

Termodinâmica da Detonação Instável no Motor de Detonação Rotativa

Rita Peixoto Pereira

Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em
Engenharia Aeronáutica
(mestrado integrado)

Orientador: Prof. Doutor Francisco Miguel Ribeiro Proença Brójo

janeiro de 2024

Declaração de Integridade

Eu, Rita Peixoto Pereira, que abaixo assino, estudante com o número de inscrição 41137 do Mestrado Integrado em Engenharia Aeronáutica da Faculdade de Engenharia, declaro ter desenvolvido o presente trabalho e elaborado o presente texto em total consonância com o **Código de Integridades da Universidade da Beira Interior**.

Mais concretamente afirmo não ter incorrido em qualquer das variedades de Fraude Académica, e que aqui declaro conhecer, que em particular atendi à exigida referenciação de frases, extratos, imagens e outras formas de trabalho intelectual, e assumindo assim na íntegra as responsabilidades da autoria.

Universidade da Beira Interior, Covilhã 03/01/2024

Rita Peixoto Pereira

*“Any intelligent fool can make things bigger, more complex, and more violent.
It takes a touch of genius – and a lot of courage – to move on the opposite direction.”*

Albert Einstein

Dedicatória

Dedicada à minha família e namorado que me apoiaram vivamente neste capítulo da minha vida.

Agradecimentos

A realização deste trabalho marca o culminar de uma fase, na qual contei com o apoio e cooperação de todos os que me acompanharam, aos quais dedico esta página de agradecimentos.

Em primeiro lugar, agradeço ao meu orientador, Professor Francisco Brójo, pelo acompanhamento, apoio e disponibilidade demonstrada no decorrer deste projeto.

Os meus maiores agradecimentos dirigem-se aos meus Pais e ao meu Irmão, pela compreensão, paciência e suporte. Ao apoio incondicional do meu namorado, sem o qual teria sido impossível finalizar esta etapa da melhor forma.

A todos os meus amigos que fizeram parte do meu percurso académico e que contribuíram para o meu sucesso, manifesto o meu apreço e o meu sincero obrigado.

Resumo

Nos últimos anos, a combustão por detonação tem sido revolucionária no setor aeronáutico e aeroespacial com elevado interesse na sua aplicação no motor de detonação rotativa (RDE – *Rotating Detonation Engine*) que realiza o processo de combustão de forma contínua, proporcionando reduções no consumo específico de combustível e ganhos significativos de eficiência comparativamente a motores de foguetes e turbinas de gás. A simplicidade mecânica do RDE requer apenas uma sequência de ignição para iniciar a onda de detonação que se propaga a velocidades supersônicas numa onda de choque de compressão autossustentada pelo calor libertado na combustão.

Esta dissertação apresenta uma análise termodinâmica da propagação de ondas de combustão, através da teoria da dinâmica de gases que, juntamente com o critério de Chapman e Jouguet (CJ), permitem determinar a velocidade apropriada da detonação para uma mistura explosiva. O modelo de Zeldovich-von Neumann-Döring é enunciado para justificar a teoria CJ incompleta. De facto, este modelo envolve a estrutura da detonação e considera as detonações patológicas de von Neumann e as detonações não ideais. Todos os processos reais envolvem viscosidade e as detonações são intrinsecamente instáveis tridimensionais e transientes. Neste sentido, com o intuito de se analisar o impacto dos efeitos viscosos no desempenho do RDE e na estrutura da detonação, esta tese apresenta duas simulações numéricas tridimensionais do fenómeno de detonação no RDE desenvolvidas por Peter A. T. Cocks et al: uma simulação de Euler e uma simulação do modelo de turbulência, considerando a mistura de ar/hidrogénio totalmente pré-misturada em condições estequiométricas. A estrutura da detonação, as velocidades de detonação previstas e o impulso específico foram analisados, verificando-se que a viscosidade num RDE provoca perdas de desempenho, sendo que o impulso específico é superior na simulação de Euler.

O desempenho do RDE é degradado pela presença das irreversibilidades que devem ser consideradas no seu projeto, tendo em vista a produção da tração necessária e estabilidade da detonação em escoamento de fluido real. A minimização das perdas num RDE é um dos grandes desafios que esta tecnologia promissora acarreta, pelo que a compreensão da termodinâmica e dinâmica de gases na propagação da detonação é fundamental para o projeto do RDE.

Palavras-chave

ondas de combustão; detonação; teoria CJ; modelo ZND; RDE; análise CFD; escoamento viscoso

Abstract

In recent years, detonation combustion has been revolutionary in the aeronautical and aerospace sector with great interest in its application in the Rotating Detonation Engine (RDE) which performs the combustion process continuously, providing reductions in specific fuel consumption and gains in efficiency compared to rocket engines and gas turbines. The mechanical simplicity of RDE requires only one ignition sequence to initiate the detonation wave that propagates at supersonic speeds in a compression shock wave self-sustained by the heat release in combustion.

This dissertation presents a thermodynamic analysis of propagating combustion waves, through the gasdynamic theory which, together with the Chapman and Jouguet (CJ) criterion, determine the appropriate detonation velocity for an explosive mixture. The Zeldovich-von Neumann-Döring model is announced to justify the incomplete CJ theory. In fact, this model involves the detonation structure and considers the pathological detonation of von Neumann and nonideal detonations. All real processes involve viscosity and detonations are intrinsically unstable, three-dimensional and transient. In this sense, in order to analyse the impact of viscous effects on the RDE performance and on the detonation structure, this thesis presents two three-dimensional numerical simulations of the detonation phenomenon in the RDE created by Peter A. T. Cocks et al: an Euler simulation and a simulation of the turbulence model, considering a fully premixed air/hydrogen mixture under stoichiometric conditions. The detonation structure, the predicted detonation velocities and the specific impulse were analysed, proving that the viscosity in an RDE causes performance losses, with the specific impulse being higher in the Euler simulation.

The performance of the RDE is degraded by the presence of irreversibilities that must be considered in its design, mindful of producing the required thrust and stability of detonation in real fluid flow. Minimizing losses in an RDE is one of the great challenges that this promising technology entails, thus understanding the thermodynamics and gas dynamics in detonation propagation is fundamental to the RDE design.

Keywords

combustion waves; detonation; CJ theory; ZND model; RDE; CFD analysis; viscous flow

Índice

Agradecimentos	ix
Resumo	xi
Abstract	xiii
Índice	xv
Lista de Figuras	xix
Lista de Tabelas	xxi
Lista de Acrónimos	xxiii
Nomenclatura	xxv
1 Introdução	1
1.1 Motivação.....	1
1.2 Objetivos.....	2
1.3 Estrutura da dissertação.....	2
2 Fundamentação Teórica	5
2.1 O Processo de Combustão	5
2.2 Ondas de Combustão	6
2.2.1 Ondas de Deflagração	6
2.2.2 Ondas de Detonação.....	6
2.2.3 Velocidade Apropriada da Onda de Combustão	8
2.3 Teoria da Dinâmica de Gases de Ondas de Combustão.....	9
2.3.1 Caracterização do Sistema Termodinâmico	9
2.3.2 Leis de Conservação	11
2.3.3 Equação de Estado para a Entalpia Sensível.....	14
2.3.4 Linha de Rayleigh.....	15
2.3.5 Velocidade do Som	17
2.3.6 Curva de Hugoniot	19
2.3.7 Ondas de Combustão Possíveis	22
2.4 Teoria de Chapman-Jouguet.....	23
2.4.1 Soluções CJ	24
2.4.2 Escoamento Isentrópico a Jusante	25
2.4.3 Condição de Escoamento Sônico.....	26
2.4.4 Condição de Entropia Mínima	27
2.5 Relações de Rankine–Hugoniot.....	29
2.5.1 Soluções CJ	30
2.5.2 RH de Detonações	31
2.5.3 RH de Detonações CJ	33
2.6 Teoria CJ Incompleta.....	33
2.7 Modelo da Estrutura Laminar da Detonação (ZND)	34
2.7.1 Estrutura Unidimensional da Detonação	35
2.7.2 Modelo ZND	36

2.7.3 Critério de Zeldovich.....	37
2.7.4 Número de Mach Inicial	38
2.8 Irreversibilidades e a Entropia.....	41
2.9 Instabilidade da Frente de Detonação	41
3 Revisão Bibliográfica.....	43
3.1 Detonação em Sistemas de Propulsão	43
3.1.1 Motor de Detonação por Pulso (PDE)	44
3.1.2 Motor de Detonação Rotativa (RDE)	46
3.2 Configuração da Câmara de Combustão do RDE.....	47
3.2.1 RDC Oco	47
3.2.2 RDC – Formato de Disco	47
3.2.3 Dimensionamento do RDC.....	48
3.3 Bocal Propulsivo do RDE	49
3.4 Combustão da Mistura Reativa	50
3.4.1 Reagentes	50
3.4.2 Modelo da Reação Estequiométrica	51
3.4.3 Reações Elementares	52
3.4.4 Cinética Química.....	53
3.5 Estrutura da Detonação num RDE.....	54
3.5.1 Camada de Corte e Estiramento de Vórtices.....	55
3.6 Modelo Bidimensional do RDE.....	56
3.6.1 Injeção e Mistura dos Reagentes.....	57
3.6.2 Modelo de Injeção.....	58
3.6.3 Diagrama Bidimensional	59
3.7 Modelo de Choque Triplo	59
3.7.1 Ondas Transversais	60
3.8 Estrutura da Célula de Detonação.....	61
3.9 Ignição pela Estrutura Celular Instável.....	61
3.10 Ciclo Termodinâmico	62
3.11 Desafios Técnicos do RDE.....	64
3.12 O RDRE Revolucionário	64
4 Modelagem CFD	67
4.1 Erros e Incertezas	68
4.2 Simulações Numéricas	68
4.3 Simulações Tridimensionais da Detonação	69
4.3.1 Descrição do Fluido de Trabalho	69
4.4 Caso de Estudo 1 – Modelo Invíscido.....	69
4.4.1 Equações Fundamentais	70
4.4.1.1 Formulação de Euler	70
4.5 Caso de Estudo 2 – Modelo Viscoso.....	72
4.5.1 Regime Laminar e Turbulento	72
4.5.2 Turbulência – Modelos Turbulentos	73
4.5.3 Equações Governantes.....	73

4.5.3.1 Hipótese de Boussinesq	75
4.6 Metodologia CFD	76
4.6.1 Geometria da Câmara de Combustão	76
4.6.2 Construção da Malha	77
4.6.2.1 Solução das Equações Governantes.....	77
4.6.2.2 Estudo de Refinamento da Malha.....	78
4.6.3 Configuração do Modelo Físico.....	79
4.6.3.1 Análise da Qualidade da Malha	79
4.6.4 Solucionador – Métodos de Solução do escoamento	80
4.6.5 Modelagem do Processo de Combustão	81
4.6.5.1 Modelos.....	82
4.6.6 Condições de Fronteira	83
4.6.6.1 Definição de Parâmetros	84
4.6.7 Solução e Inicialização.....	84
5 Resultados	87
5.1 Análise da Convergência.....	87
5.2 Análise Qualitativa	88
5.2.1 Estrutura da Onda de Detonação	88
5.2.2 Zona de Deflagração	89
5.2.3 Choque Oblíquo.....	91
5.3 Análise Quantitativa.....	91
5.3.1 Velocidade de Detonação	91
5.3.2 Impulso Específico e Tração Produzida	93
6 Conclusão	95
6.1 Perspetiva Futura	97
Bibliografia	99

Lista de Figuras

Figura 2.1: Volume de controlo usado para analisar ondas de combustão em escoamento permanente. Adaptada de [5, 6, 18]; (a) Propagação da onda de combustão que se move através do fluido; (b) Propagação da onda de combustão relativa a um sistema de coordenadas fixo à onda.	10
Figura 2.2: Domínio das soluções da detonação e deflagração no plano $p-v$ [5].	16
Figura 2.3: A linha de Rayleigh e a curva de Hugoniot. Adaptada de [5]. Soluções a Volume Constante (SVC) e a Pressão Constante (SPC) assinaladas.	22
Figura 2.4: Soluções CJ [5].	24
Figura 2.5: Modelo unidimensional da detonação plana. Adaptada de [5, 13].	35
Figura 2.6: Esboço do escoamento através da onda de detonação [5].	36
Figura 3.1 – (a) Long-EZ "Borealis" na Galeria de Pesquisa e Desenvolvimento do Museu Nacional da Força Aérea dos EUA em 28 de dezembro de 2015. (foto da Força Aérea dos EUA); (b) DAYTON, Ohio - Motor Long EZ em exibição na Galeria de Pesquisa e Desenvolvimento do Museu Nacional da Força Aérea dos EUA. (foto da Força Aérea dos EUA) [21].	44
Figura 3.2: Configuração do PDE [1].	45
Figura 3.3: Imagem experimental da espiral de Shchelkin [24].	46
Figura 3.4: Configuração do RDE [1].	46
Figura 3.5: (a) Vista do RDC oco com duas ondas de detonação que se propagam no sentido contrário aos ponteiros do relógio [11]; (b) Região de preenchimento de reagentes (azul) e queima central por deflagração num RDC oco onde coexistem duas ondas [11]; (c) Forma da onda de detonação rotativa num RDC oco com um bocal de De Laval à saída [11].	47
Figura 3.6: Esquema do campo de escoamento num RDC em forma de disco as características de recuperação dos injetores [11].	48
Figura 3.7: Parâmetros geométricos de um RDE. A área a vermelho é a área preenchida pela mistura dos reagentes na qual a detonação se propaga. (a) Vista de cima; (b) Vista lateral. Adaptado de [10].	49
Figura 3.8: Bocal <i>aerospike</i> do RDRE desenvolvido pela NASA [29].	50
Figura 3.9: Estrutura esquemática tridimensional da propagação da onda de detonação num RDE. Adaptada de [1].	54
Figura 3.10: Divergência de ondas de Mach no escoamento supersónico centradas no vértice do diedro convexo [20].	55
Figura 3.11: Esquema da câmara de combustão de RDEs [30].	57
Figura 3.12: Contorno de temperatura da estrutura celular de uma onda de detonação num RDE “desenrolado” em duas dimensões com alimentação pré-misturada, de um estudo de modelagem computacional [22]. A onda de detonação propaga-se continuamente da esquerda para a direita, tal como indicado pela seta. Imagem adaptada de [1].	59

Figura 3.13: Fenómeno espontâneo da formação de ondas de detonação rotativas com múltiplas frentes de onda na câmara de combustão do RDE, alimentado pela mistura estequiométrica de ar/hidrogênio pré-misturado [16].	61
Figura 3.14: Parâmetro geométrico de um RDE: largura da célula de detonação adaptada de [1, 10]; (a) Imagem aproximada da região da frente de detonação composta por pequenas células; (b) Representação da largura da célula de detonação.	61
Figura 3.15: Ciclos termodinâmicos: Humphrey, Brayton e Fickett-Jacobs. Adaptado [10].	63
Figura 3.16: Testes do RDRE em grande escala, impresso em 3D, em 2022, na NASA em Huntsville, Alabama [48].	66
Figura 5.1: Contornos de temperatura instantâneos da simulação tridimensional de Euler (Caso 1) [esquerda] e da simulação de escoamento viscoso com paredes deslizantes (Caso 2) [direita] – foco na região de detonação [2].	88
Figura 5.2: Contornos de temperatura instantâneos da simulação tridimensional de Euler (Caso 1) [esquerda] e da simulação de escoamento viscoso com paredes deslizantes (Caso 2) [direita] – foco na região de deflagração [2].	90

Lista de Tabelas

Tabela 3.1: Combustíveis, velocidades de propagação da onda e pressões, entalpia de combustão ΔHr (módulo) e impulso específico [10].	51
Tabela 3.2: Eficiências termodinâmicas calculadas para vários combustíveis para diferentes ciclos termodinâmicos [10].....	63
Tabela 4.1: Espectro da <i>skewness</i> da malha [32].	80
Tabela 4.2: Espectro da qualidade ortogonal da malha [32].....	80
Tabela 5.1: Velocidades de detonação nas simulações tridimensionais. Adaptada de [2].	92
Tabela 5.2: Valores de impulso específico e tração produzida pelo RDE para as simulações tridimensionais. Adaptado de [2].	93

Lista de Acrónimos

2D	Duas Dimensões – Bidimensional
3D	Três Dimensões – Tridimensional
AFRL	<i>Air Force Research Laboratory</i>
AM	<i>Additive Manufacturing</i>
APU	<i>Auxiliar Power Unit</i>
CDE	<i>Continuous Detonation Engine</i>
CDWE	<i>Continuous Detonation Wave Engine</i>
CEA2	<i>Chemical Equilibrium with Applications</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CJ	Chapman–Jouguet
CRDE	<i>Continuous Rotating Detonation Engine</i>
DDT	<i>Deflagration to Detonation Transition</i>
DES	<i>Detached Eddy Simulation</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
HFI	<i>High Frequency Instability</i>
IDDES	<i>Improved Delayed Detached Eddy Simulation</i>
ISSI	<i>Innovative Scientific Solutions Incorporated</i>
JAXA	<i>Japan Aerospace eXploration Agency</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
NASA	<i>National Aeronautics and Space Administration</i>
NPR	<i>Nozzle Pressure Ratio</i>
NRL	<i>Naval Research Laboratory</i>
ODWE	<i>Oblique Detonation Wave Engine</i>
PDE	<i>Pulse Detonation Engine</i>
PGC	<i>Pressure Gain Combustion</i>
RANS	<i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>
RDC	<i>Rotating Detonation Combustors</i>
RDE	<i>Rotating Detonation Engine</i>
RDRE	<i>Rotating Detonation Rocket Engine</i>
RH	Rankine–Hugoniot
RSM	<i>Reynolds Stress Model</i>
SPC	Solução a Pressão Constante
SRS	<i>Scale-Resolving Simulations</i>
SST	<i>Shear Stress Transport</i>
SVC	Solução a Volume Constante
ZND	Zeldovich-von Neumann-Döring

Nomenclatura

A	Área	$[m^2]$
A_c	Altura de preenchimento real da mistura num RDE	$[m]$
AF	Razão ar/combustível	$[-]$
B	Ciclo de Brayton	$[-]$
c	Velocidade do som	$[m/s]$
C	Escala de comprimento característica do escoamento	$[m]$
CJ	Chapman-Jouguet	$[-]$
c_p	Calor específico a pressão constante	$[J/(kg \cdot K)]$
c_v	Calor específico a volume constante	$[J/(kg \cdot K)]$
D	velocidade de detonação	$[m/s]$
$d_{c_{min}}$	Diâmetro mínimo da parede externa do RDE	$[m]$
e	Energia interna por unidade de massa	$[J/kg]$
E_a	Energia de ativação	$[J/mol]$
e_T	Energia total de um sistema por unidade de massa	$[J/kg]$
E_T	Energia total de um sistema	$[J]$
F	Força resultante	$[N]$
FJ	Ciclo de Fickett-Jacobs	$[-]$
F_{outlet}	Tração produzida pelo RDE	$[N]$
g	Aceleração da gravidade	$[m/s^2]$
h	Entalpia específica por unidade de massa	$[J/kg]$
\mathcal{H}	Ciclo de Humphrey	$[-]$
h_T	Entalpia total por unidade de massa	$[J/kg]$
h_f°	Entalpia de formação padrão	$[J/mol]$
ΔH_r	Entalpia de combustão	$[J/mol]$
I_{sp}	Impulso específico	$[s]$
k	Constante de taxa de Arrhenius	$[m^3/mol \cdot s]$
L_{min}	Comprimento axial mínimo de um RDE	$[m]$
m	Massa	$[kg]$
\dot{m}	Caudal mássico	$[kg/s]$
M	Número de Mach	$[-]$
\mathcal{M}	Massa molar	$[kg/mol]$
n_i	Número de moles por unidade de volume da espécie química i	$[mol/m^3]$
p	Pressão	Pa
q	Calor libertado por unidade de massa	$[J/kg]$

q_{max}	Quantidade máxima de calor	$[J/kg]$
R	Constante universal do gás	$[J/(kg \cdot K)]$
Re	Número de Reynolds	$[-]$
RH	Rankine-Hugoniot	$[-]$
s	Entropia por unidade de massa	$[J/(kg \cdot K)]$
t	Tempo	$[s]$
T	Temperatura	$[K]$
u	Norma da componente do vetor velocidade	$[m/s]$
v	Volume específico	$[m^3/kg]$
V	Norma do vetor velocidade	$[m/s]$
vN	von Neumann	$[-]$
W	Energia sob a forma de trabalho	$[J]$
x	Abcissa do diagrama $P-v$	$[-]$
y	Ordenada do diagrama $P-v$	$[-]$
Y	Fração mássica	$[-]$

Letras gregas

γ	Razão dos calores específicos	$[-]$
Γ	Circulação	$[m^2/s]$
δ	Diferencial não exata	$[-]$
Δ	Largura da câmara de combustão do RDE	$[m]$
λ	Progresso da reação	$[-]$
λ_d	Largura das células da detonação	$[m]$
μ	Viscosidade dinâmica	$[kg/(m \cdot s)]$
μ_T	Viscosidade turbulenta	$[Pa \cdot s]$
ρ	Densidade	$[kg/m^3]$
$\dot{\omega}$	Taxa de reação	$[mol/(m^3 \cdot s)]$
$\vec{\Omega}$	Vetor da vorticidade	$[m/s]$

Outra notação

∂	Diferencial parcial
------------	---------------------

Subscritos

0	Condição a montante de um processo
1	Condição a jusante de um processo
CJ	Chapman-Jouguet

<i>cr</i>	Condição crítica
<i>f</i>	Combustível (<i>Fuel</i>)
<i>H</i>	Hugoniot
<i>R</i>	Rayleigh
<i>ref</i>	Estado de referência
<i>S</i>	Processo isentrópico
<i>t</i>	Condições de estagnação

Sobrescritos

* Pontos CJ

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

O tema da dissertação surgiu do interesse crescente no conceito revolucionário de combustão por detonação contínua aplicado ao motor de detonação rotativa (RDE – *Rotating Detonation Engine*) nos setores aeronáutico e aeroespacial.

A combustão é um dos processos fulcrais em engenharia e está presente diariamente na vida humana. As “instabilidades termodinâmicas” observadas em sistemas propulsivos foram, durante longos anos, adversidades constantes ao seu desenvolvimento e dificilmente controláveis. O conceito de detonação veio a designar, precisamente, essas ocorrências. O fenômeno de deflagração é mais facilmente controlável que a detonação, um fenômeno muito mais energético e intrinsecamente instável, dado que, durante muitos anos, o modo de combustão por deflagração foi a solução escolhida. No entanto, a combustão por detonação como um método propulsivo de sistemas aeroespaciais é promissora, possibilitando alcançar eficiências mais elevadas e simplicidade mecânica através da tecnologia do motor de detonação rotativo.

Atualmente, o RDE tem sido alvo de investigações que tencionam aplicar este conceito para melhorar significativamente o desempenho das tecnologias tradicionais de motores de foguetes líquidos, maioritariamente. O motor de foguete de detonação rotativo (RDRE – *Rotating Detonation Rocket Engine*) é um conceito inovador que gera tração através de combustão supersônica, produzindo um impulso específico maior para a mesma quantidade de combustível. Este conceito já foi bem-sucedido na primeira demonstração de voo espacial em 2021 usando o foguete de sondagem S-520-31 e nos testes realizados pela Administração Nacional da Aeronáutica e Espaço (NASA – *National Aeronautics and Space Administration*), em 2022, do RDRE em grande escala, estando a comunidade científica a um passo mais perto de tornar a exploração espacial mais sustentável, ao proporcionar o aumento da capacidade de carga útil para veículos espaciais e reduções no consumo específico de combustível.

A simplicidade da estrutura do RDE e as suas características vantajosas tornam este conceito inovador uma solução futura possível como um motor autónomo para a propulsão aeroespacial. No entanto, este conceito ainda requer um grande trabalho de investigação e de desenvolvimento. Assim, tendo em conta as investigações acerca deste tema, a motivação para este trabalho prende-se com a necessidade de compreender o fenômeno da detonação que rege o

funcionamento do RDE, cujo desempenho depende das irreversibilidades inevitáveis do seu projeto realizável.

1.2 Objetivos

O principal objetivo desta dissertação é depreender a termodinâmica fundamental subjacente à propagação da onda de detonação a fim de compreender o funcionamento e desempenho do RDE, bem como as suas vantagens para a indústria aeronáutica e aeroespacial, pelo que se pretende realizar, primeiramente, uma abordagem teórica explicativa e analítica do fenómeno de detonação e, posteriormente, uma abordagem numérica descritiva de aplicação deste fenómeno no RDE.

Neste sentido, tenciona-se realizar uma análise das ondas de combustão (deflagrações e detonações), evidenciando as leis e equações que as governam através da teoria da dinâmica de gases de escoamento altamente compressível. Além disso, pretende-se determinar a velocidade apropriada para a onda de detonação dada pelo critério de Chapman–Jouguet (CJ). O estudo teórico sobre as ondas de detonação completa-se com a descrição do modelo de Zeldovich-von Neumann–Döring (ZND) da estrutura da detonação, cuja análise descritiva é essencial para compreender o fenómeno.

Após o estudo teórico e matemático sobre as ondas de combustão, pretende-se aplicar a análise realizada aos sistemas propulsivos, cuja compreensão das irreversibilidades dos processos reais é fundamental para tornar possível a aplicação prática do fenómeno da detonação tridimensional transiente e instável. Assim, o objetivo final é analisar o impacto dos efeitos viscosos no desempenho e estrutura da detonação no RDE alimentado com a mistura ar/hidrogénio pré-misturada em condições estequiométricas através da modelagem numérica utilizando a dinâmica de fluidos computacional (CFD – *Computational Fluid Dynamics*) para dois casos tridimensionais distintos, o caso de Euler e o caso do modelo de turbulência, cujos resultados serão apresentados e analisados baseando a fundamentação no modelo ZND e na teoria CJ.

1.3 Estrutura da dissertação

Esta dissertação está dividida em seis capítulos e estes em subcapítulos, de modo a facultar uma melhor compreensão e facilitar a sua leitura.

No Capítulo 1, apresentou-se uma breve análise da relevância do tema, as principais motivações que levaram à realização da dissertação e os principais objetivos a serem cumpridos, assim como as várias etapas que constituem a dissertação.

No Capítulo 2, é apresentada a fundamentação teórica numa análise descritiva e explicativa da termodinâmica da propagação das ondas de combustão através da teoria da dinâmica de gases e

da teoria CJ, incidindo a análise às ondas de detonação de propagação livre autossustentadas. O modelo ZND da estrutura da detonação é apresentado neste capítulo.

No Capítulo 3, é apresentada uma breve introdução aos sistemas propulsivos que utilizam o fenômeno de detonação, com o intuito de dar início ao estudo do motor de detonação rotativa. A configuração do RDE e projetos deste motor existentes na literatura, bem como o estudo da mistura reativa para a combustão, são apresentados. Ainda neste capítulo, é analisada a estrutura da detonação no RDE, o modelo bidimensional de Douglas Schwer [1] do RDE e o seu ciclo termodinâmico.

No Capítulo 4, apresentam-se, de forma sintetizada, simulações numéricas de CFD de motores de detonação rotativa existentes na literatura e descreve-se a modelagem numérica e metodologia CFD das duas simulações tridimensionais do fenômeno de detonação no RDE desenvolvidas por [2] a serem analisadas nesta dissertação.

No Capítulo 5, os resultados das duas simulações descritas no capítulo anterior são apresentados e analisados qualitativamente, analisando a estrutura da detonação no RDE, e quantitativamente, analisando as velocidades de detonação e o impulso específico, considerando ambos os casos de estudo.

Finalmente, no Capítulo 6, são apresentadas as conclusões mais relevantes decorrentes da análise do fenômeno de detonação e da realização do projeto da dissertação, assim como os principais resultados obtidos nas simulações numéricas apresentados no capítulo anterior. O capítulo encerra com a referência a algumas sugestões para futuros desenvolvimentos.

Capítulo 2

Fundamentação Teórica

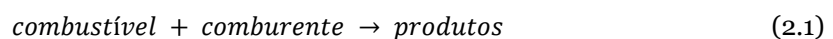
2.1 O Processo de Combustão

A combustão é um dos processos fulcrais em engenharia, que envolve o escoamento turbulento, transferência de calor, reação química, e outros processos físicos e químicos complexos [3]. Em suma, a combustão é um fenómeno sequencial de reações químicas exotérmicas em escoamentos com transmissão de calor [4]. Num processo de combustão, a onda de combustão surge após a ignição propagando-se longe da fonte de ignição, ocorrendo a transformação da energia química, ou seja, da energia interna associada às ligações atómicas das moléculas dos reagentes, em energia térmica e cinética dos produtos da combustão [5, 6]. De facto, a combustão ocorre de acordo com a primeira lei da termodinâmica assente no princípio da conservação da energia (primeira lei termodinâmica), que declara que a energia pode mudar de forma durante um processo, mas a sua quantidade total permanece constante, ou seja, a energia não pode ser criada ou destruída (a energia é conservativa) [7].

A libertação de energia através da onda de combustão provoca grandes mudanças nos estados termodinâmicos e dinâmicos dos gases. Os gradientes através da onda geram processos físicos e químicos que resultam na propagação autossustentada da onda de combustão [5].

Qualquer processo de combustão requer a existência de uma mistura constituída por, pelo menos, um combustível e um oxidante que formam os reagentes, espécies químicas presentes no início do processo. O combustível mais comumente utilizado num processo de combustão é o hidrocarboneto, cuja fórmula química é C_xH_y , e o comburente ou oxidante mais frequentemente utilizado é o ar, composto por 21% de O_2 , 78% de N_2 e 1% de outros compostos como o CO_2 , H_2O e outros gases raros [8]. O fluido de trabalho em qualquer motor de combustão interna é composto por ar, combustível e produtos de exaustão (gás queimado) [9].

A composição química da mistura reativa varia ao longo do tempo durante o processo, ou seja, os reagentes existentes no início da combustão convertem-se em produtos no final do processo. A reação química global que descreve o processo de combustão entre um combustível e um oxidante pode ser expressa na seguinte Equação (2.1):



2.2 Ondas de Combustão

As ondas de combustão autossustentadas podem ocorrer a velocidades subsônicas e supersônicas, designadas por deflagrações e detonações, respectivamente [5, 10]. Contrariamente às ondas de combustão, numa onda de choque não ocorre combustão, pelo que a única característica evidenciada tanto em detonações, deflagrações e ondas de choque perpendiculares é o aumento significativo da temperatura através da frente de onda [6].

2.2.1 Ondas de Deflagração

As ondas de deflagração propagam-se a velocidades subsônicas relativamente baixas em relação aos reagentes à sua frente pelo que, as perturbações a jusante podem-se propagar a montante e influenciar o estado inicial dos reagentes e a velocidade de propagação [5]. Uma deflagração é uma onda de expansão através da qual a pressão diminui e os produtos da combustão são acelerados para longe da onda num sentido oposto ao da sua propagação. Deste modo, dependendo da condição de fronteira que antecede a onda, a expansão dos produtos provoca um deslocamento dos reagentes a montante da frente de reação, onde surgem ondas de compressão. Assim, a propagação da onda de deflagração consiste num choque precursor seguido pela frente de reação.

A onda de deflagração propaga-se através do mecanismo de transferência de calor e massa por difusão pelo que, uma deflagração é essencialmente uma onda de difusão. Neste sentido, a ignição deve-se ao transporte de calor e radicais para os reagentes à frente da zona de reação impulsionado pela temperatura acentuada e gradientes de concentração de espécies químicas características da frente de reação. A libertação de calor pode ser utilizada para a exaustão dos produtos resultantes, gerando tração [5].

2.2.2 Ondas de Detonação

Durante muitos anos, foram usadas diferentes designações na literatura para descrever a ocorrência do fenómeno de detonação, nomeadamente, instabilidade tangencial, combustão ressonante, perturbação acústica, instabilidade transversal, entre outros nomes [11]. Durante o desenvolvimento do motor F-1 no programa Apollo, surgiram dificuldades em controlar essas “instabilidades termodinâmicas”, que até causaram a destruição do motor durante os testes realizados [11]. Um dos métodos que foi proposto para reduzir as instabilidades e evitar que ondas de pressão se amplificassem nas paredes laterais, como uma onda sonora, foi a instalação de defletores (*baffles*) para separar radialmente a câmara de combustão na placa injetora do foguete F-1.

A falta de compreensão sobre o que efetivamente ocorria num motor de foguete foi uma constante adversidade ao seu desenvolvimento. No entanto, por volta de 1950, surge o conceito de

detonação em sistemas propulsivos que vem a designar essas instabilidades de elevada frequência (HFI – *High Frequency Instability*) [11] que os engenheiros tanto tentaram prevenir. De facto, as ondas de choque são amplamente observadas em motores de foguete durante a sua operação instável, assim como a aceleração da chama e transição para o fenómeno de detonação.

A auto-detonação (*knock*) de um motor quando não premeditada, não é desejável e pretende-se que seja minimizada, de modo a evitar a destruição rápida do motor [6, 12]. Neste sentido, compreender o processo de combustão permite atuar ao nível da prevenção e minimização das consequências sempre que este fenómeno não seja desejável.

A detonação é um fenómeno muito mais energético do que a deflagração. As ondas de detonação podem ser definidas como descontinuidades no escoamento de um gás ideal no qual ocorre a adição de calor [13, 14]. A detonação é uma onda de combustão supersónica, podendo-se afirmar que a região de combustão está intimamente acoplada a uma onda de choque supersónica [13]. Assim, ao contrário da deflagração, os reagentes não são perturbados antes da passagem da frente de onda. A onda de detonação é iniciada repentinamente e propaga-se numa onda de choque de compressão incrivelmente rápida, visto que a pressão e a densidade aumentam acentuadamente, e é sustentada pelo calor libertado na combustão [5, 10, 12, 15, 16]. As variações significativas das propriedades do fluido ocorrem em distâncias muito curtas.

O mecanismo de propagação de uma detonação livre é a autoignição pela frente de choque principal impulsionada pela tração proveniente da expansão dos produtos a jusante da frente, consequência da rápida diminuição de pressão na zona de reação, juntamente com uma diminuição de pressão através das ondas de expansão que seguem a frente de onda [5]. A ignição dos reagentes deve-se à compressão adiabática (não existe interação térmica) da frente de detonação [6].

