



## **SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE ESCOAMENTO HIPERSÔNICO SOBRE CORPOS DE REENTRADA**

**Carlos Alberto Rocha Pimentel**

Universidade do Vale do Paraíba – UNIVAP  
São José dos Campos - SP 12244-000 – BRAZIL  
cearapim@univap.br

**Heidi Korzenowski**

Universidade do Vale do Paraíba – UNIVAP  
São José dos Campos - SP 12244-000 – BRAZIL  
heidi@univap.br

***Resumo.** O trabalho a ser desenvolvida tem o objetivo calcular o campo de escoamento em regime hipersônico em torno de corpos de reentrada, considerando os efeitos das reações químicas que ocorrem devido ao alto número de Mach. Para a obtenção do campo de escoamento serão utilizadas as equações de Euler em um contexto axissimétrico. O esquema de discretização espacial escolhido para este trabalho é o esquema de separação de vetores de fluxos de van Leer, de segunda ordem de precisão. A marcha no tempo será realizada por um esquema Runge-Kutta, explícito, com cinco estágios e segunda ordem de precisão temporal. As equações serão discretizadas num contexto de volumes finitos, utilizando malhas não estruturadas formadas por elementos triangulares. Nas simulações faz-se necessário a utilização de um mecanismo de cinética química detalhado, que considera as seguintes espécies químicas: N, O<sub>2</sub>, O, N, NO, e suas devidas reações de combinação e dissociação. O uso destes mecanismos químicos é necessário para obtenção de predições corretas para as diferentes escalas de tempo e/ou comprimento, presentes no campo de escoamento reativo, bem como suas variações com as condições de fluxo. Serão apresentados como resultados a distribuição e os contornos de número de Mach, pressão, temperatura para os números de Mach 8 e 9.*

***Palavras-chave:** escoamento reativo, escoamento hipersônico, volumes finitos, malhas não estruturadas.*

### **1. INTRODUÇÃO**

Ao submeter a reentrada na atmosfera terrestre ou em qualquer outro planeta, os veículos e as cápsulas de reentrada em geral, têm a sua estrutura submetidas a um forte aquecimento decorrente ao revestimento de plasma formado devido a alta temperatura do campo de escoamento em torno destes. O revestimento de plasma é formado pela colisão do veículo com o ar ambiente, especialmente nas superfícies perpendiculares à direção do movimento desses veículos. Nesses pontos de estagnação, o ar é comprimido bruscamente, com relação ao veículo, e a energia cinética do veículo é transformada em energia térmica, que é transferida para as moléculas do gás. A temperatura do gás resultante desta transformação é alta o suficiente para causar uma excitação vibracional no interior das moléculas, causando dissociação e ionização nos gases que é composta a atmosfera. O fluxo de plasma resultante (gás ionizado, porém macroscopicamente neutro) ao redor

do veículo, nos pontos de estagnação, produz diferentes regiões com diferentes estados de plasma, dependendo da forma e orientação do veículo (Anderson, 1989).

Para a determinação da alta temperatura inerente a este tipo de escoamento é necessário considerar que, sobre o veículo exista um escoamento de gases reagindo quimicamente (efeito de gás real). Portanto, os valores das propriedades termodinâmicas são dependentes da composição química do qual é formada a atmosfera.

Para a simulação de gás real é essencial a utilização de um mecanismo de cinética química detalhado. O esquema de cinética química a ser utilizado considera as seguintes espécies químicas:  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $O$ ,  $N$ ,  $NO$  e suas devidas reações de combinação, dissociação. O uso destes mecanismos químicos é necessário para obtenção de previsões corretas para as diferentes escalas de tempo e/ou comprimento, presentes no campo de escoamento reativo, bem como suas variações com as condições de fluxo.

O esquema de discretização espacial a ser utilizado é o esquema numérico de segunda ordem de van Leer (van Leer, 1995), discretizado num contexto de malhas não estruturadas utilizando volumes finitos. Serão utilizadas as equações de Euler em um contexto axissimétrico para simulação do escoamento com reação química. A marcha no tempo foi feita pela utilização de um esquema Runge-Kutta de 5 estágios, explícito e de segunda ordem de precisão (Mavriplis, 1988).

