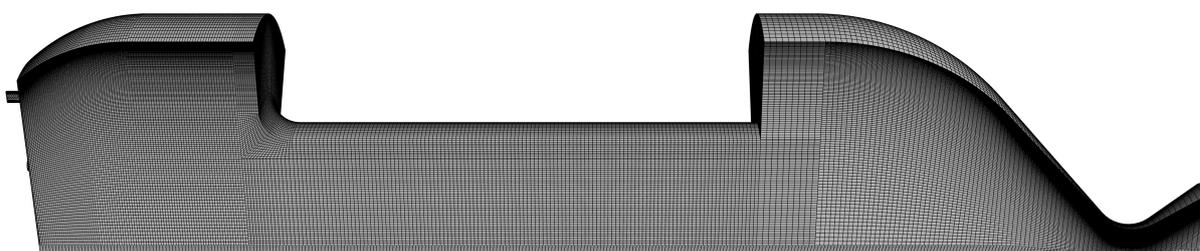


Figura 34 – Malha no momento $t = 5s$.

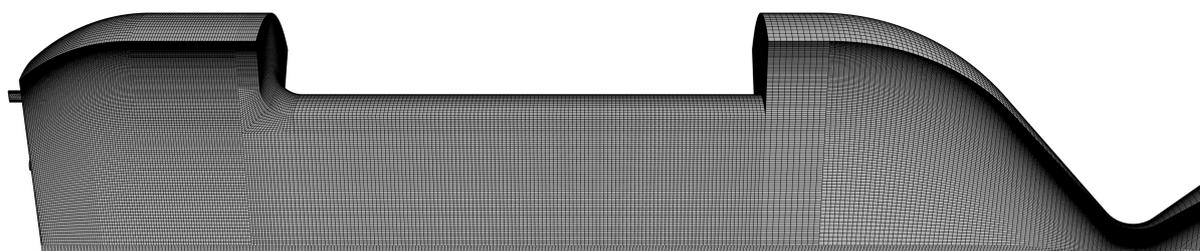


Figura 35 – Malha no momento $t = 10s$.

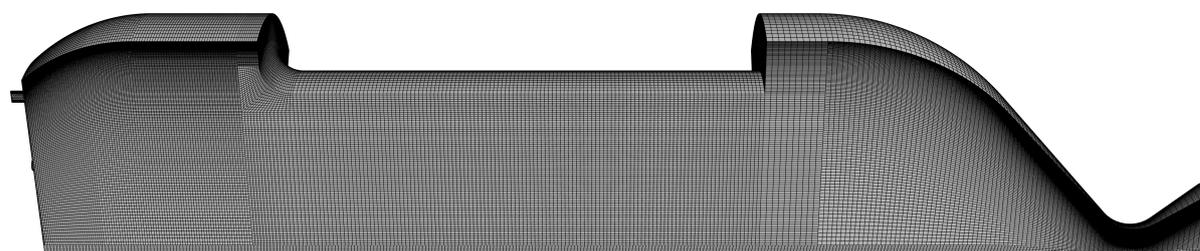


Figura 36 – Malha no momento $t = 15s$.

5.4 Resolução Transiente vs Permanente

Foram utilizadas duas abordagens para simular o motor SARA. A primeira e de escolha imediata é a simulação de uma única simulação em regime transiente. A segunda é a utilização de várias simulações permanentes em tempos diferentes.

5.4.1 Transiente

A maior preocupação ao se utilizar uma simulação transiente é a escolha correta do passo de tempo. Determinados fenômenos físicos ocorrem em passos de tempos diferentes, e a escolha de um passo de tempo muito grande pode negligenciar certos fenômenos, enquanto que a escolha de um passo de tempo muito pequeno pode gerar cálculos desnecessários e um tempo de simulação muito elevado.

Para a resolução apropriada da cinética química do processo de combustão, o manual do programa *Ansys Fluent* recomenda a utilização de um passo de tempo de 10^{-7} s. Tal passo de tempo para uma simulação de 15 segundos com 20 iterações para cada passo de tempo resultaria em uma simulação com 3×10^9 iterações. Considerando uma malha com cerca de 5 milhões de elementos e esta simulação demoraria décadas para ser resolvida, mesmo sendo utilizado um computador pessoal relativamente potente.

Já para a resolução do movimento da própria malha, um passo de tempo curto resulta um movimento quase que irrelevante, isto é, de um passo de tempo para outro, a simulação estaria calculando praticamente a mesma coisa, gerando um desperdício de tempo computacional.

A solução adotada foi de se utilizar um passo de tempo de simulação de 5×10^{-5} , valor que se mostrou suficiente para o cálculo apropriado da combustão após diversos testes, e a aceleração do movimento de malha por um fator de 250, fazendo que cada passo de tempo gere uma modificação significativa no domínio de cálculo. A aceleração do movimento da malha foi obtida a partir da multiplicação por 250 na variável do tempo t no código do Apêndice B e na expressão de injeção de combustível. Dessa forma, ao invés de calcular 15 segundos no *Fluent*, basta calcular 0,06 segundos e reescalar o tempo dos dados obtidos por um fator de 250. Dessa forma, a simulação é calculada completamente em menos de 1 dia nos computadores do CPL.

Quando se inicializa uma simulação transiente, os resultados demoram um certo tempo até se estabilizarem e apresentarem valores razoáveis. Como a simulação foi acelerada consideravelmente, o tempo necessário para a simulação estabilizar é o suficiente para perder alguns segundos de resultados. Para contornar tal problema, foram realizadas modificações no movimento da malha e nas condições de contorno para começarem a variar apenas quando um certo tempo de simulação tiver passado, fornecendo assim tempo o suficiente para a simulação se estabilizar.

5.4.2 Permanente

A opção de utilizar diversas simulações permanentes foi considerada após diversos problemas aparecerem ao se utilizar a simulação do tipo permanente, problemas os quais são abordados no capítulo de Resultados. O método de resolução permanente é mais direto e simples que no caso da simulação transiente: 16 simulações foram criadas, de 0 a 15 segundos, de 1 em 1 segundo. A malha foi atualizada para a posição do tempo desejado utilizando o comando *pre-*

view mesh motion e distribuição temporal da Equação 5.1 foi substituída pelo valor da injeção de combustível naquele tempo. Dessa forma, as 16 simulações foram calculadas individualmente após realizadas as devidas configurações.

6 Resultados

Seguindo a sequência de simulações descrita na metodologia, são apresentados neste capítulo os resultados para a simulação utilizando o modelo transiente, depois os resultados para as simulações utilizando o modelo permanente e em seguida uma comparação entre os dois modelos adotados.

6.1 Resultados simulação transiente

O modelo transiente conseguiu ser simulado em um curto prazo de tempo devido às implementações do passo de tempo acelerado para o movimento da malha, porém, tal aceleração acabou gerando um efeito indesejado. Quando a malha começa a se mover, a região para a qual a malha avança (que anteriormente não fazia parte do domínio) é preenchida por uma grande quantidade de combustível devido à condição de contorno de injeção de combustível naquela face que se move. Em pouco tempo, todo o domínio de cálculo é preenchido por uma mancha formada por combustível puro e a simulação se torna inutilizável. Apesar de utilizar a opção da malha dinâmica para prevenir que as condições de contorno interfiram com o escoamento, o problema persistiu. A Figura 37 mostra a distribuição de combustível e oxidante no domínio no tempo $t = 0s$ e a Figura 38 mostra a mesma distribuição no tempo $t = 1s$, já consideravelmente tomada pelo combustível.

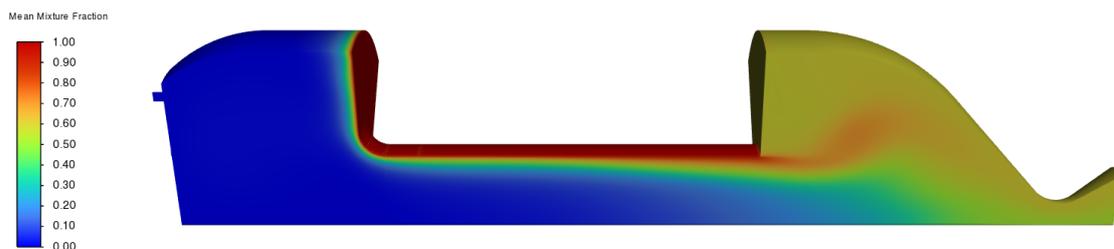


Figura 37 – MMF para o modelo transiente no tempo $t=0s$.

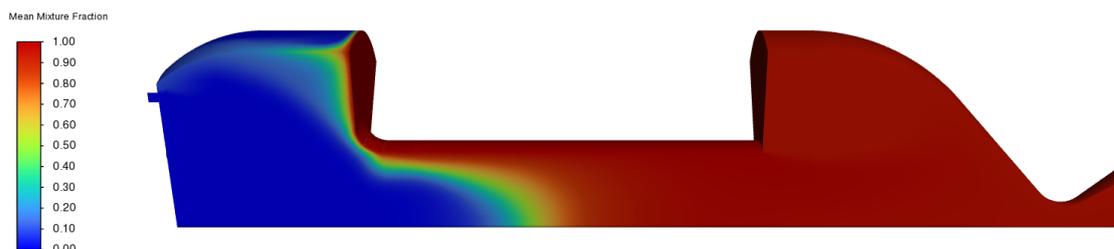


Figura 38 – MMF para o modelo transiente no tempo $t=1s$.

Outro problema gerado pela malha dinâmica, e acentuado pela aceleração do movimento da mesma, é a iteração entre as partículas discretas do modelo DPM com o movimento da malha. O primeiro problema a surgir foram com os *subtets*, isto é, sub-regiões de uma célula da malha, formada a partir da divisão de dita célula em 12 regiões a partir de arestas que saem do seu centroide até seus vértices, que tem como objetivo melhorar a localização das partículas discretas. Tais *subtets* não atualizam a posição do seu centroide de maneira automática quando a malha se move, e para contornar tal problema é necessário adicionar os seguintes comandos ao *prompt* do *Fluent*:

```
define/models/dpm/numerics/high-resolution-tracking/check-subtet-validity? yes
define/models/dpm/numerics/high-resolution-tracking/always-use-face-centroid-with-
periodics? no
define/models/dpm/numerics/high-resolution-tracking/use-quad-face-centroid? no
```

Mesmo com o problema dos *subtets* solucionado, diversas partículas ainda desaparecem toda vez que a malha se move, o que não é um problema quando o número de partículas injetadas ou perdidas é baixa, mas pode se tornar um problema gravíssimo (divergindo a solução) caso a quantidade de partículas perdidas seja muito alta. Por isso é necessário cautela na hora de decidir quantas partículas injetar e o quão rápido a malha deve se mover. Uma outra solução viável é descartar a injeção de partículas discretas e modelar a injeção de oxidante como um gás apenas.

Caso no futuro o problema relacionado à iteração entre o avanço da malha e a condição de contorno de injeção de massa seja resolvido, a simulação transiente pode ser uma boa alternativa para simular de maneira rápida a operação completa do motor de foguete SARA ou qualquer outro geometria que envolva malha dinâmica.

6.2 Resultados simulação permanente

As simulações permanentes se mostraram ser muito mais simples de se trabalhar do que o modelo transiente e resultaram em bons parâmetros a serem analisados. Começando temperatura, as Figuras 39 a 42 mostram a distribuição de temperatura dentro da câmara de combustão nos tempos $t = [0, 5, 10, 15]$ s:

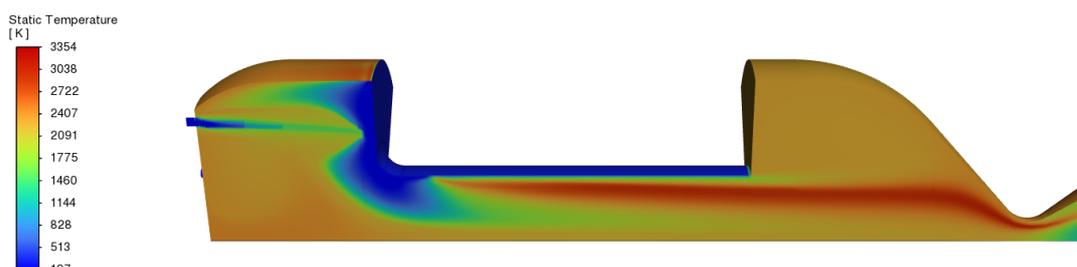
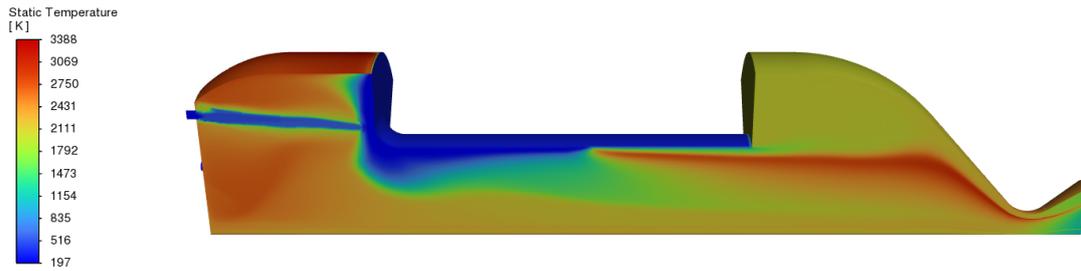
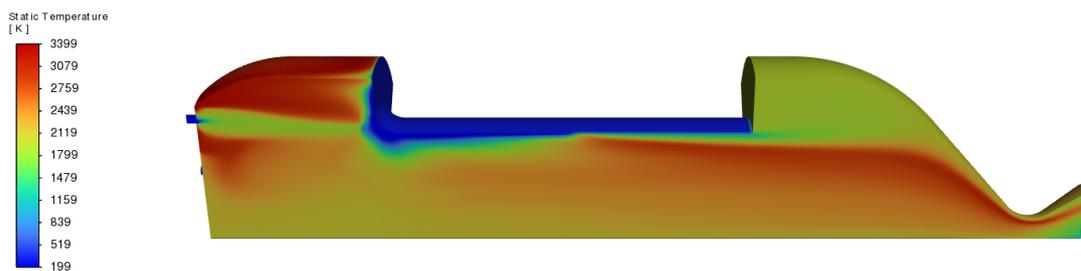
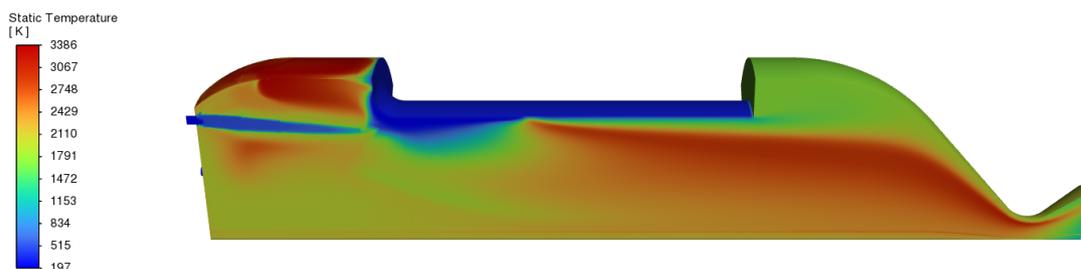


Figura 39 – Temperatura no momento $t = 0$ s.

Figura 40 – Temperatura no momento $t = 5s$.Figura 41 – Temperatura no momento $t = 10s$.Figura 42 – Temperatura no momento $t = 15s$.

O restante das figuras da distribuição de temperatura para os 16 momentos simulados podem ser conferidas no Apêndice D. Algumas considerações podem ser feitas em relação às distribuições de temperatura:

- Logo após o injetor, existe um escoamento que se estende ao longo da pré-câmara de combustão com um valor baixo de temperatura. Tal temperatura é devido à injeção do oxidante frio em comparação com a temperatura de operação do motor.
- No início do grão existe uma concentração de escoamento com baixa temperatura. Este foi um problema causado por uma concentração de oxidante que se cola à superfície do grão e abaixa sua temperatura. O oxidante se cola nesta região devido à estagnação do escoamento gerado pela injeção de combustível próximo de zero. Tal problema foi contornado parcialmente devido à injeção de 5% de combustível nessa região, mas o formato da malha próximo ao grão (volume destacado o qual é responsável pelo movimento da malha, Figuras 31 e 32) acentua tal problema. Este é um problema que deve ser resolvido em trabalhos futuros.

- Abaixo do grão existe uma faixa de alta temperatura que se estende desde o meio do grão (o correto seria no início, mas não ocorre devido à concentração de oxidante) até a saída da tubeira. Essa região de alta temperatura é o local onde ocorre o encontro entre o oxidante da pré-câmara de combustão com o combustível proveniente do grão, gerando assim uma zona onde ocorre o processo de combustão e geração de calor.
- Na pós câmara de combustão, próximo à parede, existe uma zona com temperaturas mais baixas. Essa zona é formada devido à recirculação do escoamento rico em combustível nesta região, prevenindo assim o aumento de sua temperatura.

As Tabelas 4 e 5 mostram os valores da temperatura máxima e mínima no motor de foguete ao longo dos 15 segundos simulados. Nota-se que a temperatura atinge seu máximo de 3444K aos 9 segundos e a temperatura máxima média fica na faixa de 3385K. Um fato interessante sobre a temperatura mínima é devido ao seu valor abaixo de 200K: apesar do oxidante líquido e gasoso serem injetados ambos à 200K, as partículas líquidas absorvem calor do escoamento à sua volta a fim de evaporarem, o que eventualmente pode fazer com que o oxidante gasoso perca energia e fique abaixo da temperatura de 200K. Devido à esse fenômeno se recomenda utilizar uma temperatura mínima para a tabela PDF um pouco abaixo da temperatura mínima de operação, a fim de evitar que os valores de temperatura do escoamento caiam em uma região não calculada pela tabela PDF.