De acordo com a lei da conservação da massa, a frente de detonação tem de ser antecedida (a jusante da frente de onda) por um pistão (detonação forte ou sobrecarregada (*overdriven*)) ou ondas de expansão (detonação de propagação livre, ou seja, sem suporte de pistão). O termo detonação *overdriven* refere-se ao processo de detonação no qual os parâmetros da detonação principal, como a pressão e velocidade de propagação, excedem os valores correspondentes de Chapman e Jouguet [17], contudo, este tipo de detonação não será alvo de estudo nesta dissertação. Por outro lado, para uma detonação de propagação livre, as ondas de expansão (a jusante da detonação) reduzem a pressão e a densidade para corresponder à condição de fronteira a montante da onda e, assim, atenuar a detonação. Assim, a jusante de uma detonação de propagação livre deve existir uma condição sónica, designando-se por detonação CJ, ou supersónica, designada por detonação fraca [5]. As detonações de propagação livre são, geralmente, detonações CJ.

As deflagrações autossustentadas são intrinsecamente instáveis pelo que a frente de reação é turbulenta. Assim, nas condições de fronteira adequadas, uma onda de deflagração pode atingir

velocidades supersônicas elevadas (em relação a um sistema de coordenadas fixo) e transitar abruptamente para uma onda de detonação, através de um processo de transição de deflagração para detonação (DDT – *Deflagration to Detonation Transition*) [5]. As detonações podem ser iniciadas por detonação direta ou através do processo DDT. O primeiro método refere-se à formação espontânea da detonação através de uma fonte de ignição sem ser antecedida por um regime de deflagração [5]. Este método produz uma onda de detonação numa mistura reativa quase instantaneamente, mas requer energia de ignição cerca de uma ordem de magnitude superior do que o processo DDT numa dada mistura [11]. Para um dispositivo propulsivo, a detonação direta não é aconselhável devido ao requisito de energia a ser transportada e, portanto, o processo DDT é preferível [11]. No entanto, o processo DDT é um dos processos físico-químicos mais complexos observados amplamente na natureza. Contudo, perante as condições adequadas podem-se produzir detonações que se manifestam em grande escala através deste processo causado por pontos quentes (*hot spots*), acelerações de chama, descargas elétricas sincronizadas, ou até pela geração de turbulência. A aceleração da chama parece ser o principal mecanismo responsável pelo processo DDT [5, 11].

Em tubos de paredes rugosas, as ondas de detonação propagam-se a velocidades inferiores do que a velocidade CJ, denominadas “quase-detonações”. As deflagrações de alta velocidade e as quase-detonações são dificilmente distinguíveis pois apresentam uma estrutura turbulenta semelhante e os espectros de velocidade de ambas se sobrepõem, o que sugere que os seus mecanismos de propagação também possam ser semelhantes.

O fenómeno de detonação foi estudado por físicos e químicos durante as duas guerras mundiais, por Richard Becker, Werner Döring, G. I. Taylor, John von Neumann, George Kistiakowsky, John Kirkhood, Yakov Zeldovich, K. I. Schelkhin, e muitos outros que pretenderam compreender a termodinâmica subjacente à propagação deste tipo de onda de combustão e se a sua aplicação em sistemas propulsivos será vantajosa.

2.2.3 Velocidade Adequada da Onda de Combustão

Um método explicativo de seleção da velocidade adequada de ondas de combustão (detonações e deflagrações) é descrito nas secções seguintes, analisando, maioritariamente, as ondas de detonação, tendo por referência o livro da autoria de Dr. John H. S. Lee sobre o fenómeno da detonação [5]. A metodologia envolve a teoria da dinâmica de gases para determinar os tipos de ondas de combustão possíveis dadas pelas soluções das três leis da conservação, uma equação de estado e, por fim, o critério adicional da teoria quantitativa de Donald Leonard Chapman (1869–1958) e Ehrile Jouguet (1871–1943) para completar o sistema de equações.

2.3 Teoria da Dinâmica de Gases de Ondas de Combustão

O escoamento compressível de gases é geralmente referido como dinâmica dos gases. O escoamento é compressível quando um fluido se move a velocidades comparáveis à sua velocidade do som e, portanto, as variações de massa específica tornam-se significativas [18]. Em escoamentos com números de Mach muito inferiores a 1,0 (ou mais), os efeitos de compressibilidade são insignificantes e à medida que o número de Mach se aproxima desse valor, em escoamentos subsônicos e, posteriormente, em escoamentos transônicos, os efeitos de compressibilidade tornam-se relevantes e surgem ondas de choque que dividem zonas subsônicas e supersônicas [12, 19]. Escoamentos compressíveis exibem variações de massa específica substanciais, pelo que as variações de temperatura e pressão também são substanciais [18].

Dadas certas condições iniciais e de fronteira, a teoria da dinâmica de gases possibilita conhecer que tipo de ondas de combustão possíveis podem ser realizadas dadas pelas soluções das equações de conservação, em condições de escoamento permanente unidimensional, através da onda (transição dos estados de equilíbrio a montante, reagentes, e a jusante, produtos). Todas as detonações e deflagrações em condições de escoamento permanente devem satisfazer as equações de conservação.

A mistura reativa é altamente energética e pode assumir o estado gasoso, líquido ou sólido, contudo, apenas vão ser estudadas ondas de combustão em misturas gasosas, porque estas são mais facilmente compreendidas do que em qualquer outro estado [5].

2.3.1 Caracterização do Sistema Termodinâmico

Um sistema aberto, ou um volume de controlo, é uma região adequadamente selecionada no espaço que envolve trocas de energia e de massa entre o sistema e a vizinhança. O interior de um dispositivo propulsivo, como um compressor, turbina ou bocal, envolve escoamento do fluido e é melhor estudado selecionando a região interior como o volume de controlo [7].

Desta forma, definindo os subscritos 0 e 1 como representantes do estado dos reagentes e dos produtos, respetivamente, considera-se uma onda de combustão que se propaga à velocidade u_0 em direção ao fluido em repouso ($p_0, \rho_0, T_0, V = 0$) a montante, pelo que, a jusante da onda, as propriedades do fluido são incrementadas ($p_0 + \Delta p, \rho_0 + \Delta \rho, T_0 + \Delta T, \Delta V$), sendo a velocidade a jusante menor que a velocidade da onda, como representado na Figura 2.1 a). De forma a facilitar a análise através da onda, adota-se o volume de controlo fixando o sistema de coordenadas à onda, limitado pelas linhas a tracejado, representado na Figura 2.1 b), no qual o fluido a montante se move à velocidade u_0 (velocidade de propagação da onda de combustão) e a jusante da onda move-se à velocidade $u_1 = u_0 - \Delta V$. Nas regiões a montante e a jusante das fronteiras do volume de controlo os gradientes das variáveis de estado são desprezáveis.

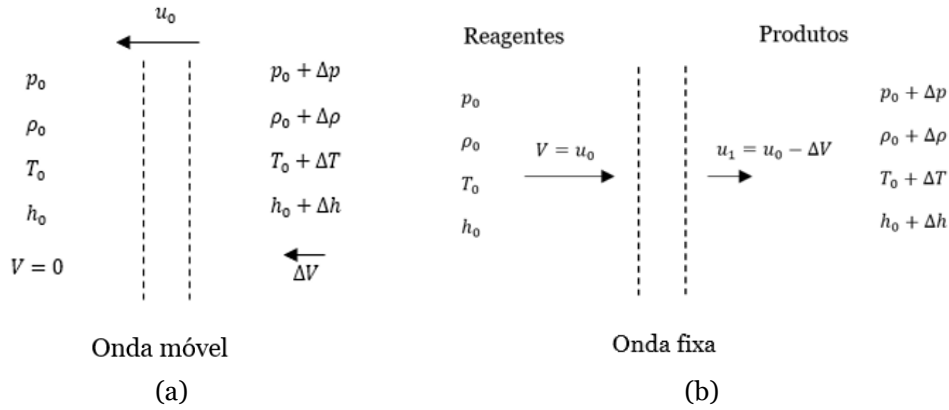


Figura 2.1: Volume de controle usado para analisar ondas de combustão em escoamento permanente. Adaptada de [5, 6, 18]; (a) Propagação da onda de combustão que se move através do fluido; (b) Propagação da onda de combustão relativa a um sistema de coordenadas fixo à onda.

Assim, no referencial adotado, a onda parecerá estacionária e a análise das ondas de combustão é possível, apesar de, no caso das detonações reais, a sua estrutura ser extremamente tridimensional. Para esta análise assumem-se as seguintes considerações [5, 6, 18]:

- Escoamento permanente (escoamento que não varia com o tempo, ou seja, $\frac{\partial}{\partial t} \equiv 0$);
- Entradas e saídas do volume de controle unidimensionais;
- Área de passagem constante;
- Comportamento de gás ideal;
- Calores específicos c_p e c_v iguais e constantes;
- Forças de corpo desprezáveis;
- Condições adiabáticas (ou seja, o sistema está termicamente isolado, pelo que não ocorrem perdas de calor do sistema para a vizinhança, pelo que $\delta q = 0$).

Primeiramente, definem-se as propriedades termodinâmicas do sistema em estudo. Para uma mistura de gás perfeito, a equação de estado pode ser escrita pela Equação (2.2):

$$p = \rho RT \quad (2.2)$$

Onde $p = \sum p_i$ pela Lei de Dalton [12] e p_i as pressões parciais, R é a constante do gás da mistura e T a temperatura. A densidade parcial de cada espécie i é $\rho_i = n_i \mathcal{M}_i$, onde \mathcal{M}_i é a massa molar de uma dada espécie i e n_i é o número de moles por unidade de volume da espécie química i numa dada mistura gasosa. Assim, a densidade da mistura gasosa é $\rho = \sum \rho_i = \sum n_i \mathcal{M}_i$. A fração mássica de uma dada espécie i é $Y_i = \frac{m_i}{m}$, onde m_i é a massa de cada espécie i e m é a massa da mistura gasosa. A fração mássica por unidade de volume pode ser escrita como $Y_i = \frac{\rho_i}{\rho}$.

Deste modo, considerando que:

$$V_0 = u_0; p_0 + \Delta p = p_1; \rho_0 + \Delta \rho = \rho_1; T_0 + \Delta T = T_1; h_0 + \Delta h = h_1$$

A análise do escoamento através da onda de combustão evidencia as desconhecidas as cinco quantidades (p_1, ρ_1, h_1, u_1 , e u_0), pelo que, conhecendo o estado inicial (isto é, p_0, ρ_0, h_0), são necessárias cinco equações para se determinar a velocidade da onda de combustão, dadas certas condições iniciais e de fronteira de uma mistura reativa [5]. Note-se que todas as velocidades serão medidas em relação à onda de combustão. Neste sentido, apresentam-se, primeiramente, as equações básicas de conservação para o volume de controlo considerado.

2.3.2 Leis de Conservação

Como o escoamento é considerado permanente unidimensional, a forma integral das equações governantes de conservação, que constituem as primeiras três equações do sistema, pode ser escrita para um volume de controlo finito [18].

Conservação da Massa

A equação de conservação da massa, conhecida pela equação da continuidade, exprime que o caudal mássico que entra e sai do volume de controlo permanece constante, pelo que:

$$\sum_i (\rho_i A_i u_i)_{entrada} = \sum_j (\rho_j A_j u_j)_{saída} = \dot{m}$$

De acordo com a Figura 2.1 b) e uma vez que a área de passagem é constante, tem-se a Equação (2.3) da continuidade:

$$\rho_0 u_0 = \rho_1 u_1 \quad (2.3)$$

Quantidade de Movimento

A lei da conservação da quantidade de movimento advém da segunda Lei de Newton que expressa que a variação da quantidade de movimento de um corpo material é igual à resultante das forças exteriores que atuam sobre esse corpo de matéria [20]. Assim, tem-se:

$$\sum F = \dot{m}(V_{saída} - V_{entrada})$$

A força resultante sobre o volume de controlo pode ser de dois tipos: forças de campo e forças de superfície. As forças de campo são decorrentes de campos externos (gravidade, magnetismo, potencial elétrico) que agem sobre toda a massa dentro do elemento que não serão consideradas. As forças de superfície decorrem das tensões sobre os lados da superfície de controlo, que incluem a pressão hidrostática e as tensões viscosas que surgem do movimento com gradientes de velocidade [18]. A espessura de ondas de pressão em gases é da ordem de 3×10^{-4} mm à pressão

atmosférica, logo, pode-se desprezar o atrito, assumindo o fluido perfeito (invíscido), cujos efeitos são desprezáveis no interior da onda, e aplicar a equação da quantidade de movimento através da onda [18]. Neste sentido, como a pressão é definida como a força exercida na área considerada, tem-se:

$$\sum F = \dot{m}(V_{saída} - V_{entrada}) \Leftrightarrow p_0 A - p_1 A = (\rho_1 A u_1 u_1 - \rho_0 A u_0 u_0)$$

Assim, a equação da quantidade de movimento é representada pela Equação (2.4).

$$p_0 + \rho_0 u_0^2 = p_1 + \rho_1 u_1^2 \quad (2.4)$$

Equação da Energia

A equação da energia obtém-se a partir da primeira Lei da Termodinâmica que enuncia que a variação da energia no interior de um sistema iguala a soma algébrica da energia transferida através das suas fronteiras sob a forma de calor e de trabalho [12], pelo que:

$$dE_T = \delta Q + \delta W \quad (2.5)$$

Onde a energia total de um sistema referente a escoamentos de fluidos é a soma da energia interna, cinética e potencial, pelo que, por unidade de massa se tem [20]:

$$de_T = de + d\left(\frac{1}{2}V^2\right) + gdz \quad (2.6)$$

Em condições de escoamento compressível, adiabático ($\delta q = 0$) e reversível (sem considerar os efeitos dissipativos por atrito, $\delta w_{atrito} = 0$, ao considerar o fluido perfeito), ou seja, isentrópico, o trabalho reduz-se apenas aos esforços normais de pressão, pelo que:

$$de_T = -d(pv)$$

Onde v é o volume específico (Equação (2.7)).

$$v = \frac{1}{\rho} \quad (2.7)$$

Como a entalpia específica por unidade de massa é dada pela Equação (2.8),

$$h = e + pv \quad (2.8)$$

Então, a Equação (2.6) é equivalente a:

$$d(e + pv) + d\left(\frac{1}{2}V^2\right) + gdz = 0 \Leftrightarrow d(h) + d\left(\frac{1}{2}V^2\right) + gdz = 0$$

Integrando ao longo do escoamento, tem-se:

$$h + \frac{1}{2}V^2 + gz = \text{constante}$$

A constante de integração corresponde à entalpia total, h_T , e, se se considerarem desprezáveis as variações de energia potencial face às variações de entalpia e de energia cinética, obtém-se a forma da equação de Bernoulli para a equação de conservação de energia [20], ou seja:

$$h_T = h + \frac{1}{2}V^2$$

Assim, considerando a entalpia de estagnação a montante igual à entalpia de estagnação a jusante da onda de combustão e o escoamento unidimensional, tem-se a Equação (2.9) da energia:

$$h_0 + \frac{u_0^2}{2} = h_1 + \frac{u_1^2}{2} \quad (2.9)$$

A entalpia específica por unidade de massa de uma espécie química i pode ser escrita como $h_i(T) = h_{f,i}^o(T_{ref}) + \int_{T_{ref}=298}^T c_{p,i}(T)dT$, onde $h_{f,i}^o$ é a entalpia de formação padrão de cada espécie i (ou seja, $p_{ref} = 1 \text{ atm}$, $T_{ref} = 298K$), $c_{p,i}$ é o calor específico por unidade de massa de cada espécie i e $\int_{T_{ref}=298}^T c_{p,i}(T)dT$ é a entalpia sensível de cada espécie i . Assim, a entalpia específica por unidade de massa da mistura é $h = \sum Y_i h_i$. De igual modo, o calor específico por unidade de massa da mistura é $c_p = \sum Y_i c_{p,i}$. Por conveniência, escolhe-se o estado inicial 0 para corresponder ao estado de referência padrão no qual a entalpia de formação é definida (ou seja, $p_0 = p_{ref} = 1 \text{ atm}$, $T_0 = T_{ref} = 298K$).

A Equação (2.9) também pode ser apresentada separando a entalpia de formação da variação da entalpia sensível, ou seja, obtendo a Equação (2.10).

$$h_0 + q + \frac{u_0^2}{2} = h_1 + \frac{u_1^2}{2} \quad (2.10)$$

Onde h_0 e h_1 referem-se à entalpia sensível da mistura, dos reagentes e produtos respetivamente e q é a diferença entre as entalpias de formação dos reagentes e dos produtos, ou seja:

$$q = \sum_i^{\text{reagentes}} Y_i h_{f,i}^o(T_{ref}) - \sum_j^{\text{produtos}} Y_j h_{f,j}^o(T_{ref})$$

As reações de combustão são exotérmicas logo a entalpia de combustão é sempre negativa, quando os reagentes e os produtos estão no mesmo estado de referência [8]. A energia química libertada (ou adição de calor proveniente da reação química [6]) não é geralmente conhecida

inicialmente, porque as espécies do produto e as suas concentrações não são conhecidas e, como dependem da temperatura, variam para diferentes soluções das leis de conservação (ou seja, detonações e deflagrações). A temperatura real dos produtos de combustão é geralmente algumas centenas de graus inferior à temperatura máxima possível (temperatura adiabática de chama) devido às perdas de calor por condução, convecção ou radiação para o exterior do sistema reativo [8], perdas de combustível não queimado e produtos de combustão incompleta [12].

Por conveniência, na análise seguinte, assume-se que q é conhecido e permanece uma constante [5], não dependendo do estado a jusante. Assumindo que as reações químicas ocorrem progressivamente, pode-se reescrever a libertação da energia química como λq , onde $0 \leq \lambda \leq 1$ representa o progresso da reação.

2.3.3 Equação de Estado para a Entalpia Sensível

Para além das três equações de conservação, obtém-se a quarta equação especificando uma equação de estado (que relaciona duas propriedades, pressão e densidade neste caso), $h(p, \rho)$, tanto para reagentes como para produtos. Assumindo que $h = c_p dT$ é a entalpia sensível por unidade de massa da mistura e, tendo em conta a equação de estado para um gás perfeito (Equação 2.2) e as relações $c_p - c_v = R$ e $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$, a equação de estado para a entalpia sensível pode ser escrita como:

$$h = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{p}{\rho} \quad (2.11)$$

Assim, foram apresentadas quatro equações, as três equações de conservação (Equações (2.3), (2.4) e (2.10)) e a Equação (2.11), para as cinco quantidades desconhecidas, pelo que ainda falta mais uma equação adicional necessária para cumprir o objetivo proposto nesta secção.

Chapman (1889) e Jouguet (1904, 1905), pouco depois da descoberta do fenómeno de detonação, formularam uma teoria quantitativa que fornece o critério adicional (velocidade mínima ou entropia mínima) para completar o sistema de equações, dadas certas condições iniciais, que seleciona a velocidade apropriada da onda de combustão para uma mistura explosiva, chamado de teoria Chapman-Jouguet. Chapman e Jouguet basearam-se nas obras de Rankine (1870) e Hugoniot (1887, 1889), que analisaram as equações de conservação através de uma onda de choque [5].

O critério CJ advém da relação entre a linha de Rayleigh e a curva de Hugoniot obtidas a partir das equações de conservação através das ondas de combustão. Assim, primeiramente, procede-se à determinação da linha de Rayleigh e da curva de Hugoniot.

2.3.4 Linha de Rayleigh

A linha de Rayleigh pode ser facilmente obtida a partir da Equação (2.3) da conservação da massa e da Equação (2.4) da quantidade de movimento.

A Equação (2.4) pode assumir a seguinte forma (Equação (2.12)):

$$p_1 - p_0 = \rho_0 u_0^2 - \rho_1 u_1^2 \quad (2.12)$$

A partir da Equação (2.3) sabe-se que:

$$\rho_1 = \frac{\rho_0 u_0}{u_1} \quad \text{e} \quad u_1 = \frac{\rho_0 u_0}{\rho_1}$$

Assim, substituindo ρ_1 no segundo membro da Equação (2.12) e tendo em conta a definição do volume específico (Equação (2.7)), o segundo membro da Equação (2.12) pode ser escrito de outra forma:

$$\begin{aligned} \rho_0 u_0^2 - \frac{\rho_0 u_0}{u_1} u_1^2 &= \rho_0 (u_0^2 - u_0 u_1) = \rho_0 u_0 (u_0 - u_1) = \rho_0 u_0 \left(u_0 - \frac{\rho_0 u_0}{\rho_1} \right) = \rho_0 u_0^2 \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho_1} \right) = \\ &= \rho_0^2 u_0^2 \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_1} \right) = \rho_0^2 u_0^2 (v_0 - v_1) \end{aligned}$$

Portanto, a Equação (2.12) equivale a:

$$p_1 - p_0 = \rho_0^2 u_0^2 (v_0 - v_1)$$

Assim, passando o termo entre parêntesis para o primeiro membro da Equação (2.12), tem-se:

$$\frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1} = \rho_0^2 u_0^2$$

A equação de conservação da massa exprime que o caudal mássico por unidade de área permanece constante, $\left(\frac{\dot{m}}{A}\right)_0 = \left(\frac{\dot{m}}{A}\right)_1 = \left(\frac{\dot{m}}{A}\right)$, pelo que se obtém a Equação (2.13).

$$\frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1} = \rho_0^2 u_0^2 = \rho_1^2 u_1^2 = \left(\frac{\dot{m}}{A}\right)^2 \quad (2.13)$$

A Equação (2.13) é equivalente à Equação (2.14).

$$\left(\frac{\dot{m}}{A}\right) = \sqrt{\frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1}} \quad (2.14)$$

A Equação (2.14) é válida se $\left(\frac{\dot{m}}{A}\right)$ pertence ao conjunto dos números reais, ou seja se $\frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1} \geq 0$, pelo que, se $v_0 > v_1$ (ou $\rho_0 < \rho_1$) então $p_1 > p_0$ e se $v_0 < v_1$ (ou $\rho_0 > \rho_1$) então $p_1 < p_0$. Deste modo, a Equação (2.14) define as regiões no plano $p-v$ onde existem soluções reais. A região definida por $p_1 > p_0$ corresponde à solução de compressão para ondas de detonação e a região definida por $p_1 < p_0$ corresponde à solução de expansão para ondas de deflagração [5].

Definindo as Equações (2.15) e (2.16),

$$x = \frac{v_1}{v_0} = \frac{\rho_0}{\rho_1} \quad (2.15)$$

$$y = \frac{p_1}{p_0} \quad (2.16)$$

Então, substituindo $p_1 = yp_0$ e $v_1 = xv_0$ na Equação (2.14), esta pode ser reescrita na seguinte Equação (2.17):

$$\left(\frac{\dot{m}}{A}\right) = \sqrt{\left(\frac{y-1}{1-x}\right) \frac{p_0}{v_0}} \quad (2.17)$$

Neste sentido, no plano $p-v$ (ou no plano $x-y$) as regiões onde ocorrem detonações e deflagrações são representadas na Figura 2.2.

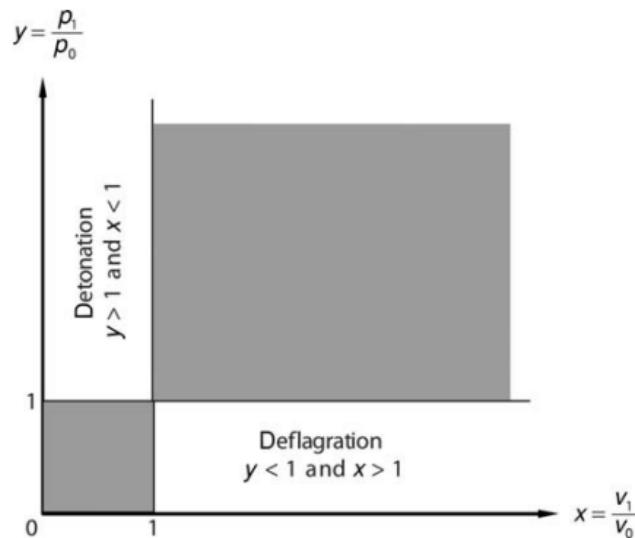


Figura 2.2: Domínio das soluções da detonação e deflagração no plano $p-v$ [5].

De modo a obter a linha de Rayleigh, a Equação (2.17) pode ser reescrita de outra forma. Neste sentido, determina-se primeiro a expressão para a velocidade do som.

2.3.5 Velocidade do Som

Para tal, recorre-se à mesma análise feita anteriormente para a onda de pressão, ou pulso, adotando-se o volume de controlo no qual a jusante da onda estacionária tem-se as propriedades incrementadas no fluido ($p + \Delta p, \rho + \Delta \rho, T + \Delta T$) que se move à velocidade $a - \Delta V$ e a montante ($p, \rho, T, V = a$) à velocidade a [18].

Portanto, pela equação da continuidade, obtém-se a Equação (2.18):

$$\Delta V = a \frac{\Delta \rho}{\rho + \Delta \rho} \quad (2.18)$$

A Equação (2.18) comprova que a velocidade induzida no fluido (ΔV) é muito menor que a velocidade a da onda. Como a espessura da onda é reduzida, pode-se desprezar o atrito e aplicar a equação da quantidade de movimento através da onda:

$$\sum F = \dot{m}(V_{saída} - V_{entrada}) \Leftrightarrow pA - (p + \Delta p)A = (\rho A a)(a - \Delta V - a)$$

Assim, determina-se a variação de pressão dada pela Equação (2.19):

$$\Delta p = \rho a \Delta V \quad (2.19)$$

Por fim, para obter uma expressão para a velocidade da onda, igualam-se as Equações (2.18) e (2.19):

$$\Delta p = \rho a a \frac{\Delta \rho}{\rho + \Delta \rho} \Leftrightarrow a^2 = \frac{\Delta p \rho + \Delta \rho}{\Delta \rho} = \frac{\Delta p}{\Delta \rho} \left(1 + \frac{\Delta \rho}{\rho}\right)$$

Assim, obtém-se a seguinte expressão:

$$a^2 = \frac{\Delta p}{\Delta \rho} \left(1 + \frac{\Delta \rho}{\rho}\right)$$

Quanto maior for a intensidade $\frac{\Delta \rho}{\rho}$ da onda, maior é a sua velocidade. No limite de intensidade infinitesimal $\Delta \rho \rightarrow 0$, obtém-se a velocidade do som c de um fluido, $c^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho}$, para a qual o processo termodinâmico efetuado pelo fluido à medida que a onda passa deve ser adiabático infinitesimal ou isentrópico, pois não existem gradientes de temperatura, exceto dentro da própria onda [18].

A expressão correta para a velocidade do som é dada pela Equação (2.20).

$$c = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s^{\frac{1}{2}} = \left(\gamma \frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T^{\frac{1}{2}} \quad (2.20)$$

Para um gás perfeito, através da equação de estado, deduz-se que a velocidade do som é dada pela Equação (2.21).

$$c = (\gamma RT)^{1/2} = \left(\frac{\gamma p}{\rho}\right)^{1/2} \quad (2.21)$$

Assim, a velocidade do som e o número de Mach no escoamento a montante da onda de combustão são dados pelas Equações (2.22) e (2.23):

$$c_0 = \sqrt{\frac{\gamma_0 p_0}{\rho_0}} = \sqrt{\gamma_0 p_0 v_0} \quad (2.22)$$

$$M_0 = \frac{u_0}{c_0} \quad (2.23)$$

Então, sabendo que, $c_0^2 = \gamma_0 p_0 v_0$, $\rho_0 = \frac{\gamma_0 p_0}{c_0^2}$ e a definição do volume específico (Equação (2.7)), através da Equação (2.13), a Equação (2.17) pode ser reescrita, de modo que:

$$\begin{aligned} \rho_0^2 u_0^2 &= \left(\frac{y-1}{1-x}\right) \frac{p_0}{v_0} \Leftrightarrow \frac{\gamma_0^2 p_0^2}{c_0^4} M_0^2 c_0^2 = \left(\frac{y-1}{1-x}\right) \frac{p_0}{v_0} \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \frac{\gamma_0^2 p_0 v_0}{c_0^2} M_0^2 = \left(\frac{y-1}{1-x}\right) \Leftrightarrow \frac{\gamma_0^2 p_0 v_0}{\gamma_0 p_0 v_0} M_0^2 = \left(\frac{y-1}{1-x}\right) \Leftrightarrow \gamma_0 M_0^2 = \frac{y-1}{1-x} \end{aligned}$$

Assim, a Equação (2.17) equivale a:

$$\gamma_0 M_0^2 = \frac{y-1}{1-x}$$

De modo equivalente, tem-se a Equação (2.24):

$$y = (1 + \gamma_0 M_0^2) - (\gamma_0 M_0^2)x \quad (2.24)$$

A Equação (2.24) representa a linha Rayleigh que define o caminho termodinâmico no qual ocorre a transição do estado inicial dos reagentes (1,1) para o estado final dos produtos (x, y) através da onda de combustão. Por outro lado, a Equação (2.24) representa uma linha reta no plano x-y com uma inclinação de $-\gamma_0 M_0^2$. A inclinação da linha de Rayleigh pode ser dada pela Equação (2.25).

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_R = -\frac{y-1}{1-x} \quad (2.25)$$

A partir da Equação (2.24), verifica-se que a velocidade da onda de combustão é proporcional à raiz quadrada da inclinação da linha Rayleigh, ou seja:

$$-\gamma_0 M_0^2 = -\frac{\gamma_0}{c_0^2} u_0^2 \Leftrightarrow u_0^2 = \gamma_0 M_0^2 \frac{c_0^2}{\gamma_0} \Leftrightarrow u_0 = \sqrt{\gamma_0 M_0^2 \frac{c_0^2}{\gamma_0}} \Leftrightarrow u_0 = \sqrt{\gamma_0 M_0^2} \cdot \sqrt{\frac{c_0^2}{\gamma_0}}$$

Portanto, uma velocidade de onda de combustão maior implica uma maior inclinação da linha de Rayleigh.

2.3.6 Curva de Hugoniot

A curva de Hugoniot relaciona-se com a linha de Rayleigh, na medida em que representa a posição (*locus*) dos estados termodinâmicos de equilíbrio a jusante (produtos da onda de combustão) para um determinado estado a montante, para diferentes velocidades da onda [5].

Em Função da Entalpia

A curva de Hugoniot pode ser obtida a partir da Equação (2.10) da energia substituindo as velocidades pelas expressões obtidas da Equação (2.13). Assim, considerando as expressões da Equação (2.26):

$$u_0^2 = \frac{1}{\rho_0^2} \frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1}, u_1^2 = \frac{1}{\rho_1^2} \frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1} \quad (2.26)$$

A Equação (2.10) torna-se:

$$\begin{aligned} h_1 - (h_0 + q) &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_0^2} \frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1} - \frac{1}{\rho_1^2} \frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1} \right) \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow h_1 - (h_0 + q) &= \frac{1}{2} (p_1 - p_0) \left(\frac{1}{v_0 - v_1} \right) (v_0^2 - v_1^2) \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow h_1 - (h_0 + q) &= \frac{1}{2} (p_1 - p_0) \left(\frac{1}{v_0 - v_1} \right) (v_0 - v_1)(v_0 + v_1) \end{aligned}$$

Assim, a curva de Hugoniot é representada pela Equação (2.27) em termos de entalpia:

$$h_1 - (h_0 + q) = \frac{1}{2} (p_1 - p_0)(v_0 + v_1) \quad (2.27)$$

Em Função da Energia Interna

A equação de Hugoniot também pode ser expressa em termos de energia interna utilizando a definição da entalpia específica por unidade de massa dada pela Equação (2.8) na Equação (2.27), obtendo a Equação (2.28).

$$\begin{aligned}
(e_1 + p_1 v_1) - (e_0 + p_0 v_0 + q) &= \frac{1}{2}(p_1 - p_0)(v_0 + v_1) \Leftrightarrow \\
\Leftrightarrow e_1 - (e_0 + q) &= \frac{1}{2}(p_1 v_0 + p_1 v_1 - p_0 v_0 - p_0 v_1) - p_1 v_1 + p_0 v_0 \Leftrightarrow \\
\Leftrightarrow e_1 - (e_0 + q) &= \frac{1}{2}(p_1 v_0 - p_1 v_1 + p_0 v_0 - p_0 v_1) \Leftrightarrow \\
\Leftrightarrow e_1 - (e_0 + q) &= \frac{1}{2}(p_1 + p_0)(v_0 - v_1) \tag{2.28}
\end{aligned}$$

As Equações (2.27) e (2.28) são válidas para meios gasosos, líquidos e sólidos.

Em Função de p e v

Além destas representações, a curva de Hugoniot pode ser expressa em termos de p e v , assumindo um gás perfeito com uma equação de estado para a entalpia dada pela Equação (2.11). Assim, a Equação (2.27) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
\frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1} \frac{p_1}{\rho_1} - \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_0 - 1} \frac{p_0}{\rho_0} + q \right) &= \frac{1}{2}(p_1 - p_0)(v_0 + v_1) \Leftrightarrow \\
\Leftrightarrow \frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1} p_1 v_1 - \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_0 - 1} p_0 v_0 + q \right) &= \frac{1}{2}(p_1 v_0 + p_1 v_1 - p_0 v_0 - p_0 v_1)
\end{aligned}$$

Tendo em conta que as definições de x e y , dadas pelas Equações (2.15) e (2.16), respetivamente, considerando o plano x - y , tem-se:

$$\begin{aligned}
\Leftrightarrow -q &= \frac{1}{2}(p_1 v_0 + p_1 v_1 - p_0 v_0 - p_0 v_1) - \frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1} p_1 v_1 + \frac{\gamma_0}{\gamma_0 - 1} p_0 v_0 \Leftrightarrow \\
\Leftrightarrow -q &= \frac{1}{2}(y p_0 v_0 + x y p_0 v_0 - p_0 v_0 - x p_0 v_0) - \frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1} x y p_0 v_0 + \frac{\gamma_0}{\gamma_0 - 1} p_0 v_0 \Leftrightarrow \\
\Leftrightarrow -q &= \frac{1}{2} \left[y p_0 v_0 + \left(1 - \frac{2\gamma_1}{\gamma_1 - 1} \right) x y p_0 v_0 + \left(\frac{2\gamma_0}{\gamma_0 - 1} - 1 \right) p_0 v_0 - x p_0 v_0 \right] \Leftrightarrow \\
\Leftrightarrow -\frac{2q}{p_0 v_0} &= y + \left(1 - \frac{2\gamma_1}{\gamma_1 - 1} \right) x y + \left(\frac{2\gamma_0}{\gamma_0 - 1} - 1 \right) - x \Leftrightarrow \\
\Leftrightarrow -2q' &= y + \left(1 - \frac{2\gamma_1}{\gamma_1 - 1} \right) x y + \left(\frac{2\gamma_0}{\gamma_0 - 1} - 1 \right) - x \Leftrightarrow \\
\Leftrightarrow -2q' &= y - \left(\frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} \right) x y + \frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} - x \Leftrightarrow \\
\Leftrightarrow -y + \left(\frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} \right) x y &= \frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} - x + 2q' \Leftrightarrow \\
\Leftrightarrow y \left[\left(\frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} \right) x - 1 \right] &= \frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} - x + 2q'
\end{aligned}$$

Desta forma, a Equação (2.27) equivale à Equação (2.29) em termos de p e v :

$$y = \frac{\frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} - x + 2q'}{\frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1}x - 1} \quad (2.29)$$

Onde,

$$q' = \frac{q}{p_0 v_0}$$

A Equação (2.29) pode ser apresentada numa forma mais conveniente, considerando:

$$\frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} = \frac{1}{\alpha}$$

Neste sentido, a Equação (2.29) apresenta-se como:

$$\begin{aligned} y = \frac{\frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} - x + 2q'}{\frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1}x - 1} &\Leftrightarrow y \frac{1}{\alpha}x - y + x = \frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} + 2q' \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \frac{1}{\alpha}xy - y + x = \frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} + 2q' \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow xy - \alpha y + \alpha x = \alpha \left(\frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} + 2q' \right) \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow (x - \alpha)(y + \alpha) = \alpha \left(\frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} + 2q' \right) - \alpha^2 \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow (x - \alpha)(y + \alpha) = \alpha \left(\frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} - \alpha + 2q' \right) \end{aligned}$$

Assim, obtém-se a Equação (2.30):

$$(y + \alpha)(x - \alpha) = \beta \quad (2.30)$$

Onde,

$$\alpha = \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} \quad (2.31)$$

$$\beta = \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} \left(\frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} - \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} + 2q' \right)$$

A inclinação da curva de Hugoniot pode ser obtida a partir da Equação (2.30).

$$(y + \alpha)(x - \alpha) = \beta \Leftrightarrow y = \frac{\beta}{x - \alpha} - \alpha$$

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_H = \frac{-\beta}{(x - \alpha)^2} = -\frac{(y + \alpha)(x - \alpha)}{(x - \alpha)^2}$$

Assim, obtém-se a inclinação da curva Hugoniot dada pela Equação (2.32).

