

Miguel Angel Tupa Walter

**Estudo numérico da
estabilização de ondas de
detonação por rampas de
comprimento finito**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA
MECÂNICA**

**Programa de Pós-graduação em
Engenharia Mecânica**

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2004

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA
DO RIO DE JANEIRO



Miguel Angel Tupa Walter

**Estudo numérico da estabilização de ondas
de detonação por rampas de comprimento
finito**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada como requisito parcial para
obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-
graduação em Engenharia Mecânica do Departamento de
Engenharia Mecânica da PUC-Rio

Orientador: Prof. Luís Fernando Figueira da Silva

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2004



Miguel Angel Tupa Walter

**Estudo numérico da estabilização de ondas
de detonação por rampas de comprimento
finito**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica do Departamento de Engenharia Mecânica do Centro Técnico Científico da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Luís Fernando Figueira da Silva

Orientador

Departamento de Engenharia Mecânica — PUC-Rio

Prof. Angela Ourivio Nieckele

Departamento de Engenharia Mecânica PUC-Rio

Prof. João Luiz Filgueiras de Azevedo

Instituto de Aeronáutica e Espaço

Centro Técnico Aeroespacial

Prof. Demétrio Bastos Netto

Laboratório Associado de Combustão e Propulsão
do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais

Prof. José Eugenio Leal

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico —
PUC-Rio

Rio de Janeiro, 13 de Fevereiro de 2004

Tupa Walter, Miguel Angel

Estudo numérico da estabilização de ondas de detonação por rampas de comprimento finito / Miguel Angel Tupa Walter ; orientador: Luís Fernando Figueira da Silva. - Rio de Janeiro : PUC-Rio, Departamento de Engenharia Mecânica, 2004.

89 f. : il. ; 30 cm

Dissertação (mestrado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica.

Inclui referências bibliográficas

1. Engenharia Mecânica – Teses. 2. Ondas de detonação. 3. Combustão em escoamento supersônico. 4. Malhas não estruturadas. 5. Dinâmica dos fluidos computacional. I. Silva, Luís Fernando Figueira da. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. III. Título.

CDD: 621

A mi abuela Isabel, a quien mi ausencia no
permitió darle el último adiós.

Agradecimentos

À minha mãe e meu irmão, por toda a compreensão e apoio durante toda esta minha ausência de casa.

À Farperj, à Capes, pelas bolsas concedidas para o desenvolvimento deste trabalho.

Ao meu orientador, Professor Luís Fernando, pela ajuda na realização deste trabalho durante estes dois anos.

Resumo

Tupa Walter, Miguel Angel; Figueira da Silva, Luís Fernando. **Estudo numérico da estabilização de ondas de detonação por rampas de comprimento finito.** Rio de Janeiro, 2004. 89p. Dissertação de Mestrado — Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Nesta dissertação apresentam-se os resultados de um estudo numérico da interação entre uma onda de detonação oblíqua forte estabilizada pela rampa de um diedro e o leque expansão gerado pela deflexão da superfície do diedro. Neste estudo foi utilizado um código numérico que resolve as equações que governam o escoamento de uma mistura reativa de hidrogênio e ar. Estas equações são discretizadas por um procedimento do tipo volumes finitos centrado na célula de cálculo, segundo um esquema que leva em conta as velocidades características do escoamento. A presença de ondas de choque e detonação requer o uso de procedimentos de adaptação de malha. Neste trabalho procedimentos de enriquecimento e empobrecimento de malha são usados, o primeiro para melhorar a resolução das regiões do escoamento nas quais ocorrem grandes gradientes das propriedades, enquanto o segundo para retirar pontos da malha em locais onde os gradientes são pequenos. Mostra-se que este procedimento de empobrecimento, desenvolvido neste trabalho, resulta em ganhos no tempo de processamento.

Na determinação dos parâmetros que levem a obter ondas do tipo Chapman-Jouguet como resultado da interação, inicialmente é realizada uma análise quase uni-dimensional baseada nos diagramas das polares de detonação e nos diagramas do tempo de indução da mistura reativa. Em seguida, os resultados das simulações numéricas mostram que a obtenção de uma detonação do tipo Chapman-Jouguet é possível para valores intermediários do ângulo diedro, dentro da faixa das detonações estáveis. Quando o ângulo do diedro é próximo ao ângulo máximo permitido para detonações estáveis obteve-se o desacoplamento da onda de detonação, com a subsequente extinção do processo de combustão.