Tabela 4 – Temperaturas máximas e mínimas na câmara de combustão - Parte 1.

t [s]	0	1	2	3	4	5	6	7
T_{max} [K]	3354	3353	3270	3380	3396	3388	3417	3417
T_{min} [K]	197	199	199	190	197	197	187	198

Tabela 5 – Temperaturas máximas e mínimas na câmara de combustão - Parte 2.

t [s]	8	9	10	11	12	13	14	15
T_{max} [K]	3408	3444	3399	3385	3380	3400	3381	3386
T_{min} [K]	186	196	199	198	191	199	198	197

A Figura 43 mostra os valores da temperatura máxima dentro da câmara de combustão ($T_{max,ch}$), a temperatura máxima na saída da tubeira ($T_{max,exit}$) e a temperatura média na saída da tubeira ($T_{mean,exit}$) para os 15 segundos de simulação.

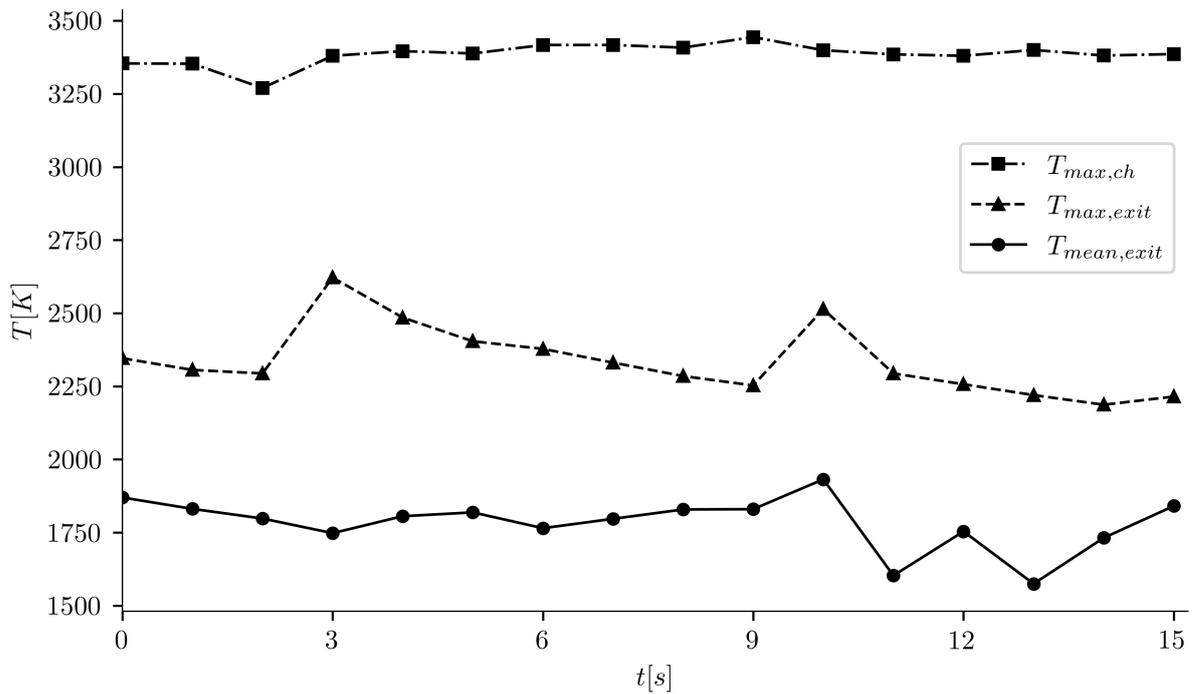


Figura 43 – Gráfico de temperatura.

As Figuras 44 a 47 mostram a distribuição de pressão ao longo do motor para os tempos $t = [0, 5, 10, 15]$ s. A distribuição de pressão tem o formato esperado para a operação do motor, isto é, alta pressão e de maneira uniforme ao longo da câmara de combustão, e grande queda de pressão ao longo da tubeira, onde energia do escoamento é convertido em velocidade.



Figura 44 – Pressão no momento $t = 0$ s.



Figura 45 – Pressão no momento $t = 5$ s.



Figura 46 – Pressão no momento $t = 10s$.



Figura 47 – Pressão no momento $t = 15s$.

As Tabelas 6 e 7 mostram os valores de operação da pressão na câmara de combustão e o valor da pressão na saída da tubeira para os 15 segundos simulados. Nota-se que a pressão de operação é bem próxima daquela esperada pelo software RPA, de 30 bar. Pode-se notar também que a pressão na saída da tubeira tem valor negativo, que é devido ao modo como o programa *Fluent* reporta a pressão como sendo pressão estática manométrica. Ou seja, a pressão na saída da tubeira é um pouco abaixo da pressão ambiente, cerca de 2% a menor. O restante das figuras relativas à distribuição de pressão para as 16 simulações são mostradas no Apêndice E.

Tabela 6 – Pressão de operação e na saída da tubeira - Parte 1.

t [s]	0	1	2	3	4	5	6	7
P_{oper} [bar]	30,2	29,9	29,0	27,8	28,4	29,0	28,6	28,3
T_{saida} [bar]	-0,014	-0,016	-0,018	-0,028	-0,023	-0,021	-0,022	-0,025

Tabela 7 – Pressão de operação e na saída da tubeira - Parte 2.

t [s]	8	9	10	11	12	13	14	15
P_{oper} [bar]	29,3	27,9	28,6	27,9	28,2	28,2	30,2	30,3
T_{saida} [bar]	-0,022	-0,027	-0,002	-0,028	-0,027	-0,028	-0,016	-0,016

A Figura 48 mostra os valores de pressão manométrica dentro da câmara de combustão (linha preta P_{ch}) e pressão manométrica na saída da tubeira (em azul P_{exit}).

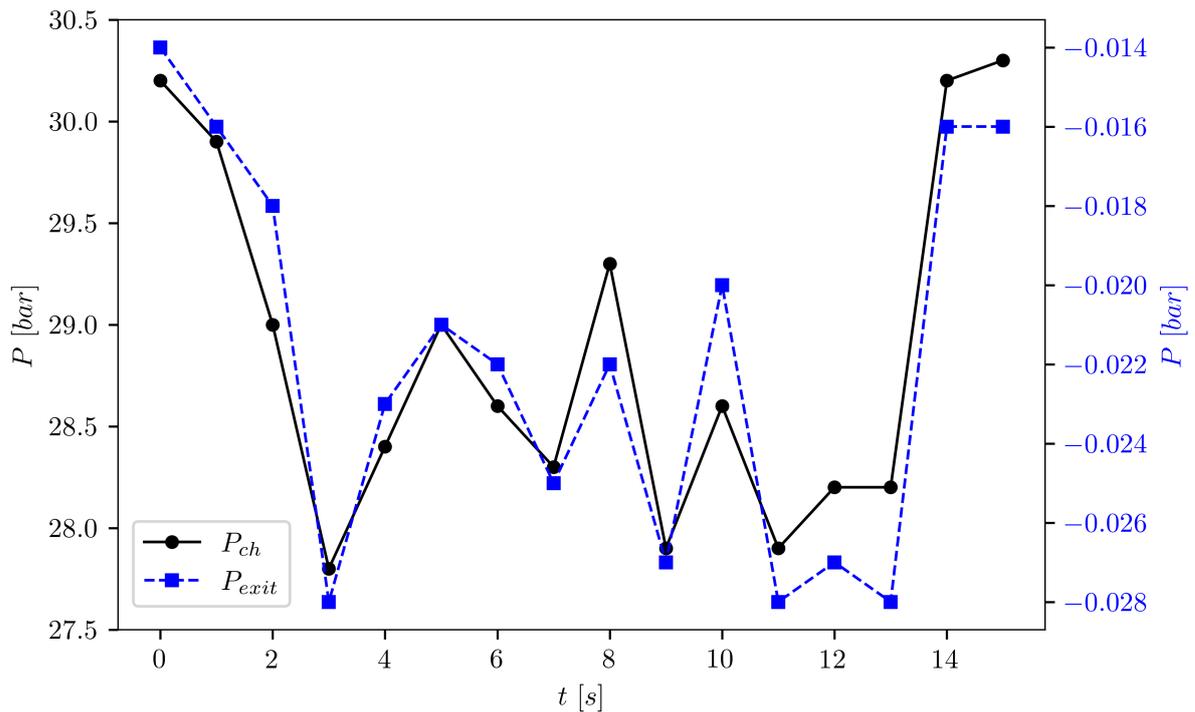


Figura 48 – Gráfico de pressão.

As Figuras 49 a 52 mostram a distribuição de *mean mixture fraction* para os tempos $t = [0, 5, 10, 15]$ s, onde os valores iguais a 0 correspondem à oxidante puro e os valores iguais a 1 correspondem ao combustível puro. Podemos observar a partir de tais figuras que abaixo do grão existe um curta faixa de combustível e a interface entre o combustível e o oxidante é onde ocorre a altas temperaturas das Figuras 39 a 42 onde ocorre o processo de combustão. Ainda é possível ver que existe um escoamento rico em combustível na pós-câmara de combustão, onde ocorrem as baixas temperaturas observadas anteriormente. O restante das figuras podem ser vistas no Apêndice F

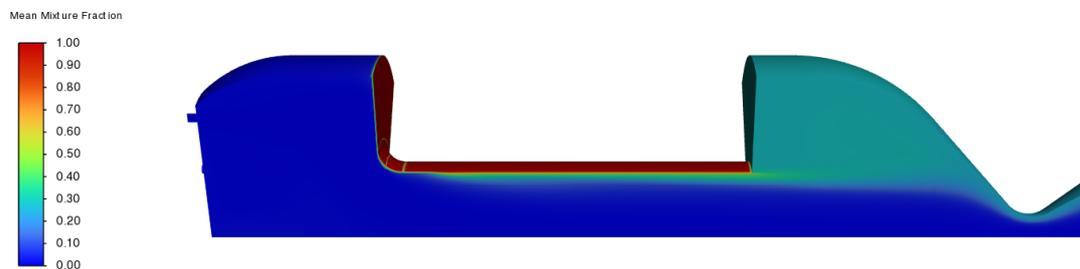
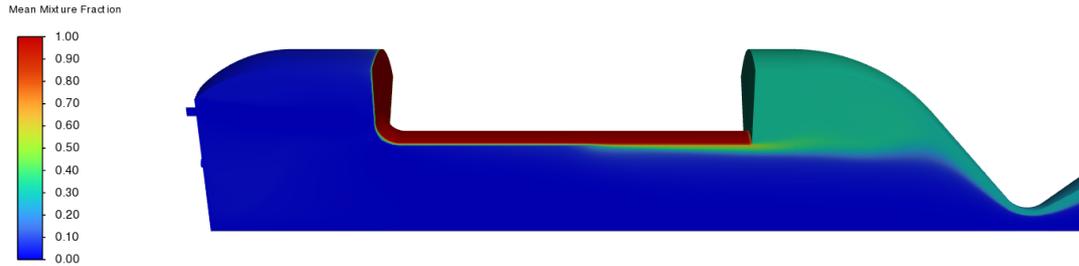
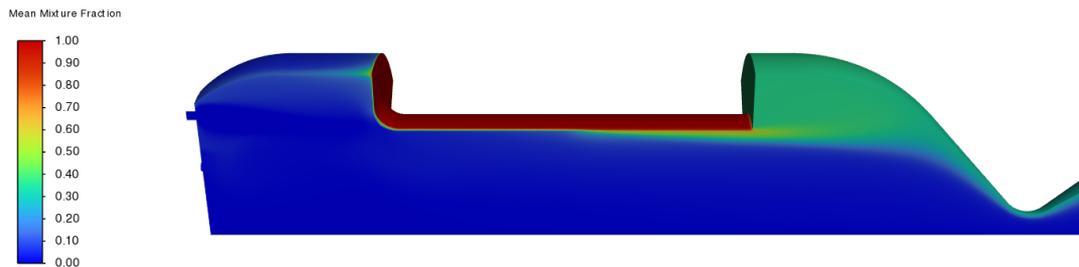
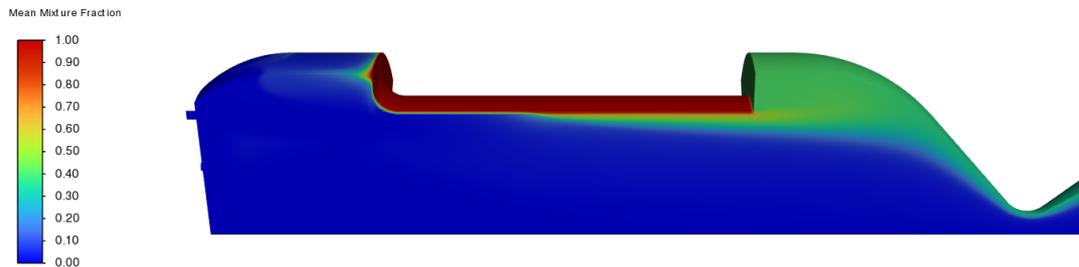


Figura 49 – *Mean Mixture Fraction* no momento $t = 0$.

Figura 50 – *Mean Mixture Fraction* no momento $t = 5$.Figura 51 – *Mean Mixture Fraction* no momento $t = 10$.Figura 52 – *Mean Mixture Fraction* no momento $t = 15$.

As Figuras 53 a 56 mostram as linhas de corrente do escoamento e suas respectivas temperaturas para os tempos $t = [0, 5, 10, 15]$ s. Destacam-se dessas imagens os dois fenômenos de recirculação que ocorrem na pré-câmara de combustão e na pós-câmara de combustão. Na pré-câmara de combustão, o oxidante que é injetado a partir dos injetores colide com o grão e em seguida cria vórtices ao longo de toda a pré-câmara. Já na pós-câmara de combustão, o escoamento rico em combustível que surge a partir da queima do grão de parafina recircula na região entre o grão e a parede, logo acima da faixa onde ocorre o processo de combustão. Todas as 16 figuras sobre as linhas de corrente podem ser vistas no Apêndice G.

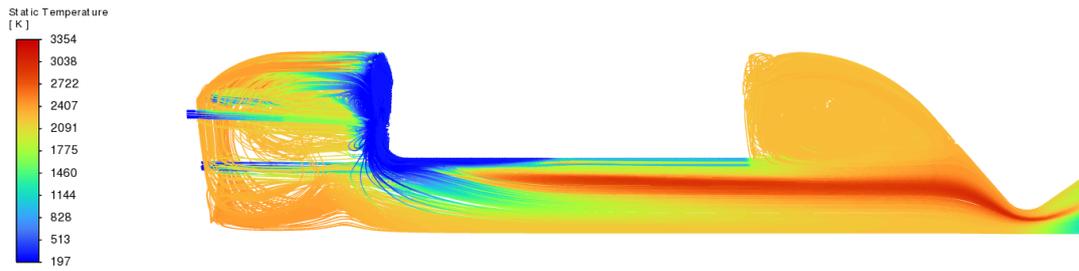


Figura 53 – Linhas de corrente no momento $t = 0$.

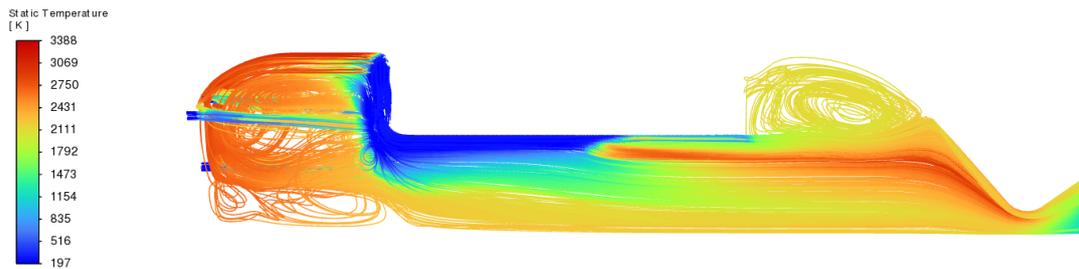


Figura 54 – Linhas de corrente no momento $t = 5$.

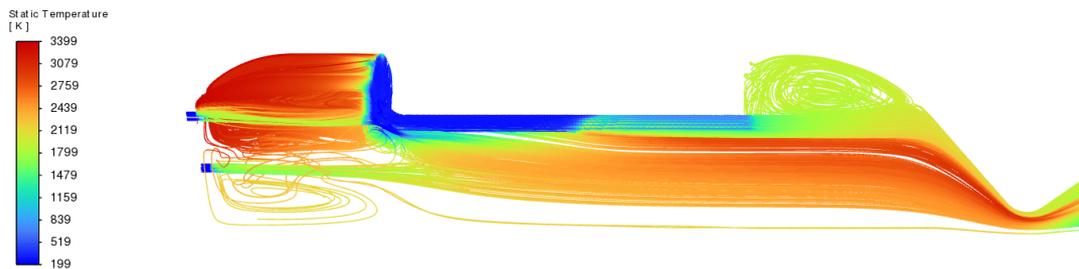


Figura 55 – Linhas de corrente no momento $t = 10$.

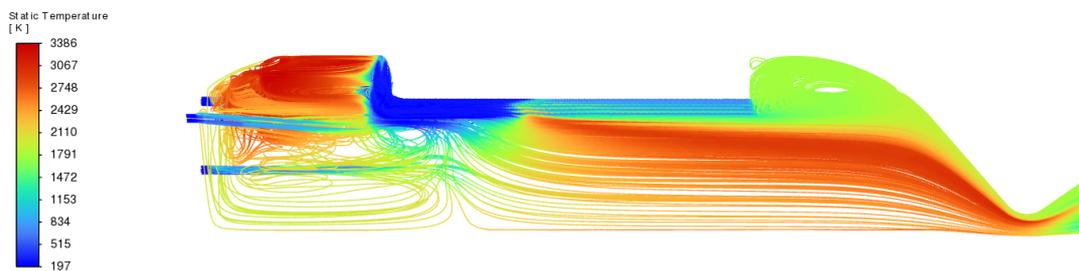


Figura 56 – Linhas de corrente no momento $t = 15$.