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_H = -\frac{y + \alpha}{x - \alpha} \quad (2.32)$$

Portanto, a curvatura da curva Hugoniot é dada pela Equação (2.33).

$$\left(\frac{d^2y}{dx^2}\right)_H = 2\frac{y + \alpha}{(x - \alpha)^2} \quad (2.33)$$

A curvatura da curva Hugoniot é sempre positiva, uma vez que $\alpha > 0$ visto que $\gamma_1 > 0$, pelo que a curva Hugoniot tem a concavidade para cima.

2.3.7 Ondas de Combustão Possíveis

Assim, após a determinação da linha de Rayleigh e da curva de Hugoniot em termos de p e v , é possível construir o gráfico representado na Figura 2.3.

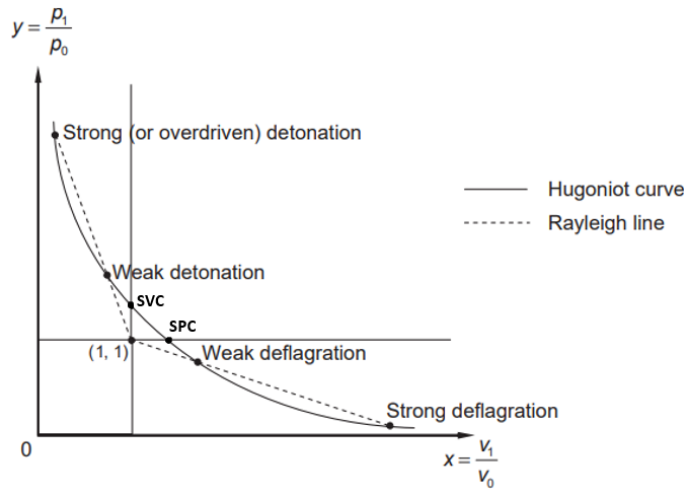


Figura 2.3: A linha de Rayleigh e a curva de Hugoniot. Adaptada de [5]. Soluções a Volume Constante (SVC) e a Pressão Constante (SPC) assinaladas.

A interseção das retas definidas por $x = 1$ e $y = 1$ com a curva de Hugoniot representam as soluções a volume constante e a pressão constante, respetivamente. Estas soluções formam os limites entre o ramo superior de detonação e o ramo inferior de deflagração da curva de Hugoniot, representados na Figura 2.3. Efetivamente, a Equação (2.17) revela a impossibilidade de soluções

no conjunto de números reais, entre as soluções de combustão de volume constante e pressão constante, no troço da curva de Hugoniot quando $x > 1$ e $y > 1$.

A teoria da dinâmica de gases possibilita conhecer o tipo de ondas de combustão possíveis que podem ser realizadas que satisfaçam as equações de conservação através da onda, em condições de escoamento permanente unidimensional, dadas certas condições iniciais e de fronteira. Desta forma, a solução das leis de conservação deve satisfazer tanto a linha de Rayleigh quanto a curva de Hugoniot simultaneamente e, segundo a Figura 2.3, a linha de Rayleigh representa a transição dos reagentes, que correspondem ao estado inicial $x = y = 1$, para os produtos, referentes aos estados finais (x, y) possíveis correspondentes aos pontos de interseção da linha de Rayleigh com a curva de Hugoniot [5].

Tendo em conta que a libertação de energia química pode ser escrita como λq , de forma a representar o progresso da reação, pode-se definir um conjunto de curvas de Hugoniot intermediárias para cada valor de λ que representam a posição (*locus*) dos estados parcialmente reagidos referentes a diferentes graus de finalização de reação química. Para ondas de choque não reativas, como choques perpendiculares, não ocorre combustão [6] e q é zero e, para esse valor, a curva de Hugoniot designa-se curva de choque de Hugoniot que intersesta o estado inicial (1,1) [5]. Para valores de q finitos (ou para valores finitos de λ), a curva de Hugoniot encontra-se acima da curva de choque de Hugoniot (não intersesta o estado inicial).

No caso representado na Figura 2.3, verifica-se que a linha de Rayleigh intersesta a curva de Hugoniot em dois pontos no ramo superior, as soluções de detonações forte (*overdriven*) característica de uma maior compressão, e fraca, e noutros dois pontos no ramo inferior, as soluções de deflagrações fraca e forte (maior expansão) [5, 13]. A pressão e a densidade da solução de detonação forte são maiores do que no caso da detonação fraca. Assim, para uma dada velocidade de propagação da onda de combustão, ou seja, para cada uma das inclinações da linha de Rayleigh, correspondem duas soluções possíveis de ondas de combustão.

2.4 Teoria de Chapman-Jouguet

Dadas certas condições iniciais, quando a linha Rayleigh se torna tangente à curva Hugoniot de equilíbrio (na qual as reações químicas estão finalizadas), as duas soluções para cada ramo da curva Hugoniot, representadas na Figura 2.3, convergem, como representado na Figura 2.4. Neste sentido, a inclinação da linha Rayleigh no ramo de detonação é mínima para a curva de Hugoniot e, portanto, a velocidade da detonação é mínima e, no ramo de deflagração da curva Hugoniot, a inclinação da linha Rayleigh é máxima, pelo que a velocidade da deflagração é máxima.

Assim, as duas soluções resultantes de tangência são chamadas de soluções CJ, não existindo soluções abaixo do valor mínimo no caso da detonação, apenas um espectro contínuo de

velocidades de detonação acima do mínimo. Quando a linha de Rayleigh não interceta a curva Hugoniot, não existem soluções para as ondas de combustão.

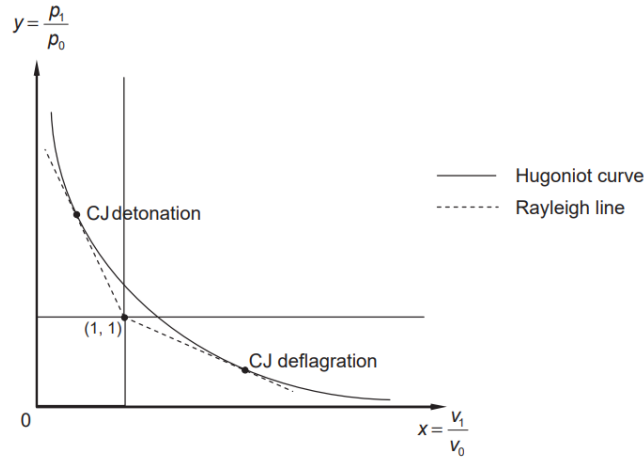


Figura 2.4: Soluções CJ [5].

Assim, a teoria CJ fornece este critério adicional de velocidade mínima (no caso da detonação) que completa o sistema de equações, dadas certas condições iniciais, que seleciona a velocidade apropriada da onda de combustão para uma mistura explosiva. As detonações de propagação livre (sem suporte de pistão, que incluem detonações CJ e detonações fracas) são, geralmente, detonações CJ. A teoria CJ apenas se aplica a ondas de combustão ideais, planas (sem curvatura), onde não se consideram perdas de calor e quantidade de movimento [5].

Chapman baseou-se em observações experimentais que demonstram que uma velocidade única de detonação é obtida para uma dada mistura explosiva em determinadas condições iniciais, pelo que considerou a solução de velocidade mínima ou de tangência a solução correta. Para detonações, a solução de tangência encontra-se bem de acordo com as análises experimentais. Contudo, no caso das deflagrações, a solução de velocidade máxima geralmente não é observada [5]. A análise das deflagrações requer maior precisão, visto que os reagentes à frente da onda são influenciados pela dinâmica dos produtos de combustão, que dependem das condições de fronteira do escoamento a jusante.

2.4.1 Soluções CJ

As soluções CJ podem ser obtidas igualando a inclinação da linha de Rayleigh com a inclinação da curva de Hugoniot, dadas pelas Equações (2.25) e (2.32), respetivamente.

$$\begin{aligned} \left(\frac{dy}{dx}\right)_H &= \left(\frac{dy}{dx}\right)_R \Leftrightarrow \frac{y + \alpha}{x - \alpha} = \frac{y - 1}{1 - x} \Leftrightarrow (1 - x)(y + \alpha) = (x - \alpha)(y - 1) \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow y + \alpha - xy - x\alpha = xy - x - y\alpha + \alpha \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow y(1 + \alpha - 2x) = -x(1 - \alpha) \end{aligned}$$

Tendo em consideração a expressão de definição de α dada pela Equação (2.31), tem-se:

$$y^* = \frac{-x^*(1-\alpha)}{1+\alpha-2x^*} = \frac{-x^*\left(1-\frac{\gamma_1-1}{\gamma_1+1}\right)}{1+\frac{\gamma_1-1}{\gamma_1+1}-2x^*} = \frac{-x^*\left(\frac{\gamma_1+1}{\gamma_1+1}-\frac{\gamma_1-1}{\gamma_1+1}\right)}{\frac{\gamma_1+1}{\gamma_1+1}+\frac{\gamma_1-1}{\gamma_1+1}-2x^*} = \frac{-x^*\left(\frac{2}{\gamma_1+1}\right)}{\frac{2\gamma_1}{\gamma_1+1}-2x^*} = \frac{-x^*\left(\frac{1}{\gamma_1+1}\right)}{\frac{\gamma_1}{\gamma_1+1}-x^*}$$

Assim, obtêm-se as soluções CJ (x^*, y^*) pela Equação (2.34).

$$y^* = \frac{-x^*}{\gamma_1 - (\gamma_1 + 1)x^*} \quad (2.34)$$

Onde o asterisco denota os pontos CJ.

A inclinação nos pontos CJ obtêm-se substituindo a Equação (2.34) na Equação (2.25), por exemplo, que representa a inclinação da linha de Rayleigh, ou seja:

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_R^* = -\frac{y^* - 1}{1 - x^*} = -\frac{-x^* - [\gamma_1 - (\gamma_1 + 1)x^*]}{\gamma_1 - (\gamma_1 + 1)x^*} = \frac{\gamma_1(1 - x^*)}{(1 - x^*)[\gamma_1 - (\gamma_1 + 1)x^*]}$$

Assim, a inclinação da linha de Rayleigh nos pontos CJ é dada pela Equação (2.35).

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_R^* = \frac{\gamma_1}{\gamma_1 - (\gamma_1 + 1)x^*} \quad (2.35)$$

A inclinação da linha de Rayleigh verifica-se ser equivalente à inclinação da curva Hugoniot (Equação (2.36)).

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_R^* = \frac{\gamma_1 x^*}{[\gamma_1 - (\gamma_1 + 1)x^*]x^*} = -\frac{\gamma_1 y^*}{x^*} = \left(\frac{dy}{dx}\right)_H^* \quad (2.36)$$

2.4.2 Escoamento Isentrópico a Jusante

A equação para um processo isentrópico nos produtos da detonação é dada por $pv^{\gamma_1} = \text{constante}$ [5, 12] ou, ainda, por $xy^{\gamma_1} = \text{constante}$. Assim, a inclinação do processo isentrópico é dada pela Equação (2.37).

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_S = -\frac{\gamma_1 y}{x} \quad (2.37)$$

Onde o subscrito S se refere a um processo isentrópico. Deste modo, verifica-se que, nos pontos CJ, as inclinações da linha de Rayleigh, da curva de Hugoniot e do processo isentrópico são iguais (Equação (2.38)).

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_R^* = \left(\frac{dy}{dx}\right)_H^* = \left(\frac{dy}{dx}\right)_S^* \quad (2.38)$$

2.4.3 Condição de Escoamento Sónico

A velocidade do som pode ser escrita através da Equação (2.39).

$$c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_S = RT \quad (2.39)$$

Considerando a equação de estado para um gás perfeito (Equação (2.2)) e que $\rho = \frac{1}{v}$, decorre a derivada parcial dada pela Equação (2.40).

$$\left(\frac{dp}{dv}\right)_S = \frac{-1}{v^2} RT \quad (2.40)$$

Substituindo as definições de x e y , dadas pelas Equações (2.15) e (2.16), respetivamente, na Equação (2.37), tem-se a Equação (2.41):

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_S = -\frac{\gamma_1 y}{x} = -\frac{\gamma_1 \frac{p_1}{p_0}}{\frac{v_1}{v_0}} = -\frac{\gamma_1 p_1 v_0}{v_1 p_0} \quad (2.41)$$

Assim, através da Equação (2.39), da Equação (2.40) e da Equação (2.41), relaciona-se a velocidade do som com a inclinação do processo isentrópico pela Equação (2.42).

$$c_1^2 = \left(\frac{dp}{d\rho}\right)_S = -v_1^2 \left(\frac{dp}{dv}\right)_S = -p_0 v_0 x^2 \left(\frac{dy}{dx}\right)_S \quad (2.42)$$

Do mesmo modo, a Equação (2.41) é equivalente à Equação (2.43), obtida considerando a Equação (2.22).

$$\begin{aligned} \left(\frac{dy}{dx}\right)_S &= -\frac{\gamma_1 p_1 v_0}{v_1 p_0} = -\frac{\gamma_1 p_1}{x p_0} = -\frac{\gamma_1 p_1 v_1}{x p_0 v_1} = -\frac{\gamma_1 p_1 v_1}{x p_0 v_0 x} = -\frac{c_1^2}{p_0 v_0 x^2} \\ \left(\frac{dy}{dx}\right)_S &= -\frac{c_1^2}{p_0 v_0 x^2} \end{aligned} \quad (2.43)$$

Por outro lado, a inclinação da linha de Rayleigh pode ser apresentada de outra forma a partir da Equação (2.26) e (2.25), ou seja, através da Equação (2.44) obtém-se a Equação (2.45).

$$u_1^2 = \frac{1}{\rho_1^2} \frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1} = v_1^2 \frac{p_1 - p_0}{v_0 - v_1} = p_0 v_0 x^2 \frac{y - 1}{1 - x} \quad (2.44)$$

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_R = -\frac{u_1^2}{p_0 v_0 x^2} \quad (2.45)$$

Assim, como a inclinação da linha de Rayleigh e a inclinação do processo isentrópico são iguais nos pontos CJ, usando agora as Equações (2.43) e (2.45) obtidas, tem-se:

$$\frac{u_1^*}{p_0 v_0 x_1^2} = \frac{c_1^*}{p_0 v_0 x_1^2}$$

Logo, obtém-se a Equação (2.46):

$$\left(\frac{u_1^*}{c_1^*}\right)^2 = M_1^{*2} = 1 \quad (2.46)$$

Portanto, o número de Mach do escoamento a jusante de uma detonação ou deflagração CJ, M_1^* , é igual à unidade. Esta condição de escoamento sónico a jusante foi usada por Jouguet para determinar a solução de detonação desejada, enquanto Chapman escolheu o critério de velocidade mínima [5]. A partir da análise das soluções de tangência, verifica-se que o critério de velocidade mínima de Chapman e o critério sónico de Jouguet são equivalentes.

Numa detonação forte (*overdriven*), o escoamento a jusante é subsónico, $M_1 < 1$, em relação à onda de combustão, enquanto numa detonação fraca (tipo de detonação de propagação livre), o escoamento é supersónico, $M_1 > 1$ [5].

A condição CJ é um requisito para que o choque principal de uma detonação não seja enfraquecido pela expansão supersónica dos produtos de detonação [10]. Este critério pode ser usado para aproximar as velocidades de detonação em modelos tridimensionais, mas é mais adequada para uma análise unidimensional com uma frente de detonação infinitesimalmente fina.

2.4.4 Condição de Entropia Mínima

A análise da variação da entropia na curva Hugoniot através da onda de combustão é relevante para justificar a escolha da solução CJ.

A equação de Hugoniot expressa em termos de energia interna (Equação (2.28)) pode ser reescrita numa forma adimensional e a sua derivada resulta na variação da energia interna ao longo da curva de Hugoniot.

Através da 1ª Lei Termodinâmica para sistemas fechados (Equação (2.5)), sabendo que, por unidade de massa, $\delta q = T ds$, para processos reversíveis, obtém-se a Equação Central da Termodinâmica para este tipo de sistemas para a variação da energia interna:

$$de = T ds - p dv$$

Onde s é a entropia, por unidade de massa.

Assim, através da expressão para a variação da energia interna ao longo da curva de Hugoniot e a equação central da termodinâmica adimensional ao longo da curva Hugoniot, é possível obter-se a variação da entropia ao longo da curva de Hugoniot, tomando $\bar{s} = s/R$:

$$\left(\frac{d\bar{s}}{dx}\right)_H = \frac{1-x}{2xy} \left[\left(\frac{dy}{dx}\right)_H + \frac{y-1}{1-x} \right] \quad (2.47)$$

Considerando a Equação (2.25) para a inclinação da linha de Rayleigh, a Equação (2.47) pode ser escrita como a Equação (2.48):

$$\left(\frac{d\bar{s}}{dx}\right)_H = \frac{1-x}{2xy} \left[\left(\frac{dy}{dx}\right)_H - \left(\frac{dy}{dx}\right)_R \right] \quad (2.48)$$

Nos pontos CJ, como as inclinações da curva Hugoniot e da linha Rayleigh são iguais, então a Equação (2.48) é simplificada para a Equação (2.49):

$$\left(\frac{d\bar{s}}{dx}\right)_H^* = 0 \quad (2.49)$$

Assim, verifica-se que a entropia assume valores extremos nos pontos CJ. Neste sentido, derivando a Equação (2.47), obtém-se a curvatura da curva da entropia e, usando a Equação (2.25) e o facto das inclinações da linha Rayleigh e da curva Hugoniot serem iguais nos pontos CJ, obtém-se a curvatura das curvas de entropia nestes pontos, dada pela Equação (2.50):

$$\left(\frac{d^2\bar{s}}{dx^2}\right)_H^* = \frac{1-x^*}{2x^*y^*} \left(\frac{d^2y}{dx^2}\right)_H^* \quad (2.50)$$

A curvatura da curva de Hugoniot é sempre positiva (Equação (2.33)), pelo que a curvatura da curva de entropia depende apenas se $1-x^*$ é positivo ou negativo. Para o ramo de detonação, onde $x^* < 1$, a curvatura da curva da entropia é positiva, enquanto para deflagrações, onde $x^* > 1$, a curvatura é negativa. Assim, a entropia é mínima para detonações CJ e máxima para deflagrações CJ.

Jouguet investigou a curva Hugoniot e determinou a variação da entropia ao longo da curva descobrindo um mínimo, a solução de entropia mínima, que corresponde à condição sónica a jusante da detonação. Assim, Jouguet confirmou que a solução de entropia mínima (a solução sónica) era a apropriada para a velocidade da onda [5]. A condição de escoamento sónico ou a condição de entropia mínima estabelecem um critério para seleccionar a solução das leis de conservação.

2.5 Relações de Rankine–Hugoniot

As ondas de combustão possíveis dadas pela teoria da dinâmica de gases correspondem aos pontos de interseção da linha de Rayleigh com a curva de Hugoniot. As relações de Rankine–Hugoniot (RH) são expressões algébricas que descrevem as condições nas quais a linha de Rayleigh intersesta a curva Hugoniot [1] para as ondas de detonação, relacionando o estado a jusante (produtos da combustão) com o estado a montante (reagentes da combustão) através da onda.

Portanto, a fim de se deduzirem as relações de RH, iguala-se a equação da linha de Rayleigh (Equação (2.24)) à equação da curva de Hugoniot (Equação (2.29)), uma vez que as soluções de detonação correspondem à interseção dessas duas equações.

$$\begin{aligned}
 (1 + \gamma_0 M_0^2) - (\gamma_0 M_0^2)x &= \frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} - x + 2q' \Leftrightarrow \\
 &= \frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} x - 1 \Leftrightarrow \\
 \Leftrightarrow (1 + \gamma_0 M_0^2) \left(\frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} x - 1 \right) - (\gamma_0 M_0^2)x \left(\frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} x - 1 \right) - \frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} + x - 2q' &= 0 \Leftrightarrow \\
 \Leftrightarrow -(\gamma_0 M_0^2) \frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} x^2 + \left(\gamma_0 M_0^2 + 1 + \frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} + \gamma_0 M_0^2 \frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} \right) x + \left(-1 - \gamma_0 M_0^2 - \frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} - 2q' \right) &= 0
 \end{aligned}$$

Multiplicando ambos os membros da equação por $-\frac{\gamma_1 - 1}{(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)}$, tem-se:

$$\begin{aligned}
 \Leftrightarrow x^2 + \left[-\frac{\gamma_1 - 1}{(\gamma_1 + 1)} - \frac{\gamma_1 - 1}{(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} - \frac{1}{\gamma_0 M_0^2} - 1 \right] x + \frac{\gamma_1 - 1}{(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} + \frac{\gamma_1 - 1}{(\gamma_1 + 1)} \\
 + \frac{\gamma_0 + 1}{\gamma_0 - 1} \frac{\gamma_1 - 1}{(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} + 2q' \frac{\gamma_1 - 1}{(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} &= 0 \Leftrightarrow \\
 \Leftrightarrow x^2 - \left[\frac{(\gamma_1 - 1)(\gamma_0 M_0^2)}{(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} + \frac{\gamma_1 - 1}{(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} + \frac{\gamma_1 + 1}{(\gamma_0 M_0^2)(\gamma_1 + 1)} + \frac{(\gamma_0 M_0^2)(\gamma_1 + 1)}{(\gamma_0 M_0^2)(\gamma_1 + 1)} \right] x \\
 + \frac{(\gamma_0 - 1)(\gamma_1 - 1)}{(\gamma_0 - 1)(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} + \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} + \frac{\gamma_0 \gamma_1 - \gamma_0 + \gamma_1 - 1}{(\gamma_0 - 1)(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} \\
 + 2q' \frac{\gamma_1 - 1}{(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} &= 0 \Leftrightarrow \\
 \Leftrightarrow x^2 - \left[\frac{2\gamma_1(\gamma_0 M_0^2)}{(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} + \frac{2\gamma_1}{(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} \right] x + \frac{\gamma_0 \gamma_1 - \gamma_0 - \gamma_1 + 1}{(\gamma_0 - 1)(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} + \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} \\
 + \frac{\gamma_0 \gamma_1 - \gamma_0 + \gamma_1 - 1}{(\gamma_0 - 1)(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} + 2q' \frac{\gamma_1 - 1}{(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} &= 0 \Leftrightarrow \\
 \Leftrightarrow x^2 - 2 \frac{\gamma_1(\gamma_0 M_0^2) + \gamma_1}{(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} x + \frac{2\gamma_0 \gamma_1 - 2\gamma_0}{(\gamma_0 - 1)(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} + \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} + 2q' \frac{\gamma_1 - 1}{(\gamma_1 + 1)(\gamma_0 M_0^2)} &= 0
 \end{aligned}$$

Considerando $\eta = \frac{1}{M_0^2}$, tem-se:

$$\Leftrightarrow x^2 - 2 \frac{\gamma_1 \left(\frac{\gamma_0 + \eta}{\eta} \right)}{(\gamma_1 + 1) \left(\frac{\gamma_0}{\eta} \right)} x + 2 \frac{\gamma_0 (\gamma_1 - 1)}{(\gamma_0 - 1) (\gamma_1 + 1) \left(\frac{\gamma_0}{\eta} \right)} + \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} \left(1 + 2q' \frac{1}{\frac{\gamma_0}{\eta}} \right) = 0 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow x^2 - 2 \frac{\gamma_1 (\gamma_0 + \eta)}{\gamma_0 (\gamma_1 + 1)} x + \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} \left[1 + 2 \frac{\gamma_0}{\left(\frac{\gamma_0}{\eta} \right) (\gamma_0 - 1)} + 2q' \frac{\eta}{\gamma_0} \right] = 0$$

Considerando $\bar{q} = \frac{q'}{\gamma_0} = \frac{q}{\gamma_0 p_0 v_0} = \frac{q}{c_0^2}$, a igualdade resulta na seguinte equação quadrática para a razão de volume específico x dada pela Equação (2.51):

$$x^2 - 2 \frac{\gamma_1 (\gamma_0 + \eta)}{\gamma_0 (\gamma_1 + 1)} x + \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} \left[1 + 2\eta \left(\frac{1}{(\gamma_0 - 1)} + \bar{q} \right) \right] = 0 \quad (2.51)$$

Resolvendo a Equação (2.51) para x , através da fórmula resolvente, visto ser uma equação de segundo grau, obtêm-se as soluções da equação, dadas pela Equação (2.52):

$$x = \frac{v_1}{v_0} = \frac{\rho_0}{\rho_1} = \frac{\gamma_1 (\gamma_0 + \eta \pm Z)}{\gamma_0 (\gamma_1 + 1)} \quad (2.52)$$

Onde:

$$Z = \sqrt{\left(\frac{\gamma_0}{\gamma_1} - \eta \right)^2 - K\eta} \quad (2.53)$$

$$K = \frac{2\gamma_0 (\gamma_1 + 1)}{\gamma_1^2} \left[\frac{\gamma_1 - \gamma_0}{\gamma_0 - 1} + \gamma_0 (\gamma_1 - 1) \bar{q} \right] \quad (2.54)$$

Assim, tal como já era esperado da resolução da Equação (2.51), existem duas soluções, evidenciadas pelo sinal \pm na Equação (2.52), conforme o domínio seja o ramo superior de detonação ou inferior de deflagração [5]. De facto, o sinal positivo corresponde à solução com uma razão de volume específico maior (maior expansão), referindo-se à solução de detonação fraca (ou deflagração forte), enquanto o sinal negativo se refere a uma detonação forte (ou deflagração fraca).

2.5.1 Soluções CJ

As soluções de tangência CJ obtêm-se quando as duas raízes da Equação (2.51) coincidem, ou seja, quando $Z = 0$ na Equação (2.53), definindo $\eta = \eta^*$, nos pontos CJ, ou seja, $\frac{1}{M_0^2} = \frac{1}{M_{CJ}^2}$, tem-se:

$$\left(\frac{\gamma_0}{\gamma_1} - \eta^*\right)^2 - K\eta^* = 0$$

Resolvendo para η^* , obtém-se a Equação (2.55):

$$\eta^* = \frac{1}{M_{CJ}^2} = \frac{\gamma_0}{\gamma_1} \left(1 - \frac{2}{1 \pm \sqrt{1 + \frac{4}{K} \frac{\gamma_0}{\gamma_1}}} \right) \quad (2.55)$$

Do mesmo modo, o sinal \pm na Equação (2.55) corresponde às duas soluções de tangência: a detonação CJ, no caso do sinal positivo, e a deflagração CJ, no caso do sinal negativo.

No caso de uma detonação CJ, é possível reescrever a Equação (2.55) como:

$$\eta^* = \frac{1}{M_{CJ}^2} \approx \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_1}\right)^2 \frac{1}{K}$$

Considerando a aproximação $\gamma_0 \approx \gamma_1$, a Equação (2.54) torna-se:

$$K \approx 2(\gamma_1^2 - 1)\bar{q}$$

Assim,

$$\eta^* \approx \frac{1}{2(\gamma_1^2 - 1)\bar{q}}$$

$$(M_{CJ})_{detonação} \approx \sqrt{2(\gamma_1^2 - 1)\bar{q}}$$

$$(M_{CJ})_{deflagração} \approx \frac{1}{\sqrt{2(\gamma_1^2 - 1)\bar{q}}}$$

No caso das deflagrações (ondas de expansão), o número de Mach aumenta através da chama, a velocidade aumenta acentuadamente e a densidade diminui bastante. Contudo, o número de Mach é demasiado pequeno, pelo que este parâmetro não caracteriza corretamente a deflagração [6].

2.5.2 RH de Detonações

As relações RH são expressões algébricas que relacionam o estado a jusante (p_1, ρ_1, T_1 , entre outras propriedades termodinâmicas) com o estado a montante (p_0, ρ_0, T_0) e, ainda, com o número de Mach de detonação, M_0 , assumindo que o gás é perfeito e que a energia química libertada é constante [5].

As relações RH através de uma onda de detonação constroem-se considerando, inicialmente, um sistema de coordenadas fixo e a onda de detonação móvel através do fluido (como o esquema representado pela Figura 2.1 a)). Quando $Z \neq 0$, a razão de densidade $\frac{\rho_1}{\rho_0}$ pode ser obtida da Equação (2.52), obtendo-se a Equação (2.56):

$$\frac{\rho_1}{\rho_0} = \frac{\gamma_0(\gamma_1 + 1)}{\gamma_1(\gamma_0 + \eta \pm Z)} \quad (2.56)$$

A razão da velocidade da partícula, Equação (2.57), pode ser obtida a partir da Equação (2.56) e da conservação da massa (Equação (2.3)).

$$\frac{u_1}{u_0} = \frac{\rho_0}{\rho_1} = \frac{\gamma_1(\gamma_0 + \eta \pm Z)}{\gamma_0(\gamma_1 + 1)} \quad (2.57)$$

A razão de pressão, Equação (2.58), obtém-se usando a equação da quantidade de movimento (Equação (2.4)).

$$y = \frac{p_1}{p_0} = \frac{\gamma_0 + \eta \pm \gamma_1 Z}{(\gamma_1 + 1)\eta} \quad (2.58)$$

A razão da temperatura e velocidade do som através da detonação podem ser obtidas a partir das Equações (2.56) e (2.58) e da equação de estado para um gás perfeito.

Considerando a propagação da onda relativa a um sistema de coordenadas fixo à onda (como representado na Figura 2.1 b)), as equações através da onda obtêm-se a partir de uma transformação de coordenadas das Equações (2.56) a (2.58).

Assim, a razão de densidade através da onda permanece a mesma dada pela Equação (2.56). No entanto, a razão da velocidade da partícula, Equação (2.59), é obtida a partir da conservação da massa considerando as velocidades $u_0 = D$ e $u_1 = D - u'_1$ a montante e a jusante da onda, respetivamente.

$$\frac{u'_1}{D} = \frac{\gamma_0 - \gamma_1(\eta \pm Z)}{\gamma_0(\gamma_1 + 1)} \quad (2.59)$$

Relativamente à razão de pressão, esta também permanece a mesma dada pela Equação (2.58), contudo, a pressão p_1 geralmente é normalizada em relação a $\rho_0 D^2$ em vez de p_0 , pelo que a partir da Equação (2.58), obtém-se a Equação (2.60):

$$\frac{p_1}{\rho_0 D^2} = \frac{\gamma_0 + \eta \pm \gamma_1 Z}{\gamma_0(\gamma_1 + 1)} \quad (2.60)$$

Assim, as Equações (2.56) a (2.60) são as relações de RH através de uma onda de detonação.

As relações RH através de uma onda de choque perpendicular num meio não reativo são análogas às relações através de uma onda de detonação, considerando $\bar{q} = 0$ na Equação (2.54).

2.5.3 RH de Detonações CJ

Para detonações CJ, onde $M_{CJ} \gg 1$ (de modo que $\eta^* \ll 1$), η^* é desprezável e $Z = 0$, pelo que, tendo em conta a aproximação $\gamma_0 \approx \gamma_1$, as relações de RH dadas pelas Equações (2.56), (2.59) e (2.60) reduzem-se às Equações (2.61), (2.62) e (2.63).

$$\frac{\rho_1}{\rho_0} = \frac{\gamma + 1}{\gamma} \quad (2.61)$$

$$\frac{u'_1}{D} = \frac{1}{\gamma + 1} \quad (2.62)$$

$$\frac{p_1}{\rho_0 D^2} = \frac{1}{\gamma + 1} \quad (2.63)$$

2.6 Teoria CJ Incompleta

Na análise da dinâmica de gases das ondas de combustão, as equações de conservação são baseadas nos estados de equilíbrio a montante e a jusante apenas, pelo que, choques, detonações, e deflagrações são analisados usando as equações de Rankine-Hugoniot através da frente de detonação sem considerar o mecanismo para a transição de reagentes para produtos através da onda. Embora a transição do estado inicial para o estado final seja representada pela linha de Rayleigh, os estados intermediários ao longo da mesma não precisam ser considerados, desde que o estado final corresponda à interseção da Linha de Rayleigh com a curva de Hugoniot.

No caso de detonações fracas (patológicas), a condição sónica não corresponde ao equilíbrio químico pois apresentam uma condição a jusante da frente de onda supersónica. A teoria CJ não considera esta solução, uma vez que só considera soluções na curva Hugoniot de equilíbrio, pelo que é inadequada até mesmo para prever, em condições de escoamento permanente, o estado de detonação.

Assim, a teoria CJ é uma teoria incompleta, pois ignora os detalhes e natureza das reações químicas dentro da estrutura de detonação (o processo de transição de reagentes para produtos) e não fornece argumentos matemáticos ou físicos necessários para justificar o critério CJ de seleção da solução. Por outro lado, a teoria CJ apenas se aplica a detonações ideais, planas (sem curvatura), em condições de escoamento permanente unidimensional negligenciando as perdas por calor e quantidade de movimento, pelo que a estrutura celular tridimensional transiente e instável de detonações em quase todas as misturas explosivas torna a teoria CJ inválida [5].