## 2. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

As equações compressíveis de Euler (Pimentel, 2000), em duas dimensões podem ser escritas como

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} = \Omega, \quad (1)$$

onde E e F são vetores de fluxo convectivo, Q é o vetor de variáveis conservadas. Se as equações são discretizadas considerando-se um procedimento de volumes finitos *cell centered*, as variáveis do escoamento são atribuídas a cada volume de controle e representam assim um valor médio sobre cada volume (Korzenowski, 1998). Neste contexto, as equações de Euler, na forma integral, passam a ser escritas como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (V_i Q_i) + \int_S [E_e dy - F_e dx] = \Omega, \quad (2)$$

onde V representa a área do volume de controle e S seu contorno.

Os vetores das variáveis conservadas, Q, e, os vetores de fluxo E, F são definidos como

$$Q = [\rho, \rho u, \rho v, \rho \varepsilon, \rho Y_1, \dots, \rho Y_{K-1}]^T, \quad E = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u v \\ \rho Y_1 u \\ \vdots \\ \rho Y_{K-1} u \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho \varepsilon + p) \\ \rho Y_1 v \\ \vdots \\ \rho Y_{K-1} v \end{bmatrix} \quad (3)$$

com  $p$ ,  $Y_k$  e  $\varepsilon$  dados por

$$Y_k = 1 - \sum_{k=1}^{K-1} Y_k, \quad p = \rho RT \sum_{k=1}^K \frac{Y_k}{W_k}, \quad \varepsilon = \sum_{k=1}^K Y_k e_k + \frac{1}{2}(u^2 + v^2), \quad (4)$$

onde

$$e_k = h_k^0 + \int_{T_0}^T c_{pk} dT - \frac{P}{\rho} \quad (5)$$

Nestas equações  $\mathcal{E}$  é a energia total por unidade de massa,  $e$  é a energia interna,  $R$  é a constante universal dos gases. A energia interna, a entalpia no estado padrão e o calor específico a pressão constante por unidade de massa das  $k$  espécies são denotadas  $e_k$ ,  $h_k^0$  e  $c_{pk}$ .  $Y_k$  e  $W_k$  são as frações de massa e o peso molecular das espécies químicas  $k$ , respectivamente.

O mecanismo de cinética química do ar considerado é um mecanismo de cinética química de Gardiner (Hachemin, 1995), dados para cada reação elementar na Tab. (1). Este mecanismo envolve 5 espécies químicas, que são,  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $N$ ,  $O$ ,  $ON$  e 17 reações químicas elementares. As taxas de produção das espécies químicas envolvidas estão de acordo com a lei de Arrhenius, expressa pela equação

$$k = A T^\beta \exp\left(\frac{-E_a}{T}\right), \quad (6)$$

onde  $k$  é a taxa de reação química,  $A$  o fator pré-exponencial,  $T$  a temperatura,  $\beta$  o expoente da temperatura,  $E_a$  a energia de ativação, e  $R$  a constante universal dos gases.

Tabela 1. Reações químicas elementares devido a Gardiner. Unidades: A(m, mol, s) e  $E_a$  (Kelvins)