Palavras-chave

Ondas de detonação; Combustão em escoamento supersônico; Malhas não estruturadas; Adaptação de malha, Dinâmica dos fluidos computacional.

Abstract

Tupa Walter, Miguel Angel; Figueira da Silva, Luís Fernando.
Numerical Study of Detonation Stabilization by Finite Length Ramps. Rio de Janeiro, 2004. 89p. MSc. Dissertation — Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

The resulting structure generated by the interaction between the leading oblique detonation wave stabilized by a ramp and the expansion fan generated by a sudden deflection of the wedge surface is studied numerically. Simulations are carried out using a computer code that solves balance equations using an upwind cell-centred finite volume method on unstructured triangular meshes.

The presence of shock waves and detonation waves on the flowfield requires the use of adaptive mesh techniques. The present work uses refinement and coarsening processes of the computational mesh. The former process improves the resolution in regions where the gradients of flowfield properties are high, while the latter one coarsens the mesh in regions where the solution varies smoothly. It is demonstrated that the coarsening process that was implemented in this work leads to a reduction of computational time.

In order to obtain parameters that lead to Chapman-Jouguet detonations as the result of the interaction, a quasi-one dimensional analysis of the combustion process is presented in terms of shock and detonation wave polars and of the induction time of the chemical kinetic mechanism. Computations show that a Chapman-Jouguet oblique detonation wave may be obtained for intermediate wedge angles within the range of stable detonations. For wedge angles near to the maximum angle that supports stable detonations, decoupling of the oblique detonation wave is obtained which eventually leads to the extinction of the combustion process.

Keywords

Detonation waves; Supersonic combustion; Unstructured meshes; Adaptive meshes; Computational fluids dynamics

Conteúdo

1	Introdução	15
2	Formulação Matemática e Método Numérico	21
2.1	Equações Governantes	21
2.2	Condições de Contorno	25
2.3	Método Numérico	26
2.4	Adaptação da Malha Computacional Procedimento de Refinamento	32
3	Adaptação da Malha Computacional Procedimento de Empobrecimento	34
3.1	Considerações Iniciais	34
3.2	Procedimento de Empobrecimento	36
3.3	Testes e Resultados	40
4	Interação entre uma Onda de Detonação Oblíqua e um Leque de Expansão	46
4.1	Estrutura da onda de detonação estabilizada por um diedro	46
4.2	Interação onda de detonação - expansão	49
4.3	Análise do Tempo de Indução e das Polares de Detonação	52
4.4	Resultados das Simulações Numéricas	54
5	Conclusões	71
	Bibliografia	73
A	Resultados Complementares	78
B	Iniciação de uma ODO para valores de ângulo do diedro próximos ao valor correspondente à detonação Chapman-Jouguet.	86