No entanto, continua a ser uma excelente teoria para a previsão da velocidade de detonação, mesmo para detonações muito instáveis. O critério CJ pode ser usado para aproximar as velocidades de detonação em modelos tridimensionais, mas é mais adequada para uma análise unidimensional com uma frente de detonação infinitesimalmente fina.

Estudos foram realizados relativamente ao escoamento transiente de expansão dos produtos de combustão e ao caso especial de detonações esféricas que, ao contrário de detonações de geometria plana, parecem não ser compatíveis com as condições sônicas de uma detonação CJ, questionando a sua existência em escoamento permanente. O modelo desenvolvido por Zeldovich, von Neumann e Werner Döring sobre a estrutura de detonação destacou-se entre as várias investigações que se seguiram à teoria CJ.

2.7 Modelo da Estrutura Laminar da Detonação (ZND)

John von Neumann (1942) apresentou argumentos físicos que justificam a escolha da solução CJ, ao invés das soluções das detonações forte e fraca. A partir de considerações de estabilidade para detonações autossustentadas (livres, sem suporte do movimento de pistão), a solução de detonação forte pode ser eliminada porque a equação de conservação da massa requer a existência de ondas de expansão a jusante da onda para reduzir a densidade e atenuar a onda.

No entanto, a solução de detonação fraca não é tão facilmente descartada. Analisando a estrutura da onda de detonação, von Neumann mostrou a possibilidade da solução da detonação fraca quando as curvas Hugoniot parcialmente reagidas se intersectam, obtendo-se uma velocidade de detonação maior do que o valor CJ de equilíbrio. A tangência da linha Rayleigh a uma curva de Hugoniot parcialmente reagida significa que a condição sônica é alcançada antes do equilíbrio químico ser alcançado. As detonações patológicas existem para certas misturas explosivas através de um aumento significativo da temperatura. O critério CJ apenas considera soluções na curva de equilíbrio de Hugoniot, pelo que é inadequado para prever, de modo geral, o estado de detonação em escoamento permanente, uma vez que não considera a existência de detonações patológicas [5]. Todas as curvas Hugoniot intermediárias correspondentes aos diferentes graus de finalização da reação devem ser consideradas.

Assim, a estrutura de detonação, os processos de transição de reagentes para produtos envolvendo a natureza das reações químicas, deve ser considerada na seleção da solução das Equações de Rankine-Hugoniot através da frente.

Contrariamente às detonações ideais, onde se considera uma detonação estritamente plana sem perdas de quantidade de movimento e de calor na zona de reação, as detonações não ideais têm curvatura e perdas devido aos efeitos de viscosidade (atrito ou fricção) e transferência de calor. Yakov B. Zeldovich (1940/1950) estudou estes efeitos de perdas na propagação da onda de detonação dentro da sua estrutura e verificou que, nesse caso, a velocidade de detonação é menor que o valor CJ de equilíbrio. As perdas de calor e quantidade de movimento para as paredes são

efeitos bidimensionais e a sua modelagem unidimensional é uma descrição incorreta na estrutura de detonação. Contudo, Zeldovich desenvolveu um critério matemático de regularidade na singularidade sónica, que requer um valor único para a velocidade de detonação (*eigenvalue detonations*) [5], um método para determinar a velocidade de detonação de detonações patológicas de von Neumann e detonações não ideais, uma vez que nestes casos, a velocidade de detonação não pode ser obtida a partir da teoria de equilíbrio CJ.

Assim, Zeldovich (1940), von Neumann (1942) e, ainda, Werner Döring (1943) que analisou com maior detalhe a estrutura de detonação, descreveram explicitamente o modelo da estrutura de detonação referido como o modelo ZND [5] que possibilita descrever a zona de transição através da onda, especificando os processos físicos e químicos que são responsáveis pela transformação do estado inicial para o estado final. O critério usado no modelo ZND é o critério desenvolvido por Zeldovich.

2.7.1 Estrutura Unidimensional da Detonação

Neste sentido, o modelo consiste numa frente de choque principal que se move à velocidade de detonação em relação ao gás e que adiabaticamente comprime e aquece os reagentes até a temperatura de ignição, que anteriormente se encontravam nas condições iniciais [13], como se pode verificar na Figura 2.5.

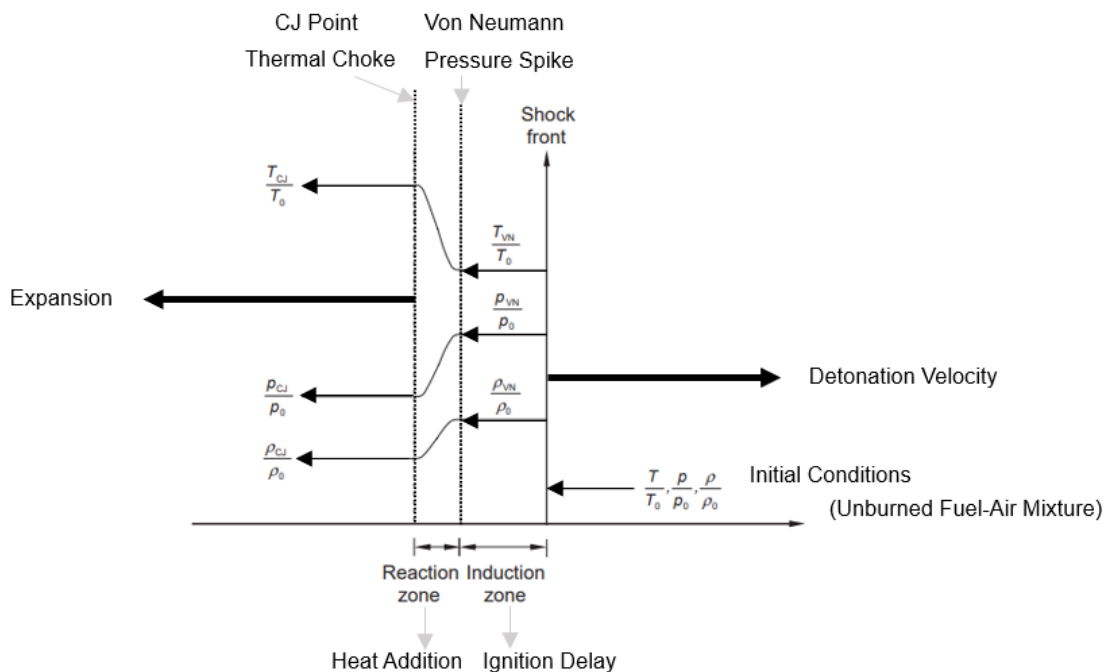


Figura 2.5: Modelo unidimensional da detonação plana. Adaptada de [5, 13].

A região de gás não queimado logo atrás do choque é uma região estável de pressão elevada conhecida como “von Neumann spike” que representa o atraso de ignição [5, 13]. Desta forma, ocorre dissociação térmica das moléculas aquecidas pelo choque, surgindo espécies de radicais

ativas na zona de indução que segue a frente de choque. De modo geral, a zona de indução é termicamente neutra pelo que o estado termodinâmico da mistura aquecida permanece relativamente constante.

Seguidamente, os reagentes são convertidos em produtos através de reações exotérmicas rápidas na zona de reação, o que resulta num maior aumento da temperatura e diminuição da pressão e densidade. A adição de calor ao escoamento ocorre imediatamente atrás do choque assim que a cinética da reação química se inicia. A espessura da região de adição de calor é determinada pelo tempo necessário para completar as reações de combustão [13].

Para uma onda de detonação livre, há uma diminuição adicional de pressão devida à expansão dos gases acelerados a jusante da frente de onda, que segue a zona de reação que gera a tração responsável pela propagação do choque principal.

Ao contrário do que ocorre numa onda de choque, o calor por condução e os efeitos viscosos desempenham um papel praticamente insignificante na estrutura de detonação, uma vez que a zona de reação está localizada muito mais a jusante e é separada do choque por uma zona de indução relativamente longa [5].

2.7.2 Modelo ZND

O modelo ZND considera igualmente o escoamento permanente compressível unidimensional com adição de calor através da onda de detonação representado na Figura 2.6.

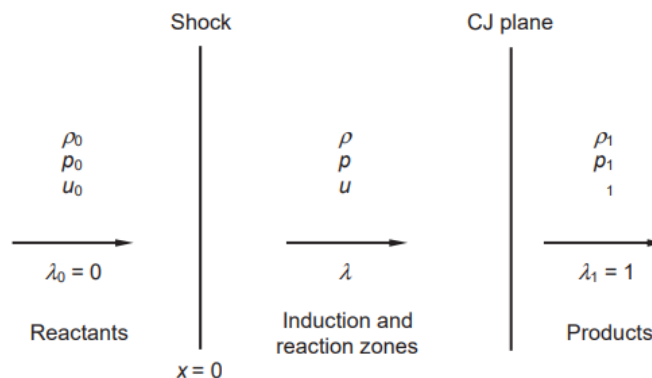


Figura 2.6: Esboço do escoamento através da onda de detonação [5].

A estrutura ZND é analisada considerando a simplificação de gás perfeito com a razão entre os calores específicos constante (γ).

Assim, tendo em conta o esquema do escoamento através da detonação representado na Figura 2.6, as equações de conservação relativas a um sistema de coordenadas fixo à onda de combustão e as expressões da velocidade do som e do número de Mach, Equação (2.22) e Equação (2.23), respetivamente, obtém-se a seguinte expressão dada pela Equação (2.64):

$$\frac{du}{dx} = \frac{(\gamma - 1)q \frac{d\lambda}{dx}}{c^2(1 - M^2)} \quad (2.64)$$

Onde λ é a variável de progresso da reação.

Assim, especificando a lei de taxa de reação, então a Equação (2.64) pode ser integrada numericamente. A reação química é descrita pela lei da taxa de Arrhenius de passo único, uma lei de taxa simples usada para estudos de detonação teóricos e numéricos, dada pela Equação (2.65):

$$\frac{d\lambda}{dt} = \varepsilon(1 - \lambda)e^{-E_a/RT} \quad (2.65)$$

A lei da taxa de Arrhenius contém duas constantes, o fator pré-exponencial ε e a energia de ativação E_a , que têm de ser especificadas. A energia de ativação pode ser vista como a energia mínima necessária para quebrar as ligações químicas das moléculas durante uma colisão de forma a ocorrer a reação e o fator de Boltzmann $e^{-E_a/RT}$ que pode ser interpretado como a probabilidade de ocorrência de uma colisão bem-sucedida originando os produtos. As constantes são determinadas experimentalmente.

O parâmetro mais importante desta expressão é a energia de ativação, uma medida da sensibilidade à temperatura da reação química que controla a estrutura ZND. A reação química ocorre de maneira gradual atrás do choque principal para energias de ativação baixas. Por outro lado, para energias de ativação elevadas, a taxa de reação ocorre muito lentamente inicialmente, mas acelera rapidamente quando a temperatura excede um determinado valor. Assim, nesse caso, a fase de indução é longa e é seguida por um tempo de reação relativamente curto. Energias de ativação elevadas causam instabilidade na estrutura ZND, contudo, a consideração do escoamento permanente unidimensional no modelo ZND não permite a manifestação de instabilidades visto que o regime não é transiente.

2.7.3 Critério de Zeldovich

A estrutura ZND pode ser determinada obtendo-se, primeiramente, o estado CJ calculando a velocidade de detonação pela teoria CJ para certos valores de γ e q . O plano sónico corresponde ao plano de equilíbrio químico no qual todas as reações químicas estão concluídas, ou seja, quando $\lambda = 1$, pelo que $d\lambda/dt = \phi$. O estado von Neumann pode ser obtido através das relações de RH para choques perpendiculares. Deste modo, as Equações (2.64) e (2.65) podem ser integradas simultaneamente do choque principal para o plano CJ, usando as expressões para a velocidade do som, a equação de estado para um gás perfeito, a definição do número de Mach e a conservação da massa e da quantidade de movimento.

Na integração da Equação (2.64), o número de Mach do escoamento atrás do choque principal é inicialmente subsónico, aumentando progressivamente para a unidade, $M \rightarrow 1$, à medida que a

energia é libertada e as reações químicas se completam e $\lambda \rightarrow 1$. Neste sentido, o denominador da Equação (2.64) aproxima-se de zero o que resulta numa singularidade (sónica), a não ser que o numerador também desapareça simultaneamente, caso em que $d\lambda/dt \rightarrow 0$, se a velocidade CJ for usada. Assim, o uso da velocidade de detonação garante a aproximação do equilíbrio químico quando o plano sónico (plano de equilíbrio químico), $M = 1$, é atingido [5].

Assim, a condição de regularidade na singularidade sónica verifica-se quando o numerador desaparece assim que o denominador se aproxima de zero. Neste sentido, alternativamente, a solução desejada para a velocidade de detonação pode ser obtida de outra forma. Neste caso, não é necessário conhecer previamente a velocidade de detonação, assumindo-se, inicialmente, uma velocidade arbitrária do choque principal para calcular o estado de von Neumann e, de seguida, integrar a Equação (2.64). À medida que a integração prossegue e $M \rightarrow 1$, o denominador desaparece, todavia, se o numerador não desaparecer em simultâneo para o valor escolhido para a velocidade de detonação (quando o equilíbrio químico não é alcançado quando o plano sónico é atingido), itera-se para a velocidade de detonação correta que satisfaça a condição de regularidade na singularidade sónica, que deve coincidir com o valor da teoria CJ se a mistura explosiva não tiver curvas de Hugoniot intermediárias que se cruzam [5]. No caso da detonação fraca, a tangência da linha Rayleigh a uma curva de Hugoniot parcialmente reagida significa que a condição sónica é alcançada antes do equilíbrio químico ser alcançado.

Assim, o método de Zeldovich requer um valor único para a velocidade de detonação, denominada de detonação de autovalor (*eigenvalue*), para o equilíbrio químico ser atingido quando o plano sónico é alcançado (condição de regularidade na singularidade sónica). Neste sentido, as detonações de valor único devem ser idênticas às detonações CJ. Contudo, os mecanismos cinéticos considerados no modelo da estrutura ZND permitem a atribuição de valores para a velocidade de detonação distintos da velocidade CJ de equilíbrio.

A consideração da estrutura e integração das leis de conservação através da zona de reação permitem a possibilidade de se incluírem os termos de perdas nas equações de conservação através da frente de detonação, obtendo-se o estado de detonação em regime permanente através da condição de regularidade, uma vez que a teoria CJ falha nesses casos. Portanto, o modelo ZND não é restringido pela suposição de ausência dos efeitos de perdas como na teoria CJ. Além disso, também se pode incluir o efeito da curvatura incluindo um termo de divergência de área na equação de continuidade. Contudo, a relativa facilidade em realizar um cálculo termodinâmico de equilíbrio pelo critério CJ é um dos motivos para que este método seja usado para determinar a velocidade de detonação de uma determinada mistura explosiva [5].

2.7.4 Número de Mach Inicial

A variação do número de Mach é dada em função da libertação de calor (ou aumento na entalpia de estagnação). A libertação de calor pode ser dada pela Equação (2.66).

$$d(\lambda q) = dQ = dh_t = c_p dT_t = \frac{dc_t^2}{\gamma - 1} \quad (2.66)$$

Onde h_t , T_t , e c_t representam a entalpia e temperatura de estagnação, e velocidade do som, respetivamente.

A definição do número de Mach permite obter as seguintes expressões:

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

$$dM = \frac{\partial M}{\partial u} du + \frac{\partial M}{\partial c} dc$$

onde,

$$\frac{\partial M}{\partial u} = \frac{c du}{c^2} = \frac{1}{c}$$

$$\frac{dM}{dc} = -\frac{u dc}{c^2} = -\frac{u}{c^2}$$

assim,

$$dM = \frac{1}{c} du - \frac{u}{c^2} dc \Leftrightarrow dM = \frac{M}{u} du - \frac{M}{c} dc$$

Portanto, tem-se a seguinte expressão da definição do número de Mach:

$$\frac{dM}{M} = \frac{du}{u} - \frac{dc}{c}$$

Do mesmo modo, a partir da equação da velocidade do som, Equação (2.21), da equação de estado para um gás perfeito, da equação de continuidade e quantidade de movimento obtêm-se as respetivas expressões:

$$2 \frac{dc}{c} = \frac{dT}{T}$$

$$\frac{dp}{p} = \frac{d\rho}{\rho} + \frac{dT}{T}$$

$$d(\rho u) = 0, \quad \frac{du}{u} = -\frac{d\rho}{\rho}$$

$$d(p + \rho u^2) = 0, \quad \frac{dp}{p} = -\gamma M^2 \frac{du}{u}$$

Assim, usando as expressões anteriores na Equação (2.64), a variação do número de Mach com a temperatura de estagnação à medida que o calor é adicionado ao escoamento pode ser descrita pela Equação (2.67):

$$\frac{dM}{M} = \frac{(1 + \gamma M^2) \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right) dT_t}{2(1 - M^2) T_t} \quad (2.67)$$

Esta equação pode ser integrada, obtendo-se a Equação (2.68):

$$\frac{T_t}{T_t^*} = \frac{2(\gamma + 1)M^2 \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)}{(1 + \gamma M^2)^2} \quad (2.68)$$

Onde T_t^* corresponde à temperatura de estagnação quando $M = 1$. Para um determinado número inicial de Mach, a quantidade máxima de calor que pode ser adicionada a um escoamento ocorre quando $M \rightarrow 1$, pelo que:

$$q_{max} = h_t^* - h_t = c_p(T_t^* - T_t) = c_p T_t \left(\frac{T_t}{T_t^*} - 1\right)$$

$$\frac{q_{max}}{c_p T_t} = (\gamma - 1) \frac{q_{max}}{c_t^2} = \frac{T_t^*}{T_t} - 1 \quad (2.69)$$

Através da Equação (2.68), a Equação (2.69), reescreve-se na forma da Equação (2.70):

$$2(\gamma^2 - 1) \frac{q_{max}}{c_t^2} = \frac{(M^2 - 1)^2}{M^2 \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)} \quad (2.70)$$

Deste modo, a Equação (2.70) permite obter o número de Mach inicial, M , para o qual o escoamento se torna sónico quando uma quantidade máxima de calor, q_{max} , for adicionada ao escoamento provocando o estrangulamento (*choking*) do escoamento, caracterizado pela restrição do caudal devido às condições sónicas [12]. Assim, a Equação (2.70) fornece o número de Mach CJ e, portanto, a inclinação da linha de Rayleigh e a quantidade máxima de calor determina a curva Hugoniot de equilíbrio [5].

A teoria da dinâmica de gases para detonações e o modelo ZND para a estrutura da detonação não consideram os efeitos das condições de fronteira na propagação da onda. Contudo, a maioria das detonações propagam-se sob a influência de paredes. No entanto, a estrutura da ZND continua a ser um modelo importante onde a cinética química detalhada das reações explosivas pode ser estudada sob condições de dinâmica de gases que correspondem aos processos de detonação.

2.8 Irreversibilidades e a Entropia

A teoria CJ não considera os efeitos dissipativos por atrito, assumindo o fluido perfeito, e considera o escoamento isentrópico dos produtos de detonação (adiabático e reversível, ao assumir o fluido perfeito).

Num sistema termicamente isolado (adiabático) a entropia não diminui (Equação (2.71)), aumenta quando o processo é irreversível e permanece constante quando o processo é reversível (a variação da entropia é nula).

$$\Delta s_{if} \geq 0 \quad (2.71)$$

Evidentemente, mesmo num processo reversível não é possível transformar todo o calor fornecido em trabalho útil, uma vez que a transformação de calor em trabalho é acompanhada pela degradação de uma parcela de energia fornecida em energia não disponível. Numa detonação CJ, a entropia é mínima, mas não é nula. A primeira lei termodinâmica apenas estabelece a contabilidade energética do sistema. A segunda lei termodinâmica é que determina que quantidade de calor fornecido se transforma em trabalho útil. A energia é uma propriedade termodinâmica conservativa mas a entropia, de modo geral, não o é.

O desempenho de sistemas de engenharia é degradado pela presença de irreversibilidades e a geração de entropia é uma medida das suas magnitudes presentes durante os processos. Quanto maior for a extensão das irreversibilidades maior será a geração de entropia [7]. Todos os processos que ocorrem na natureza são irreversíveis, os processos reversíveis são apenas idealizações dos processos reais e nunca podem ser alcançados. Os processos são tratados como reversíveis para facilitar a análise dos mesmos e servem como modelos idealizados para serem comparados com os processos reais [7]. De facto, o fluido real envolve viscosidade [20] pelo que os processos termodinâmicos subjacentes ao fenómeno da detonação serão irreversíveis. Através da detonação forte, ocorre um maior aumento da entropia do que através de uma detonação fraca (para a mesma velocidade de detonação), por exemplo. As detonações não ideais (reais) apresentam perdas devido aos efeitos de viscosidade (atrito ou fricção) e transferência de calor e podem ser estudadas pelo critério de Zeldovich no modelo ZND.

2.9 Instabilidade da Frente de Detonação

A estrutura plana de escoamento unidimensional permanente de uma detonação raramente é realizada experimentalmente, uma vez que as detonações são intrinsecamente instáveis para quase todas as misturas explosivas e possuem uma estrutura tridimensional transiente. Embora as detonações reais tenham uma estrutura celular tridimensional e transiente com flutuações de velocidade e pressão, o escoamento médio na direção de propagação ainda pode ser considerado unidimensional e permanente, uma vez que a velocidade de propagação média se mantém

sensivelmente próxima da velocidade CJ unidimensional ideal, até mesmo perto dos limites de detonação. As flutuações tridimensionais turbulentas podem então ser modeladas por termos de fonte (*source*) nas equações de quantidade de movimento e de energia, através da modelagem de turbulência [5].

A reação química no modelo ZND é descrita pela lei da taxa de Arrhenius de passo único, cujo parâmetro mais relevante é a energia de ativação, uma medida da sensibilidade à temperatura da reação química que controla a estrutura ZND e, portanto, a estabilidade da detonação. Energias de ativação elevadas causam instabilidade na estrutura ZND, contudo, a consideração do escoamento permanente unidimensional no modelo ZND não permite a manifestação de instabilidades. Contudo, tal exclui qualquer solução multidimensional transiente que descreva a instabilidade da onda de detonação real. Uma teoria quantitativa sobre a estabilidade da detonação será uma investigação futura essencial para a melhor compreensão deste fenômeno instável.

Capítulo 3

Revisão Bibliográfica

3.1 Detonação em Sistemas de Propulsão

Após o estudo teórico e matemático sobre a termodinâmica subjacente às ondas de combustão no capítulo anterior, com enfoque na onda de detonação, a análise realizada para a detonação é agora aplicada aos sistemas propulsivos que se baseiam neste modo de combustão.

A estrutura plana de escoamento unidimensional permanente de uma detonação descrita na teoria CJ e no modelo ZND, raramente é realizada experimentalmente, uma vez que as detonações são intrinsecamente instáveis para quase todas as misturas explosivas e possuem uma estrutura tridimensional transiente, embora o escoamento médio na direção de propagação das detonações reais possa ser considerado unidimensional e permanente, uma vez que a velocidade de propagação média se mantém sensivelmente próxima da velocidade CJ, até mesmo perto dos limites de detonação. Todavia, a propagação da onda de detonação em sistemas propulsivos reais revela características que não foram demonstradas nos modelos teóricos, pelo que a sua análise e compreensão é fundamental para tornar possível a aplicação prática do fenómeno da detonação.

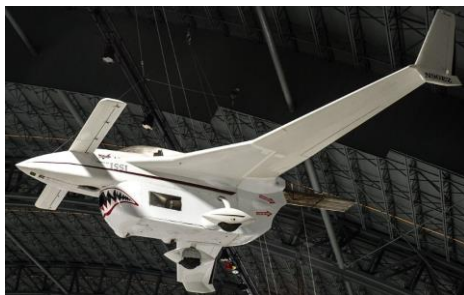
O motor é um conversor de energia, converte energia química em energia mecânica. A energia de um motor vem do processo de combustão de um hidrocarboneto, com o fornecimento de ar para a oxidação [12].

Os motores aeroespaciais são divididos em duas categorias: motores foguete, motores de propulsão *non-airbreathing* [12] e motores de propulsão *airbreathing*. Os sistemas de propulsão podem ainda ser classificados conforme seja utilizado o modo de combustão por deflagração ou por detonação [13]. Os motores convencionais de aviação e aeroespacial são caracterizados pelo processo de combustão por deflagração, como as turbinas de gás, entre outros [16]. Os motores que utilizam a combustão de forma intermitente por deflagração (jatos de pulso) ou por detonação (motores de detonação de pulso) são relativamente simples [13]. O fenómeno de deflagração é mais facilmente controlável que a detonação, uma vez que a detonação é um fenómeno muito mais energético do que a deflagração, pelo que, durante muitos anos, foi a solução para o modo de combustão dos motores [10]. No entanto, ao longo dos anos, tornou-se cada vez mais difícil alcançar eficiências mais elevadas nestes motores e o interesse na aplicação do fenómeno de detonação em sistemas propulsivos foi crescendo, tendo em vista o alcance de uma maior eficiência termodinâmica [16].

Maioritariamente são estudados dois tipos de motores baseados no fenômeno de detonação: o motor de detonação por pulso (PDE – *Pulse Detonation Engine*) e o motor de detonação de rotação contínua (CRDE – *Continuous Rotating Detonation Engine*), ou, simplesmente, RDE [10]. O motor PDE parece integrar-se melhor no modo de propulsão *airbreathing*, enquanto a aplicação da onda de detonação rotativa parece mais adequada para o motor de foguete [15], mas ambos os motores podem ser operados para várias condições e números de Mach. Outro conceito existente é o motor de onda de detonação oblíqua (ODWE – *Oblique Detonation Wave Engine*), adequado para motores hipersônicos de respiração aérea e requer que a velocidade de voo do motor seja maior do que a velocidade de detonação da mistura de reação [15].

3.1.1 Motor de Detonação por Pulso (PDE)

Em janeiro de 2008, sucedeu-se o primeiro voo tripulado de uma aeronave movida por um PDE, o modelo Rutan Long-EZ “Borealis” modificado, representado na Figura 3.1 (a) e 3.1 (b). O voo foi o resultado de um esforço cooperativo de cinco anos entre o laboratório de pesquisa da força aérea (AFRL – *Air Force Research Laboratory*) e soluções científicas inovadoras incorporadas (ISSI – *Innovative Scientific Solutions Incorporated*). O projeto usou o popular Long-EZ construído em casa, projetado por Burt Rutan como plataforma. Esta aeronave foi entregue ao museu em 2008 [21].



(a)



(b)

Figura 3.1 – (a) Long-EZ “Borealis” na Galeria de Pesquisa e Desenvolvimento do Museu Nacional da Força Aérea dos EUA em 28 de dezembro de 2015. (foto da Força Aérea dos EUA); (b) DAYTON, Ohio - Motor Long EZ em exibição na Galeria de Pesquisa e Desenvolvimento do Museu Nacional da Força Aérea dos EUA. (foto da Força Aérea dos EUA) [21].

O PDE é tipicamente configurado com múltiplos tubos alimentados por um conjunto de válvulas rotativas, que requerem uma fonte de energia e suporte mecânico. Os tubos são preenchidos com uma mistura reativa que é posteriormente inflamada por faísca elétrica. A sequência de disparo (*firing*) do PDE requer uma válvula e uma sequência de ignição [1]. A configuração tradicional do PDE ilustra-se na Figura 3.2.

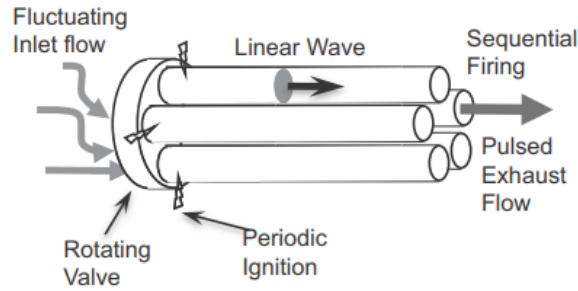


Figura 3.2: Configuração do PDE [1].

A velocidade da deflagração dos reagentes aumenta acentuadamente ocorrendo o fenômeno de DDT, surgindo uma onda de choque. Os produtos da detonação (gases a alta pressão) são acelerados a partir da extremidade da câmara, gerando tração através do processo de exaustão (*blowdown*) que ocorre devido à diferença de pressão [10, 12]. Desta forma, é iniciado um novo ciclo após a câmara ser esvaziada, sucedendo-se a entrada de reagentes frescos e a mistura é novamente detonada [10].

Assim, a frequência máxima de operação é limitada a cerca de 100 Hz, ou seja, a câmara deve ser recarregada e a detonação deve ser iniciada 100 vezes por segundo [10, 22]. A frequência máxima é baixa quando dimensionada para níveis de tração elevados, uma vez que os ciclos de tração descontínuos podem não ser suficientemente rápidos para aproximar a continuidade necessária aos fins propulsivos [10, 22]. A frequência operacional depende da geometria da câmara, da mistura reativa, das perdas térmicas e de fricção e do caudal mássico [10, 15, 20]. Em certos projetos, é ainda necessário recorrer à remoção forçada, com um gás inerte, de produtos de combustão residuais existentes na câmara que permanecem estagnados na câmara de detonação e diminuem a velocidade da frente de chama [10, 12], interferindo no ciclo seguinte de detonação. No entanto, este procedimento restringe ainda mais a frequência de operação para aproximadamente 50 Hz [23], reduzindo a eficiência. Portanto, um PDE requer um mecanismo de recarga eficiente, apesar de ser bastante simples mecanicamente [22].

Misturas distintas requerem geometrias de tubo diferentes para induzir DDT. A fim de superar esta limitação geométrica e proporcionar um dispositivo mais compacto, podem ser colocados obstáculos na câmara para acelerar o processo de DDT [10, 11]. A obtenção de detonações em sistemas de propulsão PDE pode ser conseguida através de várias maneiras conceituais. A espiral de Shchelkin colocada dentro do tubo de detonação é uma das formas de potenciar a transição da deflagração para a detonação, representada na Figura 3.3. Este método promove a turbulência da chama, que desempenha um papel fundamental no processo de aceleração das ondas de combustão. O campo de escoamento rotativo de mistura gasosa é estabelecido dentro do tubo de detonação devido à elevada velocidade [24].



Figura 3.3: Imagem experimental da espiral de Shchelkin [24].

Contudo, estes obstáculos reduzem o impulso específico (I_{sp}), definido pela tração produzida por um determinado dispositivo por unidade de caudal mássico de combustível [2, 10]. Portanto, a melhor solução consiste em sustentar a reação de detonação, ao invés de transições repetidas de DDT que provocam a perda de eficiência [10].

3.1.2 Motor de Detonação Rotativa (RDE)

Assim, com o intuito de melhorar o desempenho dos motores que utilizam ondas de detonação, surgiu o conceito do RDE, analisado pela primeira vez na década de 1950 no Instituto Lavrentyev de Hidrodinâmica na Sibéria [1] e na Universidade de Michigan. O RDE requer apenas uma sequência de ignição para iniciar a onda de detonação, normalmente através de um pequeno PDE, que é aceso por uma faísca [1]. Investigadores apoiam o uso de velas de ignição (*spark plugs*) para a iniciação da câmara de combustão de detonação rotativa (RDC – *Rotating Detonation Combustors*), em oposição a pré-detonadores, por ser altamente confiável, durável e facilmente substituível [11].

O RDE não tem componentes móveis [1] e é constituído por uma câmara de combustão anelar, a configuração aerodinâmica ideal, resultando num conjunto muito mais compacto [25] de design simples e apresenta maior durabilidade que permite uma melhor mistura de ar/combustível [12]. A câmara de combustão é fechada na extremidade onde ocorre a injeção da mistura reativa e aberta na outra extremidade. A configuração simplificada do RDE é representada na Figura 3.4.

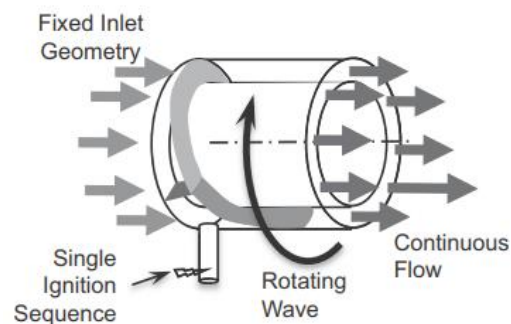


Figura 3.4: Configuração do RDE [1].

3.2 Configuração da Câmara de Combustão do RDE

Os projetos de RDEs existentes, de modo geral, têm dimensões inferiores às requeridas para produzir a tração necessária. Portanto, com o intuito de se construírem RDEs de maiores dimensões, é necessária uma pesquisa aprofundada sobre a geometria da câmara de combustão [10]. A maioria dos RDEs experimentais são geometricamente semelhantes em design, constituídos por cilindros coaxiais que formam uma câmara anelar [10, 26], com injeção axial ou radial da mistura explosiva [25]. Portanto, a solução comum para manter uma detonação estável é usar o RDE convencional. Todavia, existem outras configurações como o RDC oco e em forma de disco.

3.2.1 RDC Oco

Os parâmetros que ditam a física do RDC anelar também se verificam para RDCs ocos, representados na Figura 3.5. No entanto, aqui, existem parâmetros adicionais devido à remoção da parede interna [10, 27]. A analogia do RDC “desenrolado” não se adequa a RDCs ocos devido à tridimensionalidade muito pronunciada da onda, pelo que a curvatura da frente de detonação rotativa, radialmente, é inevitável. Vastas regiões de queima por deflagração e o “aprisionamento” do produto na câmara levam à perda inerente de eficiência de RDCs ocos [11]. Neste sentido, este design dificulta a estabilidade da detonação, uma vez que, naturalmente, os reagentes se movem livremente pelo espaço antes ocupado pelo corpo central, não ocorrendo uma boa mistura para sustentar uma detonação estável [27].

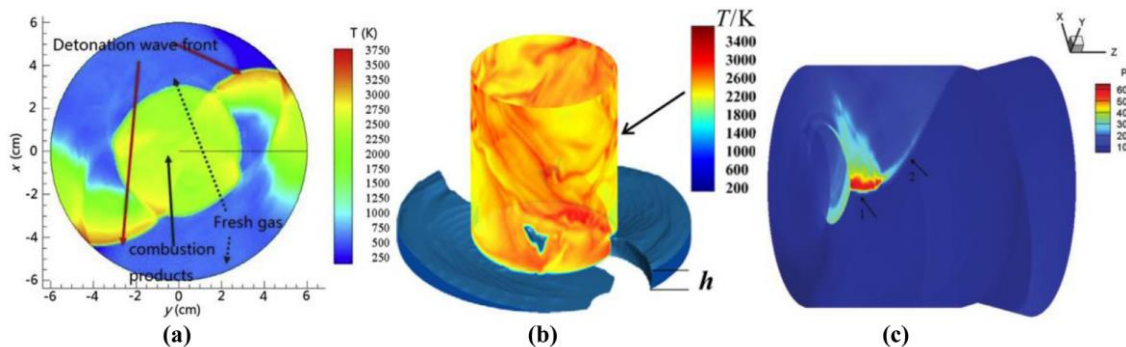


Figura 3.5: (a) Vista do RDC oco com duas ondas de detonação que se propagam no sentido contrário aos ponteiros do relógio [11]; (b) Região de preenchimento de reagentes (azul) e queima central por deflagração num RDC oco onde coexistem duas ondas [11]; (c) Forma da onda de detonação rotativa num RDC oco com um bocal de De Laval à saída [11].