Reações elementares	A	$\beta$	$E_a$ (Kelvins)
$N_2+N_2=>2N+N_2$	3.7e21	-1.6	113200.
$2N+N_2=>N_2+N_2$	1.08e13	-1.493	100.
$N_2+O_2=>2N+O_2$	1.4e21	-1.6	113200.
$2N+O_2=>N_2+O_2$	3.07e13	-1.493	100.
$N_2+NO=>2N+NO$	1.4e21	-1.6	113200.
$2N+NO=>N_2+NO$	3.07e13	-1.493	100.
$N_2+N=>2N+N$	1.6e22	-1.6	113200.
$2N+N=>N_2+N$	3.51e14	-1.493	100.
$N_2+O=>2N+O$	1.4e21	-1.6	113200.
$2N+O=>N_2+O$	3.07e13	-1.493	100.
$O_2+N_2=>2O+N_2$	3.64e18	-1.0	59380.
$2O+N_2=>O_2+N_2$	1.84e10	-0.714	109.
$O_2+O_2=>2O+O_2$	1.64e19	-1.0	59380.
$2O+O_2=>O_2+O_2$	8.28e10	-0.714	109.
$O_2+NO=>2O+NO$	1.82e18	-1.0	59380.
$2O+NO=>O_2+NO$	9.19e09	-0.714	109.
$O_2+N=>2O+N$	1.82e18	-1.0	59380.
$2O+N=>O_2+N$	9.19e09	-0.714	109.
$O_2+O=>2O+O$	4.56e19	-1.0	59380.
$2O+O=>O_2+O$	2.3e11	-0.714	109.
$NO+N_2=>N+O+N_2$	4.0e20	-1.5	75500.
$N+O+N_2=>NO+N_2$	2.16e19	-1.3217	97.
$NO+O_2=>N+O+O_2$	4.0e20	-1.5	75500.
$N+O+O_2=>NO+O_2$	2.16e19	-1.3217	97.
$NO+NO=>N+O+NO$	8.0e20	-1.5	75500.
$N+O+NO=>NO+NO$	4.32e19	-1.3217	97.
$NO+N=>N+O+N$	8.0e20	-1.5	75500.
$N+O+N=>NO+N$	4.32e19	-1.3217	97.
$NO+O=>N+O+O$	8.0e20	-1.5	75500.
$N+O+O=>NO+O$	4.32e19	-1.3217	97.
$N_2+O=>NO+N$	1.82e14	0.0	38370.

$\text{NO} + \text{N} \Rightarrow \text{N}_2 + \text{O}$	7.35e13	-0.07083	666.
$\text{NO} + \text{O} \Rightarrow \text{O}_2 + \text{N}$	3.8e09	1.0	20820.
$\text{O}_2 + \text{N} \Rightarrow \text{NO} + \text{O}$	4.07e10	0.886	4689.

Todas as propriedades termodinâmicas da mistura reativa são calculadas utilizando o código CHEMKIN-III (Kee, 2000). Este código contém sua própria base de dados termodinâmicos. As propriedades termodinâmicas das espécies químicas, calor específico a pressão constante ( $C_p$ ), entalpia ( $H$ ) e entropia ( $S$ ), vêm das interpolações polinomiais das tabelas termoquímicas do JANNAF. O método de cálculo utilizado pelo CHEMKIN-III é o mesmo do relatório NASA SP-273. Com a hipótese de gás termicamente perfeito, o calor específico a pressão constante e a entalpia não dependem da pressão, e são dependentes unicamente da temperatura. O interesse de um método que utiliza interpolações polinomiais é de economizar o tempo de cálculo computacional, já que a utilização de uma interpolação direta a partir das tabelas de termoquímica tem um custo computacional comparativamente elevado. Portanto, os métodos de cálculo das propriedades termoquímicas que serão apresentadas aqui estão de acordo com o código CHEMKIN-III.

As propriedades termodinâmicas de calor específico a pressão constante  $C_{p_i}$ , entalpia  $H_i$  e entropia  $S_i$  para cada espécie química  $i$  são calculadas em termos de um polinômio, sendo esta função da temperatura. As outras propriedades termodinâmicas da mistura reativa são calculadas em termos destas três propriedades.

### 3. RESULTADOS

As simulações foram realizadas para fluxos hipersônicos em torno do veículo de reentrada SARA, para os números de Mach inicial 8 e 9, considerando gás reativo com 79% de  $\text{N}_2$  e 21% de  $\text{O}_2$ . Para os casos simulados utilizou-se uma malha de 9292 nós e 17999 volumes. As condições iniciais de pressão e temperatura para os casos simulados foram de 0,1847 atm e 300 K, respectivamente.