A Figura 57 mostra os valores da velocidade (em preto v_{exit}), número de Mach (em azul M) e velocidade do som (em vermelho a) na saída da tubeira.

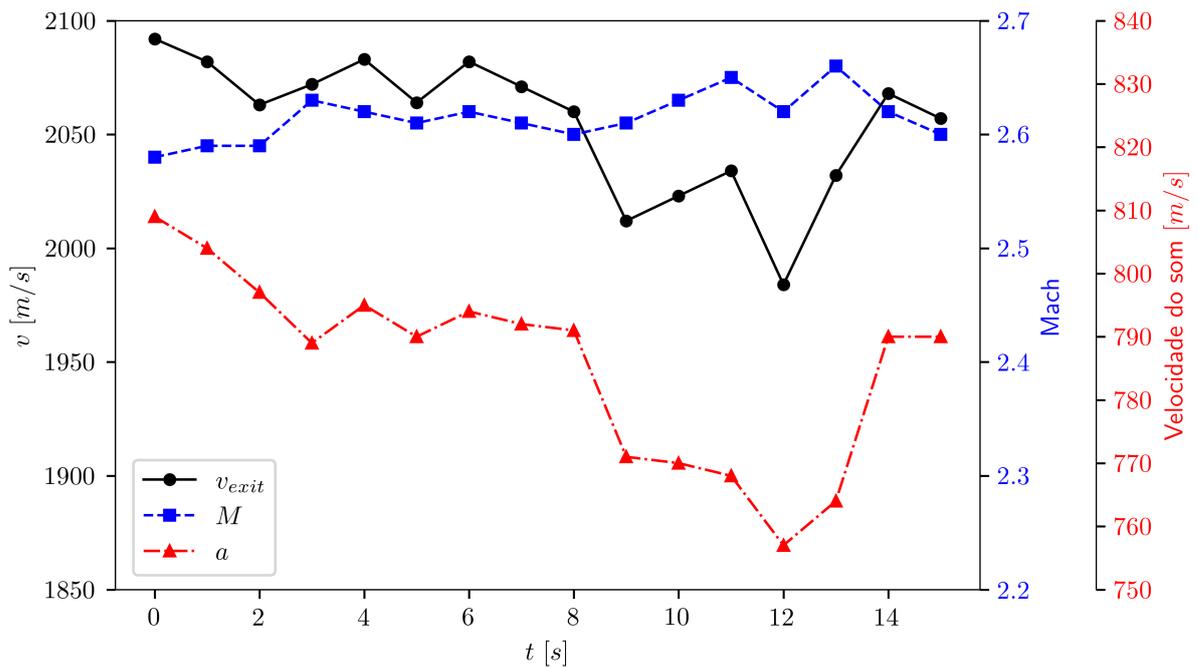


Figura 57 – Gráfico de velocidade.

A Figura 58 mostra a vazão mássica total (em azul \dot{m}_{tot} , oxidante e combustível somados), a qual é utilizada juntamente com os valores de velocidade da Figura 57 e pressão da Figura 48 para encontrar o valor do empuxo T (em preto no gráfico) a partir da equação do foguete (Eq. (2.3)).

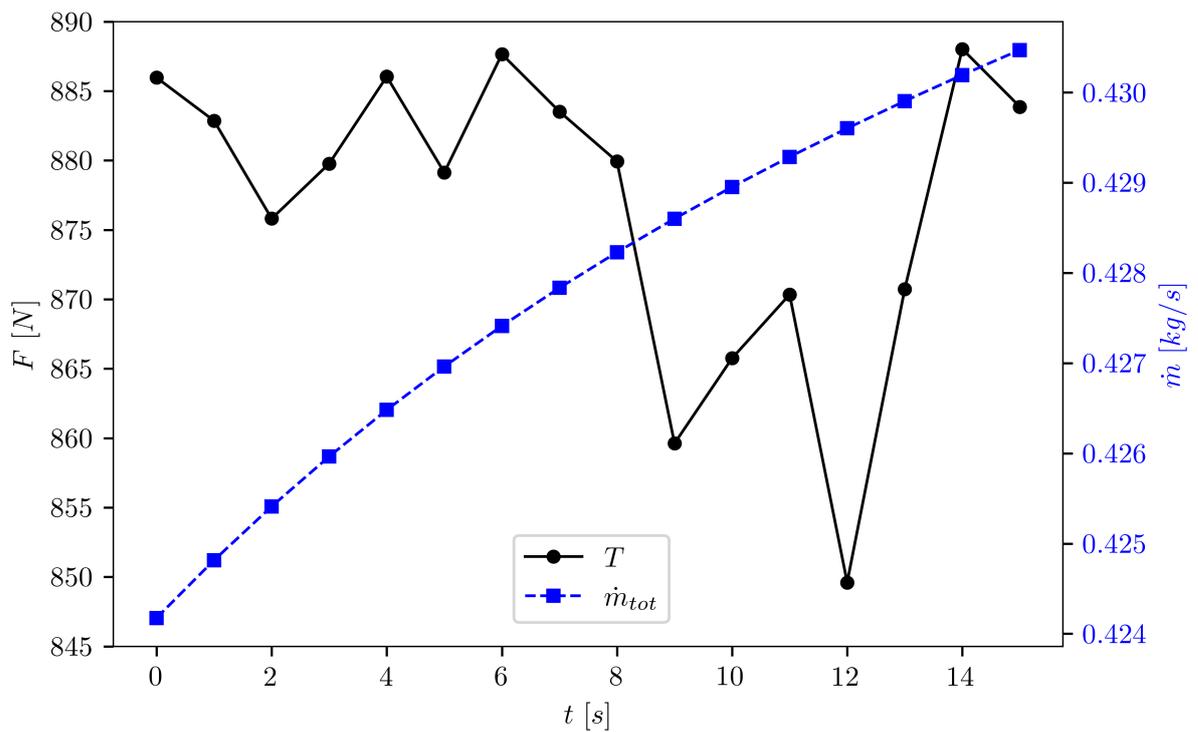


Figura 58 – Gráfico de empuxo e vazão mássica.

Por fim, a Figura 59 mostra a fração molar dos principais produtos do processo de combustão na saída da tubeira.

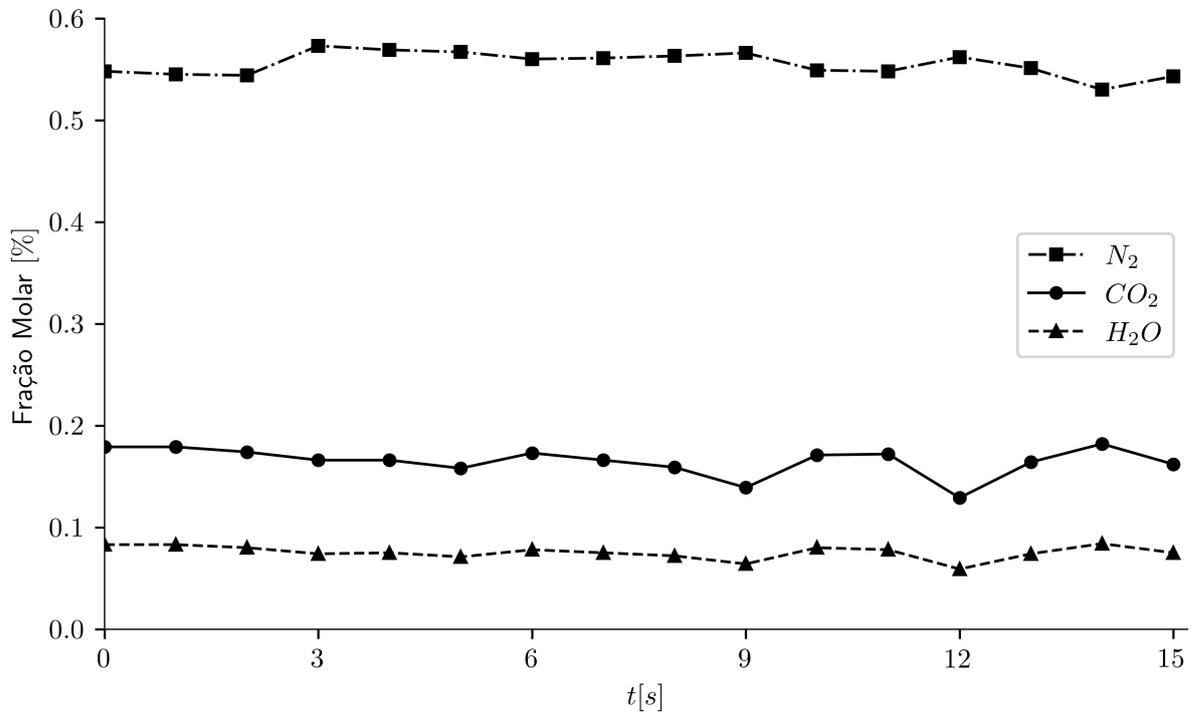


Figura 59 – Gráfico de principais produtos químicos na saída da tubeira.

6.3 Validação

Tabela 8 – Comparação entre simulação e RPA.

Dado	Simulação	RPA	Desvio (%)
Empuxo [N]	877	931	5,82
Vazão mássica total [kg/s]	0,428	0,420	1,85
Pressão na câmara de combustão [bar]	28,9	30	3,79
Pressão na saída da tubeira [bar]	0,978	0,899	8,79
Temperatura na câmara de combustão [K]	3385	3252	4,09
Temperatura na saída da tubeira [K]	1783	1974	9,67
Velocidade na saída da tubeira [m/s]	2055	2384	13,8
Velocidade do som na saída da tubeira [m/s]	786	861	8,75
Número de Mach na saída da tubeira	2,615	2,768	5,53
Fração molar de CO ₂ na saída	0,165	0,133	3,19
Fração molar de H ₂ O na saída	0,075	0,199	12,4
Fração molar de N ₂ na saída	0,555	0,552	0,29

A Tabela 8 compila alguns dos valores numéricos médios obtidos através das simulações e os compara aos valores obtidos a partir do software *Rocket Propulsion Analysis* (RPA). Com

exceção dos parâmetro de fração molar de água (H_2O) e os parâmetro de velocidade, todos os outros parâmetros quantitativos ficaram abaixo de 10% de erro.

Foram realizados em julho e agosto de 2024 dois testes de bancada com o motor de foguete SARA, sendo o primeiro um teste preliminar com combustível 100% parafina e 5 segundos de queima, e o segundo teste mais parecido com as condições na qual foi realizada a simulação, isto é, combustível 95% parafina e 5% polietileno e tempo de operação de 10 segundos.

O baixo tempo de operação no teste principal é devido principalmente às diferenças das propriedades do grão feito no CPL e o grão feito na Coreia, que afetam diretamente na taxa de regressão do combustível. O tipo de parafina utilizada (diferentes fornecedores), diferentes processos de mistura entre a parafina e o polietileno, entre outros fatores podem ser a causa da diferença entre as propriedades dos grãos do CPL e da Coreia. Conforme explicitado na introdução deste trabalho, a regressão da simulação foi baseada nos dados do grão de combustível da Coreia, e o teste experimental foi abordado no trabalho como forma de mostrar as diversas semelhanças entre a simulação e o teste físico, mesmo tendo diferentes condições iniciais e condições de operação.

Os vídeos de ambos os testes podem ser encontrados no canal do *Youtube* do CPL (CPL - UnB, 2024) (ver Figura 60).

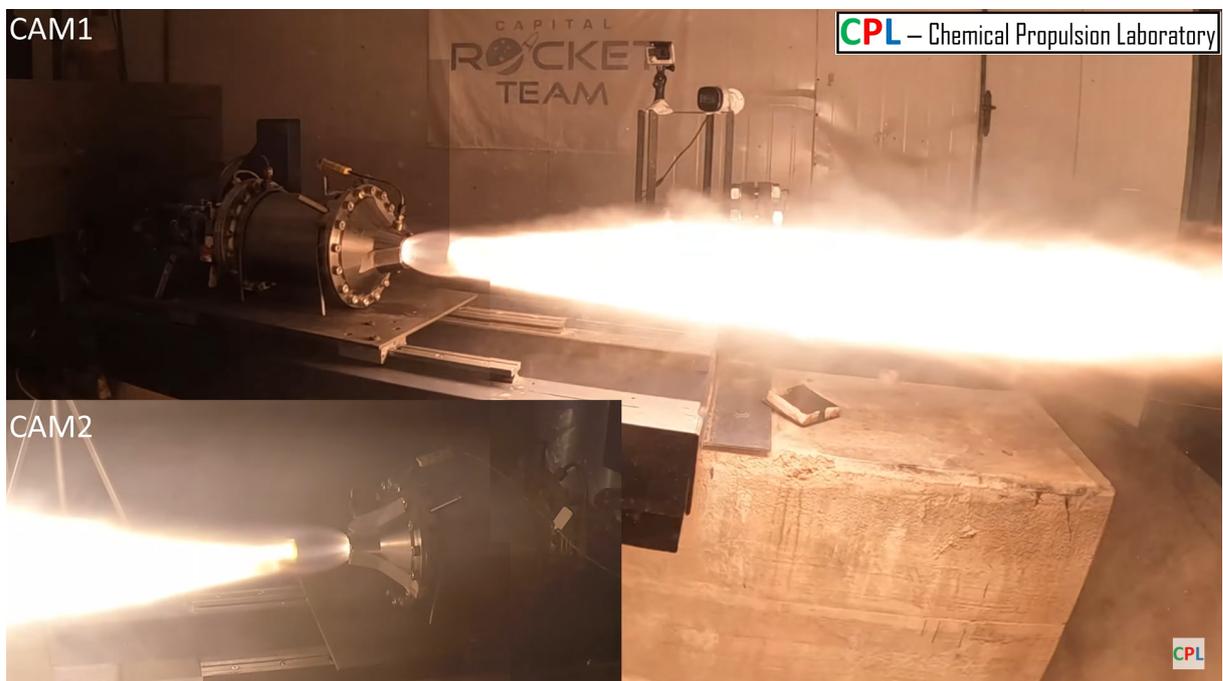
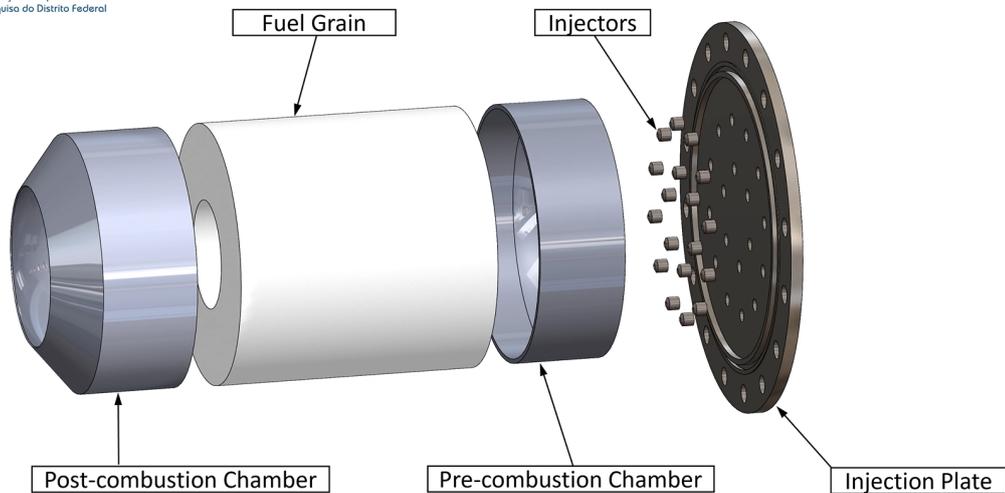


Figura 60 – Teste de 10 segundos do motor SARA.

Para posicionar o grão dentro do motor, primeiramente é colocada uma manta protetora feita de borracha e dentro da manta são colocados duas peças impressas em 3D apenas para fixar o grão no local correto, conforme mostrado na Figura 61.



Universidade de Brasília

Faculdade UnB Gama



CPL

Figura 61 – Montagem do grão no motor SARA.

Dentre os resultados qualitativos obtidos, se destaca a alta temperatura na pré câmara de combustão, a qual é maior do que a temperatura na pós câmara de combustão. Acreditava-se que pela alta concentração de óxido nitroso na pré-câmara de combustão que é injetado à baixíssimas temperaturas (ver Figura 62), que a temperatura nesta região também seria baixa e aumentaria apenas após a faixa onde ocorre o processo de combustão. Mas devido aos fenômenos de recirculação e possivelmente à dissociação do óxido nitroso N_2O nesta região, existe um aumento considerável na temperatura.

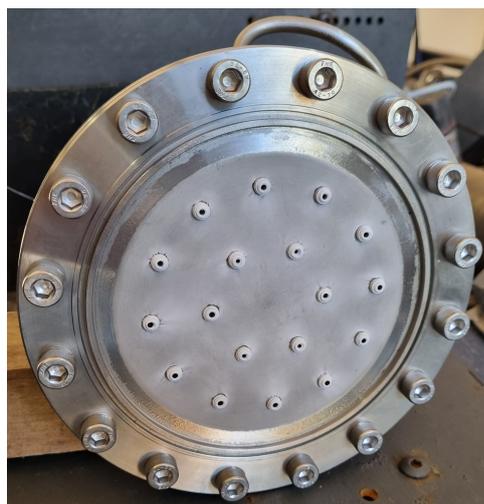


Figura 62 – Placa injetora após teste frio.

A temperatura alta pode ser vista pela diferença de deterioração das peças de impressão 3D localizadas antes e depois do grão, onde a peça posicionada na pré-câmara de combustão

queimou muito mais do que a peça posicionada na pós-câmara, conforme pode ser visto na Figura 63.