3.2.2 RDC – Formato de Disco

A terceira variante principal dos designs do RDC é em forma de disco ou “câmara de combustão de plano-radial”, representado na Figura 3.6. Em contraste com os designs RDC mais tradicionais, neste caso, os reagentes são alimentados radialmente para dentro ou para fora. Esta classe de

dispositivos é proposta para superar rigorosas restrições espaciais e é lançado como uma unidade de energia auxiliar (APU – *Auxiliar Power Unit*) para aeronaves, bem como uma câmara de combustão para compressores radiais e turbinas [11].

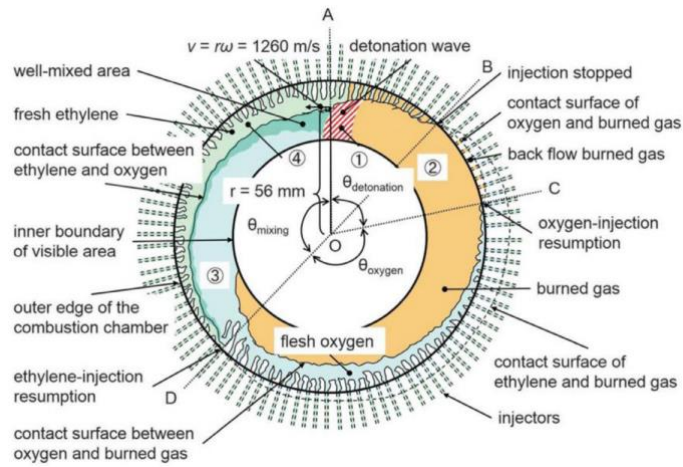


Figura 3.6: Esquema do campo de escoamento num RDC em forma de disco as características de recuperação dos injetores [11].

3.2.3 Dimensionamento do RDC

A largura das células da detonação, λ_d , depende da energia da detonação (relacionada com a mistura reativa escolhida), bem como da geometria. A largura da câmara ou canal, caracterizada por Δ , varia entre os designs. A altura mínima crítica de enchimento, A_{cr} , é a altura mínima de mistura necessária para que uma onda de detonação se propague através de uma dada mistura combustível/oxidante. O valor de A_{cr} e o diâmetro mínimo da parede externa, $d_{c_{min}}$, estão relacionados com a largura da célula por:

$$A_{cr} \propto (12 \pm 5)\lambda_d$$

$$d_{c_{min}} = 28\lambda_d \quad (3.1)$$

A largura mínima do canal, Δ_{min} , está relacionada com A_{cr} por

$$\Delta_{min} \propto 0,2A_{cr}$$

Finalmente, o comprimento axial mínimo de um RDE, L_{min} , está relacionado com a altura de preenchimento real, A_c , por

$$L_{min} = 2A_c \quad (3.2)$$

Os parâmetros geométricos do RDE referidos são representados na Figura 3.7.

Ainda não há dados teóricos para λ_d , mas existem vários modelos que podem ser usados para prever o valor sob várias condições. Misturas mais reativas, como H_2/O_2 , possuem valores menores de λ_d e, portanto, têm diâmetros mínimos de câmara na ordem de 40 a 50 mm.

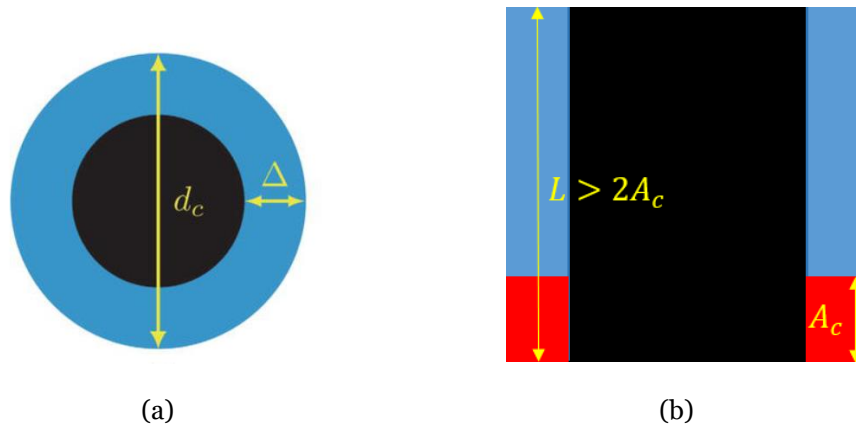


Figura 3.7: Parâmetros geométricos de um RDE. A área a vermelho é a área preenchida pela mistura dos reagentes na qual a detonação se propaga. (a) Vista de cima; (b) Vista lateral. Adaptado de [10].

Todos os parâmetros devem ser bem definidos, uma vez que determinam a estabilidade da onda de detonação, influenciando a formação de choques refletidos adicionais, ondas de expansão, efeito da expansão do gás produto - falta de exaustão completa da câmara causa estruturas de choque secundárias e terciárias significativas, entre outros. De forma geral, diâmetros maiores e larguras anelares maiores auxiliam a operação altamente estável do RDC definida por picos repetíveis de pressão e velocidades de volta de detonação. A propagação da onda de detonação estável depende de todos estes fatores [11].

3.3 Bocal Propulsivo do RDE

A eficiência termodinâmica é aumentada pela expansão dos produtos produzida pela tubeira que gera tração [25, 26]. Dois dos objetivos de uma boa configuração de um bocal são: a obtenção do maior impulso específico e a minimização da massa inerte do bocal [12].

O bocal em sino (*bell*) ou bocal de contorno é talvez o mais comum [12] que funciona de forma ideal a uma determinada pressão atmosférica externa. Com a finalidade de ser o mais eficiente possível, a pressão de exaustão à saída do bocal deve igualar a pressão atmosférica para que a velocidade de exaustão seja maximizada. Por outro lado, este tipo de bocal necessita de uma pressão de câmara consistente para maximizar a taxa de expansão. De facto, os bocais são normalmente projetados para uma determinada razão de pressão do bocal (NPR – *Nozzle Pressure Ratio*), com a suposição de uma pressão de câmara quase constante.

Todavia, a onda de detonação rotativa causa grandes variações de pressão na câmara na direção azimutal ao longo do tempo, criando um perfil de pressão não uniforme que entra no bocal [28].

O NPR do RDE deve, portanto, ser otimizado para o perfil de pressão variável da câmara, pelo que o bocal deve ser concebido para funcionar numa vasta gama de razões de pressão com uma eficiência de bocal apropriada. O bocal *plug/aerospike* tem a capacidade de se adaptar para ser otimizado a razões de pressão abaixo do seu NPR de projeto [28]. A Figura 3.8 apresenta a configuração do bocal *aerospike* desenvolvido pela NASA.

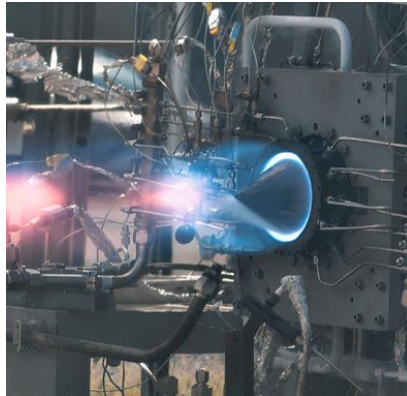


Figura 3.8: Bocal *aerospike* do RDRE desenvolvido pela NASA [29].

Os bocais de geometria variável são um possível constituinte de foguetes, contudo, o aumento de peso, complexidade e custo seriam notáveis. Os bocais *aerospike* são uma alternativa mais leve e simples e permitem que o foguete opere de forma mais eficiente porque possuem características de compensação de altitude [26]. Os bocais *aerospike* são unicamente adequados para RDEs, com um design cônico [30], que requer uma câmara de combustão anelar, característica do próprio RDE [28].

3.4 Combustão da Mistura Reativa

3.4.1 Reagentes

A velocidade de propagação da onda varia com a combinação combustível/oxidante. Uma variedade de misturas foi testada num tubo de detonação de um RDE, cujos parâmetros avaliados são indicativos do seu desempenho variável, como apresentado na Tabela 3.1. As misturas de hidrogénio/oxigénio têm sido ideais para fins de modelagem e trabalhos experimentais devido à sua simplicidade química, comportamento previsível e facilidade de detonar esta mistura [11]. De facto, a elevada velocidade de propagação e pressão da detonação tornam o hidrogénio um combustível adequado para aplicações reais. A análise da Tabela 3.1 permitiu verificar que a velocidade da onda de detonação em RDEs operacionais alimentados com uma mistura de H_2/ar é cerca de $1964 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ e que a frequência operacional é, aproximadamente, de 4000 Hz [10], produzindo uma tração quase contínua. Projetos desenvolvidos, que envolveram uma combinação de reagentes de H_2/ar , maioritariamente, ou H_2/O_2 , permitiram a obtenção de ondas de detonação estáveis que atingiram velocidades máximas de $1500 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ a $2000 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, sugerindo se existe, efetivamente, limite superior para a velocidade da onda de detonação.

Tabela 3.1: Combustíveis, velocidades de propagação da onda e pressões, entalpia de combustão ΔH_r (módulo) e impulso específico [10].

<i>Fuel mixture</i>	<i>Detonation speed (m·s⁻¹)</i>	<i>Wavefront pressure (atm)</i>	ΔH_r (MJkg ⁻¹)	I_{sp} (s)
<i>Hydrogen/oxygen</i>	2836	18,5	8,43	289,39
<i>Hydrogen/air</i>	1964	15,5	3,48	200,41
<i>Ethylene/oxygen</i>	2382	31,9	5,23	243,06
<i>Ethylene/air</i>	1821	18,2	2,85	185,82
<i>Ethane/oxygen</i>	2257	29,0	4,87	230,31
<i>Ethane/air</i>	1710	15,8	2,49	174,49
<i>Propane/oxygen</i>	2354	34,2	5,18	240,20
<i>Propane/air</i>	1797	17,5	2,80	183,37

O transporte e a manutenção das linhas de combustível são fatores decisivos na escolha do combustível que pode ser utilizado. O hidrogénio é um “combustível verde” [8] que contribui para a diminuição das emissões de CO_2 , se não for produzido a partir de combustíveis fósseis. O hidrogénio e o oxigénio são particularmente voláteis e reativos, pelo que são difíceis de transportar e armazenar em grandes quantidades, necessárias para modelos de RDE e aplicações aeroespaciais. Além disso, o H_2 é dispendioso a nível económico e energético, visto que deve ser comprimido a pressões elevadas. De facto, a utilização de combustíveis gasosos e oxidantes não atmosféricos é desafiante [10]. No entanto, o hidrogénio tem um calor de combustão elevado, o que o distingue de hidrocarbonetos líquidos. Alternativamente à mistura H_2/O_2 , o combustível de aviação (*Jet Fuel*), o querosene, o octano, entre outros hidrocarbonetos de cadeia longa podem ser uma opção mais viável, devido à sua elevada densidade de energia volumétrica como resultado do estado líquido, bem como a maior facilidade de transporte.

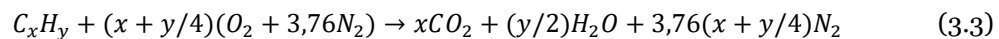
Outra possibilidade de fonte de energia de baixo carbono é a amoníaco (NH_3), que, contrariamente ao hidrogénio, tem um menor custo de energia armazenada por unidade, maior densidade em comparação com os combustíveis fósseis, facilidade de produção, maior capacidade de processamento e distribuição, e maior capacidade de comercialização [31]. Contudo, como combustível de turbina a gás, tem uma velocidade de reação química relativamente lenta, resultando numa velocidade de combustão laminar baixa e baixas taxas de calor de libertação, pelo que exige uma velocidade de entrada de reagentes mais baixa. No entanto, com a diminuição do escoamento de ar, o resultado é a menor eficiência de combustão. Uma solução proposta para este problema é a queima do NH_3 com mais um combustível reativo, como CH_4 ou H_2 [31].

3.4.2 Modelo da Reação Estequiométrica

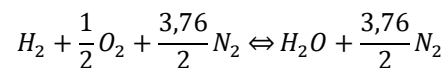
Durante a combustão, a composição química da mistura reativa varia ao longo do tempo tal como já foi mencionado, pelo que a composição exata dos produtos não é conhecida. No entanto, tal é

possível idealizando a reação, através do princípio da conservação da massa, obtendo o modelo da reação estequiométrica.

Uma mistura reativa designa-se por estequiométrica, quando a quantidade de oxidante nessa mistura é a teoricamente necessária e suficiente para que ocorra a combustão total [8] da quantidade de combustível disponível na mistura, ou seja, quando todo o carbono se transforma em CO_2 e todo o hidrogénio em H_2O , para um hidrocarboneto, não existindo a formação de óxidos de azoto [32]. A máxima libertação de energia química ocorre quando o combustível é queimado na proporção estequiométrica [12]. A combustão estequiométrica de uma mole de determinado combustível hidrocarboneto em ar pode ser expressa pela Equação (3.3).



Onde $n_{ar} = x + y/4$. Assim, considerando a reação de combustão na câmara anelar do RDE de hidrogénio/ar, tem-se que $x = 0$ e $y = 2$, pelo que a Equação (3.3) torna-se:



A razão estequiométrica ar/combustível para um hidrocarboneto é dada pela Equação (3.4) [12]:

$$(AF)_{esteq} = \left(\frac{m_{ar}}{m_{combustível}} \right)_{esteq} = \frac{(x + y/4)(M_{O_2} + 3,76M_{N_2})}{M_{combustível}} = 4,76(x + y/4) \frac{M_{ar}}{M_{combustível}} \quad (3.4)$$

Assim, tendo em conta as massas molares das moléculas de oxigénio (32,00 g/mol) e azoto (28,16 g/mol), e as massas molares dos elementos químicos de hidrogénio (1,008 g/mol) e carbono (12,011 g/mol), para a mistura reativa composta por hidrogénio e ar, a razão estequiométrica ar/combustível (Equação (3.4)) pode ser obtida.

Através do produto da massa molar de cada espécie química i dos reagentes da mistura reativa hidrogénio/ar com o número de moles dessa mesma espécie, obtêm-se as massas de cada espécie i , pelo que: $m_{H_2} = 2,016 \text{ kg}$, $m_{O_2} = 16 \text{ kg}$ e $m_{N_2} = 52,6652 \text{ kg}$. Assim, a massa total dos reagentes é 70,6812 kg. As frações mássicas dos reagentes podem ser então calculadas, pelo que $Y_{H_2} = 0,0285$, $Y_{O_2} = 0,2264$ e $Y_{N_2} = 0,7451$. A soma total das frações mássicas dos reagentes é igual à unidade.

3.4.3 Reações Elementares

Uma reação química como a representada pela Equação 3.3 é uma descrição simplista do processo de combustão e não permite explicar adequadamente o modo como se desenrola a reação a nível molecular [8], visto que apenas inclui os reagentes observados, os produtos finais e as suas quantidades molares relativas. De facto, a reação de combustão envolve um certo número de

reações elementares em que participam espécies químicas intermédias que podem ser elementos ou moléculas estáveis, ou radicais. Os radicais são espécies químicas instáveis, reativas, cujos átomos ou moléculas têm eletrões desemparelhados [8, 32]. O conjunto de reações elementares necessário para descrever uma reação global é designado por mecanismo de reação.

Frequentemente, as reações elementares são reações compostas por duas moléculas, cuja expressão química pode ser descrita pela seguinte forma geral [4] (Equação (3.5)):



Onde a, b, c, d são os respetivos coeficientes estequiométricos.

3.4.4 Cinética Química

A cinética química é a parte da química que trata das taxas de reação e dos fatores que influenciam essas taxas [8].

A velocidade da reação elementar e, portanto, a velocidade da conversão de reagentes em produtos [8], é medida pela taxa de reação de uma certa espécie química, ou taxa de consumo ($\dot{\omega}$), definida como a derivada da concentração molar de uma espécie em relação ao tempo devido à reação envolvida. Neste sentido, a taxa de reação de uma certa espécie química A pode ser expressa pela Equação (3.6):

$$\dot{\omega}_A = -\frac{d[A]}{dt} \quad (3.6)$$

Onde a notação [A] é a concentração molar. Para a Equação (3.5), a taxa de reação da espécie química A pode ser expressa pela seguinte forma empírica (Equação (3.7)):

$$\frac{d[A]}{dt} = -k [A][B] \quad (3.7)$$

Onde a constante de proporcionalidade k , referida como constante de taxa de Arrhenius depende da temperatura. O sinal negativo da equação traduz a diminuição da concentração da espécie A ao longo do tempo [8].

A partir da Equação (3.6) e (3.7), obtém-se a seguinte expressão para a taxa de reação da espécie química A dada pela Equação (3.8):

$$\dot{\omega}_A = k [A][B] \quad (3.8)$$

Regularmente, a taxa de Arrhenius (k) é representada pela equação empírica da lei de Arrhenius, Equação (3.9), pelo que [4]:

$$k = P \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3.9)$$

Onde P é o fator pré-exponencial, que expressa a frequência das moléculas dos reagentes colidindo umas com as outras.

Assim, a taxa de reação pode ser expressa pela Equação (3.10):

$$\dot{\omega}_A = P[A][B] \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3.10)$$

3.5 Estrutura da Detonação num RDE

A onda de detonação é iniciada na câmara, geralmente a partir de uma chama de alta velocidade que sofre o processo de DDT quando entra na câmara [10]. À medida que a onda se propaga da esquerda para a direita como indicado na Figura 3.9, de modo circunferencial em torno da câmara e, portanto, perpendicularmente à direção de injeção, consome os reagentes na direção azimutal, gerando uma zona de alta pressão atrás da frente de onda [10, 15, 22] comparativamente à zona dianteira da onda [23]. A zona de alta pressão causa estagnação do escoamento no plano de injeção, ou seja, a velocidade do escoamento é adiabaticamente levada a zero [20] e, portanto, os micro-bocais injetores estão bloqueados. O gás a pressão elevada (produtos da detonação) expande-se nas direções azimutal e axial numa expansão centrada de Prandtl-Meyer [10, 15, 33] e, devido às restrições geométricas, sai da câmara, gerando tração [10]. No plano de saída, é fixado um bocal no projeto de um motor propulsivo [22].

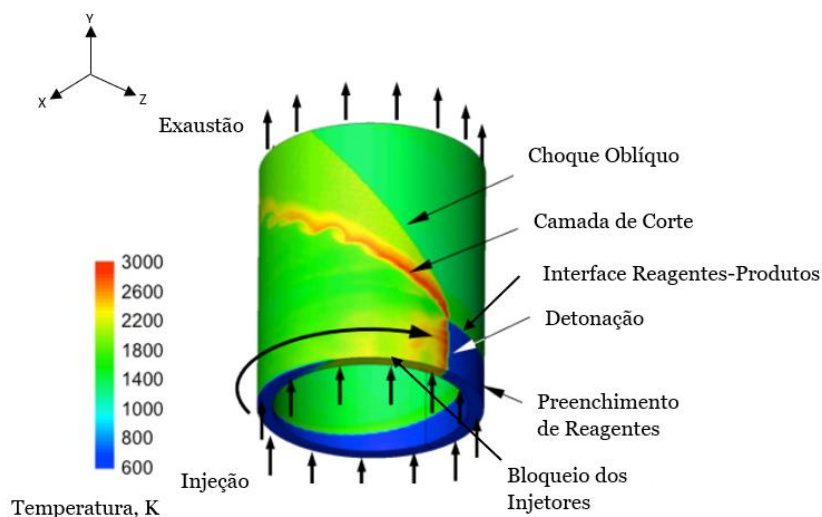


Figura 3.9: Estrutura esquemática tridimensional da propagação da onda de detonação num RDE. Adaptada de [1].

Numa expansão centrada de Prandtl-Meyer ou, ainda, “Prandtl-Meyer fan” isentrópico [20], como representado na Figura 3.10, as ondas de Mach isentrópicas, tendem a divergir numa onda

de choque dissipativa, associada a um gradiente de pressão favorável ao escoamento, ou seja, a um acréscimo de velocidade e uma correspondente diminuição de pressão, adequada a regimes supersônicos.

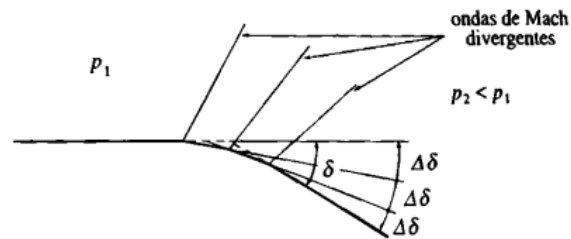


Figura 3.10: Divergência de ondas de Mach no escoamento supersônico centradas no vértice do diedro convexo [20].

O movimento do fluido no interior da câmara de combustão favorece a mistura rápida do combustível com o ar que, em pouco tempo, se torna homogênea e aumenta a velocidade da combustão e o seu rendimento [12]. O *swirl* ou escoamento azimutal, movimento rotacional macroscópico principal [12], é uma característica essencial e uma medida de como o RDE transforma o calor em energia cinética através da rotação do escoamento [1].

A entrada de mistura fresca na câmara de combustão ocorre a uma taxa constante e verifica-se que as reações químicas ocorrem numa região próxima à parede do tubo. Assim, a onda continua-se a propagar na próxima revolução, criando assim uma onda autossustentável enquanto houver renovação contínua da camada da mistura reativa e a remoção dos produtos da detonação for assegurada [1, 10, 15, 22, 23, 34]. Portanto, o RDE também é designado de motor de detonação contínua (CDE – *Continuous Detonation Engine*) ou motor de onda de detonação contínua (CDWE – *Continuous Detonation Wave Engine*), um motor que realiza o processo de combustão de forma contínua. De facto, o RDE é caracterizado por uma ou mais ondas de detonação contidas dentro da câmara [10, 15, 35].

3.5.1 Camada de Corte e Estiramento de Vórtices

À medida que a onda de detonação se propaga e se expande, a pressão diminui novamente e, eventualmente, o escoamento pelo plano de injeção reinicia-se, criando-se uma zona de preenchimento de reagentes que entram na câmara (zona de recuperação do escoamento). A interface reagentes-produtos, região de mistura entre a pré-mistura fresca e os produtos, é responsável pela ocorrência de combustão por deflagração ao longo da camada de corte [2, 10] gerada pela mistura dos produtos recentemente detonados (atrás da frente de onda) com os produtos mais antigos do ciclo anterior (região acima da interface reagente-produtos), representada na Figura 3.9.

A atuação de tensões de corte (esforços tangenciais ou de atrito) características do fluido real geram instabilidades, que diminuem a velocidade de propagação da detonação [23], comunicando a

vorticidade a elementos do fluido [20]. O aumento de pressão subsequente perturba a frente de detonação que se aproxima e força o escoamento sónico imediatamente atrás da onda a sofrer aceleração de escoamento supersónico. Efetivamente, a condição CJ é um requisito para que o choque principal de uma detonação não seja enfraquecido pela expansão supersónica dos produtos de detonação [10]. Assim, a viscosidade atua através do mecanismo de difusão molecular para transmitir a vorticidade, quando a velocidade e, portanto, a pressão de estagnação, são variáveis. A vorticidade é definida pela Equação (3.11).

$$\vec{\Omega} = \nabla \times \vec{V} \quad (3.11)$$

Onde \vec{V} é o vetor velocidade do escoamento.

Os escoamentos transversais gerados no sentido das altas pressões para as baixas pressões imprimem um movimento circulatório (vórtices), através do efeito de interação dos gradientes de pressão e densidade. Quanto maior o diferencial de pressões, maior será a intensidade dos escoamentos transversais e, conseqüentemente, dos vórtices [20]. Se a vorticidade for nula, a circulação, Γ , também o será [20]. Estes dois conceitos estão intimamente relacionados através do teorema de Stokes da análise vetorial que estabelece que a circulação de um vetor (o vetor velocidade, neste caso) ao longo de um contorno fechado é igual ao fluxo do rotacional desse vetor (o vetor vorticidade, neste caso) através de qualquer superfície que se apoie sobre o contorno [20].

Portanto, devido a este fenómeno, o motor RDE sofre uma perda de desempenho, que geralmente é inferior a 10%, embora em certas simulações a perda seja até 20% da pré-mistura queimada nesta região [22].

3.6 Modelo Bidimensional do RDE

Em 1969, Voitsekhovskii examinou a estrutura das ondas de choque em gases bem como em detonações rotativas com velocidade próxima do valor CJ [10, 35]. As análises realizadas em modelos de motores de detonação rotativa, permitiram concluir que, relativamente a um sistema de coordenadas cilíndricas [36], a dimensão radial do modelo tridimensional é pequena comparativamente à dimensão azimutal e axial, pelo que, radialmente, a variação do escoamento é desprezável. Assim, o campo de escoamento do modelo tridimensional da câmara anelar do RDE pode ser “desenrolado”, uma simplificação num modelo a duas dimensões, permitindo a análise numa malha uniforme retilínea cartesiana com condições de fronteira periódicas na direção azimutal, assumindo-se que os efeitos da parede têm um efeito desprezável no escoamento [1, 2, 22, 37].

O Laboratório de Pesquisa Naval forneceu várias simulações numéricas de um RDE, nomeadamente o trabalho de Douglas Schwer sobre a simulação de Euler de escoamento invíscido [1] de um RDE alimentado pela mistura estequiométrica com ar/hidrogénio, tendo em conta as

propriedades de gás ideal, sem retorno de escoamento. O diâmetro médio da câmara anelar é 140 mm, largura da câmara de 10 mm e um comprimento axial de 177 mm.

O modelo descrito [1] é uma idealização da operação real do RDE, mas uma representação precisa da termodinâmica subjacente à detonação rotativa e, portanto, os efeitos radiais e outros fenômenos não modelados pela simulação de Euler são considerados insignificantes.

Dean [1] mostrou que é possível trabalhar em escoamento invíscido somente se o escoamento for transiente. As restrições inerentes ao escoamento permanente dos modelos são evitadas quando se considera o escoamento transiente [38]. O regime de escoamento transiente num RDE causado pela instabilidade proveniente da propagação da onda de detonação rotativa não causa perdas significativas no modelo de Euler bidimensional [5].

3.6.1 Injeção e Mistura dos Reagentes

O processo de injeção axial de reagentes, pré-misturados ou não, através de um plano de orifícios (micro-bocais) circunferencial de geometria fixa foi bem-sucedido na maioria das simulações e modelos reais [1, 2, 10, 15, 22, 23, 37, 39, 40, 41], cuja representação esquemática ilustra-se na Figura 3.11. No entanto, para uma operação ideal, cada mistura de reagentes requer um orifício de geometria ligeiramente diferente, pelo que alguns dispositivos têm uma placa injetora ajustável [10]. O aumento da área de injeção de combustível, através do aumento do número de orifícios, resulta num ganho de pressão mais eficiente, produzindo-se uma onda de expansão maior dos reagentes de combustão anteriores, gerando maior tração, sem comprometer as características do campo de escoamento [10]. A configuração dos bocais injetores mais detalhada está presente em [25].

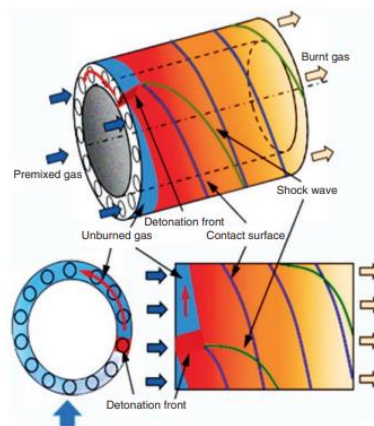


Figura 3.11: Esquema da câmara de combustão de RDEs [30].

A velocidade da onda de detonação rotativa varia consideravelmente com as taxas de escoamento de injeção e também com o grau de mistura dentro da câmara de combustão [11]. De facto, a iniciação e a sustentação, das detonações num RDC são quase garantidas se a reatividade e a

qualidade da mistura forem suscetíveis ao processo de DDT [11, 23]. A mistura imperfeita da injeção direta, abaixo de um valor crítico, causa degradação no desempenho e não suportará a detonação, criando uma camada de reagentes não queimados entre a detonação e o plano de injeção, causando instabilidade e extinção da detonação [23, 25].

Baixas velocidades na zona de preenchimento resultam numa detonação eficiente [1]. Contudo, velocidades de injeção mais baixas e o bloqueio dos injetores aumentam o risco de retorno de escoamento no plano de injeção, causando uma falha catastrófica do sistema [10, 11, 22, 23]. De modo a minimizar este problema, os reagentes não devem ser pré-misturados, ou seja, a injeção dos reagentes deve ser feita separadamente e a sua mistura deve ocorrer na câmara [10]. Neste caso, verifica-se que a natureza contínua do motor não é alterada, bem como se observa uma taxa de escoamento elevada com pressurização [23]. Contudo, a taxa de escoamento elevada do RDE não assegura totalmente uma boa mistura, sendo que esta deve ocorrer de forma rápida e numa distância curta.

3.6.2 Modelo de Injeção

Contudo, investigações numéricas sobre o comportamento de RDCs e a sua dependência na injeção geralmente utilizam esquemas pré-misturados devido à simplicidade na configuração das condições de fronteira [11], nomeadamente, Voitsekhovskii, que testou com sucesso um RDE radial com reagentes pré-misturados, e a simulação bidimensional descrita [1].

O modelo de injeção usado na simulação numérica [1] apresentada não modela individualmente os injetores. A condição de fronteira de injeção é considerada ideal e as condições de injeção (p_i , T_i , ρ_i) são calculadas assumindo expansão isentrópica através dos micro-bocais de área fixa de 0,2, que produzem um escoamento uniforme de injeção [1, 27]. A mistura de reagentes encontra-se a uma pressão e temperatura de estagnação constantes ($p_t=10$ atm, $T_t = 300$ K). A injeção do caudal mássico em cada célula é afetada pelas condições p_t , T_t e pressão local da câmara de combustão, p , pelo que está sujeito a três condições [1, 22]:

- Para $p > p_t$, não há escoamento e a condição de fronteira é tratada como uma parede;
- Para $p_t > p > p_{cr}$, o escoamento não está estrangulado, assim $p_i = p$ e verificam-se as Equações (3.12) e (3.13) para os reagentes:

$$T_i = T_t \left(\frac{p}{p_t} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \quad (3.12)$$

$$V_i = \sqrt{2 \frac{\gamma}{(\gamma-1)} RT_t \left[1 - \frac{p}{p_t} \right]^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}} \quad (3.13)$$

- Para $p \leq p_{cr}$, o escoamento está estrangulado, assim, $p_i = p_{cr}$. A pressão crítica é definida em termos da pressão de estagnação, dada pela Equação (3.14):

$$p_{cr} = p_t \frac{2}{\gamma + 1} \left(\frac{\gamma}{\gamma - 1} \right) \quad (3.14)$$

Este modelo simplificado tem a vantagem de baixos custos computacionais, ausência de parâmetros específicos de projeto de injetores e ausência de problemas de mistura de dois escoamentos e evita as complicações da modelagem da detonação com turbulência, obtendo-se resultados de desempenho satisfatórios.

3.6.3 Diagrama Bidimensional

Assim, o diagrama seguinte da estrutura da onda de choque rotativa ilustrado na Figura 3.12 foi obtido do trabalho referenciado [1], no qual são identificadas várias características a partir do modelo computacional bidimensional apresentado de um RDE [1, 22].

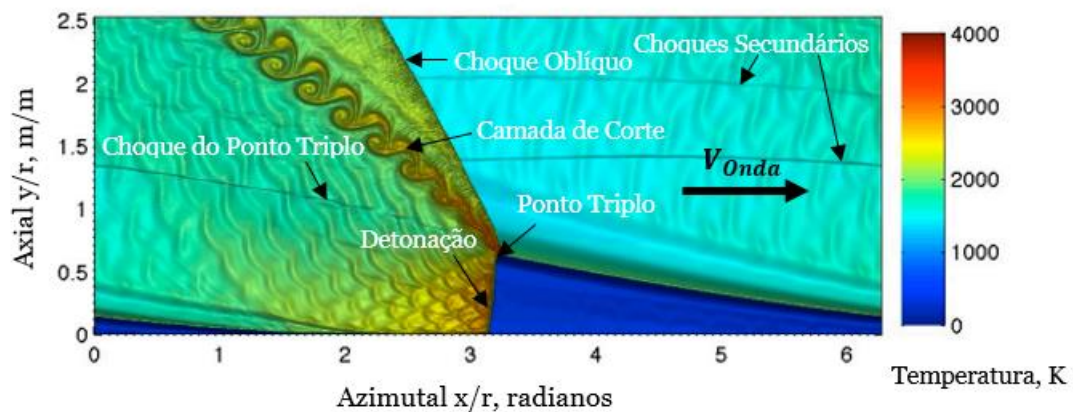


Figura 3.12: Contorno de temperatura da estrutura celular de uma onda de detonação num RDE “desenrolado” em duas dimensões com alimentação pré-misturada, de um estudo de modelagem computacional [22]. A onda de detonação propaga-se continuamente da esquerda para a direita, tal como indicado pela seta. Imagem adaptada de [1].

A zona de recuperação é a condição de fronteira de expansão inferior da detonação [1], enquanto a camada de corte é a condição de fronteira de expansão superior do escoamento de detonação que afasta os produtos da onda de combustão [1].

3.7 Modelo de Choque Triplo

A intensa zona de reação característica do fenômeno da detonação, está associada a uma “quebra” (um vinco ou dobra) da frente de choque principal. A camada de corte e estiramento de vórtices fazem parte do mecanismo que gera o choque oblíquo que se propaga a partir do topo da onda de detonação. O choque oblíquo atua como um compressor secundário de uma fração substancial do

escoamento. O escoamento que passa através do choque oblíquo gera a maior parte da tração útil [1]. Contudo, a ocorrência de reações na região do choque oblíquo provoca o aumento da entropia, através da liberação de calor, introduzindo perdas no sistema, agravadas pelo maior comprimento da câmara que leva ao maior escoamento através do choque. Contudo, tal é compensado pela natureza mais fraca de um choque oblíquo que gera níveis mais baixos de entropia e menor pressão, em comparação com o choque normal na frente de detonação [2]. O aumento da entropia mais relevante é através da detonação num RDE [1].