Na Figura (1) é mostrado o campo de pressão e a distribuição de pressão sobre a parede para número de Mach igual a 9. Observa-se que os contornos de pressão estão bem definidos e que o choque, assim como, a região de estagnação foram bem determinados. No gráfico da distribuição de pressão sobre a parede aparecem algumas oscilações, devido ao fato da malha ser ainda grossa nesta região.

A pressão atrás da onda de choque, obtida através da simulação numérica, para este caso é de 17,66 atm. De acordo com a teoria da dinâmica dos gases (Bertin, 1994) a pressão atrás da onda de choque para este caso é de 17,42 atm. Observa-se uma boa concordância entre os resultados teórico e numérico, onde o erro obtido entre estes valores foi de somente 1,35%.

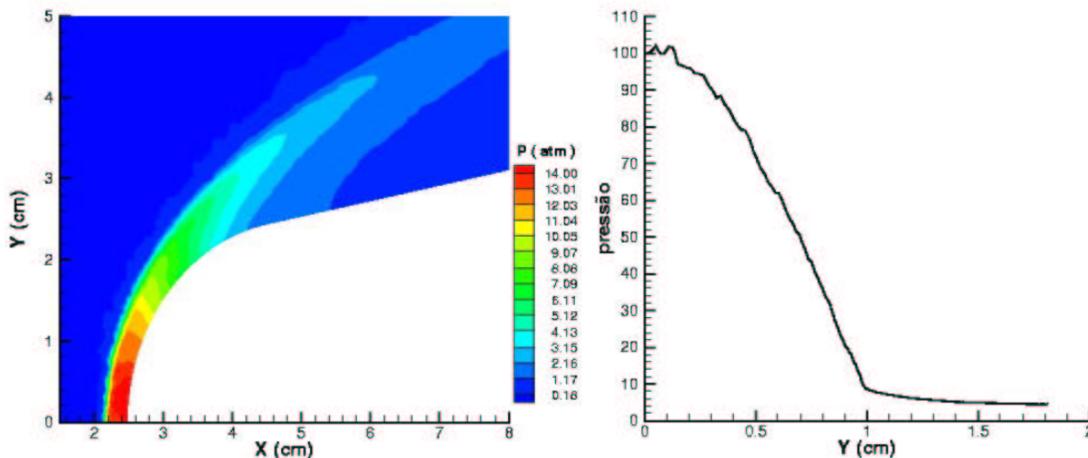


Figura 1. Campo de pressão e a distribuição de pressão sobre a parede para  $M_\infty=9$ .

Apresenta-se na Fig. (2) os contornos de temperatura e a evolução longitudinal das frações de massa na região de estagnação. A temperatura obtida atrás da onda de choque, através da simulação numérica foi de aproximadamente 3564 K. O resultado teórico apresenta um valor de temperatura atrás da onda de choque de 5000 K. Observa-se uma diferença entre os resultados teórico e numérico, com um erro entre os valores de 28,72%. Esta diferença, no caso de escoamento com reação química, deve-se ao fato da temperatura ser menor devido as reações elementares de dissociação absorverem energia. Isto faz com que a temperatura seja menor comparado ao resultado considerando gás perfeito.