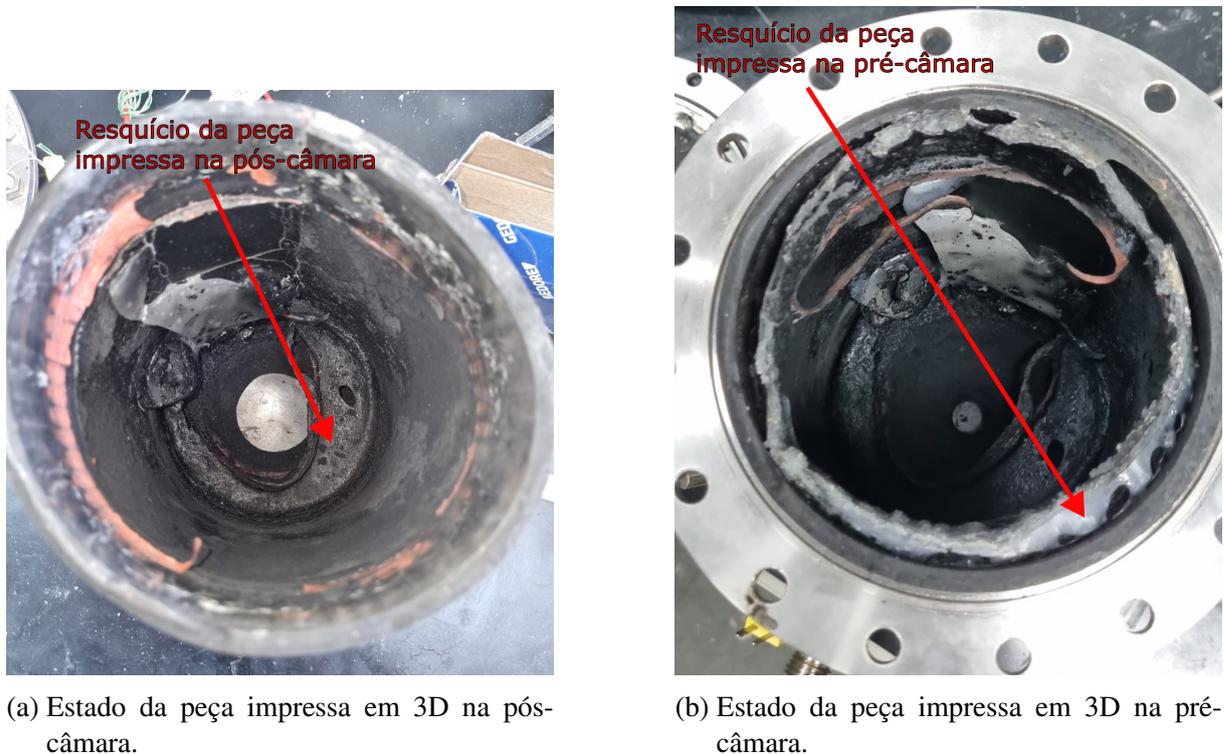


Figura 63 – Deterioração das peças impressas em 3D na câmara de combustão.

A Figura 64 mostra o estado inicial e o estado final da peça impressa em 3D que é fixada na pré-câmara de combustão.



Figura 64 – Deterioração da peça 3D da pré-câmara de combustão

Por fim, vale destacar que a parte interna da placa injetora sofreu um leve tratamento térmico devido às altas temperaturas na região, conforme pode ser visto na Figura 65.

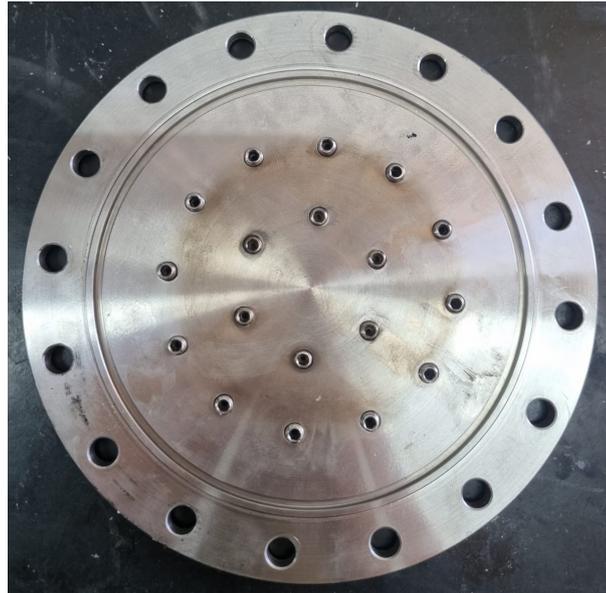


Figura 65 – Tratamento térmico sofrido pela placa injetora.

Quanto aos dados quantitativos (publicados em (SHYNKARENKO et al., 2024)), são compilados na Tabela 9 os valores obtidos no experimento de 10 segundos comparados aos valores médios obtidos na simulação.

Tabela 9 – Comparação entre simulação e testes experimentais.

Dado	Simulação	Experimental	Desvio (%)
Empuxo [N]	877	950	7,68
Vazão mássica total [kg/s]	0,428	0,483	11,39
Pressão na câmara de combustão [bar]	28,9	31,8	9,12
Temperatura na câmara de combustão [K]	3385	2489	36,00
Temperatura na saída da tubeira [K]	1783	1095	62,83
Número de Mach na saída da tubeira	2,615	3,0	12,83

O desvio associado aos valores de temperatura são significativamente altos. Isso ocorre possivelmente devido à troca de calor entre o escoamento e a estrutura do motor no experimento real, o que implica na diminuição da temperatura. O posicionamento do sensor de temperatura também pode acabar captando o valor da temperatura em uma região do escoamento em que a mesma é mais baixa. A presença das peças de impressão 3D na pré-câmara e na pós-câmara também podem acabar absorvendo calor e derretendo, fazendo com que o escoamento tenha uma temperatura mais baixa do que o esperado. Por fim, vale lembrar que as condições de contorno também são diferentes, como os raios final e inicial do grão, a densidade, o fluxo de oxidante, etc., o que também acarreta em diferenças entre os resultados experimental e simulado.

6.4 Comparação modelo Transiente vs modelo Permanente

Apesar do problemas que surgiram em cada um dos modelos, podem ser destacados pontos positivos e negativos sobre cada um, o que ajuda a distinguir em qual situação cada modelo é mais recomendado de ser utilizado.

- **Compatibilidade com outros modelos:** Um dos maiores defeitos do modelo transiente é a incompatibilidade do mesmo com outros modelos físicos e suas iterações com a malha dinâmica. Como pode ser visto com os problemas que surgiram entre o DPM e o excesso de injeção de combustível devido ao movimento da malha, vários modelos físicos tem seu funcionamento alterado devido à maneira que o programa *Ansys Fluent* atualiza os parâmetros de cada modelo conforme o movimento da malha e resolve suas equações associadas.

Dessa forma, cada modelo físico a mais que é adicionado à simulação resulta em diversos novos problemas que devem ser solucionados, e tal resolução é trabalhosa e custa tempo, tanto de pesquisa, quanto teste, simulação e validação.

- **Geração de dados:** O modelo transiente gera todas as imagens e dados de uma só vez, bastando apenas configurá-lo uma única vez. Então é bastante conveniente configurar toda a simulação com os dados necessários, deixar calculando por alguns dias e depois ter todos os dados separados e salvos. O problema no modelo transiente é devido a impossibilidade de se conseguir novos dados depois que a simulação termina. Enquanto que no modelo permanente, é possível visitar cada uma das simulações já resolvidas e obter novos parâmetros a partir dos dados salvos, a simulação transiente não consegue salvar os dados não pré-definidos intermediários da simulação, seja pelo grande volume de memória necessária para gravar todos as informações de todos os passos de tempo, ou pelo próprio movimento da malha que impossibilita retornar a simulação à algum passo de tempo passado.

Dessa forma, quando se tem uma simulação muito bem estabilizada e se tem definido quais dados são necessários, a simulação transiente é uma boa opção devido à conveniência de se simular apenas uma vez e poder se concentrar em outras tarefas enquanto a simulação é resolvida. Quando se está testando novas configurações da simulação, ou quando ainda não se sabe exatamente quais são todos os dados necessários, as diversas simulações permanentes fornecem uma opção robusta para se ter toda as informações a disposição quando necessário, apesar de ser mais trabalhosa de se usar.

- **Complexidade:** O modelo transiente exige do usuário um conhecimento mais aprofundado sobre diversos aspectos de uma simulação de fluidos. Por exemplo, a escolha de um *solver* da simulação (primeira, segunda ou terceira ordem) é uma escolha trivial numa simulação do tipo permanente, pois caso a simulação divirja, basta trocar o *solver* e rei-

niciar o cálculo. Caso a simulação transiente falhe após alguns dias de cálculo devido à uma escolha errada do solver, são dias de trabalho e poder computacional jogados fora, pois numa simulação de malha dinâmica não é possível retornar a malha e os dados da simulação simultaneamente para um tempo anterior.

Novamente, é recomendado utilizar o modelo transiente apenas quando o usuário estiver confiante da estabilidade de sua simulação e tiver segurança de que todos os parâmetros de solução terão boa qualidade ao longo de todo o tempo.

- **Discretização do tempo:** Existe uma quantidade finita pequena de tempos discretos no qual o modelo permanente consegue ser resolvido, isto é, quanto mais passos de tempo o usuário deseja calcular, maior será a quantidade de trabalho envolvido em configurar cada uma das simulações e executá-las¹. Já para o modelo transiente é possível obter muito mais dados e imagens ao longo do tempo devido ao modelo utilizar o estado da simulação no passo de tempo anterior para calcular o próximo, assim diminuindo consideravelmente a necessidade de tempo computacional para se calcular muitos passos de tempo.
- **Flutuações temporais:** Quando se está interessado em calcular flutuações temporais no escoamento, como vorticidades ou influência do movimento da malha no escoamento, o modelo transiente deve ser adotado. Apenas recomenda-se cautela ao interpretar se algum fenômeno de flutuação temporal é devido à fenômenos físicos reais ou se estão relacionados à flutuações computacionais, como discretização não apropriada do domínio², movimento demasiadamente acelerado da malha, etc.

¹ O tratamento das superfícies, a compilação da UDF, a definição do movimento de cada região, entre outras configurações, devem ser feitas uma a uma no *Ansys Fluent*, pois ao se duplicar uma simulação dentro do *workbench*, tais configurações não são transportadas e resultam em erros graves.

² Resolução de turbulência utilizando o modelo LES exige uma malha com novos parâmetros de refinamento quando comparado à modelos de turbulência RANS, por exemplo.

7 Conclusão

As teorias e principais equações relacionadas ao funcionamento de um motor de foguete híbrido, assim como aquelas necessárias para simular o mesmo foram descritas no capítulos iniciais do trabalho, de maneira a fornecer um material conciso e de qualidade para um leitor interessado tanto na problemática sobre MFH, quanto estudantes e profissionais da área de CFD.

Dentre as teorias abordadas, estão aquelas relacionadas às propriedades quantitativas e qualitativas de operação de um motor de foguete híbrido, as leis de conservação da massa, momento e energia, uma poderosa ferramenta computacional de modelagem de escoamentos turbulentos, e por fim, a maneira na qual um processo de combustão é descrito e desenvolvido computacionalmente.

Além do desenvolvimento teórico, foi criada uma metodologia de movimento de malha que permite variar o domínio de cálculo da simulação do motor SARA, a fim de contabilizar o efeito de regressão do grão de combustível sólido. O movimento da malha é feito de tal maneira a preservar a qualidade de malha durante toda a simulação, qualidade a qual é de grande importância para obtenção de dados que sejam fidedignos à realidade.

Do ponto de vista prático de simulação, além da implementação do modelo de malha dinâmica, foram utilizados ainda diversos modelos computacionais para garantir que a simulação do motor seja a mais próxima possível da realidade, tendo em vista o poder computacional à disposição para realização de tal simulação. Foram utilizados modelo de turbulência $k-\omega SST$, modelo de resolução de equações transiente, modelo de combustão não pré-misturado, modelo de injeção de partículas discretas, entre outros.

Apesar dos resultados de distribuição de temperatura obtidos não serem ideais devido à um problema de fixação de óxido nitroso na parede esquerda do grão de combustível, as distribuições de pressão e de fração mássica de combustível e oxidante obtidas foram satisfatórias do ponto de vista qualitativo. Isto é, existe uma concentração de combustível na região próxima à superfície inferior do grão, se estendendo ao longo da parede da pós-câmara de combustão e gerando uma região de queima entre o combustível e o oxidante. Além disso, a pressão próxima de 30 bar permanece uniforme ao longo da câmara de combustão e diminui significativamente ao longo da tubeira, onde a energia interna do escoamento é convertida em energia cinética. Do ponto de vista quantitativo, os resultados médios obtidos na simulação também tiveram boa correlação com os resultados esperados a partir do programa *Rocket Propulsion Analysis*.

Os valores de pressão e temperatura da câmara de combustão permaneceram relativamente estáveis durante todo o tempo de simulação do motor de foguete SARA. Este resultado pode acabar facilitando o projeto de futuros motores que utilizem a mesma geometria interna do motor SARA, uma vez que as condições que a estrutura do motor deve resistir são conhecidas

e não variam de maneira significativa no tempo. Ao se construir o motor SARA utilizando um novo procedimento de manufatura (usinagem, manufatura aditiva, etc) ou um novo material (Inconel, aço, material compósito), é possível prever como o escoamento irá interagir com a parede interna do motor, simplificando o processo de projeto estrutural.

Ainda restam diversos desafios a serem superados quanto à simulação de motores de foguete híbridos com domínio variável, como corrigir a interação entre o movimento do grão e a condição de contorno de injeção de combustível no regime transiente, ou resolver o problema de estagnação do escoamento próximo à superfície do grão na pré-câmara, ou utilizar um modelo mais sofisticado de resolução de turbulência (como o modelo LES) para compreender melhor a influência da recirculação do escoamento na pré/pós câmara do motor, ou utilizar um modelo de movimento de malha de seis graus de liberdade para estudar o efeito de regressão do grão de combustível em cada ponto da sua superfície, entre outros. Este trabalho tem como objetivo não só apresentar o progresso feito no tema em questão, mas também fornecer recursos para que alunos e profissionais obtenham sucesso ao seguir o estudo que aqui foi apresentado.

Referências

- ANDERSON, J. *Fundamentals of Aerodynamics*. 6. ed. [S.l.]: Mc Graw Hill Education, 2017. Citado na página 27.
- ANSYS. *ANSYS Fluid Dynamics Verification Manual*. [S.l.]: ANSYS, Inc., 2020. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 43.
- BREDBERG, J. On the wall boundary condition for turbulence models. *Internal Report 00/4*, 2000. Citado na página 40.
- CAI, G. et al. Scale effect of fuel regression rate in hybrid rocket motor. *Aerospace Science and Technology*, 2011. Citado na página 24.
- CEBECI, T.; SMITH, A. M. O. *Analysis of Turbulent Boundary Layers*. [S.l.]: Academic Press, 1974. Citado na página 29.
- CHA, J. Numerical simulation of chemical propulsion systems: Survey and fundamental mathematical modeling approach. *mdpi*, 2023. Citado na página 17.
- CHELARU, T.-V.; MINGIREANU, F. Hybrid rocket engine, theoretical model and experiment. *Acta Astronautica*, 2010. Citado na página 21.
- CPL - UnB. *Hybrid rocket engine test (with TVC gimbal), blended fuel*. 2024. <<https://www.youtube.com/watch?v=uPTBqH0nCYM>>. Online, acessado em 14 de setembro de 2024. Citado na página 69.
- DAVYDENKO, N. A. et al. Hybrid rocket engines: The benefits and prospects. *Aerospace Science and Technology*, 2006. Citado na página 17.
- DEQUICK, B. Two-phase flow numerical model of a paraffin-fueled hybrid rocket motor. Université Libre de Bruxelles, 2022. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 22.
- GIERAS, M.; GORGERI, A. Numerical modelling of the hybrid rocket engine performance. *Propulsion and Power Research*, 2021. Citado na página 18.
- HINZE, J. O. *Turbulence*. New York: McGraw-Publishing, 1975. Citado na página 31.
- KIM, S.; MOON, H.; KIM, J. Evaluation of paraffin–polyethylene blends as novel solid fuel for hybrid rockets. *Journal of propulsion and power*, 2015. Citado 3 vezes nas páginas 18, 24 e 49.
- KNUPP, P. M. Remarks on mesh quality. *45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, 2007. Citado na página 38.
- MAZZETTI, A.; MEROTTO, L.; PINARELLO, G. Paraffin-based hybrid rocket engines applications: A review and a market perspective. *Acta Astronautica*, 2016. Citado na página 17.
- MENG, X. et al. Numerical simulation of combustion surface regression based on butterworth filter in hybrid rocket motor. *Acta Astronautica*, 2022. Citado na página 18.

- MENG, X. et al. Three-dimensional numerical simulation of hybrid rocket motor based on dynamic mesh technology. *Aerospace Science and Technology*, 2023. Citado na página 18.
- SCHLICHTING, H. *Boundary Layer Theory*. 7. ed. [S.l.]: McGraw-Hill Book Company, 1979. Citado na página 30.
- SHYNKARENKO, O.; ANDRIANOV, A.; BERTOLDI. Low-thrust hybrid motor efficiency research for design optimization purposes. In: A.E.M. *AIAA/SAE/ ASEE Joint Propulsion Conference*. Orlando USA, 2015. Citado na página 18.
- SHYNKARENKO, O. et al. Conceptual design of a 1 kn hybrid rocket engine manufactured with additive technology. *International Astronautical Congress*, 2024. Citado na página 72.
- SUTTON, G. P.; BIBLARZ, O. *Rocket Propulsion Elements*. 8. ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2010. Citado na página 21.
- TIAN, H.; DUAN, Y.; ZHU, H. Three-dimensional numerical analysis on combustion performance and flow of hybrid rocket motor with multi-segmented grain. *Chinese Journal of Aeronautics*, 2019. Citado na página 19.
- TIAN, H.; GUO, Y.; WANG, P. Combustion characteristics of hybrid rocket motor with segmented grain. *Aerospace Science and Technology*, 2015. Citado na página 19.
- TIAN, H. et al. Numerical analysis of the hybrid rocket motor with axial injection based on oxidizer flow distribution. *Acta Astronautica*, 2021. Citado na página 19.
- TIAN, H. et al. Dynamic characteristics study of regression rate in variable thrust hybrid rocket motor. *Acta Astronautica*, 2022. Citado na página 18.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. 2. ed. [S.l.]: Pearson Education, 2007. Citado na página 27.
- WEI, T. et al. Experiment and numerical research on regression rate of hybrid rocket motor with single-port wagon wheel fuel grain. *Acta Astronautica*, 2023. Citado na página 18.
- WHITE, F. M. *Viscous Fluid Flow*. [S.l.]: McGraw-Hill Book Company, 1974. Citado na página 30.
- WHITE, F. M. *Fluid Mechanics*. 8. ed. [S.l.]: Mc Graw Hill Education, 2016. Citado na página 39.
- WILCOX, D. C. *Turbulence Modeling for CFD*. La Canada, California: DCW Industries, 1998. Citado na página 32.
- ZILLIAC, G.; KARABEYOGLU, M. A. Hybrid rocket fuel regression rate data and modeling. *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, 2006. Citado na página 24.