A onda de choque oblíqua e a onda de detonação cruzam-se num ângulo nos lados adjacentes da dobra, pelo que a sua interação cria um terceiro choque (transversal), de forma a satisfazer as condições por trás da interseção das ondas de choque.

Assim, Shchelkin propôs um modelo de choque triplo para a frente de detonação giratória. O ponto triplo é o resultado da interação do choque oblíquo com a frente de detonação e o choque secundário [1, 42].

3.7.1 Ondas Transversais

De facto, a onda de detonação rotativa não é um fenómeno plano, mas consiste numa estrutura celular moldada por ondas transversais, ondas de choque secundárias, que se propagam perpendicularmente e em sentido contrário à frente de detonação [1], para a região de gás pré-comprimido pela frente de onda. As ondas transversais são oscilações em torno de uma média definida pela termodinâmica de estado permanente, que variam consideravelmente, dependendo da pressão de estagnação de entrada e da pressão de retorno [22]. O processo fundamental da detonação rotativa é compreendido quando se “filtram” estas oscilações [1].

O estudo das ondas transversais em casos tridimensionais de ondas de detonação permitiu supor que a queima é causada principalmente pelas ondas transversais. Longe dos limites de detonação, o número de ondas transversais aumenta e o seu movimento é bastante caótico. A interação do choque primário com numerosas perturbações transversais produz uma onda de detonação com múltiplas frentes de onda, representada pela Figura 3.13. Em condições de escoamento permanente, é possível obter-se uma detonação rotativa com apenas uma frente de onda (*single-headed*) para determinadas condições iniciais próximas aos limites de detonação [16, 42].

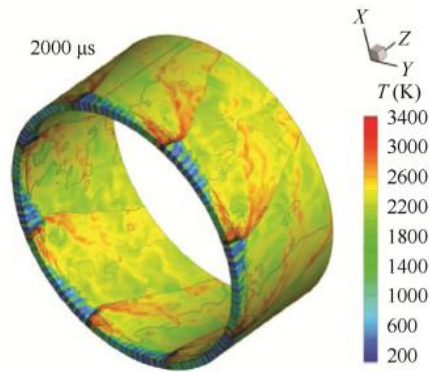


Figura 3.13: Fenómeno espontâneo da formação de ondas de detonação rotativas com múltiplas frentes de onda na câmara de combustão do RDE, alimentado pela mistura estequiométrica de ar/hidrogénio pré-misturado [16].

3.8 Estrutura da Célula de Detonação

A estrutura de detonação é composta por pequenas células em forma de diamante que compõem a frente. A estrutura da célula de detonação pode ser observada tanto na Figura 3.14 (a) como na Figura 3.14 (b), cada célula delineada com zonas de alta pressão que contêm pontos triplos [10]. A pressão concentrada nestes pontos coincide com a máxima libertação de energia e o pico de pressão subsequente da colisão de dois pontos triplos gera novas células de detonação. Deste modo, a formação de novas células de detonação permite a propagação das ondas de detonação. Além disso, a largura da célula de detonação, λ_d , é definida pela geometria do sistema e pela composição química do combustível, sendo provável que a velocidade e a direção do ponto triplo estejam diretamente relacionadas com esses fatores. Contudo, os efeitos dos pontos triplos nas características da onda ainda requerem uma investigação mais aprofundada e completa [10].

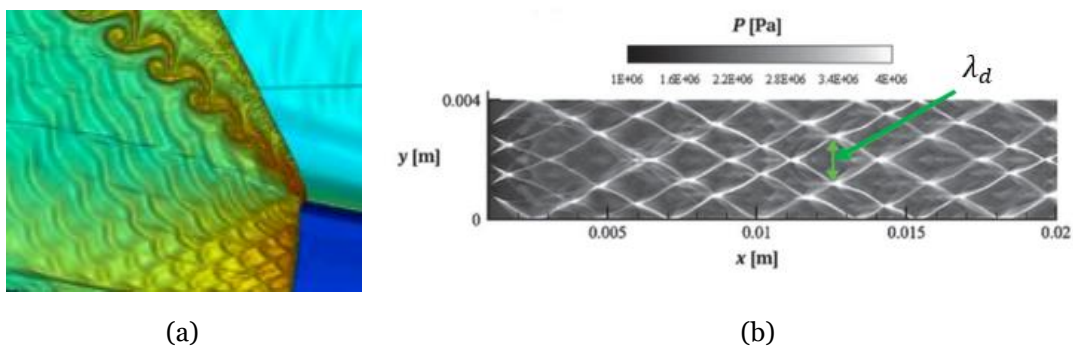


Figura 3.14: Parâmetro geométrico de um RDE: largura da célula de detonação adaptada de [1, 10]; (a) Imagem aproximada da região da frente de detonação composta por pequenas células; (b) Representação da largura da célula de detonação.

3.9 Ignição pela Estrutura Celular Instável

O choque triplo na intensa zona de reação e as interações do choque primário com numerosas

perturbações transversais (ondas de choque secundárias) são regiões a temperaturas muito elevadas. Estas regiões parecem facilitar a ignição que se transmite às regiões de temperaturas mais baixas. De facto, a estrutura celular da detonação é delineada com zonas de alta pressão e máxima libertação de energia, que contêm pontos triplos que colidem e geram novas células de detonação, permitindo a sua propagação.

Efetivamente, a iniciação da detonação é evidenciada pelo desenvolvimento espontâneo da estrutura celular que é destruída com o amortecimento das ondas transversais que impossibilita a autossustentação da detonação. Desta forma, conclui-se que a estrutura celular fornece os mecanismos para a ignição e combustão rápida na zona de reação da onda de detonação.

Por outro lado, os esforços de atrito que se verificam nas interações de choques transmitem a vorticidade que pode gerar misturas turbulentas muito fortes na zona de reação com o transporte de radicais livres de misturas reativas, bem como de produtos para os reagentes. Desta forma, iniciam-se reações químicas sem a necessidade de dissociação térmica de moléculas por aquecimento adiabático causado pela frente de choque (como no modelo de estrutura ZND) [5]. No modelo ZND unidimensional, o mecanismo de ignição tem em consideração que a força do choque é baseada num valor médio através da frente de choque e não se consideram interseções de choques, presentes na propagação tridimensional da detonação.

Portanto, a instabilidade inerente a quase todas as detonações autossustentadas implica que a existência de instabilidades seja essencial para a propagação autossustentada de uma detonação. Assim, futuramente, é relevante o desenvolvimento de modelos de turbulência que incorporem interações de choque, para a descrição da zona de reação de detonações reais, em vez da visão tradicional do modelo laminar ZND.

3.10 Ciclo Termodinâmico

A maioria das turbinas a gás que operam com deflagração seguem o ciclo de Brayton (B), um processo isobárico (a pressão constante) [25, 26]. Por outro lado, uma detonação é praticamente isocórica (processo a volume constante) de compressão elevada [1], e pode ser modelada com o ciclo de Humphrey (\mathcal{H}), ou, preferencialmente, com o ciclo de Fickett-Jacobs (FJ), nos quais a combustão ocorre num volume fixo, resultando num pico de pressão à medida que os produtos se expandem.

Os ciclos \mathcal{H} e FJ distinguem-se, principalmente, nas mudanças de estado de 2–3' para o ciclo \mathcal{H} , no qual o pico de pressão ocorre a volume constante, que difere de 2–3'' no ciclo FJ , no qual o volume diminui, como representado na Figura 3.15. A próxima fase (3'' – 4'' para o ciclo FJ e 3' – 4' para o ciclo \mathcal{H}) é semelhante para os dois ciclos, contudo, no ciclo FJ , o processo de expansão é maior antes de atingir a pressão atmosférica. Assim, como visto na Figura 3.15, o ciclo FJ é mais

eficiente volumetricamente que o ciclo B , e envolve um ganho de pressão maior que o \mathcal{H} , indicando que, para a mesma compressão isocórica inicial, o ciclo FJ é o mais eficiente.

A combinação de choque e libertação de calor de uma detonação ideal e aumento rápido de pressão através da frente, gera menos entropia do que a combustão convencional, o que implica uma maior eficiência térmica [26]. A eficiência térmica é alcançada porque o calor é adicionado através da combustão a altas pressões e temperaturas de uma detonação [1]. Portanto, a simplicidade do RDE oferece a possibilidade de um motor de detonação prático [10] que, teoricamente, tem eficiências térmicas superiores até 20% relativamente ao desempenho dos ciclos convencionais baseados em deflagração [1].

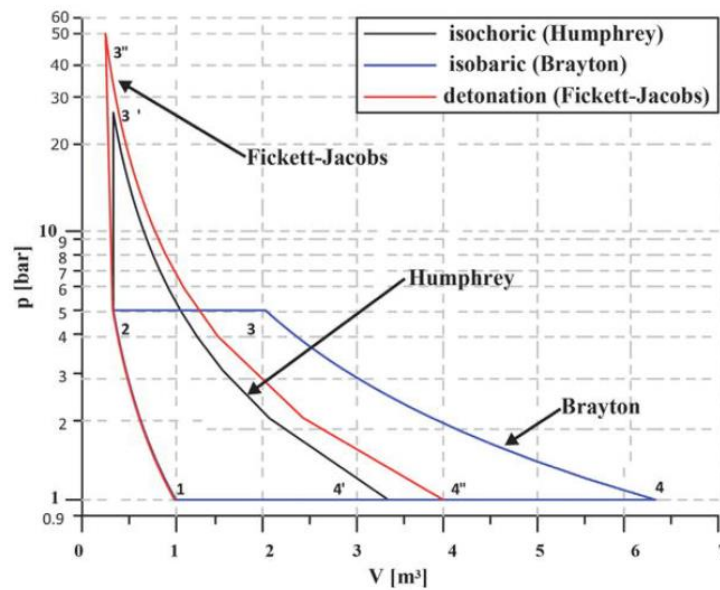


Figura 3.15: Ciclos termodinâmicos: Humphrey, Brayton e Fickett-Jacobs. Adaptado [10].

As eficiências térmicas de vários combustíveis, tendo em conta os diferentes ciclos termodinâmicos, são apresentadas na Tabela 3.2. Um motor de turbina a gás alimentado a hidrogénio, por exemplo, tem uma eficiência termodinâmica de 36,9%, enquanto um motor de detonação tem uma eficiência termodinâmica de 59,3% [10], que significa que este tipo de motor é capaz de extrair mais energia da mesma quantidade de combustível.

Tabela 3.2: Eficiências termodinâmicas calculadas para vários combustíveis para diferentes ciclos termodinâmicos [10].

<i>Fuel</i>	Brayton (%)	Humphrey (%)	Fickett-Jacobs (%)
<i>Hydrogen</i> (H_2)	36,9	54,3	59,3
<i>Methane</i> (CH_4)	31,4	50,5	53,2
<i>Acetylene</i> (C_2H_2)	36,9	54,1	61,4

Os ganhos significativos de eficiência em relação à tecnologia tradicional de câmaras de combustão de turbinas a gás são possíveis através da adoção deste novo conceito de câmara de combustão com ganho de pressão (PGC – *Pressure Gain Combustion*), como o RDE [30, 43], que proporciona reduções no consumo específico de combustível [2] e soluciona as dificuldades relativas a PDEs.

3.11 Desafios Técnicos do RDE

De modo geral, as ondas de detonação propagam-se à velocidade CJ para cada tipo de mistura reativa (entre 1500 ms^{-1} a 2500 ms^{-1}), pelo que a frequência operacional efetiva dos RDEs atuais é elevada e encontra-se entre 1 a 10 kHz, aproximadamente, resultando numa tração praticamente contínua [10, 22]. De facto, um CDWE é, de certa forma, semelhante a um motor PDE funcionando a uma frequência muito elevada e, portanto, com maior pressão média dentro da câmara. Todavia, a velocidade de detonação observada no laboratório de referência é geralmente inferior à velocidade de detonação CJ [15] devido ao facto do intervalo de tempo entre duas ondas de detonação ser muito pequeno, pelo que a mistura é inferior à ideal alterando as características da detonação; os gases não queimados podem se misturar parcialmente com os produtos da detonação e não reagir; devido à expansão dos produtos atrás de uma onda de detonação e à velocidade do escoamento, a mistura não queimada ganha alguma velocidade no sentido oposto à propagação da detonação. De facto, o escoamento dentro da câmara é bastante heterogéneo [15].

O RDE apresenta bastantes desafios técnicos como o requisito, por exemplo, da onda de detonação dever ser iniciada num único sentido [22, 35]. Por outro lado, as condições dentro da câmara de combustão de um RDE são menos compreendidas do que num PDE, o que dificulta o seu projeto de modo a suportar as forças e os escoamentos de calor típicos de um RDE [22]. Além disso, os micro-bocais são submetidos a pressões e temperaturas elevadas, limitando sua vida útil [22]. Efetivamente, otimizar o sistema, garantindo não só uma iniciação da detonação confiável e a estabilidade das ondas, mas também que o RDE não sobreaqueça são alguns dos desafios enfrentados no desenvolvimento dos motores antes da sua aplicação em sistemas propulsivos reais [10].

3.12 O RDRE Revolucionário

Contrariamente ao que se sucede num motor de turbina de gás, que usa o ar da atmosfera como fluido de trabalho, os motores de foguete usam os gases de exaustão da combustão. Os motores de foguete dividem-se em duas categorias principais: foguetes líquidos e foguetes sólidos. A maior diferença entre ambos reside no facto de num foguete líquido, o combustível e o oxidante serem armazenados separadamente, enquanto num foguete sólido, os reagentes serem misturados e armazenados num cilindro [44].

Atualmente, o motor de detonação rotativa tem sido alvo de investigações que tencionam aplicar este conceito para melhorar significativamente o impulso específico e aperfeiçoar o desempenho das tecnologias de motores de foguetes líquidos, maioritariamente. Este conceito inovador, se bem-sucedido, será capaz de proporcionar o aumento da capacidade de carga útil para veículos espaciais, um componente essencial para tornar a exploração espacial mais sustentável [25, 26, 28, 45]. O RDRE é um conceito revolucionário que difere de um motor de foguete tradicional por gerar tração através de combustão supersónica. Este projeto produz mais tração usando a mesma quantidade de combustível do que os sistemas de propulsão atuais [26].

A instabilidade e o regime transiente num RDE são fatores significantes [1] e, apesar de Zelodovich ter afirmado que, dada a dificuldade de realizar e utilizar a detonação com perdas mínimas, as tentativas de aplicação prática da combustão por detonação, para produção de energia, serem desaconselháveis, engenheiros e cientistas nunca desistem da ideia de conseguirem controlar um fenómeno incontrolável, neste caso, a detonação.

Assim, em julho de 2021, sucedeu-se a primeira demonstração de voo espacial bem-sucedida no mundo de um motor de detonação rotativa integrado usando o foguete de sondagem S-520-31, a partir do Centro Espacial Uchinoura da Agência Japonesa de Exploração Aeroespacial (JAXA – *Japan Aerospace eXploration Agency*) [46, 47]. O voo foi breve (aproximadamente oito minutos), característico deste tipo de veículos, destinados à realização de experiências científicas e investigação espacial. No voo do S-520-31, assim que terminou a combustão do foguete, iniciou-se a combustão pelo sistema de RDE. Futuramente, existe uma grande possibilidade de os motores de detonação serem utilizados para a primeira e segunda fase de combustão, dada a sua estrutura simples e leve. O RDE atingiu 500 N de tração nesta missão, um valor pequeno em comparação com motores de foguete de classe média, onde cada fase da combustão produz tração na ordem dos milhões de newtons. Este problema pode ser resolvido de forma relativamente fácil usando um conjunto de RDEs.

Desde o programa Apollo que as investigações da NASA se direcionaram para a melhoria do desempenho do sistema de motor de foguete líquido com conceitos avançados de propulsão, de fabricação aditiva (AM – *Additive Manufacturing*, construção de objetos 3D através da adição de camada sobre camada de material) e novos materiais, permitindo que o motor opere sob condições extremas por períodos mais longos sem superaquecimento [25]. Assim, os avanços mais recentes na ciência dos materiais e na dinâmica de fluidos computacional conduziram uma equipa de engenheiros da NASA em Huntsville, Alabama, a realizarem testes do RDRE em grande escala em 2022 [29, 48], representado na Figura 3.16, nos quais o motor foi acionado mais de uma dúzia de vezes, com aproximadamente 10 minutos de duração. O RDRE impresso em 3D poderá proporcionar reduções no consumo específico de combustível [2] que, para um motor foguete, cujo peso é dominado pelo combustível, representa uma grande vantagem.



Figura 3.16: Testes do RDRE em grande escala, impresso em 3D, em 2022, na NASA em Huntsville, Alabama [48].

Capítulo 4

Modelagem CFD

Os problemas de combustão podem ser resolvidos segundo uma abordagem teórica, numérica e/ou experimental. O objetivo deste Capítulo é fornecer uma descrição explicativa da modelagem numérica e metodologia CFD sobre o fenômeno de detonação tridimensional num RDE para dois casos distintos. Neste sentido, será estudado e analisado o impacto dos efeitos viscosos no desempenho do RDE e na estrutura da detonação tendo por base o modelo ZND e a teoria CJ de equilíbrio.

Uma das etapas essenciais para o projeto e melhoria de sistemas de combustão é a previsão do comportamento do escoamento do fluido, previsão de temperaturas, concentrações de espécies resultantes e emissões, análise dos processos de transferência de calor e de massa, reações químicas, e outros fenômenos relativos à combustão [3]. A simulação CFD permite realizar esta análise completa do movimento do fluido em sistemas reativos através da modelagem da combustão, independentemente da complexidade da geometria [3, 9], tendo por base um conjunto de equações implementadas em softwares CFD. Roche [1] afirma que a simulação numérica precisa não é uma análise teórica pura, uma vez que as teorias subjacentes da simulação são baseadas em princípios fundamentais conhecidos, uma simulação encontra-se mais próxima da produção de dados experimentais, possibilitando conhecer o decurso dos fenômenos, do que uma explicação proveniente da teoria [1].

O termo “dinâmica dos fluidos” refere-se ao estudo do movimento interativo de inúmeras partículas individuais, neste caso, moléculas ou átomos, assumindo que a densidade do fluido é elevada o suficiente, de modo que este pode ser aproximado como um fluido contínuo, pelo que mesmo um elemento do fluido infinitesimalmente pequeno (no sentido do cálculo diferencial) contém um número suficiente de partículas, para as quais se pode especificar a velocidade média e a energia cinética média. Desta forma, é possível definir-se quantidades em cada ponto do fluido como a velocidade, pressão, temperatura, densidade, entre outras [49].

A simulação tridimensional (3D) é considerada a abordagem mais completa para a investigação do ciclo de funcionamento de um motor, permitindo prever qualquer processo do mesmo através da variação de parâmetros da sua configuração e condição de operação [9]. Assim, a modelagem CFD é uma ferramenta bastante útil para a análise de detonações rotativas [10, 31], permitindo compreender os detalhes da estrutura da detonação e avaliar os fatores que influenciam o desempenho de motores de detonação rotativos, bem como auxilia no desenvolvimento deste método propulsivo [2, 10].

As simulações de CFD podem ser realizadas utilizando um software comercial de CFD, como a versão do ANSYS Fluent [31], que abrange todos os conteúdos de física, fornecendo acesso a muitos campos de simulação de engenharia, necessários a qualquer processo de design. Os modelos do ANSYS Fluent concentram-se em escoamentos de fluidos e reações químicas, permitindo executar simulações de primeira abordagem de sistemas de combustão.

4.1 Erros e Incertezas

A modelagem CFD de fenômenos de escoamento complexos, como a combustão, gera, ocasionalmente, erros de convergência iterativos, de discretização, incertezas de entrada (*input*) associadas a discrepâncias entre o escoamento real e a definição do problema dentro de um modelo CFD. Imprecisões na geometria do domínio, propriedades do fluido, suposições simplificadoras, incorreções na configuração das condições iniciais e de fronteira que comprometem irremediavelmente a qualidade global dos resultados e reduzem, drasticamente, os benefícios das simulações. Além disso, a falta de compreensão dos fenômenos ao nível físico fundamental de alguns modelos 3D de processos de motores, formulações matemáticas imprecisas, dependências numéricas na estrutura da malha, processos de validação ambíguos, não garantem um alto nível de confiabilidade na reprodução e previsão dos processos. Erros e incertezas são inevitáveis na modelagem CFD, pelo que se torna necessário desenvolver métodos rigorosos para quantificar o nível de confiança nos resultados através da verificação e validação [3, 9].

4.2 Simulações Numéricas

A realização de medições experimentais e visualização da complexidade do campo de escoamento na câmara anelar do RDE são desafiantes. A análise de simulações numéricas apoia a construção de modelos analíticos baseados na teoria modificada da detonação ZND [1], permitindo auxiliar a compreensão do fenômeno da combustão por detonação.

As ondas de choque, ondas transversais e o estiramento de vórtices na camada de corte característicos da estrutura da detonação rotativa são intrinsecamente dependentes do tempo [1], dada a instabilidade inerente à propagação deste tipo de onda de combustão para quase todas as misturas explosivas. Neste sentido, a abordagem experimental de RDEs pode ser complementada com simulações numéricas em regime transiente, dependente do tempo, para a análise da estrutura tridimensional da detonação rotativa.

A maioria dos estudos realizados sobre o campo de escoamento na câmara de combustão de RDEs presentes na literatura foram trabalhos experimentais ou simulações numéricas, que desvendaram a estrutura básica da onda de detonação [1, 2, 22, 27, 31, 45, 50, 51, 52, 53], nomeadamente as simulações de Euler, numa combustão pré-misturada. As simulações

bidimensionais são dominantes [1, 45, 51, 52, 53], contudo, os trabalhos recentes concentram-se em estender esta abordagem para cálculos tridimensionais.

Embora as simulações bidimensionais de Euler sejam computacionalmente eficientes, não permitem a avaliação dos efeitos tridimensionais na câmara anelar do RDE, nem o impacto de efeitos viscosos e térmicos nas suas paredes. Por outro lado, as configurações de RDEs mais realistas não envolvem a combustão pré-misturada, sendo necessária uma simulação 3D para simular com precisão a mistura de reagentes e a propagação da detonação, visto que a onda se manifestará através de um campo de escoamento tridimensional, devido à ausência de mistura perfeita (no caso da combustão não pré-misturada) [2]. A curvatura das ondas de detonação, estruturas turbulentas tridimensionais e choques transversais são características relatadas em modelagem computacional tridimensional e estudos experimentais e não podem ser capturados usando modelos periódicos planares, como o modelo bidimensional do RDE descrito no Capítulo 3, e requerem geometrias computacionais mais complexas. Essas características surgem dos efeitos do tamanho do canal, dos injetores discretos e das interações entre ondas transversais e paredes [10].

4.3 Simulações Tridimensionais da Detonação

As simulações tridimensionais da câmara de combustão do RDE apresentadas nesta dissertação referem-se a dois casos de estudo distintos desenvolvidos por Peter A. T. Cocks et al [2]: uma simulação de Euler (Caso 1) e uma simulação do modelo de turbulência (Caso 2), de modo a comparar o caso do escoamento invíscido da propagação da detonação com o caso de escoamento viscoso.

De forma a simplificar a análise extremamente complexa da estrutura da detonação no RDC, a mistura reativa de ar/hidrogénio totalmente pré-misturada em condições estequiométricas é injetada no RDE [2].

4.3.1 Descrição do Fluido de Trabalho

Assume-se que o fluido de trabalho é um gás perfeito de composição fixa, uma simplificação distante da realidade, especialmente no âmbito da própria detonação rotativa. No entanto, foi demonstrado que, com a seleção criteriosa das propriedades do gás, pode ser obtida uma concordância bem-sucedida com as abordagens experimentais [51]. Além disso, esta suposição não tem um impacto substancial no desempenho ou na física fundamental do RDE e simplifica o procedimento matemático associado ao desenvolvimento do modelo [51].

4.4 Caso de Estudo 1 – Modelo Invíscido

A primeira simulação numérica teve em consideração as simulações desenvolvidas por

investigadores do Laboratório de Pesquisa Naval (NRL – *Naval Research Laboratory*) [1] sobre o modelo invíscido de Euler para modelar a detonação do RDE, uma vez que o escoamento é transiente [1].

Portanto, o primeiro caso de estudo é uma simplificação do escoamento instável da câmara de combustão do RDE, uma idealização da operação real da câmara de combustão, com o propósito de se examinar o processo fundamental termodinâmico e estrutural da onda de detonação. Assim, negligenciando os efeitos de viscosidade [1, 2, 22], permite compreender melhor o funcionamento e desempenho de um RDE. Neste sentido, o fluido comporta-se como não-viscoso: um modelo de fluido perfeito ou ideal [20], evitando a modelagem complexa da detonação com turbulência, resultando em baixos custos computacionais [1].

4.4.1 Equações Fundamentais

Os processos de combustão são governados por equações básicas de transporte para o escoamento de fluidos [3], equações de conservação fundamentais da dinâmica dos fluidos, que constituem o ponto de partida para a simulação 3D-CFD de qualquer investigação [9]. A simulação CFD é baseada na solução numérica das equações diferenciais parciais de conservação ao longo de um domínio de fluido arbitrário [9, 49].

O software ANSYS Fluent resolve as equações de conservação de massa e quantidade de movimento para qualquer escoamento e, ainda, uma equação adicional de conservação de energia no caso de escoamentos com transferência de calor ou compressibilidade, ou ainda uma equação de conservação de espécies para escoamentos que envolvem mistura de espécies ou reações [19].

As equações que governam o movimento de um fluido viscoso designam-se por equações de Navier-Stokes, que esclarecem o papel dos mecanismos de perda difusiva, e um fluido invíscido é regido pelas equações de Euler, uma das formulações simplificadas das equações de Navier-Stokes [49].

4.4.1.1 Formulação de Euler

Considerar o fluido invíscido, negligenciando completamente os efeitos viscosos, é uma aproximação válida, como, por exemplo, para escoamentos com um elevado número de Reynolds, onde a camada limite é muito fina em comparação com as dimensões do corpo e as forças inerciais tendem a dominar as forças viscosas [19, 49]. A camada limite é a região junto à parede sólida onde se manifestam efeitos quantificáveis de tensões de corte de nível molecular, induzidos pela condição de não-escorregamento na superfície, que vai continuamente aumentando de espessura ao longo do escoamento [20]. Para simulações de Euler, a espessura de choque principal, o menor fator de escala de uma detonação, não é considerada, uma vez que a viscosidade é nula [1]. Além disso, na análise de Euler, o termo de transporte difusivo de quantidade de movimento é nulo [20].

Para escoamentos invíscidos, o ANSYS Fluent resolve as equações de Euler [19]. A equação de conservação de massa é a mesma que para um escoamento laminar, mas as equações de conservação da quantidade de movimento e energia são reduzidas devido à ausência de difusão molecular [19].

As equações de conservação de Euler [19, 37] para a câmara de combustão do RDE para escoamento transiente, tridimensional e rotacional (vorticidade não nula) apresentam-se da seguinte forma:

1) Equação da Conservação da Massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (4.1)$$

A Equação (4.1) é a forma geral da equação de continuidade e é válida tanto para escoamentos incompressíveis como para escoamentos compressíveis [19].

2) Equação da Conservação da Quantidade de Movimento

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{V}) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) = -\nabla p + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (4.2)$$

Onde $\rho \vec{g}$ e \vec{F} são as forças de corpo gravitacional e externa (por exemplo, forças que surgem da interação com a fase dispersa) contendo ainda outros termos de fonte dependentes de modelo, respetivamente [19], no entanto, não serão consideradas. A pressão hidrostática, força de superfície que decorre das tensões sobre os lados da superfície de controlo [18], será a única força considerada. Assim, a Equação (4.2) torna-se a Equação (4.3):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{V}) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) = -\nabla p \quad (4.3)$$

3) Equação da Conservação da Energia

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E_t) + \nabla \cdot (\vec{V}(\rho E_t + p)) = \dot{\omega} \Delta H_r \quad (4.4)$$

O termo de taxa de reação, $\dot{\omega}$ para os reagentes, é calculado através da reação de passo único de Arrhenius. Este termo também pode ser obtido a partir de um modelo de parâmetro de indução [1, 37].

As grandezas termodinâmicas e hidrodinâmicas são transformadas em grandezas não-dimensionais antes de serem resolvidas. Todas as simulações computacionais usam a solução de ZND como condição inicial [54].

As equações de Euler representam de forma precisa fenômenos como choques e ondas de expansão, servindo de base para o desenvolvimento de métodos de discretização e condições de fronteira [49].

No modelo numérico, as equações de conservação de Euler são usadas juntamente com a equação de conservação adicional para os reagentes dada pela Equação (4.5) [1]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{V} = -\dot{\omega} \quad (4.5)$$

Para o modelo de duas espécies, a densidade do produto é obtida através da Equação (4.6):

$$\rho_{produtos} = \rho - \rho_{reagentes} \quad (4.6)$$

A pressão e a temperatura são obtidas através da equação de estado para um gás ideal. Assim, o passo seguinte consiste em resolver todo o sistema de equações governantes para as variáveis de escoamento.

4.5 Caso de Estudo 2 – Modelo Viscoso

O Caso 2 é uma análise do impacto dos efeitos viscosos do fluido no campo de escoamento na câmara anelar do RDE. De forma a compreender os escoamentos turbulentos, percorrem-se os tópicos gerais do fenômeno de turbulência e os modelos turbulentos existentes para modelar o escoamento referente ao Caso 2.

A maioria dos escoamentos que ocorrem na natureza e em aplicações em engenharia são turbulentos, como a maioria dos processos de combustão que frequentemente dependem da turbulência [55]. A fim de se compreender melhor a simulação de turbulência no escoamento reativo da câmara anelar do RDE, recorre-se a uma breve descrição explicativa dos regimes de escoamentos existentes: regime laminar ou turbulento. A sua distinção clarifica-se, de modo geral, através do número de Reynolds, um parâmetro adimensional definido pela Equação (4.7):

$$Re = \frac{\rho V C}{\mu} \quad (4.7)$$

Onde C é a escala de comprimento característica do escoamento e μ é a viscosidade dinâmica. Este parâmetro, com o significado físico de ordem de grandeza relativa entre forças de inércia e forças de atrito viscoso [20] é denominado de número de Reynolds, em homenagem a Osborne Reynolds, o precursor da investigação sobre escoamentos de fluidos viscosos.

4.5.1 Regime Laminar e Turbulento

O regime laminar é característico de escoamentos a baixos números de Reynolds pelo que os

elementos de fluido tendem sempre a deslizar uns sobre os outros, organizadamente em diferentes substratos ou lamelas [20], como se verifica no interior de uma camada limite ou de qualquer outra camada de corte delgada. A intensidade relativa dos efeitos dissipativos induzidos por tensões viscosas é suficiente para amortecer quaisquer pequenas perturbações naturalmente existentes no ambiente e impostas sobre a camada de corte e o regime mantém-se organizado, laminar [8, 20].

A transição de regime laminar a turbulento ocorre quando algumas destas pequenas perturbações têm capacidade para entrar em sintonia com o escoamento e serem por este amplificadas, conduzindo a uma degenerescência do escoamento num regime caótico e num processo altamente não-linear, turbulento [20]. A turbulência verifica-se a números de Reynolds mais elevados caracterizada pela sua irregularidade e tridimensionalidade, em que flutuações de velocidade de diferentes intensidades e comprimentos de onda, em torno de um valor médio, promovem o transporte de corpos de fluido de umas regiões do espaço para outras, do que resulta uma grande capacidade de mistura ou de uniformização [8, 20, 55]. Estes corpos de fluido em movimento desordenado são designados turbilhões (*eddies*) [20]. Os escoamentos turbulentos são descritos detalhadamente em [20, 55].

4.5.2 Turbulência – Modelos Turbulentos

A simulação de escoamentos turbulentos, contrariamente aos escoamentos laminares ou invíscidos, é mais complexa apesar da evolução no desempenho dos supercomputadores modernos. As equações que governam o movimento de um fluido viscoso designam-se por equações de Navier-Stokes, como já foi mencionado. Teoricamente, é possível resolver diretamente todas as estruturas de um campo turbulento, desde as maiores escalas dos turbilhões contendo energia até às menores escalas dos turbilhões dissipativos, usando uma abordagem conhecida como simulação numérica direta (DNS – *Direct Numerical Simulation*), na qual as equações exatas de Navier-Stokes são resolvidas numericamente sem a necessidade de usar modelos de turbulência [20, 49]. Todavia, este método não é viável para problemas práticos de engenharia por ser computacionalmente dispendioso, especialmente para escoamentos mais complexos com números de Reynolds altos, devendo-se apenas utilizar para geometrias muito simples, envolvendo números de Reynolds mais baixos [20].

A turbulência pode ser descrita como um estado de instabilidade contínua no escoamento onde, em qualquer ponto do tempo e espaço, as variáveis de campo, como a velocidade, revelam flutuação, diferindo de um valor local médio [20, 55]. A simulação destas flutuações, que podem ser de pequena escala e de alta frequência, é computacionalmente dispendiosa.

4.5.3 Equações Governantes

O escoamento turbulento pode ser representado em termos instantâneos de conservação da

massa, quantidade de movimento e de energia [8]. O procedimento adotado por Osborne Reynolds (em 1895) para, matematicamente, trabalhar com as variáveis flutuantes, [18] foi a decomposição das variáveis instantâneas em componentes médios no tempo e variáveis flutuantes [56] em torno desses valores médios nas equações instantâneas (exatas) de Navier-Stokes, obtendo-se as Equações de Médias de Reynolds de Navier-Stokes (RANS – *Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) que podem ser escritas da seguinte forma [3, 19]:

1) Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (4.8)$$

2) Equação da Quantidade de Movimento:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u'_i u'_j}) \\ - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right) \right] = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Os escoamentos turbulentos compressíveis são também descritos pela Equação do Transporte Escalar (4.10):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\Phi}_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\Phi}_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho u'_i \Phi'_k}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\Phi \frac{\partial \tilde{\Phi}_k}{\partial x_i} \right) = S_\Phi \quad (4.10)$$

Onde Φ_k é um escalar arbitrário, Γ_Φ é o coeficiente de difusão, S_Φ é um termo de fonte para cada equação k [19] e \tilde{u} é a velocidade de média de Favre [3]. A barra superior indica uma variável com média de tempo e o til indica uma variável ponderada por densidade ou média variável de Favre [3].

A resolução das equações requer um modelo de turbulência para representar a dinâmica do escoamento juntamente com um modelo de combustão turbulenta para descrever a conversão de espécies químicas e libertação de calor. Os dois métodos de simulação numérica mais utilizados são a simulação de RANS e a simulação de grandes turbilhões (LES – *Large Eddy Simulation*).