Lista de Figuras

1.1	Esquema representativo da iniciação de uma onda de detonação oblíqua por um diedro e sua interação com um leque de expansão.	16
1.2	Esquema Representativo de um estato jato (<i>Ramjet</i>) [4].	17
1.3	Esquema representativo de um estato jato supersônico (<i>Scramjet</i>) [4].	17
1.4	Esquema representativo de um motor a detonação oblíqua (<i>ODWE</i>) [4].	18
1.5	Esquema representativo de um acelerador a efeito estato-jato (<i>Ram accelerator</i>) [4].	19
2.1	Condições do contorno e domínio computacional.	26
2.2	Esquema representativo do volume genérico “i”	29
3.1	Esquema da técnica de empobrecimento de malha por troca de arestas (<i>diagonal swap</i>).	35
3.2	Esquema da técnica de empobrecimento de malha por colapso de arestas.	36
3.3	Representação das quatro diferentes possibilidades de colapso de arestas.	37
3.4	Domínio de influência do colapso da aresta.	38
3.5	Esquema representativo de volumes com diferentes valores do parâmetro Q_{Δ} .	40
3.6	Malha e campo de pressão (atm) para o caso de um escoamento de ar sobre um diedro, $\delta = 20^{\circ}$, $M_{\infty} = 2,25$, $T_{\infty} = 300$ K e $p_{\infty} = 1$ atm.	42
3.7	Malha e campo de pressão (atm) para o caso de um escoamento de ar sobre um diedro de rampa finita, $\delta = 40^{\circ}$, $M_{\infty} = 8$, $T_{\infty} = 300$ K e $p_{\infty} = 1$ atm.	43
3.8	Contornos de densidade (g/cm^3), temperatura (K) e pressão (atm) ao longo da linha “0” (diedro de rampa finita (fig. 3.7), $\delta = 40^{\circ}$, $M_{\infty} = 8$, $T_{\infty} = 300$ K e $p_{\infty} = 1$ atm).	44
3.9	Resíduos máximos da densidade correspondentes ao caso da fig. 3.6.	45
3.10	Resíduos máximos da densidade correspondentes ao caso da fig. 3.7.	45
4.1	Esquema representativo da transição OCO/ODO.	47
4.2	Polares de choque e detonação para $M_{\infty}=8$, $T_{\infty}=300$ K e $p_{\infty}=0,75$ atm.	48
4.3	Esquema representativo da interação ODO-expansão.	50
4.4	Imagem schlieren da estabilização da combustão sobre um projétil cônico (Lehr [10]).	51
4.5	Imagem schlieren da iniciação de uma ODO CJ (Kasahara [41]).	51

- 4.6 Linhas de iso-tempo de indução (s) e linhas dos estados a jusante da ODO precursora das ODO estáveis ($p^*=1$ atm), em função da temperatura (K) e da pressão (atm). $\nabla - \delta = \delta_{max}$; $\Delta - \delta = \delta_{cj}$. 53
- 4.7 Contornos de temperatura (K) e densidade (g/cm^3), para $\delta = 30^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 275$ K e $p_\infty = 0,75$ atm. 57
- 4.8 Contornos de pressão (atm) e da característica esquerda C^+ , para $\delta = 30^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 275$ K e $p_\infty = 0,75$ atm. 58
- 4.9 Contornos da fração de massa dos radicais OH e H_2O , para $\delta = 30^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 275$ K e $p_\infty = 0,75$ atm. 59
- 4.10 Contornos de pressão (atm) (preto) e fração de massa do OH (azul), para $\delta = 30^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 275$ K e $p_\infty = 0,75$ atm. 60
- 4.11 Zona ampliada da transição OCO/ODO, mostrando os contornos de pressão (atm) e fração de massa do OH (fig.4.10). 60
- 4.12 Evolução de ρ (g/cm^3), p (atm), OH e T (K) ao longo da linha de corrente "0" (fig.4.10). 61
- 4.13 Evolução de ρ (g/cm^3), p (atm), OH e T (K) ao longo da linha de corrente "I" (fig.4.10). 61
- 4.14 Contornos de temperatura (K) e densidade (g/cm^3), para $\delta = 40^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 300$ K e $p_\infty = 0,75$ atm. 65
- 4.15 Contornos de pressão (atm) e da característica esquerda C^+ , para $\delta = 40^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 300$ K e $p_\infty = 0,75$ atm. 66
- 4.16 Contornos da fração de massa das espécies químicas OH e H_2O , para $\delta = 40^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 300$ K e $p_\infty = 0,75$ atm. 67
- 4.17 Contornos de pressão (atm) (preto) e fração de massa do OH (azul), para $\delta = 40^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 300$ K e $p_\infty = 0,75$ atm. 68
- 4.18 Zona ampliada da transição OCO/ODO, mostrando os contornos de pressão (atm) e fração de massa do OH (fig.4.17). 68
- 4.19 Zona ampliada da transição OCO/ODO, mostrando os contornos de pressão (atm) e fração de massa do OH (fig.4.17). 69
- 4.20 Evolução de ρ (g/cm^3), p (atm), OH e T (K) ao longo do linha de corrente 0 (fig. 4.17). 69
- 4.21 Evolução de ρ (g/cm^3), p (atm), OH e T (K) ao longo do linha de corrente I (fig. 4.17). 70
- 4.22 Evolução de ρ (g/cm^3), p (atm), OH e T (K) ao longo do linha de corrente II (fig. 4.17). 70
- A.1 Contornos de temperatura (K) e densidade (g/cm^3), para $\delta = 30^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 300$ K e $p_\infty = 0,75$ atm. 79
- A.2 Contornos de pressão (atm) e da característica esquerda C^+ , para $\delta = 30^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 300$ K e $p_\infty = 0,75$ atm. 80
- A.3 Contornos da fração de massa dos radicais OH e H_2O , para $\delta = 30^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 300$ K e $p_\infty = 0,75$ atm. 81
- A.4 Contornos de temperatura (K) e densidade (g/cm^3), para $\delta = 40^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 275$ K e $p_\infty = 0,75$ atm. 82
- A.5 Contornos de pressão (atm) e da característica esquerda C^+ , para $\delta = 40^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 275$ K e $p_\infty = 0,75$ atm. 83