APÊNDICE A – Cálculo da taxa de regressão

```

##### PACKAGES IMPORTS #####

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import math
from scipy.integrate import solve_ivp

##### ODE SOLUTION FOR THE RADIUS #####

def drdt(t,r):
    # PR95PE05
    a = 0.234
    n = 0.39
    m = 0.38

    return a*(m/(math.pi*r**2))**n/1000

r0 = 0.025
t_span = [0,30]
t = np.linspace(t_span[0],t_span[1],30000)

sol_PR95PE05 = solve_ivp(f,t_span,[r0],t_eval = t)

##### SOLUTION FOR THE REGRESSION RATE #####

dr_PR95PE05 = np.zeros(30000)
it_max = 0
for i in range(len(sol_PR95PE05.y[0])):
    dr_PR95PE05[i] = 0.234*(0.38/(math.pi*sol_PR95PE05.y[0][i]**2))**0.
    39

    if sol_PR95PE05.y[0][i] <= 0.06:
        it_max = i
print(f"Complete combustion time: {sol_PR95PE05.t[it_max]}")

##### GRAPH PLOT FOR THE RADIUS #####

fig, ax = plt.subplots()
plt.plot(t, sol_PR95PE05.y[0]*1000,'black',lw = 1)
plt.ylim([0, 60])
plt.xlim([0, 30])

```

```

plt.xlabel("Tempo (s)")
plt.ylabel("Raio do grao (mm)")

ax.spines['top'].set_linewidth(0.5)
ax.spines['right'].set_linewidth(0.5)
ax.spines['bottom'].set_linewidth(0.5)
ax.spines['left'].set_linewidth(0.5)

##### GRAPH PLOT FOR THE REGRESSION RATE #####

fig, ax = plt.subplots()
plt.plot(t, dr_PR95PE05, 'black', lw = 1)
plt.ylim([0.9, 1.9])
plt.xlim([0, 30])
plt.yticks(np.linspace(0.9, 1.9, 6))
plt.xlabel('Tempo (s)')
plt.ylabel('Taxa de regressao (mm/s)')

ax.spines['top'].set_visible(False)
ax.spines['right'].set_visible(False)
ax.spines['bottom'].set_linewidth(0.5)
ax.spines['left'].set_linewidth(0.5)

##### RADIUS FUNCTION POLYNOMIAL FIT #####

degree = 4
coefficients_r = np.polyfit(t, sol_PR95PE05.y[0], degree)
poly_r = np.poly1d(coefficients_r)

x_points = np.linspace(0, t[it_max], 30000)
y_points = poly_r(x_points)

print(f"Radius coefficients: {coefficients_r}")
print(f"Polynomial: \n{poly_r}")

error_max = 0.0
for i in range(it_max):
    error = (sol_PR95PE05.y[0][i] - y_points[i]) / sol_PR95PE05.y[0][i] * 100
    if error > error_max:
        error_max = error
print(f'Maximum error: {error_max:.3f}%')

##### REGRESSION RATE FUNTION POLYNOMIAL FIT #####

degree = 4
coefficients_dr = np.polyfit(t, dr_PR95PE05, degree)
poly_dr = np.poly1d(coefficients_dr)

```

```
x_points = np.linspace(0,t[it_max],30000)
y_points = poly_dr(x_points)

print(f"Regression rate coefficients: {coefficients_dr}")
print(f"Polynomial: \n{poly_dr}")

error_max = 0.0
for i in range(it_max):
    error = (dr_PR95PE05[i]-y_points[i])/dr_PR95PE05[i]*100
    if error > error_max:
        error_max = error
print(f'Maximum error: {error_max:.3f}%')
```

APÊNDICE B – UDF para movimento de malha

```

1 #include "udf.h"
2
3 DEFINE_GRID_MOTION(dynamesh, domain, dt, time, dtime)
4 {
5     Thread *tf = DT_THREAD(dt);
6     face_t f;
7     Node *v;
8     real NV_VEC(pos), NV_VEC(xPos);
9     real length, new_length;
10    real prevTime = time - dtime;
11    int n;
12
13    real rb = -9.76*pow(10,-9)*pow(prevTime,4) + 8.888*pow(10,-7)*pow(
prevTime,3)
14            -3.738*pow(10,-5)*pow(prevTime,2) + 0.001784*prevTime +
0.0253;
15
16    real r = -9.76*pow(10,-9)*pow(time,4) + 8.888*pow(10,-7)*pow(time,3)
17            -3.738*pow(10,-5)*pow(time,2) + 0.001784*time + 0.0253;
18
19    SET_DEFORMING_THREAD_FLAG(THREAD_T0(tf));
20
21    begin_f_loop(f, tf)
22    {
23        f_node_loop(f, tf, n)
24        {
25            v = F_NODE(f, tf, n);
26            if (NODE_POS_NEED_UPDATE(v) && time > 0)
27            {
28                NODE_POS_UPDATED(v);
29
30                NV_D(pos, =, 0, NODE_Y(v), NODE_Z(v));
31                NV_D(xPos, =, NODE_X(v), 0, 0);
32
33                length = sqrt(pow(NODE_Y(v),2) + pow(NODE_Z(v),2));
34                new_length = length + r - rb;
35
36                NV_S(pos, /=, length);
37                NV_S(pos, *=, new_length);
38                NV_V(pos, +=, xPos);

```

```
39         NV_V(NODE_COORD(v), =, pos);
40     }
41 }
42 }
43 end_f_loop(f, tf);
44 }
```

APÊNDICE C – Malha dinâmica

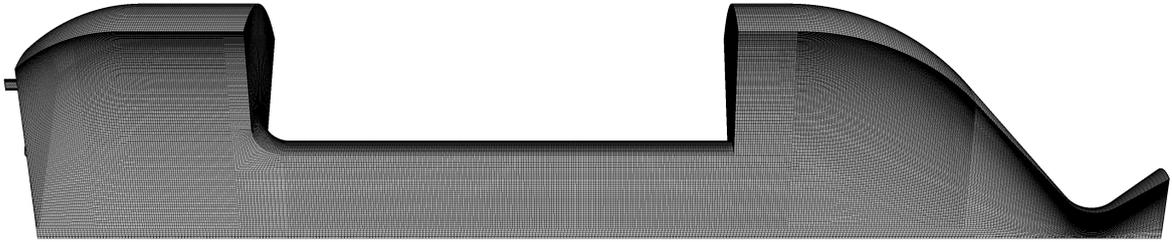


Figura 66 – Malha no tempo $t = 0s$.



Figura 67 – Malha no tempo $t = 1s$.

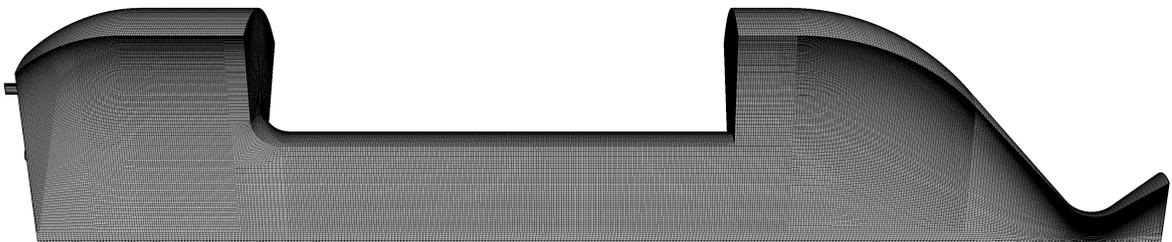


Figura 68 – Malha no tempo $t = 2s$.

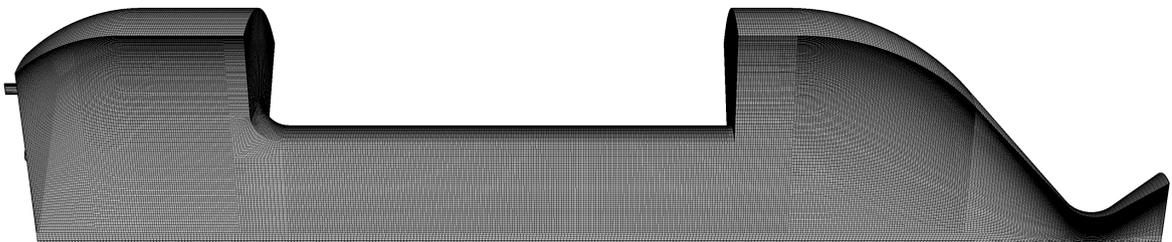


Figura 69 – Malha no tempo $t = 3s$.

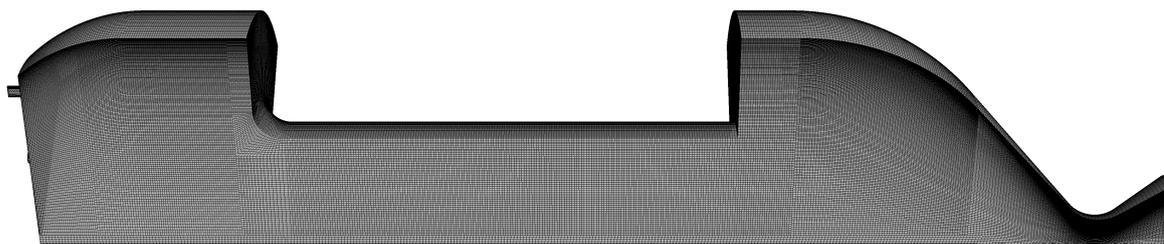


Figura 70 – Malha no tempo $t = 4s$.

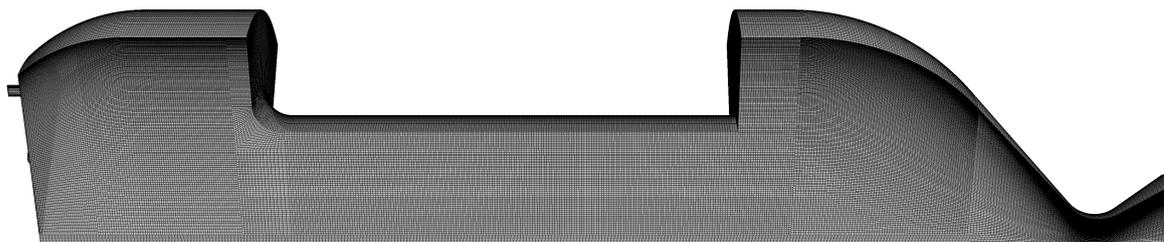


Figura 71 – Malha no tempo $t = 5s$.

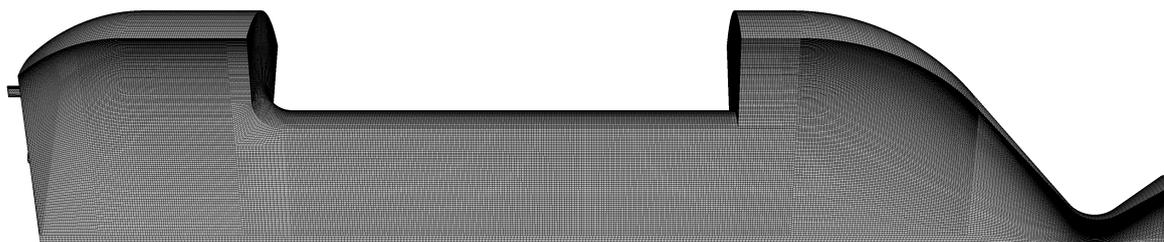


Figura 72 – Malha no tempo $t = 6s$.

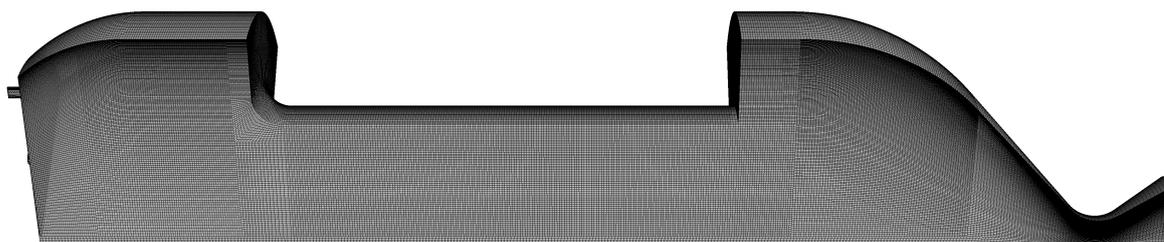


Figura 73 – Malha no tempo $t = 7s$.

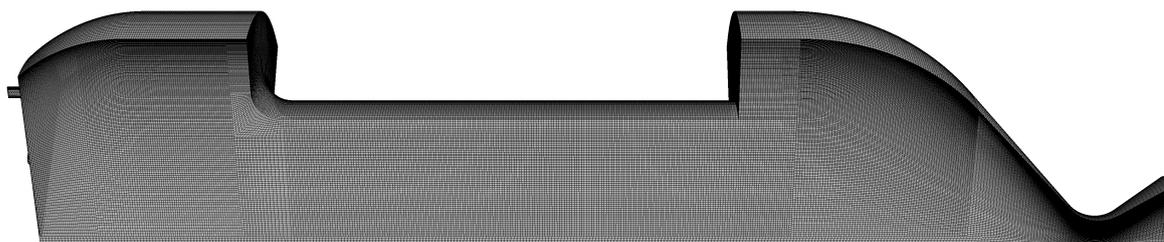
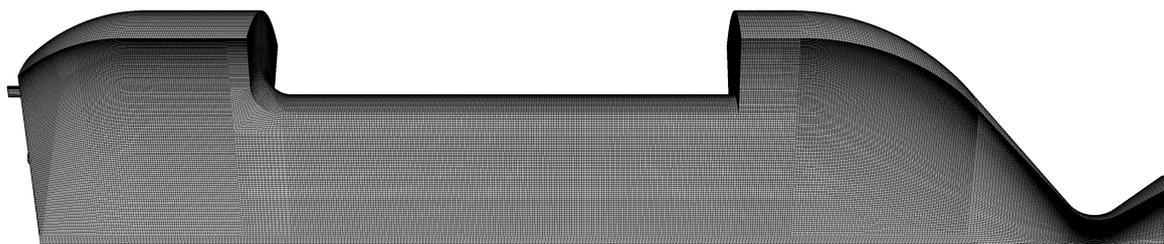
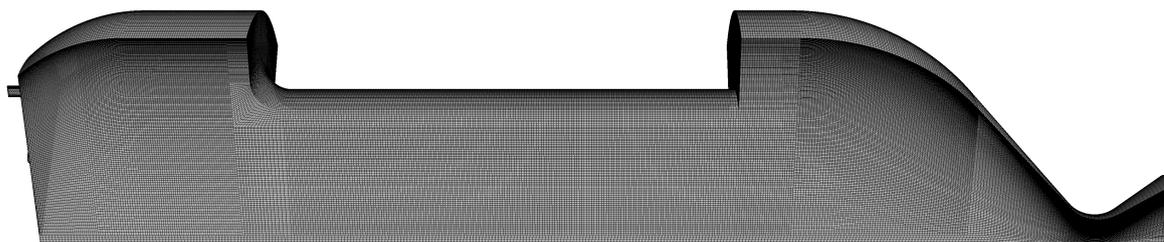
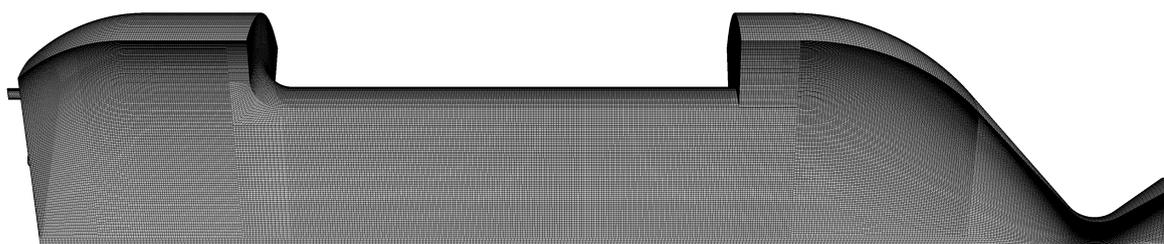
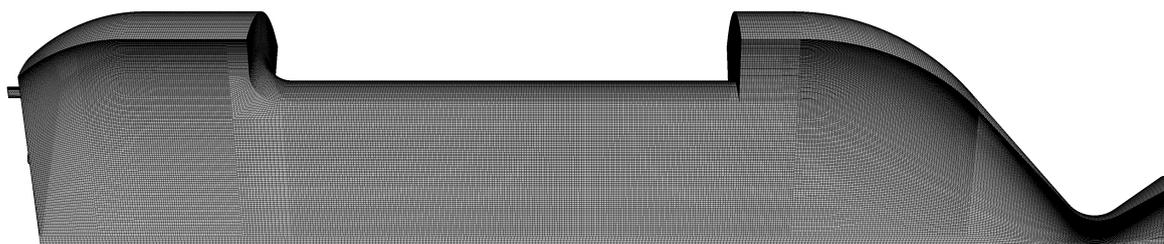
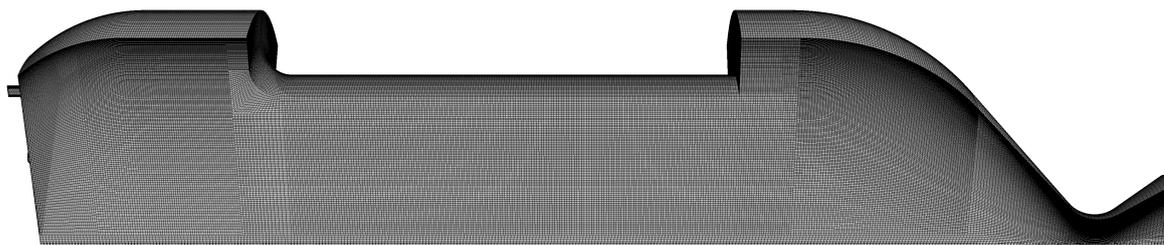


Figura 74 – Malha no tempo $t = 8s$.