Os modelos de turbulência RANS mais comuns são classificados com base no número de equações de transporte adicionais que precisam ser resolvidas juntamente com as equações de escoamento RANS: o modelo Spalart-Allmaras de 1 equação, os modelos $k - \varepsilon$ ou $k - \omega$ de 2 equações e o modelo de tensão de Reynolds (RSM – *Reynolds Stress Model*) de 7 equações, por exemplo [3]. Os modelos RANS, oferecem a abordagem mais económica para computação de escoamentos industriais turbulentos complexos e geralmente fornecem o nível de precisão necessário. O modelo Spalart-Allmaras foi projetado especificamente para aplicações aeroespaciais envolvendo

escoamentos limitados por paredes e demonstrou fornecer bons resultados para camadas limite sujeitas a gradientes de pressão adversos [3, 19, 49]. Os modelos $k - \varepsilon$ ou $k - \omega$ simplificam o problema e introduzem o parâmetro de viscosidade turbulenta (*Eddy-Viscosity*) para calcular as tensões de Reynolds. O Modelo RSM é mais complexo, mas proporciona a estabilização da turbulência em escoamentos turbulentos e rotacionais, melhorando os resultados. No entanto, o RSM requer um aumento significativo no tempo de cálculo, devido às equações adicionais e à convergência reduzida [3, 19, 49].

4.5.3.1 Hipótese de Boussinesq

Em escoamentos laminares, a tensão do fluido é proporcional à taxa de deformação com a viscosidade sendo uma constante de proporcionalidade. Todavia, em escoamentos turbulentos, a tensão turbulenta está relacionada com a taxa média de deformação através da viscosidade turbulenta (μ_T), por meio da Hipótese de Boussinesq.

A abordagem da média de Reynolds para modelagem de turbulência exige que as tensões de Reynolds, $-\overline{\rho u'_i u'_j}$, sejam adequadamente modeladas [19], pelo que um método comum emprega a hipótese de Boussinesq para relacionar as tensões de Reynolds aos gradientes médios de velocidade [3, 19]:

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij} - \frac{2}{3} \mu_T \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (4.11)$$

A hipótese de Boussinesq é usada no modelo Spalart-Allmaras e nos modelos $k - \varepsilon$ e $k - \omega$. A vantagem desta abordagem é o custo computacional relativamente baixo associado ao cálculo da viscosidade turbulenta, μ_T . A desvantagem da hipótese de Boussinesq é o facto de assumir que a viscosidade turbulenta é uma quantidade escalar isotrópica, o que não é estritamente verdadeiro. No entanto, normalmente é adequada para escoamentos de cisalhamento dominados por apenas uma das tensões de corte turbulentas, como muitos escoamentos técnicos, tais como camadas limite de parede, camadas de mistura e jatos [19].

Em muitos casos, os modelos baseados na hipótese de Boussinesq apresentam um desempenho muito bom e a despesa computacional do modelo de tensão de Reynolds não se justifica. Contudo, o RSM é claramente superior em situações onde a anisotropia da turbulência tem um efeito dominante no escoamento médio, como escoamentos altamente turbulentos e ou secundários impulsionados por tensões [19].

O LES e o DNS são mais precisos que o RANS e possibilitam uma descrição melhorada da interação chama-turbulência. Dado que um campo turbulento é fundamentalmente determinado pelos grandes turbilhões e que os pequenos turbilhões têm uma estrutura essencialmente isotrópica e universal, uma primeira abordagem possível consiste numa simulação LES, que compreende a natureza instável de escoamentos turbulentos e, portanto, de fenómenos de

combustão transientes [20]. Os modelos RANS captam apenas a dependência temporal das quantidades médias estatísticas e não os detalhes da instabilidade. Contudo, o LES não é vantajoso em simulações industriais, uma vez que requer uma resolução excessivamente alta para camadas limites de parede, visto que as maiores escalas no espectro turbulento são geometricamente muito pequenas, sendo necessário um passo de tempo pequeno e uma malha muito fina, elevando o custo computacional. Assim, o uso do LES só é recomendado pelo ANSYS para escoamentos onde as camadas limites da parede não são relevantes, ou no caso de serem laminares. Neste sentido, os modelos RANS, apesar das suas limitações, são uma metodologia viável para modelar o fenômeno de combustão em escala real e para o desenvolvimento de tecnologias avançadas de sistemas de combustão [3, 19, 49].

Portanto, a fim de proporcionar uma melhor solução, foram desenvolvidos inúmeros modelos híbridos que combinam certos elementos do RANS e LES e permitem a simulação de escoamentos com números de Reynolds elevados. Contudo, estes modelos ainda requerem um poder computacional considerável. No ANSYS Fluent, o modelo *Detached Eddy Simulation* (DES) [19], é um modelo híbrido baseado em vários modelos, nomeadamente no modelo Spalart-Allmaras. Os custos computacionais ao usar o modelo DES são menores que os custos computacionais do LES, mas maiores que os custos envolvidos com a utilização do RANS [19]. O modelo *Improved Delayed Detached Eddy Simulation* (IDDES) é um modelo híbrido RANS-LES, consistindo numa combinação de várias técnicas novas e existentes, que fornece um modelo de simulação de resolução de escala (SRS – *Scale-Resolving Simulation*) mais flexível e conveniente para escoamentos de números de Reynolds elevados [19].

Todavia, nenhum modelo de turbulência é universalmente aceite como superior para todas as classes de problemas. A escolha do modelo de turbulência dependerá de considerações como a física envolvida no escoamento, o nível de precisão exigido, os recursos computacionais disponíveis e a quantidade de tempo disponível para a simulação. A escolha do modelo mais adequado advém da compreensão das capacidades e limitações das diversas opções de modelos disponíveis para escoamentos reativos na câmara de combustão [56].

4.6 Metodologia CFD

A realização das simulações numéricas, através de um software comercial de CFD como o ANSYS Fluent, deve seguir a seguinte metodologia: construção do modelo e processo de criação de malha, configuração do modelo físico e definição dos parâmetros da simulação (definição de modelos, condições de fronteira), métodos de solução e inicialização.

4.6.1 Geometria da Câmara de Combustão

Assim, a simulação tem início na criação da geometria da câmara de combustão anelar do RDE. A câmara de combustão anelar tem um diâmetro externo e interno 100 mm e 80 mm,

respetivamente, e um comprimento axial de 100 *mm*.

4.6.2 Construção da Malha

A etapa seguinte consiste na geração da malha do modelo 3D, um dos passos mais importantes de uma simulação CFD, visto que a qualidade da malha está diretamente relacionada com a precisão, convergência e velocidade da solução.

As primeiras malhas não estruturadas consistiam exclusivamente em tetraedros isotrópicos, o que era totalmente suficiente para escoamentos invíscidos regidos pelas equações de Euler. Uma malha bidimensional (2D) consiste normalmente em triângulos e/ou quadriláteros, enquanto uma malha tridimensional (3D) é constituída, geralmente, por tetraedros, hexaedros, prismas ou pirâmides. No caso de a malha ser constituída por quadriláteros ou hexaedros, não deve haver dobras vincadas nas linhas da malha, de modo a não aumentar os erros numéricos [49]. Além disso, a malha não deve ter espaços vazios entre as células e estas não se devem sobrepor.

As malhas de escoamentos turbulentos, como o Caso 2, podem ser construídas a partir de elementos tetraédricos, contudo é aconselhável usar prismas ou hexaedros nas regiões de escoamento viscoso e tetraedros nas regiões fora, melhorando a precisão da solução e economizando o número de elementos, faces e arestas [49]. Assim, os requisitos de memória e tempo de execução da simulação são reduzidos significativamente.

4.6.2.1 Solução das Equações Governantes

A resolução das equações de conservação em qualquer volume de controlo finito através do método do volume de controlo permite uma análise detalhada do campo de escoamento reativo dentro da câmara de combustão [9, 49].

De forma a capacitar um computador para a resolução numérica das equações de um domínio de fluido contínuo (como o campo de escoamento dentro câmara de combustão anelar), todo o fluido contínuo deve ser representado por um número finito de elementos discretos. O objetivo da construção da malha é dividir o domínio em vários subdomínios menores numa malha de células (aproximação de volume finito) através de um processo conhecido como a geração ou construção da malha (discretização espacial) onde a solução será calculada [3, 9]. Assim, a malha computacional servirá como uma estrutura para a solução numérica local das equações governantes [3].

Os métodos numéricos para a solução das equações de Euler empregam uma discretização separada no espaço e no tempo [49]. Para simulações transientes, as equações governantes devem ser discretizadas tanto no espaço quanto no tempo. A discretização espacial para as equações dependentes do tempo é idêntica ao caso de estado permanente [19]. A discretização temporal envolve a integração de cada termo nas equações diferenciais ao longo de um intervalo de tempo

[19]. A variável de tempo é discretizada numa sequência de pequenos intervalos de tempo chamados de passos de tempo e a solução é realizada no tempo, ou seja, a solução no tempo t_{n+1} é calculada a partir da solução conhecida no tempo t_n [9]. O intervalo de tempo escolhido deve ser reduzido o suficiente para permitir que cada célula envolvida “capte” a transição do processo. No caso de uma malha mais fina, são necessárias mais células e, conseqüentemente, mais tempo de computação para cada passo de tempo, mas também mais passos de tempo necessários para a simulação de um ciclo [9]. A estrutura da onda de detonação depende do passo de tempo.

Dependendo do grau escolhido de discretização da malha, é possível obter um registo completo do movimento do fluido e quaisquer fenómenos químicos e termodinâmicos atuando em qualquer parte do domínio da simulação até uma escala de comprimento próxima das dimensões moleculares [9].

4.6.2.2 Estudo de Refinamento da Malha

A escolha do nível de resolução da malha mais apropriado é de extrema importância para o sucesso das simulações numéricas e depende das condições de escoamento, do tipo de análise, geometria, entre outras variáveis [57].

A consistência da análise numérica é conseguida através da obtenção do melhor equilíbrio entre a qualidade dos resultados e a resolução da malha. Deste modo, deve-se recorrer a um estudo de refinamento da malha (ou estudo de convergência), partindo, primeiramente, de uma malha menos refinada (mais densa), capaz de captar todas as características da geometria e, de seguida, por intermédio de um processo iterativo, realiza-se uma série de refinamentos, a fim de avaliar o efeito dessas novas resoluções nos resultados [57]. Geralmente, uma malha mal refinada comprometerá os resultados da simulação, enquanto uma malha mais fina (refinada) irá melhorar a solução, aproximando-a da solução numérica verdadeira, assim que os erros da discretização espacial se aproximam assintoticamente de zero. No entanto, esta exige maiores custos computacionais, uma vez que o número de elementos/células da malha no domínio do escoamento é maior, pelo que as células se tornam menores [57].

Assim, é necessário seleccionar as zonas do modelo onde são necessárias malhas mais finas e as zonas onde uma malha mais densa pode ser usada sem comprometer os resultados [57]. Este procedimento só pode ser realizado através de uma abordagem de tentativa e erro. Além disso, o refinamento (ou engrossamento) exige a geração de uma nova malha, mantendo os parâmetros da malha original [57].

O sucesso da resolução do escoamento turbulento presente no Caso 2 requer algumas considerações durante a geração da malha. A forte interação do escoamento médio e da turbulência tem como consequência uma maior dependência dos resultados numéricos na malha do que em escoamentos laminares [56]. A solução das equações de Navier-Stokes com números de Reynolds mais elevados requerem uma resolução da malha suficientemente fina nas regiões

onde o escoamento médio sofre alterações rápidas e as camadas de corte têm grandes taxas de deformação [49].

Além disso, deve-se certificar que o nível de refinamento é suficiente para “cobrir” a configuração completa da geometria do modelo e que os custos computacionais não aumentam desnecessariamente.

Muitos dos modelos computacionais existentes são construídos com o objetivo de capturar detalhadamente o campo de escoamento. A estrutura da detonação é bastante sensível ao espaçamento da malha e ao intervalo de tempo pelo que, para prever a estrutura com precisão e exatidão, uma resolução da malha mais fina é necessária [1], contudo exige vastos recursos computacionais e tempo para alcançar a convergência. Uma malha menos refinada, relativamente densa, é benéfica para avaliações paramétricas que visam compreender a física [51], de modo a detectar apenas a estrutura essencial do campo de escoamento primário, produzindo-se soluções estáveis e rapidamente convergentes.

Neste sentido, ambos os Casos 1 e 2 usam uma malha estruturada uniforme de 0,2 mm de espaçamento também usado para outras análises numéricas [1, 31], pelo que a malha total é composta por 35 600 000 células [2]. Para esta resolução da malha, o tamanho da célula de detonação aproxima-se das análises experimentais [1].

4.6.3 Configuração do Modelo Físico

Para a inicialização do ANSYS Fluent, é necessário garantir que a opção 3D seja selecionada. A opção de dupla precisão garante que os resultados sejam mais precisos, evitando que os resultados dos modelos sejam bastante influenciados pela ocorrência de um pequeno erro, embora esta opção torne a solução mais lenta [57]. Por outro lado, o cálculo deve ser iniciado com um modelo mais simples e a solução deve ser executada até que o campo de escoamento esteja razoavelmente convergido. Inicialmente, deve-se verificar a qualidade da malha.

4.6.3.1 Análise da Qualidade da Malha

A qualidade da malha desempenha um papel significativo na precisão e estabilidade da computação numérica, tal como já foi mencionado. Independentemente do tipo de malha utilizada no domínio, é essencial verificar a qualidade da malha, garantindo uma boa qualidade ortogonal e baixa razão de aspeto (medida do alongamento de uma célula) e boa assimetria (*skewness*), a fim de assegurar que a simulação se realize nas condições operacionais desejadas [57]. A qualidade ortogonal da célula assume valores entre 0 e 1, sendo 1 o melhor valor, que garante que a solução seja robusta. Geralmente, é recomendado que o valor da qualidade ortogonal atingida seja superior a 0,1 [57]. Para a construção da malha de uma câmara de combustão, utilizando o software ANSYS, a razão de aspeto deve ser inferior a 100.

Os atributos associados à qualidade da malha são: a distribuição do ponto de nó, a suavidade (*smoothness*) e a distorção/assimetria (*skewness*) [56]. A malha deve ser suave, ou seja, não deve haver mudanças bruscas no volume das células da malha ou na razão de alongamento e os elementos devem ser o mais regulares possível [49]. Dependendo dos tipos de células da malha (tetraédrica, hexaédrica, poliédrica, etc.), são avaliados diferentes critérios de qualidade [56].

Assim, no fim do processo de criação da malha, de forma a garantir que não existem erros, deve-se obter o relatório de qualidade de malha e verificar se são apresentados erros. As Tabelas 4.1 e 4.2 apresentam os espectros para a *skewness* e qualidade ortogonal da malha.

Tabela 4.1: Espectro da *skewness* da malha [32].

<i>Excellent</i>	<i>Very Good</i>	<i>Good</i>	<i>Acceptable</i>	<i>Bad</i>	<i>Unacceptable</i>
0 – 0,25	0,25 – 0,50	0,50 – 0,80	0,80 – 0,94	0,95 – 0,97	0,98 – 1,00

Tabela 4.2: Espectro da qualidade ortogonal da malha [32].

<i>Unacceptable</i>	<i>Bad</i>	<i>Acceptable</i>	<i>Good</i>	<i>Very Good</i>	<i>Excellent</i>
0 – 0,001	0,001 – 0,14	0,15 – 0,20	0,20 – 0,69	0,70 – 0,95	0,95 – 1,00

O software ANSYS Fluent oferece a capacidade de melhorar a suavidade refinando a malha com base na mudança no volume celular ou no gradiente do volume celular [56].

4.6.4 Solucionador – Métodos de Solução do Escoamento

A complexidade em realizar a simulação do processo de detonação no RDE devido à natureza física e química do fenómeno de detonação e à estrutura de onda de detonação impõe a necessidade de utilização de métodos numéricos adequados, que sejam capazes de reconstruir os processos de propagação de descontinuidades no escoamento. Assim, essas simulações definem altos requisitos para o solucionador [50].

Os métodos de solução na modelagem CFD baseiam-se nas seguintes etapas:

- Divisão do domínio em volumes de controlo discretos usando uma malha computacional [19];
- Integração das equações governantes do escoamento do fluido nos volumes de controle individuais do domínio [3, 19];
- Processo de Discretização – conversão das equações integrais resultantes num sistema de equações algébricas para as variáveis dependentes discretas ("desconhecidas"), como velocidades, pressão, temperatura e escalares conservados [3, 19];

- Linearização das equações discretizadas e solução do sistema de equações lineares resultante para produzir valores atualizados das variáveis dependentes através de um método iterativo [3, 19].

O software ANSYS Fluent permite a seleção de um dos dois métodos numéricos: o solucionador baseado em pressão e o solucionador baseado em densidade [19]. Tradicionalmente, a abordagem baseada em pressão foi desenvolvida para escoamentos incompressíveis de baixa velocidade, enquanto a abordagem baseada em densidade foi destinada principalmente para escoamentos compressíveis de alta velocidade. No entanto, recentemente ambos os métodos foram reformulados e habilitados para resolver uma variedade de condições de escoamentos [19].

Os dois métodos numéricos empregam um processo de discretização semelhante (volume finito), mas a abordagem usada para linearizar e resolver as equações discretizadas é diferente [19]. Para ambos os métodos, o ANSYS Fluent resolverá as equações integrais governantes para a conservação de massa e momento e, quando necessário, para energia e outros escalares, como turbulência e espécies químicas. Contudo, vários modelos de combustão apenas estão disponíveis no Fluent para o método baseado em pressão.

4.6.5 Modelagem do Processo de Combustão

A realização da simulação requer a seleção do modelo disponível no software que represente da melhor forma o processo de combustão. O cálculo do processo de combustão pode ser descrito por vários modelos designados de “modelos de libertação de calor”, uma vez que a análise não se foca nos mecanismos da reação química. Os modelos 3D-CFD inserem-se nesta categoria, nos quais a análise completa do campo de escoamento permite um cálculo detalhado da progressão da propagação da chama dentro da câmara de combustão. Esses modelos garantem uma elevada previsibilidade, visto que todos os detalhes geométricos relevantes são considerados [9].

Dependendo da quantidade de detalhes, um mecanismo de combustão pode consistir em apenas algumas etapas ou milhares de reações elementares, como já foi abordado nesta tese. Geralmente, o processo de combustão pode ser diferenciado em diferentes níveis de complexidade. Idealmente, uma equação de transporte deve ser resolvida para cada uma das espécies do sistema reagente a fim de descrever com precisão os processos físicos e químicos que ocorrem durante a combustão. Uma descrição simplificada é extremamente útil para aplicações práticas de problemas de combustão, reduzindo os recursos computacionais necessários. Para combustíveis de componente único, como é o caso deste estudo, uma reação global de uma etapa é frequentemente usada em simulações práticas devido à sua simplicidade.

A simplicidade do mecanismo de reação de uma etapa não é completamente apropriada para a modelagem da detonação segundo [50], contudo é útil para estudos simplificados. Modelos de RDEs usando misturas H_2/ar , H_2/O_2 , CH_4/ar e C_2H_4/ar consideram química detalhada e configurações simplificadas, embora apenas alguns estudos estão disponíveis para comparação

com a química simplificada (uma ou duas etapas), dadas as despesas computacionais relativamente grandes necessárias e os recursos computacionais atuais [10].

Embora modelos de reação complexos produzam dados valiosos, exigem vastos recursos computacionais e tempo para alcançar a convergência. Uma abordagem de modelagem mais simples é benéfica para avaliações paramétricas que visam captar a estrutura essencial do campo de escoamento primário e compreender a física subjacente [51], produzindo-se soluções estáveis e rapidamente convergentes.

4.6.5.1 Modelos

Os processos de combustão podem ser caracterizados por vários modelos. No caso da combustão pré-misturada, no software ANSYS Fluent estão disponíveis os seguintes modelos de espécies:

- Transporte de espécies e química de taxa finita: modela a mistura, o transporte e combustão de espécies químicas, resolvendo as equações de conservação que descrevem convecção, difusão e fontes de reação para cada espécie, com aplicações em sistemas de reação laminar ou turbulenta e sistemas de combustão com ou sem pré-mistura, ou parcialmente pré-misturadas;
- Combustão pré-misturada: um modelo de combustão pré-misturada turbulenta baseado na abordagem da variável de progresso de reação. Na combustão pré-misturada, o combustível e o oxidante são misturados a nível molecular antes da ignição e a combustão ocorre como uma frente de chama fina que se propaga nos reagentes não queimados e é esticada e contorcida pela turbulência, pelo que se torna difícil de modelar;
- Transporte de Composição PDF: deve ser usado para simular efeitos cinéticos químicos de taxa finita em escoamentos de reação turbulentos; computacionalmente caro e apenas disponível para o solucionador baseado em pressão, recomendado apenas para modelagem com malhas pequenas em 2D.

As simulações que envolvem escoamentos reativos e espécies químicas, como o processo de combustão, são complexas, pelo que se torna difícil obter uma solução convergente e os modelos químicos exigem um elevado custo computacional. As reações levam a uma grande libertação de calor, grandes variações de densidade e acelerações no escoamento e envolvem a magnitude do termo de fonte de reação e taxas de reação muito rápidas, pelo que a solução das equações de transporte de espécies torna-se numericamente difícil. Contudo, existem algumas técnicas de solução que melhoram a estabilidade e aceleram a convergência da solução.

Um modelo de reação de taxa finita simplifica o escoamento real da câmara de combustão do RDE elimina o escoamento de cisalhamento instável e a estrutura celular de detonação associada a análises mais detalhadas [51]. A formulação de transporte de espécies e química de taxa finita é adequada para uma ampla gama de aplicações, que incluem escoamentos laminares ou turbulentos e sistemas de combustão com chamas pré-misturadas, não pré-misturadas ou

parcialmente pré-misturadas. O ANSYS Fluent permite modelar múltiplas reações químicas simultâneas, com reações ocorrendo na fase fluida (reações volumétricas) e/ou em paredes ou superfícies de partículas e na região porosa [19]. A mistura e o transporte de espécies químicas são modelados pelo software através da resolução de equações de conservação para cada espécie componente. Neste sentido, o ANSYS Fluent prevê a fração de massa local de cada espécie, através da solução de uma equação de convecção-difusão [19].

Relativamente ao modelo de energia, este deve ser ativado, pois diz respeito à energia relacionada à variação de temperatura durante o processo de combustão.

Através do Modelo Viscoso podem ser estudados escoamentos laminares e turbulentos. O Caso 1 é uma simulação de escoamento invíscido e o Caso 2 é referente ao fenómeno de turbulência. No âmbito do estudo do escoamento transiente da propagação de detonação em RDEs, tendo em consideração os efeitos viscosos, foram realizadas várias simulações numéricas nomeadamente uma análise CFD através do método de solução de densidade para a resolução do modelo RANS, mais concretamente, o modelo de turbulência de transporte de tensão de cisalhamento (SST – *Shear Stress Transport*) k- ω [31], ou ainda através da abordagem LES [45]. Relativamente à presente simulação referente ao Caso 2, a seleção do modelo híbrido IDDES como modelo de turbulência para a câmara anelar do RDE [2].

4.6.6 Condições de Fronteira

O domínio da simulação 3D-CFD é conduzido pelas condições de fronteira e limitado apenas às partes do motor que têm uma geometria complexa ou, neste caso, onde ocorrem fenómenos complexos como a câmara de combustão onde investigações numéricas sobre a injeção de combustível e combustão, por exemplo, são necessárias [9]. De certo modo, o processo de resolver um problema de campo (por exemplo, um escoamento de fluido) não é nada mais do que a extrapolação de um conjunto de dados definidos num contorno de fronteira ou superfície para o interior do domínio [3].

A limitação do domínio de simulação requer a aplicação de condições de fronteira iniciais precisas, independentemente da metodologia numérica escolhida para resolver as equações de conservação governantes. As condições iniciais determinam o estado do fluido no instante $t = 0$, ou na fase inicial de um esquema iterativo [49]. A solução inicial deve satisfazer, pelo menos, as equações governantes e as relações termodinâmicas adicionais [49]. Efetivamente, as condições de fronteira devem ser adequadas ao caso de estudo, para que mais rapidamente seja obtida a solução final. Caso contrário, comprometerão irremediavelmente a fiabilidade e a previsibilidade dos resultados da simulação 3D-CFD [3, 9]. A causa mais comum de divergência rápida de simulações de CFD é a seleção inadequada de condições de contorno.

A parede é o limite mais comum encontrado em escoamentos de fluido confinados [3]. A condição de fronteira adequada para um escoamento invíscido governado pelas equações de Euler do Caso

1, é a condição do escoamento ser tangencial à superfície, uma vez que não existe força de fricção, ou seja, o vetor de velocidade deve ser tangente à superfície [49]. Deste modo, é admissível dizer-se que o fluido escorrega ao longo da superfície em escoamentos invíscidos, o que é equivalente à condição de não existir escoamento normal à superfície, pelo que:

$$\vec{V} \cdot \vec{n} = 0 \quad (\text{na superfície}) \quad (4.12)$$

Onde \vec{n} denota o vetor unidade normal à superfície [49].

Em condições de escoamento real viscoso e turbulento verifica-se que os elementos de fluido imediatamente em contacto com uma parede sólida aderem a esta, condição fronteira designada de não-escorregamento [20], uma vez que existe força de fricção. Deste modo, é admissível dizer-se que o fluido não escorrega ao longo da superfície em escoamentos turbulentos. A condição de não escorregamento é a condição apropriada para componentes de velocidade em paredes sólidas [3].

Contudo, o Caso 2 mantém a condição de deslizamento/escorregamento nas paredes para evitar a formação de uma camada limite, não considerando o impacto das paredes [2]. Assim, evita-se a resolução de malha mais fina perto das paredes (e maior número de células) para capturar com precisão os efeitos viscosos, uma vez que tal implicaria maiores custos computacionais e tempo despendido do que as simulações tradicionais de Euler.

4.6.6.1 Definição de Parâmetros

Após a identificação das condições de fronteira, é necessário preencher todos os parâmetros para cada uma delas. Nas simulações, tem-se em consideração a condição de fronteira de entrada de escoamento comumente empregada pelos investigadores do NRL que considera a variação espacial campo de pressão dentro da câmara devido ao movimento da onda de detonação. Desta forma, a mistura estequiométrica de hidrogénio/ar pré-misturada é injetada através de micro-bocais com uma razão de área fixa de 0,2 sem ocorrência de retorno de escoamento. A pressão e a temperatura de estagnação de entrada dos reagentes são 10 bar e 300 K. A condição de fronteira de saída de escoamento é tratada como uma fronteira supersónica/subsónica, dependente do número Mach local. Nas regiões subsónicas é aplicada uma pressão de retorno de 1 bar.

4.6.7 Solução e Inicialização

O algoritmo dos cálculos numéricos necessários para obter uma solução válida para a simulação CFD inclui a definição dos métodos usados para o controlo e monitorização da solução. Durante o cálculo da solução é possível monitorizar a convergência dinamicamente verificando os resíduos, estatísticas, valores específicos e integrais. O Fluent permite imprimir relatórios e exibir gráficos da variação de diversas variáveis do escoamento (como temperatura, pressão,

velocidades, entre outros), ou mesmo integrações de superfície/volume. O objetivo dos monitores é exibir o(s) valor(es) dos parâmetros relevantes numa simulação e avaliar a convergência da solução para cada variável durante o processo de simulação. Assim, pode-se proceder à inicialização da solução para se obterem os resultados.

Capítulo 5

Resultados

Neste capítulo, apresentam-se os resultados das simulações da combustão de hidrogénio/ar na câmara de combustão do modelo RDE de [2]. Os dois casos estudados serão analisados em simultâneo de forma a simplificar a análise da estrutura da onda de detonação e facilitar a comparação do caso invíscido com o caso viscoso.

A qualidade da solução numérica é garantida pela análise da convergência realizada para todos os resultados. A obtenção de uma solução convergente num escoamento reativo é um processo, por vezes, complicado e moroso. Efetivamente, no fenómeno de combustão, as reações geram uma grande libertação de calor, resultando em grandes variações de densidade e acelerações no escoamento.

5.1 Análise da Convergência

A análise de convergência é realizada utilizando os resíduos escalados globalmente juntamente com o critério de convergência absoluta e, de forma a garantir a convergência das soluções assim que os resíduos fossem alcançados, é feita a monitorização de diversas grandezas relevantes, tais como a pressão absoluta média no volume de fluido; a temperatura média total no volume de fluido; a magnitude média da velocidade no volume de fluido; entre outras. As soluções são consideradas convergentes quando os resíduos diminuam suficientemente; a solução não se altera com mais iterações; o desequilíbrio global de massa é obtido, ou seja, o escoamento que entra no sistema deve ser igual ao escoamento que sai do sistema. A análise dos resíduos permite obter a primeira evidência de que a solução é convergente.

Geralmente, são realizadas várias simulações, devido a erros e obstáculos que surgem na abordagem CFD da complexidade do problema de combustão em causa. De facto, os resultados são, de modo geral, derivados do tempo despendido para a simulação. A seleção de um modelo capaz e adequado para o fenómeno de combustão por detonação, que permita obter soluções completamente convergentes, para determinados parâmetros, é uma das dificuldades enfrentadas.

Assim, procede-se à análise CFD das simulações tridimensionais do conceito de motor PGC de acordo com a referência [2], para avaliação do impacto dos efeitos viscosos no desempenho e comportamento da câmara de combustão de um RDE.

5.2 Análise Qualitativa

Os resultados da simulação convergida do domínio completo do RDE, de acordo com as condições de fronteira e parâmetros definidos, são demonstrados nas Figuras 5.1 e 5.2, para os Casos 1 e 2, respectivamente, sob a forma de contornos de temperatura instantâneos, e que serão analisadas e apresentadas nas secções seguintes [51].

5.2.1 Estrutura da Onda de Detonação

A Figura 5.1 revela que a onda de detonação, iniciada através da aceleração da chama pelo processo DDT [11], se propaga da esquerda para a direita. Nas figuras identificam-se características da estrutura da onda de detonação: a frente de onda, camada de corte, choque oblíquo, interface reagentes-produtos, zona de preenchimento, zona de bloqueio dos injetores. A zona de recuperação é a condição de fronteira de expansão inferior da detonação [1], enquanto a camada de corte é a condição de fronteira de expansão superior do escoamento de detonação que afasta os produtos da onda de combustão [1].

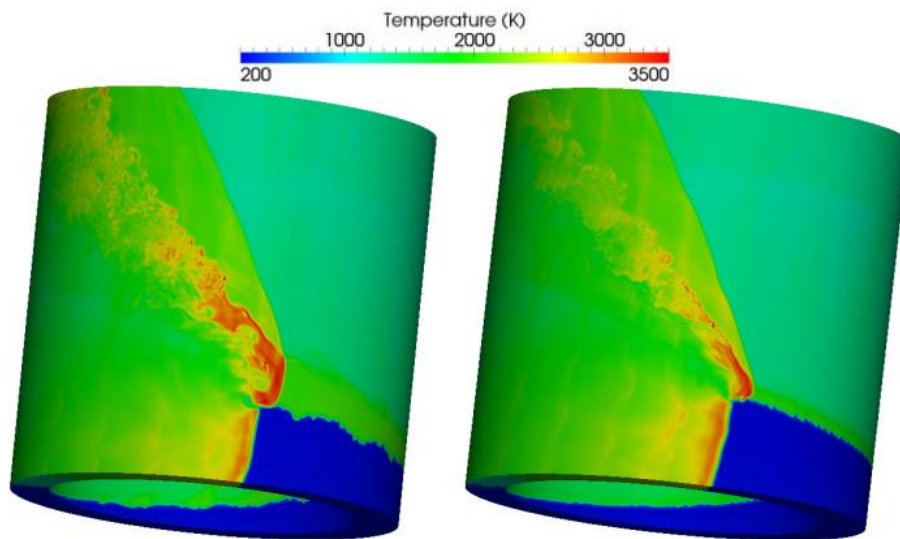


Figura 5.1: Contornos de temperatura instantâneos da simulação tridimensional de Euler (Caso 1) [esquerda] e da simulação de escoamento viscoso com paredes deslizantes (Caso 2) [direita] – foco na região de detonação [2].

A onda de detonação rotativa é sustentada porque atua como uma válvula móvel, bloqueando o seu próprio fornecimento de reagentes e reiniciando o escoamento da mistura reativa à medida que a onda passa, assim que a pressão local da câmara se torna inferior à pressão de alimentação. O escoamento de recuperação é desimpedido, subsônico, entra em combustão imediatamente ao entrar em contato com os produtos quentes da detonação. Eventualmente, a pressão da câmara torna-se menor que a pressão crítica do bocal injetor e o escoamento fica sufocado. A forma da

zona de preenchimento não é perfeitamente triangular porque há aceleração, expansão e divergência na zona de preenchimento [1].

A entrada de mistura fresca na câmara de combustão ocorre a uma taxa constante e verifica-se na Figura 5.1 que as reações químicas ocorrem numa região próxima à parede do tubo. Assim, a onda continua-se a propagar na próxima revolução, criando assim uma onda autossustentável enquanto houver renovação contínua da camada da mistura reativa e a remoção dos produtos da detonação for assegurada.

O mecanismo de propagação de uma detonação livre é a autoignição pela frente de choque principal impulsionada pela tração proveniente da expansão dos produtos, consequência da rápida diminuição de pressão na zona de reação, juntamente com uma diminuição de pressão através das ondas de expansão [5]. O choque principal da detonação atua como um compressor. O choque oblíquo atua como um compressor secundário de uma fração substancial do escoamento. O escoamento que passa através do choque oblíquo gera a maior parte da tração útil. A zona de reação é a câmara de combustão. A expansão dos produtos de detonação tem as características termodinâmicas de uma turbina [1].

Na Figura 5.1, é possível identificar a região de temperatura mais baixa: a zona de preenchimento de reagentes. As regiões de temperatura mais elevada concentram-se nas regiões da frente de onda, produtos da combustão recentes atrás da frente e zona de expansão superior, pela camada de corte e choque oblíquo. Nas regiões de temperatura mais elevada, a intensidade da combustão é maior com o decorrer da reação química, os reagentes são convertidos em produtos através de reações exotérmicas rápidas, o que resulta no aumento da temperatura e diminuição da pressão e densidade, que provoca um aumento na velocidade, uma vez que a área de injeção e o caudal mássico de combustível são parâmetros constantes.

5.2.2 Zona de Deflagração

Na Figura 5.2, a câmara de combustão foi rodada para auxiliar a análise do campo de escoamento a montante da frente de onda. O principal mecanismo de libertação de calor num RDE é uma detonação. No entanto, também ocorre combustão por deflagração. A interface entre os reagentes frios e os produtos quentes é a região de mistura responsável pela ocorrência de deflagração visível em ambos os casos, zona de temperatura mais elevada acima dos reagentes frios.