A.6	Contornos da fração de massa das espécies químicas OH e H ₂ O, para $\delta = 40^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 275$ K e $p_\infty = 0,75$ atm.	84
A.7	Contornos de pressão (atm) (preto) e fração de massa do OH (azul), para $\delta = 40^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 275$ K, $p_\infty = 0,75$ atm.	85
A.8	Zona ampliada da transição OCO/ODO, mostrando os contornos de pressão (atm) e fração de massa do OH (fig.A.7).	85
B.1	Contornos de pressão (atm), para $\delta = 11^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 600$ K e $p_\infty = 2,5$ atm.	87
B.2	Contornos de temperatura (K) e densidade (g/cm^3) para $\delta = 11^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 600$ K e $p_\infty = 2,5$ atm.	88
B.3	Contornos da fração de massa das espécies químicas OH e H ₂ O para $\delta = 11^\circ$, $M_\infty = 8$, $T_\infty = 600$ K e $p_\infty = 2,5$ atm.	89

Lista de Tabelas

2.1	Mecanismo de Balakrishnan e Williams [23] para combustão de H ₂ -ar.	24
2.2	Condições do contorno.	26
4.1	Comprimentos de indução e raios de curvatura	64

Lista de Símbolos

Caracteres Latinos

A	Fator pré-exponencial (Lei de Arrhenius)
a	Velocidade do som
C	Constante que exprime o valor de qualidade mínima
\mathcal{C}	Operador convectivo
C_{pi}	Calor específico a pressão constante da espécie química i
E	Energia total por unidade de massa
E_a	Energia de ativação
e	Energia interna da mistura
e_i	Energia interna da espécie química i
\mathbf{F}, \mathbf{G}	Vetores de fluxo
h_i	Entalpia da espécie química i
k_k^f	Constante de avanço direta para a reação k
k_k^b	Constante de avanço inversa para a reação k
k_k^{eq}	Constante de equilíbrio para a reação k
M	Número de Mach
N	Número de espécies químicas
n	Normal
p	Pressão
\mathbf{Q}	Vetor dos termos de produção química
Q_Δ	Medida que exprime uma ideia de qualidade dos volumes
\mathcal{R}	Constante universal dos gases
S_f	Operador da dinâmica dos fluidos
S_Q	Operador da parte química
T	Temperatura
t	Tempo
t_i	Tempo de indução da explosão térmica adiabática
t_r	Tempo de reação da explosão térmica adiabática
\mathbf{U}	Vetor das variáveis conservadas
u, v	Componentes cartesianas da velocidade
V_i	Volume da célula de cálculo i
Z	Número de reações químicas
W	Massa molecular

x, y Coordenadas cartesianas
 Y_i Fração de massa de espécie química i

Caracteres Gregos

δ Semi ângulo do diedro
 β Expoente da temperatura (Lei de Arrhenius)
 Δ Incremento finito
 θ Ângulo da onda de choque oblíqua ou da onda de detonação oblíqua
 ν Coeficientes estequiométricos
 ρ Densidade
 χ Símbolo químico de uma espécie química
 $[\chi]$ Concentração de uma espécie química
 $\dot{\omega}$ Taxa de produção molar

Subscrito

∞ Condições na corrente livre
 s Condições à jusante da onda de choque precursora da ODO
 L Estado à esquerda da face
 R Estado à direita da face