Figura 75 – Malha no tempo $t = 9s$.Figura 76 – Malha no tempo $t = 10s$.Figura 77 – Malha no tempo $t = 11s$.Figura 78 – Malha no tempo $t = 12s$.Figura 79 – Malha no tempo $t = 13s$.

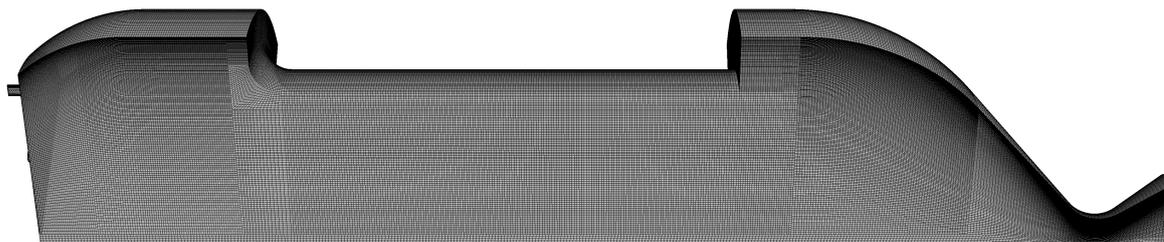


Figura 80 – Malha no tempo $t = 14s$.

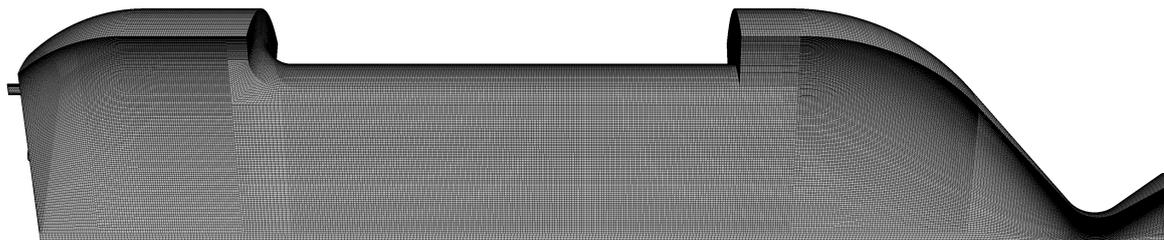


Figura 81 – Malha no tempo $t = 15s$.

APÊNDICE D – Distribuição de temperatura

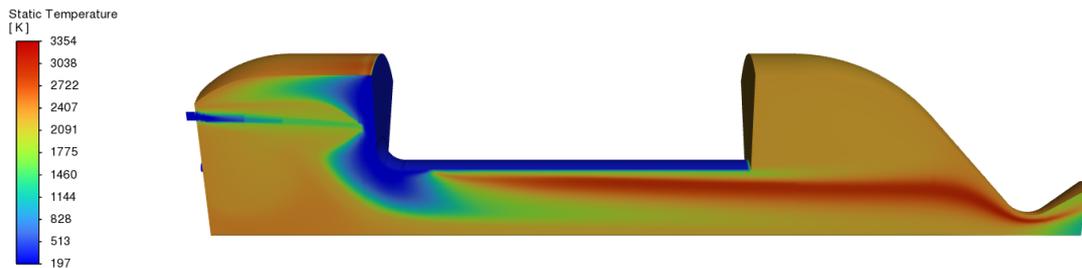


Figura 82 – Temperatura no tempo $t = 0s$.

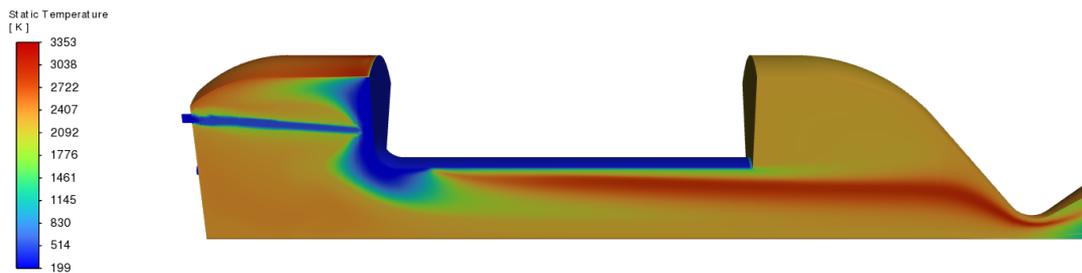


Figura 83 – Temperatura no tempo $t = 1s$.

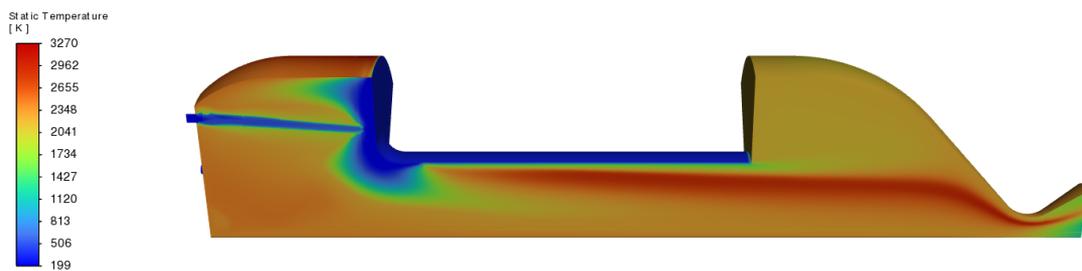


Figura 84 – Temperatura no tempo $t = 2s$.

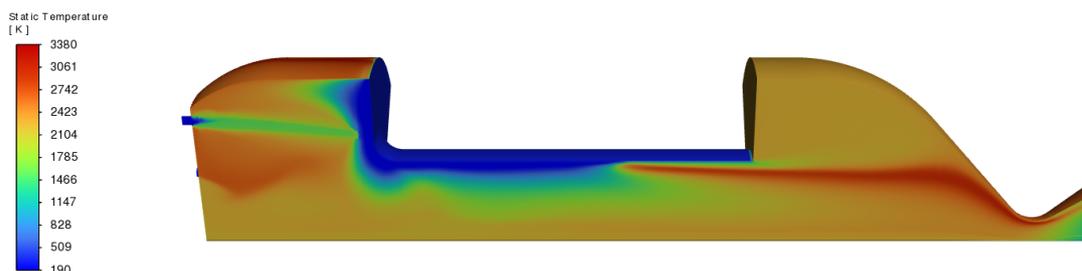


Figura 85 – Temperatura no tempo $t = 3s$.

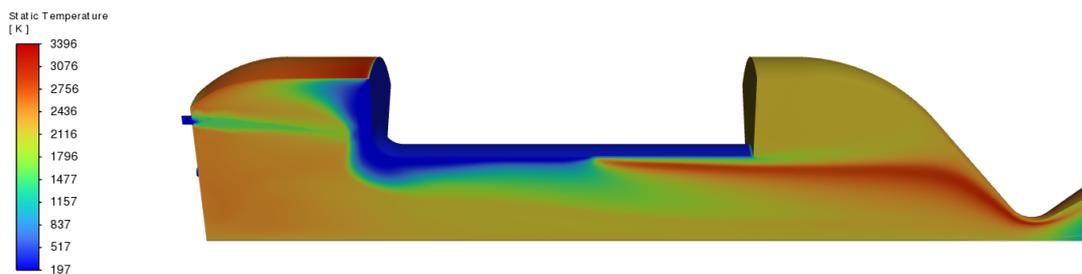


Figura 86 – Temperatura no tempo $t = 4s$.

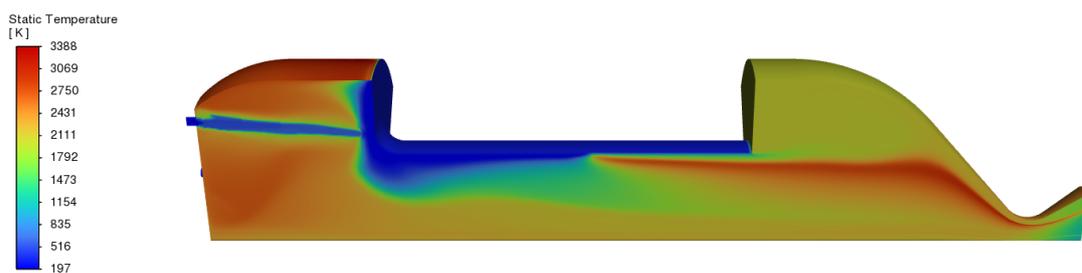


Figura 87 – Temperatura no tempo $t = 5s$.

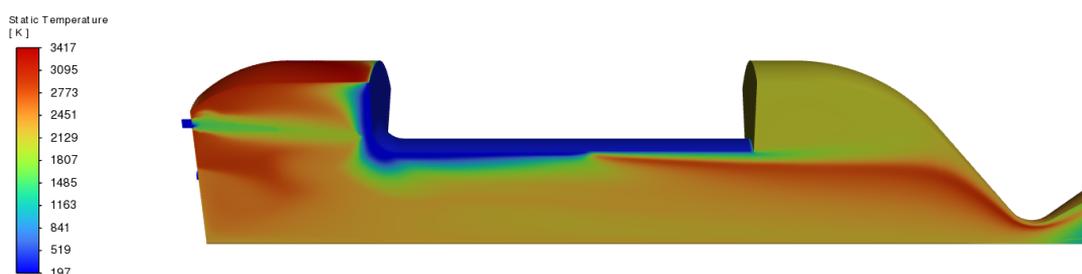


Figura 88 – Temperatura no tempo $t = 6s$.

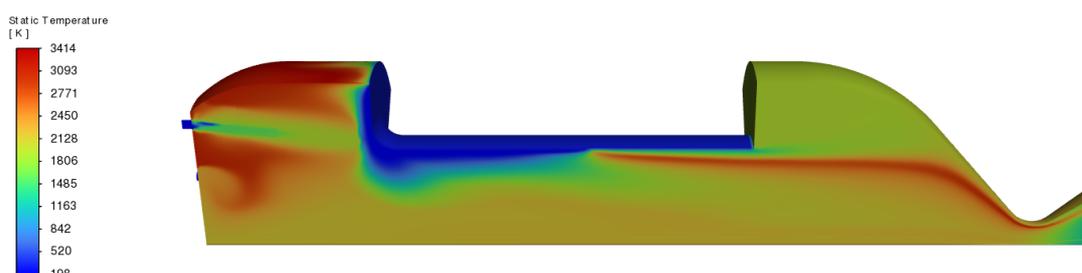


Figura 89 – Temperatura no tempo $t = 7s$.

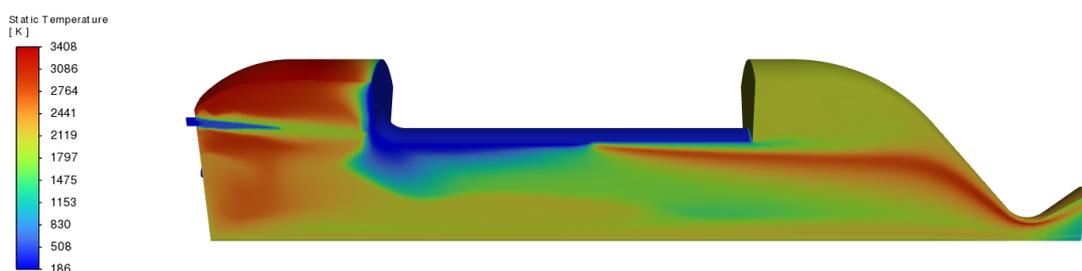


Figura 90 – Temperatura no tempo $t = 8s$.

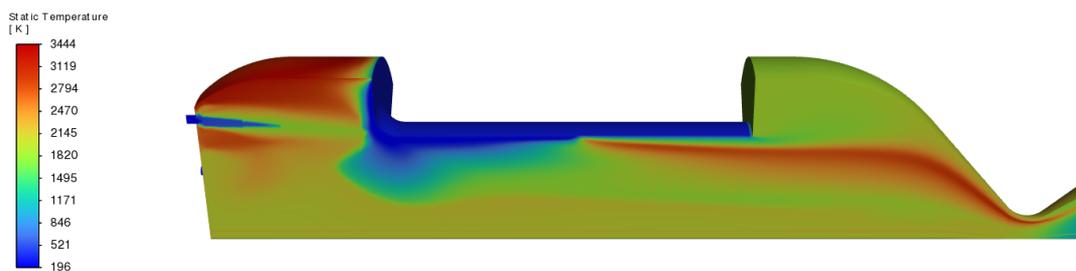


Figura 91 – Temperatura no tempo $t = 9s$.

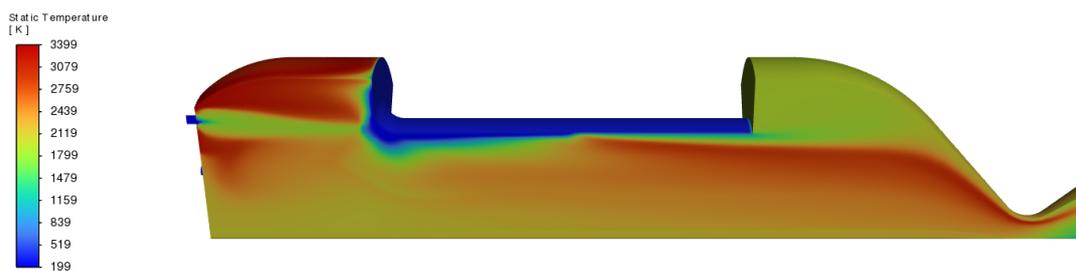


Figura 92 – Temperatura no tempo $t = 10s$.

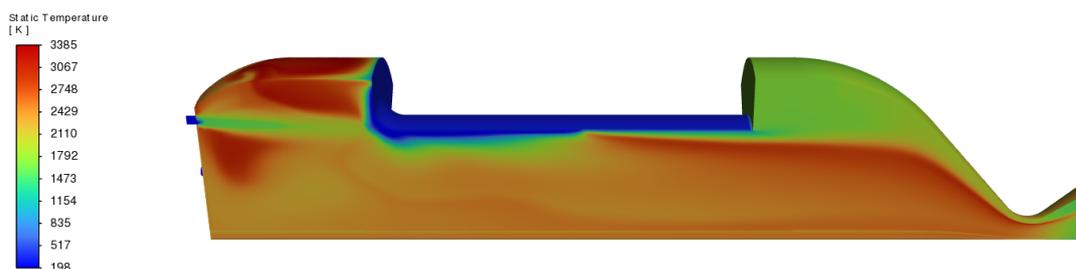


Figura 93 – Temperatura no tempo $t = 11s$.

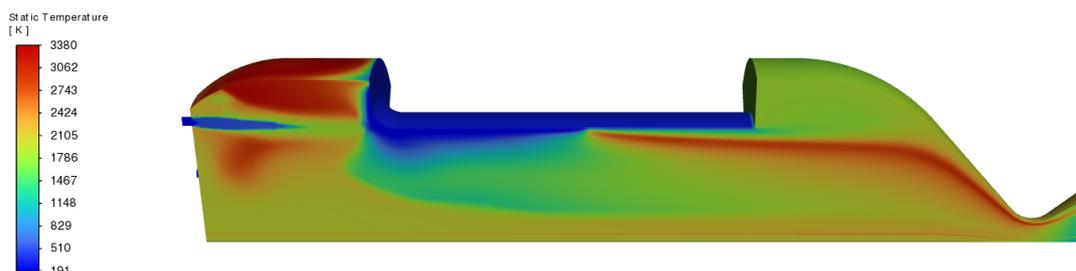


Figura 94 – Temperatura no tempo $t = 12s$.

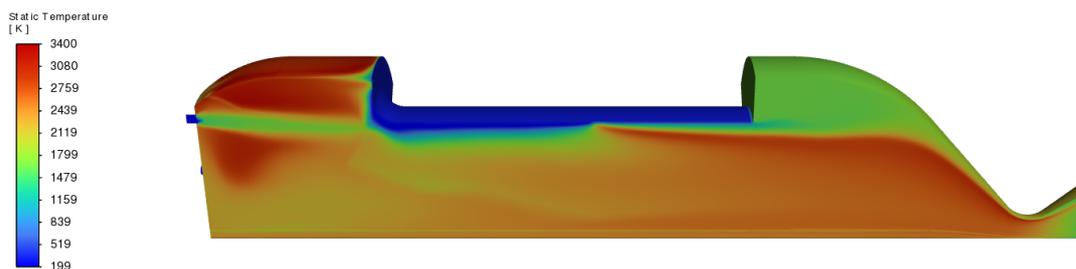


Figura 95 – Temperatura no tempo $t = 13s$.