O mecanismo de reação particularmente simples, juntamente com a malha densa usada que gera difusão numérica relativamente alta, pode levar a velocidades de chama irrealisticamente altas na zona de deflagração. De facto, muitas reações podem ocorrer na zona de deflagração, até não restarem reagentes para a queima por detonação [51]. A extensão da queima por deflagração ocorre num grau de tal forma superior na simulação de Euler, que se verifica que a altura da frente de onda de detonação na simulação de Euler (Caso 1) é menor do que no cálculo viscoso (Caso 2), uma vez que mais combustível foi consumido antes da detonação por deflagração na simulação

de Euler. A estrutura de detonação é composta por pequenas células que compõem a frente e, como a altura da frente de onda de detonação no Caso 2 é maior que no Caso 1, mais células de detonação são geradas em toda a sua altura, que permitem a propagação das ondas de detonação, em comparação com a simulação de Euler [2].

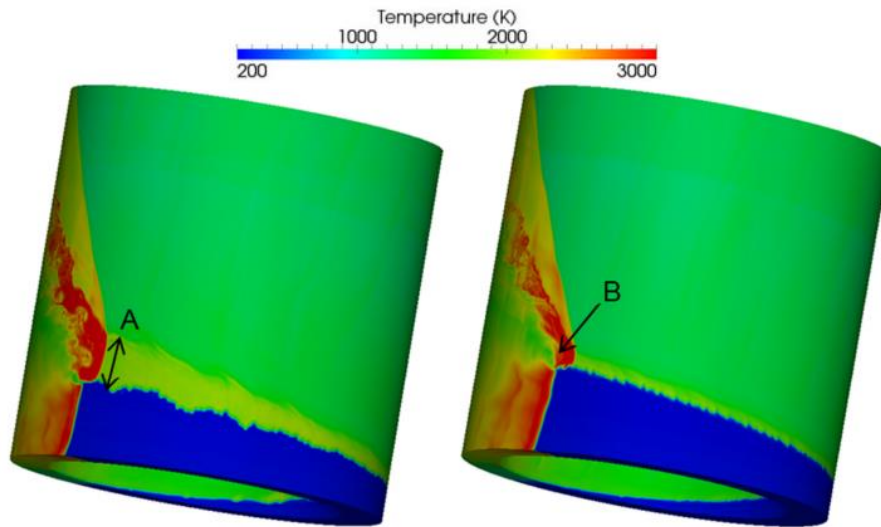


Figura 5.2: Contornos de temperatura instantâneos da simulação tridimensional de Euler (Caso 1) [esquerda] e da simulação de escoamento viscoso com paredes deslizantes (Caso 2) [direita] – foco na região de deflagração [2].

Na análise de Euler, o termo de transporte difusivo de quantidade de movimento anula-se, mas o escoamento é considerado rotacional (vorticidade não nula). Se o campo de escoamento, e aproximação numérica da mesma, fossem verdadeiramente invíscidas, nenhuma reação de deflagração ocorreria. Em escoamentos reais (viscosos) há sempre difusão e os melhores esquemas de CFD não podem evitar completamente a difusão mesmo quando os termos de difusão física são negligenciados. No entanto, esperava-se que os níveis reduzidos de difusão na simulação de Euler provocassem uma taxa de reação reduzida. Contudo, a nitidez (*sharpness*) desta interface reagentes-produtos na simulação de Euler torna a chama mais suscetível às perturbações de transporte e à transmissão da vorticidade aos elementos de fluido, aumentando a área da chama de superfície e, portanto, aumentando a taxa de reação [51]. A quantidade de reagente que queima por deflagração também é sensível à precisão da discretização espacial.

A consideração dos efeitos de difusão, resulta em produtos de combustão que aquecem os reagentes, permitindo assim que a reação química prossiga, mais células de detonação são geradas em toda a sua altura que permitem a propagação das ondas de detonação [51]. Desta forma, no cálculo viscoso, é reduzida a combustão por deflagração e a sensibilidade desta interface às perturbações locais, pelo que a taxa de queima é mais baixa.

5.2.3 Choque Oblíquo

A mistura dos produtos recentemente detonados (atrás da frente de onda) com os produtos mais antigos (região acima da zona de preenchimento) do ciclo anterior [2] forma a camada de corte e vórtices, que fazem parte do mecanismo que gera o choque oblíquo que se propaga a partir do topo da onda de detonação.

A onda de choque perpendicular (ângulo de 90°) é mais forte que uma onda de choque oblíqua [12]. A Figura 5.2 ilustra que o choque oblíquo gerado acima da onda de detonação muda de forma na sua base ('A'), gerando um choque mais forte nesta região, cujo tamanho parece ser igual à altura da região de temperatura elevada gerada pela queima de deflagração a montante da detonação. Este choque também se propaga à frente da frente de detonação. Os produtos quentes da queima por deflagração são ainda mais aquecidos e comprimidos à medida que passam pela frente de onda, expandindo-se, possivelmente, no ponto 'B' da Figura 5.2. Esta expansão poderá ser facilitada no Caso de Euler, marcado pelo choque mais forte que se propaga a montante da detonação [2].

Evidentemente, na ausência da região de combustão por deflagração, o choque oblíquo acima da onda de detonação não tem um componente de choque mais forte na sua base, pelo que se supõe que a presença desta característica depende da zona de deflagração que ocorre a montante da detonação [2].

O regime transiente do escoamento nas simulações tridimensionais de RDEs é, de modo geral, mais nítido que o verificado em simulações bidimensionais [2], uma vez que as simulações 3D não diferem das simulações 2D apenas na terceira dimensão introduzida, mas também na presença de curvatura do anel, sendo que ambos os fatores podem influenciar o campo de escoamento observado.

5.3 Análise Quantitativa

5.3.1 Velocidade de Detonação

Nesta secção, utilizam-se medidas quantitativas para se obterem mais informações sobre a operação e o desempenho de cada simulação tridimensional do RDE apresentada [2, 51]. O desempenho de uma dada configuração de RDE específica pode ser comparado com um PDE de tubo reto, dado serem essencialmente equivalentes [51]. No entanto, esse estudo não vai ser realizado para esta análise. A velocidade de detonação prevista pode ser avaliada para cada caso, considerando a região de gás não queimado logo atrás do choque de pressão elevada conhecida como "von Neumann spike" (que representa o atraso de ignição) [5, 13]. Neste sentido, examinando os traços de pressão/tempo em locais da câmara anelar, considera-se o tempo entre os dois picos de von Neumann e a distância percorrida pela onda para analisar a velocidade de detonação.

O escoamento médio na direção de propagação de detonações reais ainda pode ser considerado unidimensional e permanente, uma vez que a velocidade de propagação média se mantém sensivelmente próxima da velocidade CJ unidimensional ideal, até mesmo perto dos limites de detonação. Assim, como termo de comparação para as simulações descritas, a velocidade CJ é calculada, 1987 m/s, pelo código *Chemical Equilibrium with Applications* (CEA2) [2], o programa computacional da NASA, considerando a pressão e temperatura de 2 bar e 230 K [2], valores aproximados relativos aos reagentes logo à frente da detonação. Estas propriedades sofrem alguma variação nas direções radial e axial, mas a velocidade CJ permanece relativamente constante a essas mudanças.

Assim, na Tabela 5.1, são apresentadas as velocidades de detonação para o raio médio (45 mm), raio interno e externo. Nestas simulações, relativas à mistura de hidrogénio/ar completamente pré-misturados, a velocidade da onda azimutal para cada caso apresenta o maior valor possível numa frente de detonação relativamente uniforme [1], comparativamente à velocidade da onda em simulações nas quais o grau de mistura dos reagentes não é 100%.

Tabela 5.1: Velocidades de detonação nas simulações tridimensionais. Adaptada de [2].

<i>Case</i>	<i>Detonation Velocity (m/s)</i>		
	<i>Mean Radius</i>	<i>Inner Radius</i>	<i>Outer Radius</i>
Euler	1948	1732	2165
<i>Viscous with slip walls</i>	1952	1735	2168
CJ at 2 bar and 230 K	1987	1987	1987

A variação entre a velocidade de detonação simulada e a velocidade CJ pode ser parcialmente devida à definição de parâmetros da simulação como a definição da composição dos produtos comparativamente com o código CEA2. Todavia, a Tabela 5.1 revela que os valores referentes ao raio médio são bastante próximos da velocidade CJ. Embora a estrutura celular tridimensional transiente e instável de detonações em quase todas as misturas explosivas torna a teoria CJ para escoamento permanente unidimensional inválida, a teoria CJ continua a ser uma excelente teoria para a previsão da velocidade de detonação, mesmo para detonações muito instáveis. Por outro lado, ambas as velocidades de detonação previstas para o Caso 1 e para o Caso 2 encontram-se ligeiramente abaixo da velocidade CJ para o raio médio, podendo estar relacionado com o facto de, na simulação de Euler, a combustão por deflagração ocorrer num grau elevado e, no Caso 2, serem considerados os efeitos viscosos, e ambos os fatores diminuírem a velocidade de detonação. Além disso, o efeito da curvatura da câmara tridimensional ou a sensibilidade da velocidade de detonação prevista à localização radial podem estar relacionados com essa diferença relativa à velocidade CJ verificada.

A análise da Tabela 5.1 demonstra a existência de uma variação significativa na velocidade de detonação na direção radial. Os valores dos raios interno e externo foram calculados assumindo que a onda de detonação é plana. Portanto, como a distância percorrida pela onda na

circunferência interna é menor que na circunferência média e a distância percorrida na circunferência externa é maior que na circunferência média, as velocidades de detonação devem ser menores e maiores nesses locais, respetivamente. As velocidades de detonação para o raio externo para ambos os casos, por exemplo, são superiores aos valores para o raio médio e superiores à velocidade CJ.

A Tabela 5.1 revela que as velocidades de detonação previstas para cada raio para o Caso de Euler e para o Caso Viscoso são semelhantes, concluindo-se que os efeitos viscosos não parecem impactar a velocidade de detonação observada nas simulações [2]. A velocidade de detonação no Caso 2 é ligeiramente superior ao Caso 1, que pode estar relacionado com as grandes quantidades de queima por deflagração que se verificam mais acentuadas no Caso de Euler, o que introduz perdas no sistema, apesar dos efeitos viscosos considerados no Caso 2 também introduzirem perdas. Na simulação de Euler, apesar dos níveis reduzidos de difusão, a vorticidade é transmitida aos elementos de fluido e torna a chama suscetível às perturbações de transporte, aumentando a taxa de reação por deflagração, diminuindo a velocidade da frente de onda.

5.3.2 Impulso Específico e Tração Produzida

A análise final realizada para avaliar o impacto dos efeitos viscosos no desempenho previsto de um RDE foi a análise do impulso específico definido pela Equação (5.1):

$$I_{sp} = \frac{F_{outlet}}{\dot{m}_f g} \quad (5.1)$$

Onde, \dot{m}_f é o caudal mássico de combustível através da entrada, g é a aceleração padrão devido à gravidade e F_{outlet} é a força na saída, definida pela Equação (5.2):

$$F_{outlet} = \int (\rho V^2 + (p - p_{back})) dA \quad (5.2)$$

Onde ρ , v e p são a densidade, a velocidade e a pressão numa célula na face de saída que tem uma área de face de dA . O termo p_{back} é a pressão de retorno aplicada na condição de fronteira de saída.

A Tabela 5.2 apresenta os valores do impulso específico e tração produzida pelo RDE para os dois casos tridimensionais.

Tabela 5.2: Valores de impulso específico e tração produzida pelo RDE para as simulações tridimensionais. Adaptado de [2].

Case	Total Mass Flow Rate (kg/s)	Outlet Force (N)	Isp (s)
Euler	1,369	2145,542	5641,119
Viscous with slip walls	1,350	2108,580	5618,743

O caso de Euler possui o maior valor de tração produzida e, conseqüentemente, o impulso específico é maior, apesar das grandes quantidades de queima por deflagração, o que corrobora o facto de os efeitos viscosos, considerando um modelo de turbulência, introduzirem perdas mais significativas no sistema, mesmo com condições de contorno de deslizamento aplicadas às paredes no Caso 2. Os efeitos viscosos presentes no Caso 2 são os efeitos de perda mais significativos na diminuição da tração produzida comparativamente à maior extensão de queima por deflagração no Caso 1 como demonstrado na Tabela 5.2. Efetivamente, a viscosidade, característica do fluido real, gera instabilidades provocando perdas de desempenho nos dispositivos propulsivos.

Teoricamente, a diferença entre o Caso 1 e o Caso 2 seria ainda maior se a queima por deflagração, no caso de Euler, fosse reduzida, causando um aumento mais significativo no impulso específico. Por outro lado, a diminuição dos valores de impulso específico seria mais acentuada no caso 2 considerando a condição de contorno de não escorregamento.

Os valores de impulso específico seriam superiores se o escoamento de exaustão fosse expandido para as condições ambientais através de uma tubeira, aumentando a tração do dispositivo.

Capítulo 6

Conclusão

O projeto desta dissertação tinha como principal objetivo compreender a termodinâmica fundamental subjacente à propagação da detonação que rege o funcionamento e desempenho do RDE, o conceito revolucionário que tem intrigado a comunidade científica e que tem sido o tema de investigações nos últimos anos. Assim, analisou-se a teoria da dinâmica de gases que possibilitou determinar os tipos de ondas de combustão possíveis dadas pelas soluções das leis da conservação. Além disso, com uma equação de estado e o critério CJ adicional, determinou-se a velocidade apropriada para a detonação que, para uma mistura explosiva, demonstra ser única. O critério de velocidade mínima de Chapman e a condição de escoamento sónico a jusante de Jouguet, correspondente à solução de entropia mínima, são equivalentes. O modelo ZND da estrutura da detonação destacou-se entre as várias investigações que procuraram justificar a teoria CJ incompleta, pelo que foi apresentado nesta dissertação. De facto, o modelo ZND envolve os processos de transição de reagentes para produtos e um critério matemático que determina a velocidade apropriada de detonações patológicas de von Neumann e de detonações não ideais (com curvatura, perdas por atrito e transferência de calor), não consideradas na teoria CJ que assume o fluido perfeito.

Seguidamente, aplicando a análise realizada aos sistemas propulsivos, estudou-se o campo de escoamento da câmara anelar tridimensional do RDE através da simulação bidimensional de Euler de Douglas Schwer [1]. Assim, foi possível identificar a existência de interseções de choques, como o choque triplo da frente de choque principal da detonação. Efetivamente, a detonação rotativa não é um fenómeno plano, mas consiste numa estrutura celular moldada por ondas transversais, oscilações que se “filtram” para se compreender o processo fundamental do fenómeno. Novas células de detonação são geradas da colisão de dois pontos triplos da estrutura celular da detonação, permitindo a propagação das ondas de detonação.

A compreensão das irreversibilidades dos processos reais, que envolvem viscosidade, é fundamental para tornar possível a aplicação prática vantajosa do fenómeno da detonação tridimensional transiente e instável. A análise numérica CFD permite prever o comportamento do escoamento no RDE, sendo que as flutuações de velocidade e pressão tridimensionais das detonações reais podem ser tratadas através da modelagem de turbulência. Neste sentido, esta dissertação apresentou duas simulações tridimensionais em regime transiente do fenómeno de detonação do RDE desenvolvidas por [2]: uma simulação de Euler (Caso 1), que negligencia os efeitos de viscosidade e de difusão molecular, e uma simulação do modelo de turbulência (Caso 2), de forma a analisar o impacto dos efeitos viscosos no desempenho do RDE e na estrutura da detonação. A câmara de combustão tem um diâmetro externo e interno de 100 mm e 80 mm, respetivamente, e um comprimento axial de 100 mm e a mistura reativa é a combinação

ar/hidrogénio totalmente pré-misturada, em condições estequiométricas, garantindo uma boa qualidade de mistura. O Caso 2 mantém a condição de fronteira de escorregamento nas paredes do caso de Euler, evitando a formação de uma camada limite e uma resolução de malha mais fina perto das paredes para capturar com precisão os efeitos viscosos, visto que tal implicaria maiores custos computacionais e tempo para alcançar a convergência e este estudo pretende apenas captar a estrutura essencial do campo de escoamento.

Os resultados das simulações foram apresentados e analisados, primeiramente, segundo a estrutura da onda de detonação de acordo com o modelo ZND. Ambas as simulações numéricas demonstraram que a onda de detonação rotativa é sustentada porque atua como uma válvula móvel, bloqueando o seu próprio fornecimento de reagentes e reiniciando o escoamento da mistura reativa à medida que a onda passa. O principal mecanismo de libertação de calor num RDE é a detonação. No entanto, verificou-se em ambos os casos a presença de combustão por deflagração que ocorre num grau superior na simulação de Euler, embora os níveis de difusão sejam reduzidos, a interface reagentes-produtos torna a chama mais suscetível às perturbações de transporte, consumindo-se mais combustível antes da detonação pelo que a altura da frente de onda é menor, contrariamente ao Caso 2 que considera os efeitos de difusão. Na simulação de Euler, o choque oblíquo muda de forma na sua base, gerando um choque mais forte que também se propaga a montante da detonação, cujo tamanho parece depender da altura da região de temperatura elevada gerada pela deflagração, o que poderá facilitar a expansão dos produtos.

Numa segunda fase, realizou-se a análise das velocidades de detonação obtidas para cada caso e para cada raio da câmara de combustão. A velocidade de propagação média de detonações instáveis mantém-se sensivelmente próxima da velocidade CJ unidimensional ideal, pelo que a velocidade CJ de 1987 m/s, obtida pelo código termodinâmico CEA2 da NASA, foi usada como termo de comparação para as simulações. De facto, os valores referentes ao raio médio encontram-se próximos da velocidade CJ para ambos os casos, no entanto, são inferiores a este valor, possivelmente devido, por um lado, à deflagração na simulação de Euler e à viscosidade no Caso 2, ou à curvatura da câmara tridimensional e localização radial definida. A definição dos produtos da detonação relativamente ao código CEA2 pode também ter influenciado. As velocidades de detonação obtidas na direção radial variam significativamente, visto que se considerou detonação plana e as distâncias percorridas pela onda são distintas para cada raio. Finalmente, procedeu-se à análise do impulso específico que se revelou superior no caso de Euler, demonstrando que os efeitos viscosos provocam a perda de desempenho mais significativa, mesmo com a condição de escorregamento aplicada às paredes no Caso 2.

Os efeitos viscosos influenciaram a estrutura da detonação e parâmetros de desempenho do RDE, pelo que a sua inclusão é fundamental na análise da propagação da detonação, tendo em vista a obtenção de valores de tração superiores em escoamento de fluido real. A viscosidade é, de facto, um dos maiores obstáculos ao desempenho do RDE e à validade dos modelos teóricos subjacentes, pelo que a minimização das perdas e a estabilidade da onda de detonação no RDE é

essencial. Contudo, o RDE apresenta potencial para aperfeiçoar o desempenho de motores de foguetes líquidos e proporcionar o aumento da capacidade de carga útil para veículos espaciais, tornando a exploração espacial mais sustentável.

6.1 Perspetiva Futura

Os motores de detonação rotativa têm o potencial de fornecer um ciclo de combustão significativamente mais eficiente do que os motores baseados em deflagração. A simplicidade da estrutura do RDE e as suas características vantajosas tornam este conceito inovador uma solução futura possível como um motor autónomo para a propulsão aerospacial. A aplicação do fenómeno da detonação no sistema propulsivo tem sido desafiante e ainda requer investigações futuras.

A modelagem CFD simplificada das simulações apresentadas nesta dissertação permitiu analisar parâmetros de desempenho e a termodinâmica fundamental subjacente à propagação da onda de detonação no RDE, todavia, não foram considerados vários parâmetros e efeitos, nomeadamente a transferência de calor, cuja análise futura do seu impacto no RDE será importante, possibilitando uma maior aproximação da análise CFD à operação real do motor. Além disso, também seria relevante considerar a condição de não escorregamento no Caso 2, que exigiria melhorar a qualidade da malha perto das paredes. As velocidades de onda previstas computacionalmente e experimentalmente em RDEs são significativamente diferentes, possivelmente devido à vorticidade resultante de interações entre ondas de detonação, zonas de deflagração, entre outras hipóteses que ainda não foram analisadas. O desenvolvimento de simulações numéricas da combustão não pré-misturada de RDEs também será relevante, nas quais os efeitos viscosos deverão exercer uma maior influência na qualidade da mistura de reagentes, um dos fatores essenciais à estabilidade das ondas de detonação que, consequentemente, influencia o desempenho do motor.

O processo fundamental da detonação rotativa é compreendido quando se “filtram” oscilações em torno de uma média definida pela termodinâmica em escoamento permanente, como as ondas de choque transversais secundárias. Contudo, a iniciação e propagação autossustentada da detonação são evidenciadas pelo desenvolvimento espontâneo da estrutura celular que é destruída com o amortecimento das ondas transversais. Por outro lado, os esforços de atrito que se verificam nas interações de choques transmitem a vorticidade que pode gerar misturas turbulentas na zona de reação com o transporte de radicais livres. Desta forma, iniciam-se reações químicas sem a necessidade de dissociação térmica de moléculas por aquecimento adiabático causado pela frente de choque estabelecido no modelo ZND unidimensional, que não considera interseções de choques. Portanto, a estrutura instável parece ser essencial para a propagação autossustentada de uma detonação. Assim, futuramente, é relevante o desenvolvimento de modelos de turbulência que incorporem interações de choque, para a descrição da zona de reação de detonações reais, em vez da visão tradicional do modelo laminar ZND. Contudo, o modelo ZND continua a ser importante como um modelo de análise da estrutura da detonação. Os efeitos dos

pontos triplos nas características da onda ainda requerem uma investigação mais aprofundada e completa. Uma teoria quantitativa sobre a estabilidade da detonação será uma investigação futura essencial para a melhor compreensão deste fenómeno instável a fim de auxiliar o desenvolvimento do projeto do RDE e tornar viável e vantajosa a sua aplicação em sistemas propulsivos reais.

Bibliografia

- [1] Nordeen, Craig A.. “Thermodynamics of a Rotating Detonation Engine”. Doctoral Dissertations. 277, 2013.
- [2] Cocks, Peter A.; Holley, Adam T.; Greene, Christopher B.; Haas, Martin. “Development of a High Fidelity RDE Simulation Capability”. *AIAA 2015-1823. 53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting* (2015). <https://doi.org/10.2514/6.2015-1823>.
- [3] Versteeg, H. K.; Malalasekera, W.. “An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method”. Pearson Prentice Hall, 2nd edition, 2007.
- [4] White, Frank M.. “Mecânica dos Fluidos”. McGraw-Hill, 6th edition, 2011.
- [5] Lee, John H. S.. “The Detonation Phenomenon”. Cambridge University Press, 2008.
- [6] Turns, Stephen R.. “An Introduction to Combustion: Concepts and Applications”. McGraw-Hill, 2nd edition, 2000.
- [7] Çengel, Yunus A.; Boles, Michael A.. “Thermodynamics: An Engineering Approach”. McGraw-Hill, 5th edition, 2005.
- [8] André Silva. Diapositivos de apoio à unidade curricular Turbulência e Combustão, lecionada na UBI, 2022.
- [9] Chiodi, Marco.. “An Innovative 3D-CFD-Approach towards Virtual Development of Internal Combustion Engines”. Vieweg + Teubner Verlag, 2011.
- [10] Shaw, Ian J; *et al.* “A Theoretical Review of Rotating Detonation Engines”. McGraw-Hill, em *Direct Numerical Simulations - An Introduction and Applications*. IntechOpen, 2021. <https://doi.org/10.5772/intechopen.90470>.
- [11] Anand, Vijay; Gutmark, Ephraim. “Rotating detonation combustors and their similarities to rocket instabilities”. *Progress in Energy and Combustion Science* 73 (2019): 182-234. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2019.04.001>.
- [12] Francisco Brójo. Diapositivos de apoio às unidades curriculares Propulsão de Aeronaves I e II, e Voo de Alta Velocidade, lecionada na UBI, 2022.
- [13] Bussing, Thomas R. A.; Pappas, George. “An Introduction to Pulse Detonation Engines”. *AIAA 1994-263. 32nd Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (1994). <https://doi.org/10.2514/6.1994-263>.
- [14] Wintenberger, E.; Shepherd, J. E.. “Stagnation Hugoniot Analysis for Steady Combustion Waves in Propulsion Systems”. *Journal of Propulsion and Power* 22 4 (2006): 835-844. <https://doi.org/10.2514/1.12779>.
- [15] Daniau, E.; Falempin, F.; Zhdan, S.. “Pulsed and Rotating Detonation Propulsion Systems: First Step Toward Operational Engines”. *AIAA/CIRA 13th International Space Planes and Hypersonics Systems and Technologies Conference* (2012). <https://doi.org/10.2514/6.2005-3233>.
- [16] Zhou Rui; Wu Dan; Wang Jianping. “Progress of continuously rotating detonation engines”. *Chinese Journal of Aeronautics* 29 1 (2016): 15-29. <https://doi.org/10.1016/j.cja.2015.12.006>.

- [17] Liu, Z.; Nagano, S.; Itoh, S.. "Overdriven detonation phenomenon in high explosive". *AIP Conference Proceedings* 505 (2000): 227-230. <https://doi.org/10.1063/1.1303462>.
- [18] Brederode, Vasco de. "Aerodinâmica Incompressível: Fundamentos". IST Press, 2014.
- [19] CFD Experts Simulate the Future. "Ansys Fluent Theory Guide". Ansys, 2021.
- [20] Brederode, Vasco de. "Aerodinâmica Incompressível: Fundamentos". IST Press, 2014.
- [21] Scaled Composites Long-EZ "Borealis". National Museum of The United States Air Force, 2023. Disponível em: [Scaled Composites Long-EZ "Borealis" > National Museum of the United States Air Force™ > Display \(af.mil\)](#). Último acesso em 11/2023.
- [22] Schwer, Douglas A.; Kailasanath, K.. "Numerical Investigation of Rotating Detonation Engines". *46th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit* (2010). <https://doi.org/10.2514/6.2010-6880>.
- [23] Lu, Frank K.; Braun, Eric M.; Massa, Luca; Wilson, Donald R.. "Rotating Detonation Wave Propulsion: Experimental Challenges, Modeling, and Engine Concepts (Invited)". *47th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit* (2011).
- [24] Debnath Pinku; Pandey, K. M.. "Computational Study of Deflagration to Detonation Transition in Pulse Detonation Engine Using Shchelkin Spiral". *Applied Mechanics and Materials* 772 (2015): 136-140. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMM.772.136>.
- [25] Teasley, Thomas W.; Protz, Christopher S.; Larkey, Andrew P.; Williams, Benjamin B.; Gradl, Paul R.. "A Review Towards the Design Optimization of High Performance Additively Manufactured Rotating Detonation Rocket Engine Injectors,". *AIAA 2021-3655. AIAA Propulsion and Energy 2021 Forum* (2021). <https://doi.org/10.2514/6.2021-3655>
- [26] Schnabel, Mark C.; Brophy, Christopher M.. "Pressure Distribution and Performance Impacts of Aerospike Nozzles on Rotating Detonation Engines". *AIAA 2018-1626. 2018 AIAA Aerospace Sciences Meeting* (2018). <https://doi.org/10.2514/6.2018-1626>.
- [27] Schwer, Douglas A.; Johnson, Ryan; Kercher, Andrew; Kessler, David A.; Corrigan, Andrew T.. "Numerical Investigation of Centerbody-less Rotating Detonation Combustors". *AIAA 2020-2158. AIAA Scitech 2020 Forum* (2020). <https://doi.org/10.2514/6.2020-2158>.
- [28] Harroun, Alexis; Heister, Stephen D.; Sardeshmukh, Swanand V.; Ruf, Joseph H.. "Effect of Aerospike Plug Nozzle Design on Rotating Detonation Engine Performance for Rocket Applications". *AIAA 2019-0197. AIAA Scitech 2019 Forum* (2019). <https://doi.org/10.2514/6.2019-0197>.
- [29] Chung, Jackson. NASA Successfully Tests Full-Scale Rotating Detonation Rocket Engine (RDRE), Could be Used for Future Deep Space Missions. Techeblog, 2023. Disponível em: [NASA Successfully Tests Full-Scale Rotating Detonation Rocket Engine \(RDRE\), Could be Used for Future Deep Space Missions - TechEBlog](#). Último acesso em 11/2023.
- [30] Li, Jiun-Ming; Teo, Chiang Juay; Khoo, Boo Cheong; Wang, Jian-Ping; Wang, Cheng. "Detonation Control for Propulsion". Springer, 2018. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-68906-7>.
- [31] Sun, Zhipeng; Huang, Yue; Luan, Zhenye; Gao, Sijia; You, Yancheng. "Three-dimensional simulation of a rotating detonation engine in ammonia/hydrogen mixtures and oxygen-

- enriched air”. *International Journal of Hydrogen Energy* 48 12 (2023): 4891-4905. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.11.029>.
- [32] Martins, Maria da Conceição Rodrigues. “3D CFD Combustion Simulation of a Four-Stroke SI opposed Piston IC Engine”. Tese de Mestrado, UBI, 2020.
- [33] Braun, Eric M.; Lu, Frank K.; Wilson, Donald R.; Camberos, José A.. “Airbreathing rotating detonation wave engine cycle analysis”. *Aerospace Science and Technology* 27 1 (2013): 201-208. <https://doi.org/10.1016/j.ast.2012.08.010>.
- [34] Bykovskii, Fedor A.; Zhdan, Sergey A.; Vedernikov, Evgenii F.. “Continuous Spin Detonations”. *Journal of Propulsion and Power* 22 6 (2006): 1204-1216. <https://doi.org/10.2514/1.17656>.
- [35] Zhou, R.; Wang, J.-P.. “Numerical investigation of shock wave reflections near the head ends of rotating detonation engines”. *Shock Waves* 23 (2013): 461-472. <https://doi.org/10.1007/s00193-013-0440-0>.
- [36] Sistema de coordenadas cilíndricas. UFRGS, 2023. Disponível em: [Sistema de coordenadas cilíndricas \(ufrgs.br\)](https://www.ufrgs.br/sistema-de-coordenadas-cilindricas). Último acesso em 11/2023.
- [37] Schwer, Douglas A.; Kailasanath, K.. “Modeling Exhaust Effects in Rotating Detonation Engines”. *48th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit* (2012). <https://doi.org/10.2514/6.2012-3943>.
- [38] Wang, Li; Mavriplis, Dimitri J.. “Implicit Solution of the Unsteady Euler Equations for High-Order Accurate Discontinuous Galerkin Discretizations”. *Journal of Computational Physics* 225 2 (2007): 1994-2015. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2007.03.002>.
- [39] Schwer, Douglas A.; Kailasanath, Kailas. “Physics of Heat-Release in Rotating Detonation Engines”. *AIAA 2015-1602. 53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting* (2015). <https://doi.org/10.2514/6.2015-1602>.
- [40] Schwer, Douglas A.; Corrigan, Andrew; Taylor, Brian; Kailasanath, Kailas. “On Reducing Feedback Pressure in Rotating Detonation Engines”. *AIAA 2013-1178. 51st AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition* (2013). <https://doi.org/10.2514/6.2013-1178>.
- [41] Schwer, Douglas A.; Kailasanath, Kailas. “Effect of Low Pressure Ratio on Exhaust Plumes of Rotating Detonation Engines”. *AIAA 2014-3901. 50th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference* (2014). <https://doi.org/10.2514/6.2014-3901>.
- [42] Voitsekhevskii, B.V.; Mitrofanov, V.V.; Topchian, M.E.. “Investigation of the structure of detonation waves in gases”. *Symposium (International) on Combustion* 12 1 (1969): 829-837. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(69\)80464-9](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(69)80464-9).
- [43] Wolanski, Piotr. “Application of the Continuous Rotating Detonation to Gas Turbine”. *Applied Mechanics and Materials* 782 (2015): 3-12. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMM.782.3>.
- [44] Glenn Research Center. Rocket Propulsion. NASA, 2023. Disponível em: [Rocket Propulsion \(nasa.gov\)](https://www.nasa.gov/rocket-propulsion). Último acesso em 11/2023.

- [45] Gaillard, T.; Davidenko, D.; Dupoirieux, F.. “Numerical simulation of a Rotating Detonation with a realistic injector designed for separate supply of gaseous hydrogen and oxygen”. *Acta Astronautica* 141 (2017): 64-78. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2017.09.011>.
- [46] Goto, Keisuke; Matsuoka, Ken; *et al.* “Space Flight Demonstration of Rotating Detonation Engine Using Sounding Rocket S-520-31”. *Journal of Spacecraft and Rockets* 60 1 (2023): 273-285. <https://doi.org/10.2514/1.A35401>.
- [47] The World’s First Space Flight for the Rotating Detonation Engine, and A Glimpse at A New Sample Return Capsule. Cosmos, 2023. Disponível em: [The world’s first space flight for the rotating detonation engine, and a glimpse at a new sample return capsule – Cosmos \(jaxa.jp\)](#). Último acesso em 11/2023.
- [48] Osorio, Ray. NASA Validates Revolutionary Propulsion Design for Deep Space Missions. NASA, 2023. Disponível em: [NASA Validates Revolutionary Propulsion Design for Deep Space Missions - NASA](#). Último acesso em 11/2023.
- [49] Blazek, Jiri. “Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications”. Elsevier, 3th edition, 2015.
- [50] Folsiak, Michal; Kobiera, Arkadiusz; Wolanski, Piotr. “Rotating Detonation Engine Simulations in-House Code – Reflops”. *Transactions of the Institute of Aviation* 207 (2010).
- [51] Paxson, Daniel E.. “Numerical Analysis of a Rotating Detonation Engine in the Relative Reference Frame”. AIAA 2014-0284. 52nd Aerospace Sciences Meeting (2014). <https://doi.org/10.2514/6.2014-0284>.
- [52] Zhdan, S. A.; Bykovskii, F. A.; Vedernikov, E. F.. “Mathematical Modeling of a Rotating Detonation Wave in a Hydrogen–Oxygen Mixture”. *Combustion, Explosion, and Shock Waves* 43 (2007): 449-459. <https://doi.org/10.1007/s10573-007-0061-y>.
- [53] Hayashi, A. Koichi; Kimura, Yoichiro; *et al.* “Sensitivity Analysis of Rotating Detonation Engine with a Detailed Reaction Model”. *47th AIAA Aerospace Sciences Meeting including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition* (2009). <https://doi.org/10.2514/6.2009-633>.
- [54] Ludovino, David Miguel Monteiro. “A Influência da Existência de Nervuras num Processo de DDT”. Tese de Mestrado, UBI, 2017.
- [55] Tennekes, H.; Lumley, J. L.. “A First Course in Turbulence”. The MIT Press, 1972.
- [56] ANSYS, Inc., ANSYS Fluent User's Guide. Release 2020 R2, July 2020
- [57] Domingues, Rafael Silva. “CFD Analysis of the Combustion of Hydrogen Fuel on a CFM56-3 Combustor”. Tese de Mestrado, UBI, 2022.