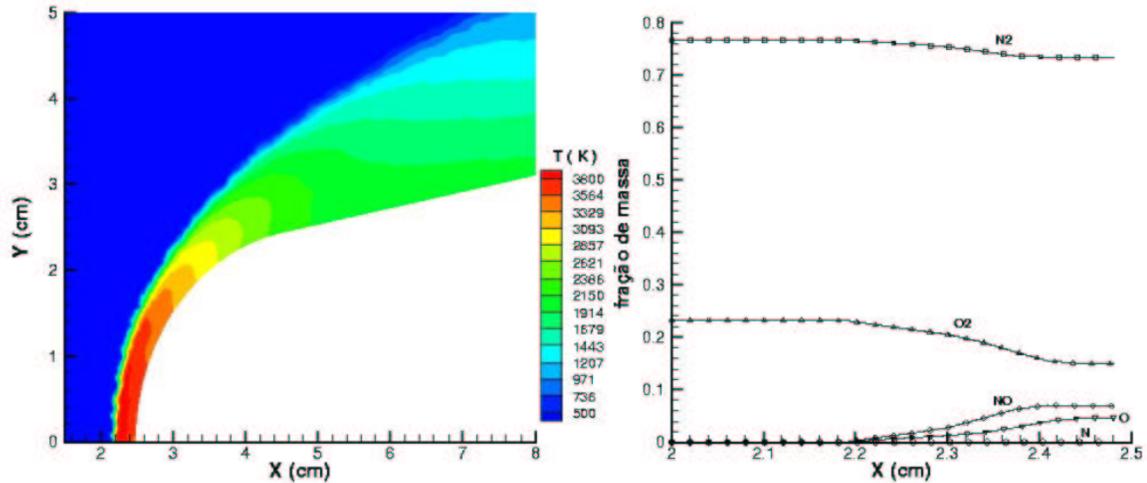


Figura 2. Contornos de temperatura e a evolução longitudinal das frações de massa na região de estagnação para  $M_\infty=9$ .

Na Figura (3) é apresentado o campo de pressão e a distribuição de pressão sobre a parede para número de Mach igual a 8. A pressão atrás da onda de choque, obtida através da simulação numérica, para este caso é de 13.01 atm. Pela teoria da dinâmica dos gases a pressão atrás da onda de choque é de 13,76 atm. Observa-se uma boa concordância entre os resultados teórico e numérico, onde o erro obtido entre estes valores foi de 5,45%.

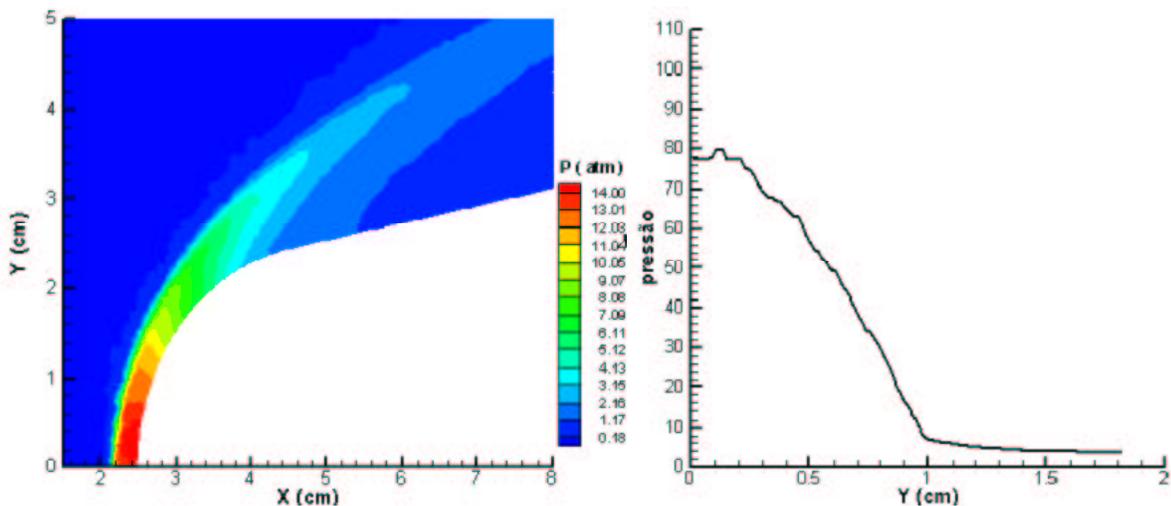


Figura 3. Campo de pressão e a distribuição de pressão sobre a parede para  $M_\infty=8$ .

Apresenta-se na Fig. (4) os contornos de temperatura e a evolução longitudinal das frações de massa na região de estagnação. Observa-se novamente uma boa resolução dos fenômenos físicos e químicos apresentados pelo método numérico.