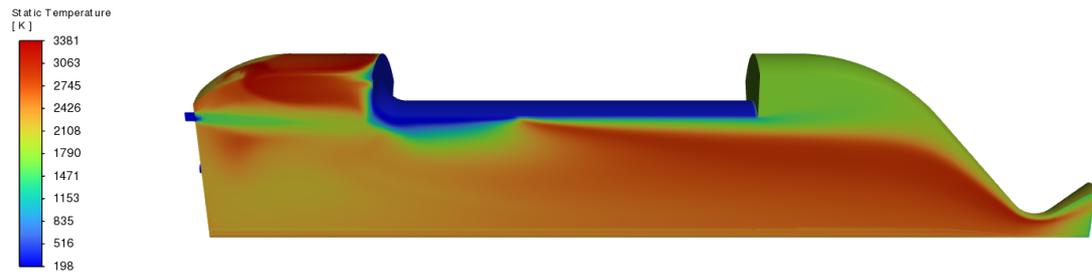


Figura 96 – Temperatura no tempo $t = 14s$.

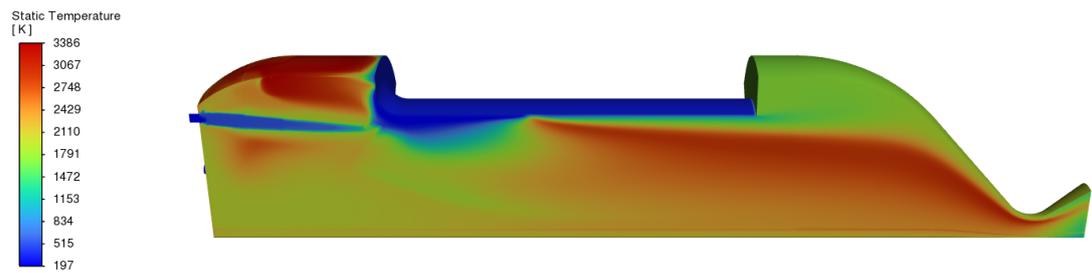


Figura 97 – Temperatura no tempo $t = 15s$.

APÊNDICE E – Distribuição de pressão



Figura 98 – Pressão no tempo $t = 0s$.



Figura 99 – Pressão no tempo $t = 1s$.



Figura 100 – Pressão no tempo $t = 2s$.



Figura 101 – Pressão no tempo $t = 3s$.



Figura 102 – Pressão no tempo $t = 4s$.



Figura 103 – Pressão no tempo $t = 5s$.



Figura 104 – Pressão no tempo $t = 6s$.



Figura 105 – Pressão no tempo $t = 7s$.



Figura 106 – Pressão no tempo $t = 8s$.



Figura 107 – Pressão no tempo $t = 9s$.



Figura 108 – Pressão no tempo $t = 10s$.



Figura 109 – Pressão no tempo $t = 11s$.



Figura 110 – Pressão no tempo $t = 12s$.



Figura 111 – Pressão no tempo $t = 13s$.



Figura 112 – Pressão no tempo $t = 14s$.



Figura 113 – Pressão no tempo $t = 15s$.

APÊNDICE F – Distribuição de *mean mixture fraction*

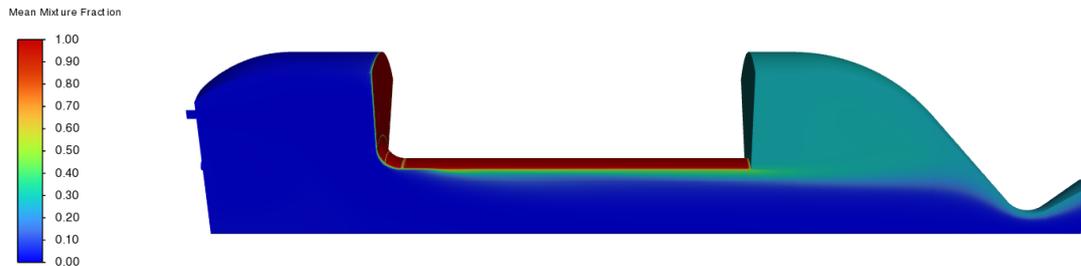


Figura 114 – *Mean mixture fraction* no tempo $t = 0$ s.

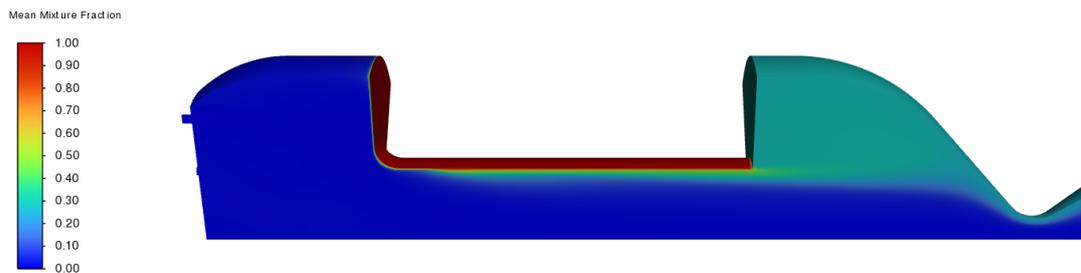


Figura 115 – *Mean mixture fraction* no tempo $t = 1$ s.

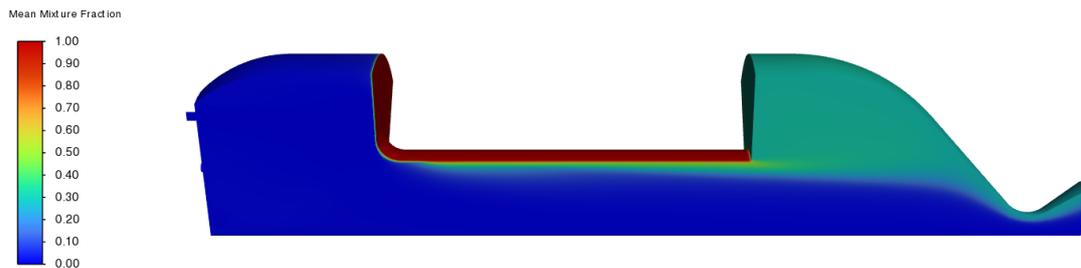


Figura 116 – *Mean mixture fraction* no tempo $t = 2$ s.

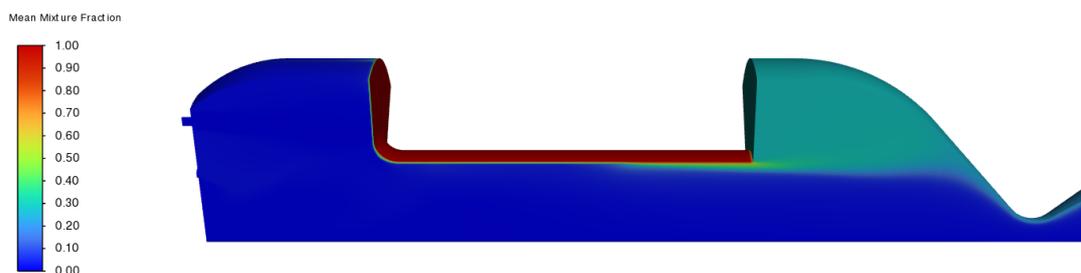


Figura 117 – *Mean mixture fraction* no tempo $t = 3$ s.

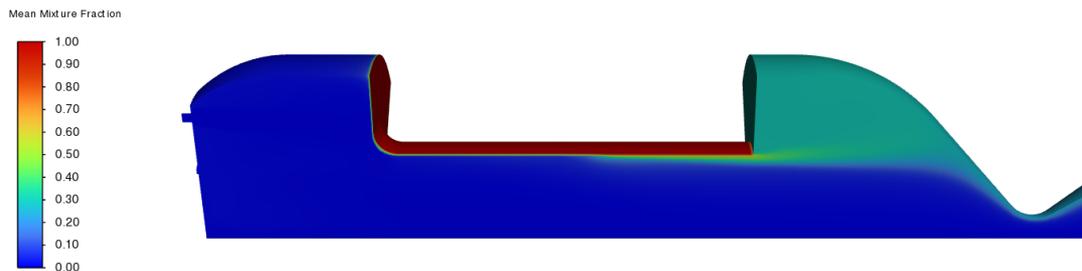


Figura 118 – Mean mixture fraction no tempo $t = 4$ s.

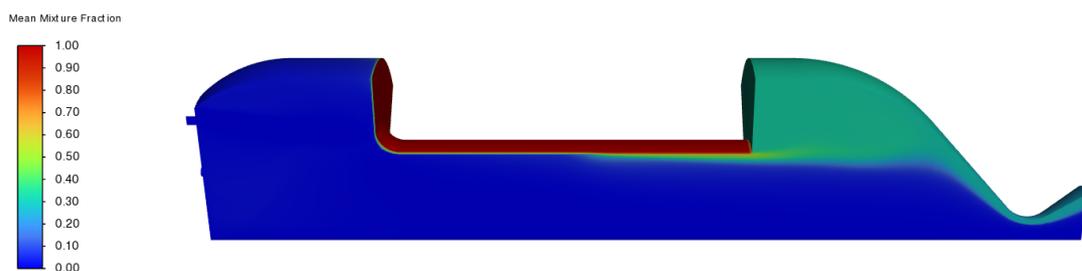


Figura 119 – Mean mixture fraction no tempo $t = 5$ s.

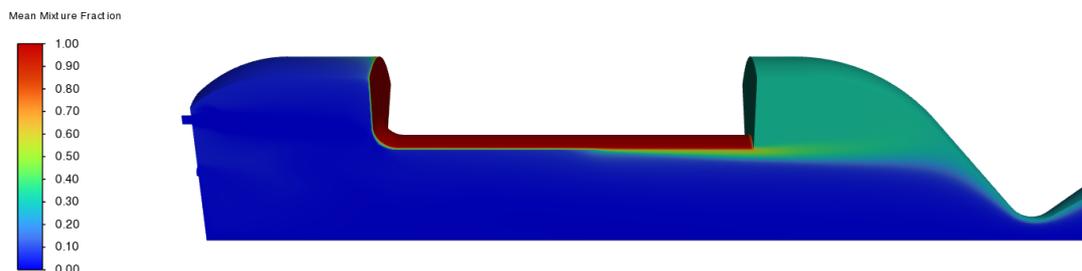


Figura 120 – Mean mixture fraction no tempo $t = 6$ s.

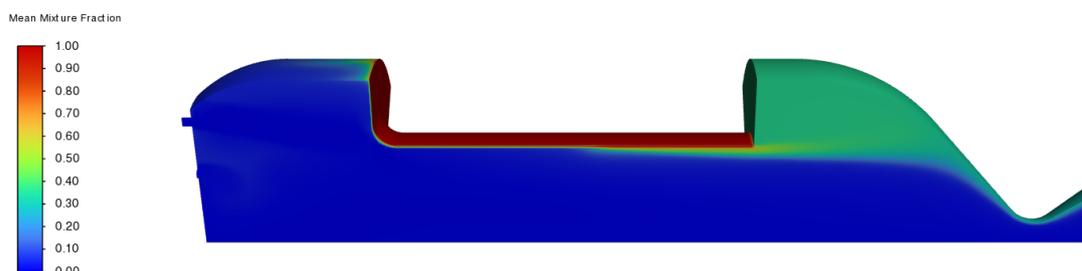


Figura 121 – Mean mixture fraction no tempo $t = 7$ s.

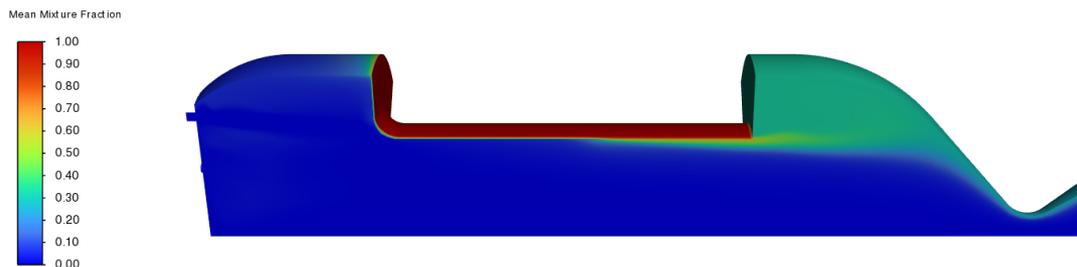


Figura 122 – Mean mixture fraction no tempo $t = 8s$.

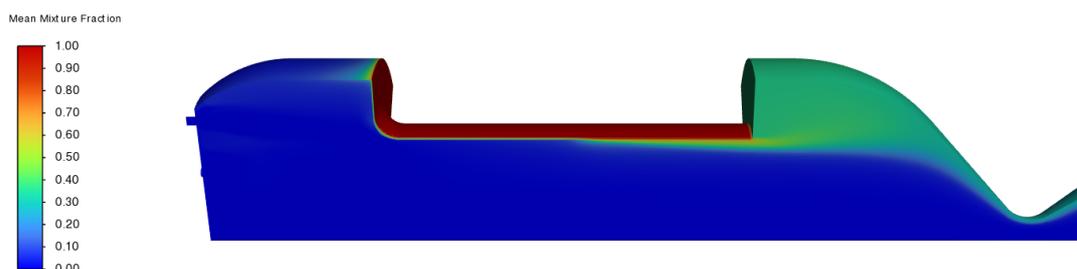


Figura 123 – Mean mixture fraction no tempo $t = 9s$.

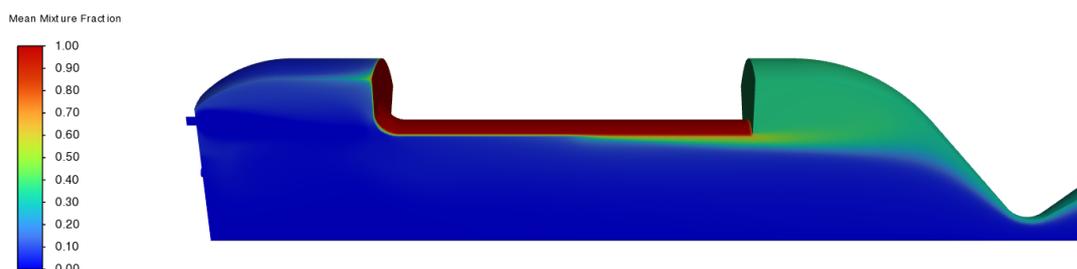


Figura 124 – Mean mixture fraction no tempo $t = 10s$.

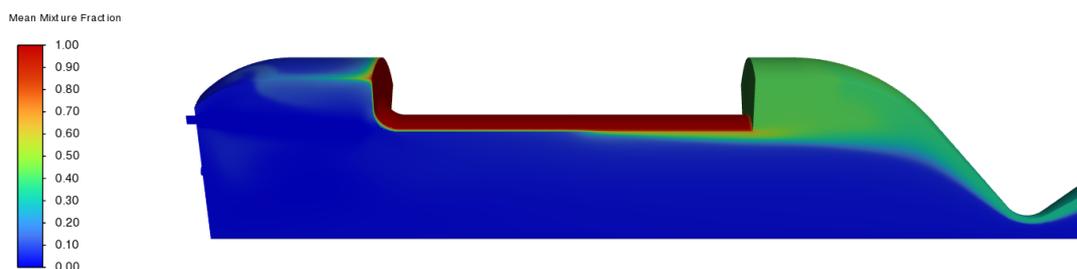


Figura 125 – Mean mixture fraction no tempo $t = 11s$.

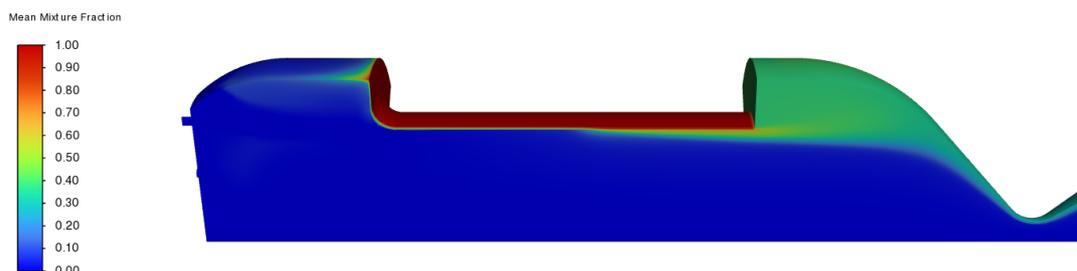


Figura 126 – Mean mixture fraction no tempo $t = 12s$.

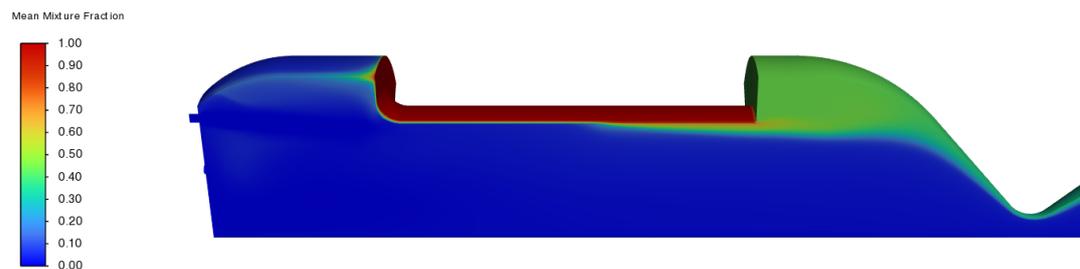


Figura 127 – Mean mixture fraction no tempo $t = 13s$.

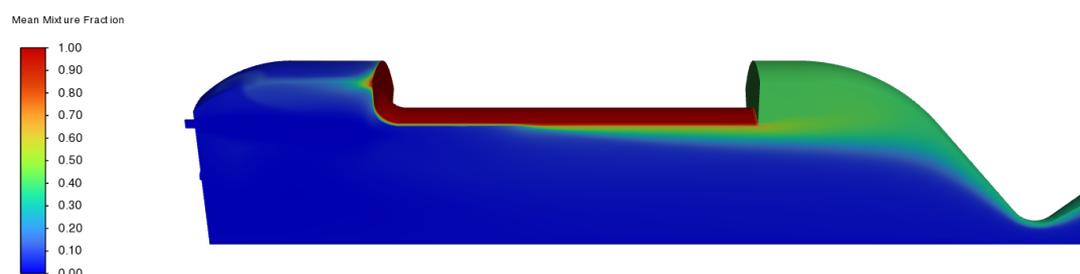


Figura 128 – Mean mixture fraction no tempo $t = 14s$.

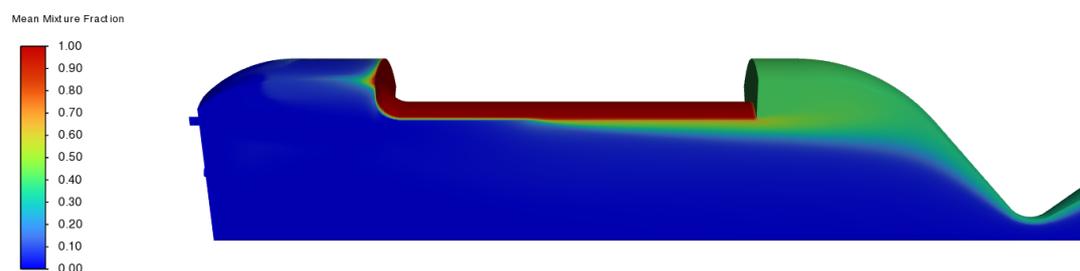


Figura 129 – Mean mixture fraction no tempo $t = 15s$.

APÊNDICE G – Linhas de corrente

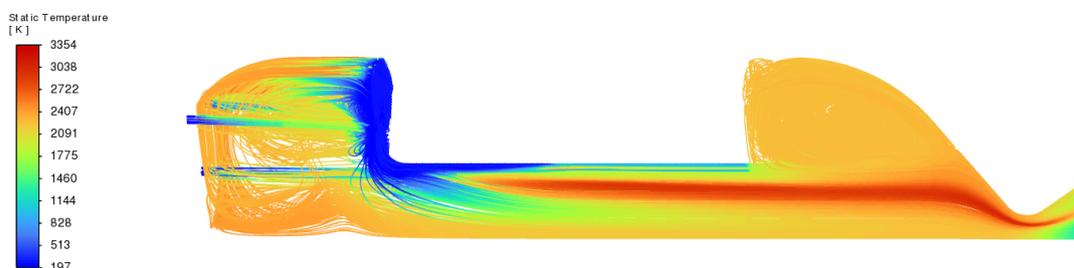


Figura 130 – Linhas de corrente no tempo $t = 0s$.

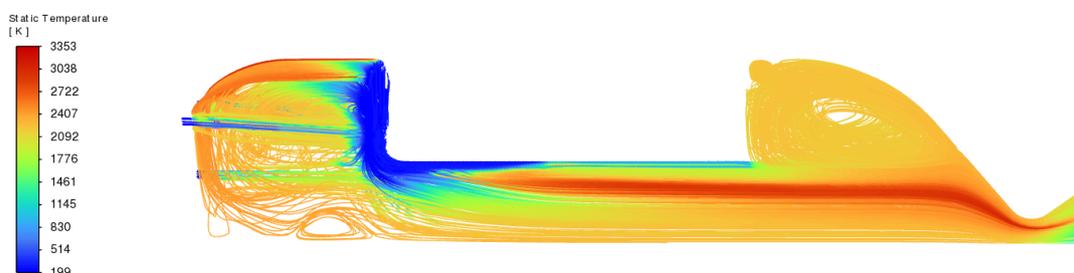


Figura 131 – Linhas de corrente no tempo $t = 1s$.

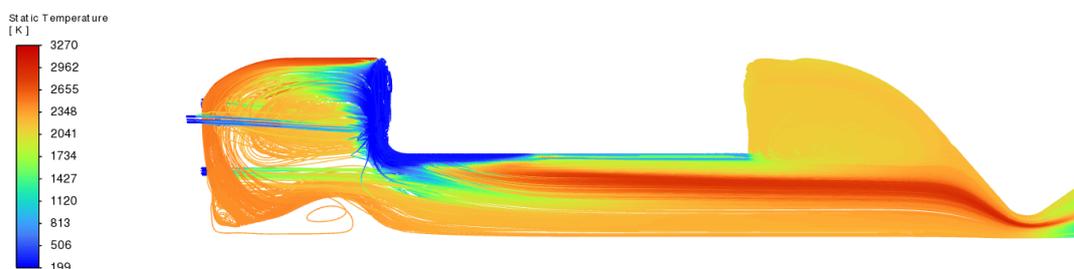


Figura 132 – Linhas de corrente no tempo $t = 2s$.

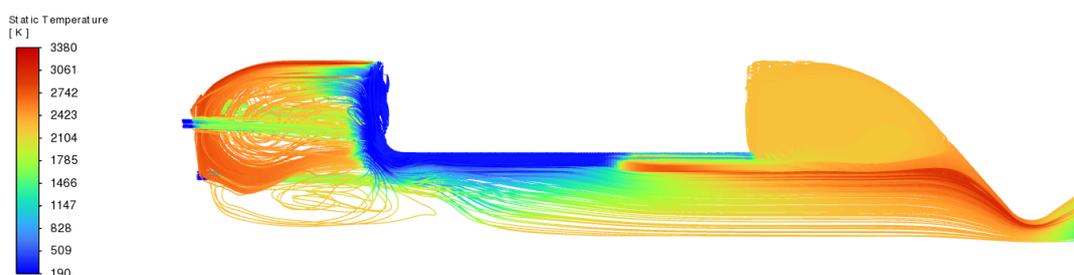


Figura 133 – Linhas de corrente no tempo $t = 3s$.

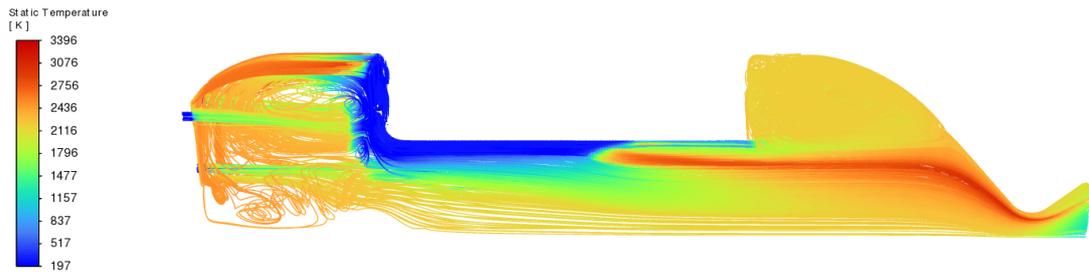


Figura 134 – Linhas de corrente no tempo $t = 4s$.

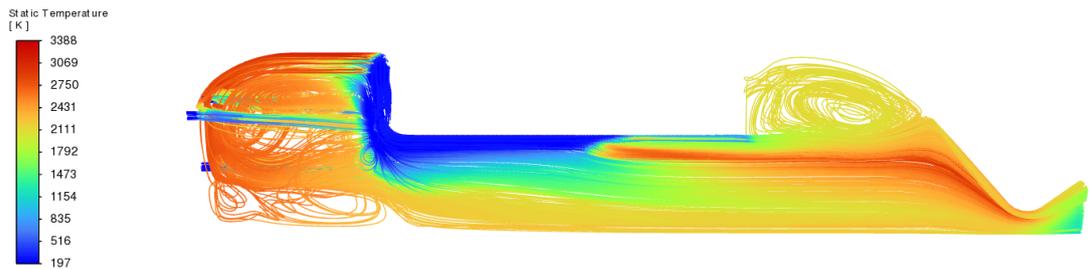


Figura 135 – Linhas de corrente no tempo $t = 5s$.

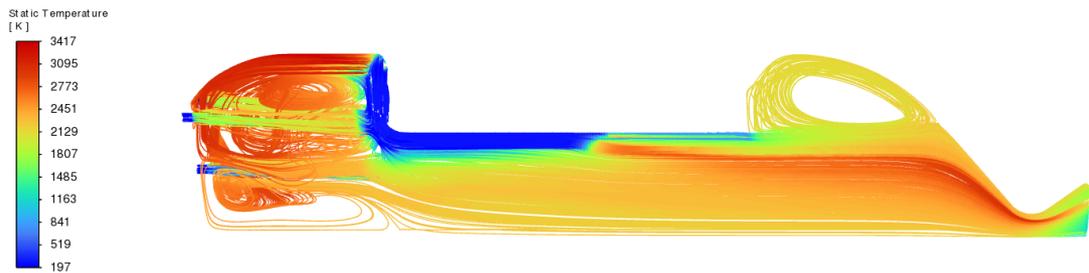


Figura 136 – Linhas de corrente no tempo $t = 6s$.

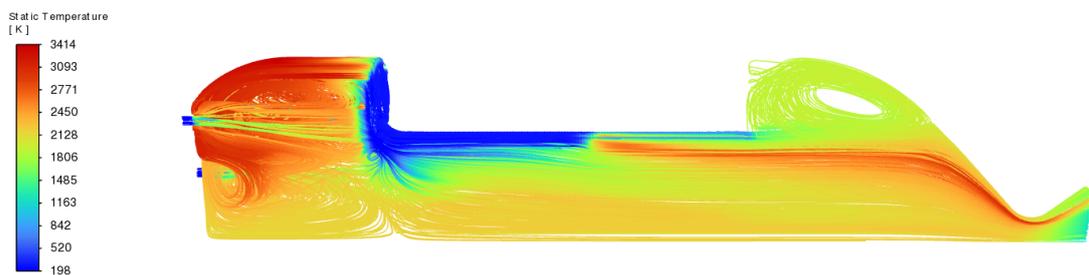


Figura 137 – Linhas de corrente no tempo $t = 7s$.

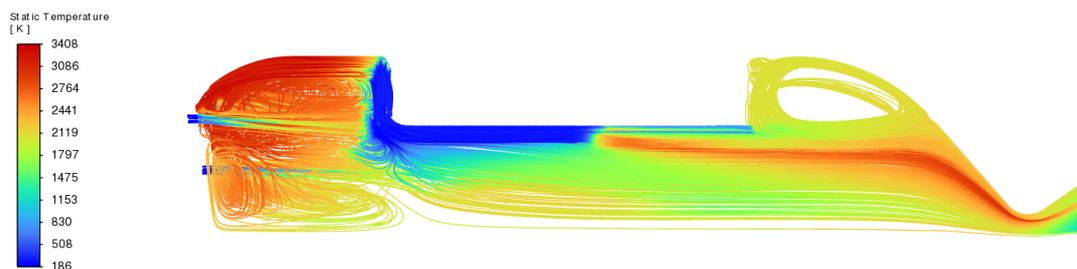


Figura 138 – Linhas de corrente no tempo $t = 8s$.

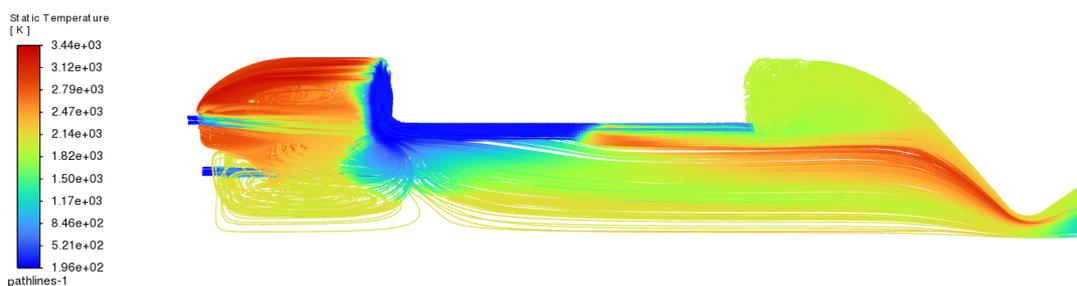


Figura 139 – Linhas de corrente no tempo $t = 9s$.

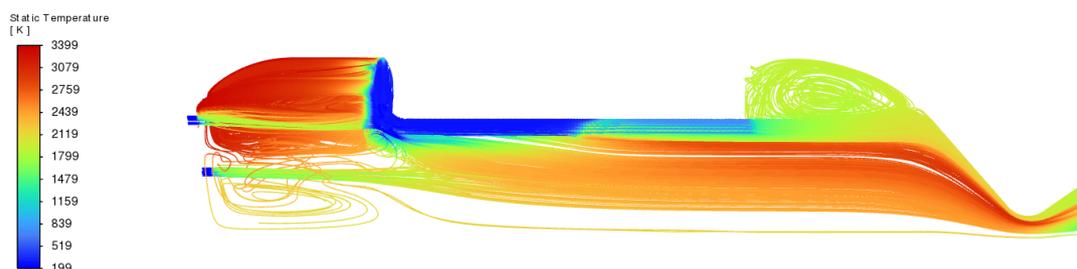


Figura 140 – Linhas de corrente no tempo $t = 10s$.

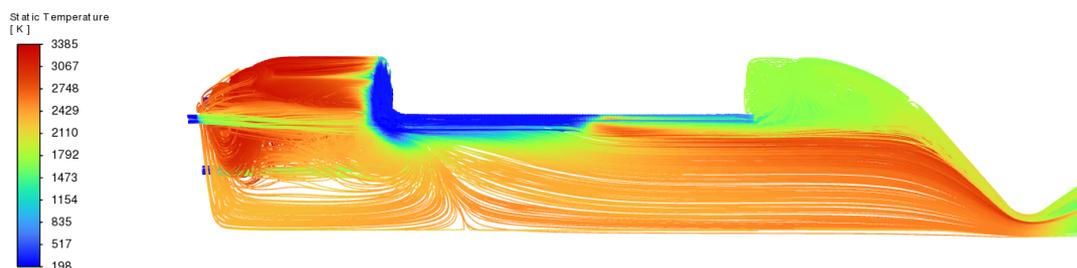


Figura 141 – Linhas de corrente no tempo $t = 11s$.

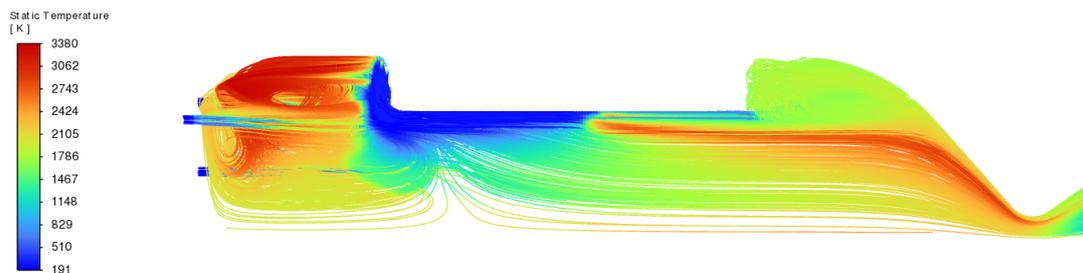


Figura 142 – Linhas de corrente no tempo $t = 12$ s.

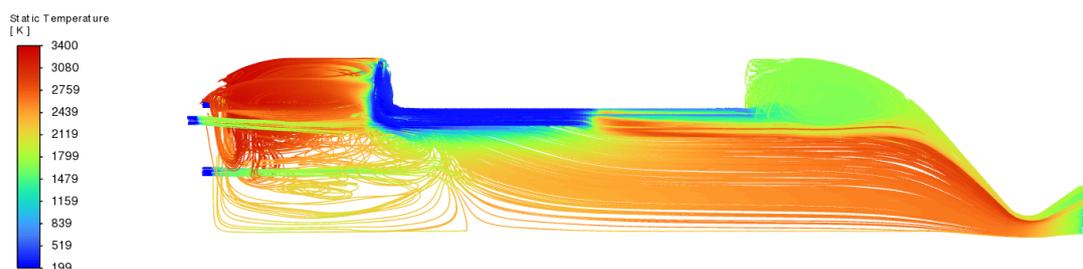


Figura 143 – Linhas de corrente no tempo $t = 13$ s.

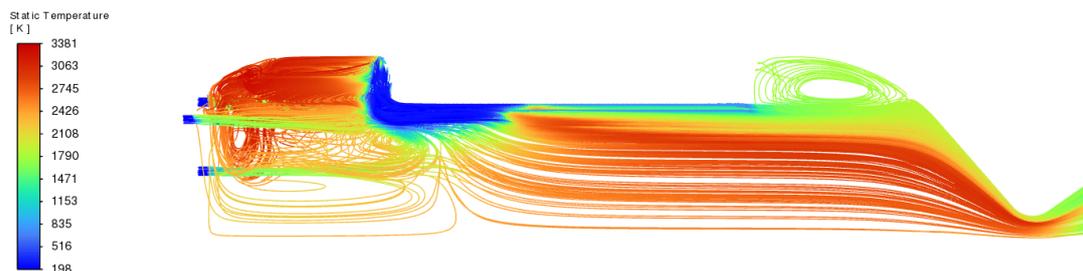


Figura 144 – Linhas de corrente no tempo $t = 14$ s.

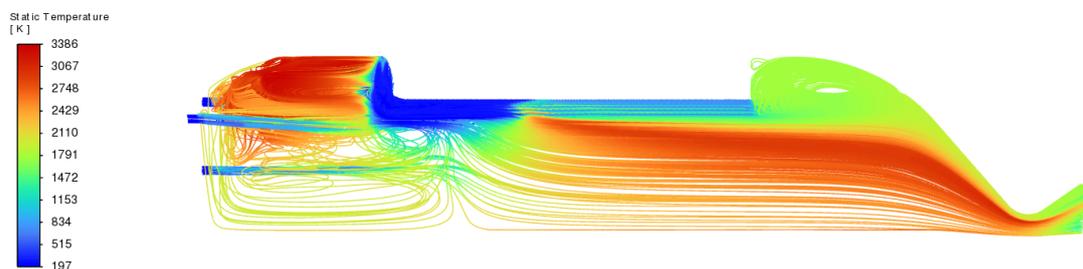


Figura 145 – Linhas de corrente no tempo $t = 15$ s.