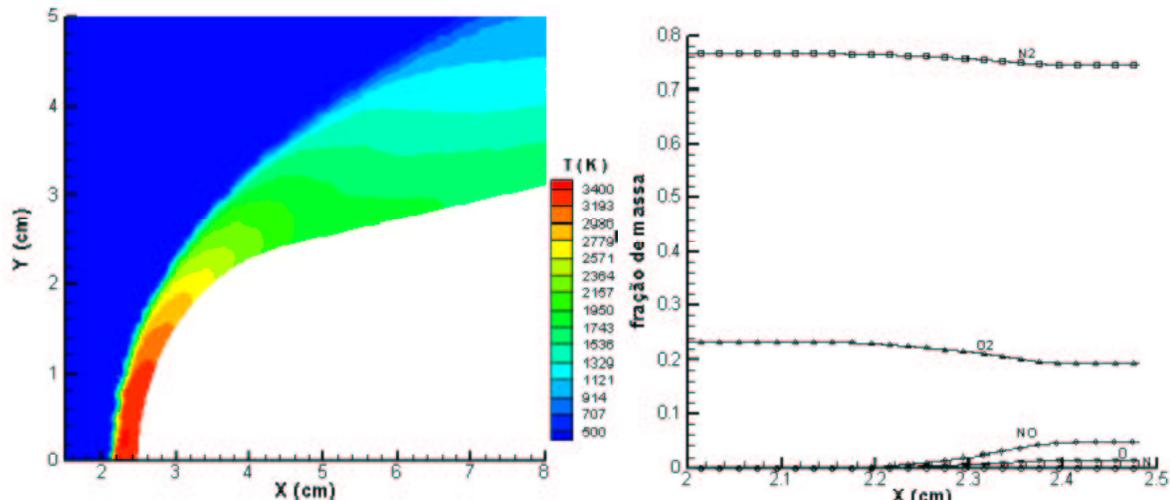


Figura 4. Contornos de temperatura e a evolução longitudinal das frações de massa na região de estagnação para  $M_\infty = 8$ .

#### 4. CONCLUSÕES

O trabalho apresentado teve como objetivo calcular o campo de escoamento em regime hipersônico em torno do veículo de reentrada SARA, considerando os efeitos das reações químicas que ocorrem devido ao alto número de Mach. Para simular o campo de escoamento foram utilizadas as equações de Euler em um contexto axissimétrico. O esquema de discretização espacial escolhido para este trabalho foi o esquema de separação de vetores de fluxos de van Leer, de segunda ordem de precisão. A marcha no tempo foi realizada por um esquema Runge-Kutta, explícito, com cinco estágios e segunda ordem de precisão temporal. As equações foram discretizadas num contexto de volumes finitos, utilizando malhas não estruturadas formadas por elementos triangulares. Os resultados obtidos com o esquema de discretização utilizado tiveram uma resolução suficiente para capturar alguns fenômenos físicos e químicos característico a este tipo de escoamento.

#### 5. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a AEB pelo apoio financeiro fornecido para a realização do projeto (Convênio 015/2000). O primeiro autor agradece o suporte da CAPES, quando este foi aluno de doutoramento. O segundo autor agradece à FAPESP (Projeto Jovem Pesquisador 98/09812-6).

#### 4. REFERÊNCIAS

Anderson, John D. Jr., "Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics", McGraw Hill, NY, 1989.

Hachemin, J-V, "Developpement d'un code Navier-Stokes parabolise pour des ecoulements tridimensionels en desequilibre thermochimique", Note Technique 1995-8, FR ISSN 0078-3781, France, 1995.

Kee, J. R., Rupley, F. M., *et al.*, Chemkin Collection, Release 3.6, Reaction Design, Inc., San Diego, CA, 2000.

Korzenowski, H., “Técnicas em Malhas não Estruturadas para Simulação de Escoamento a Altos Números de Mach” (Unstructured Grid Technique for Flow Simulation at High Mach numbers), doctoral Thesis, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, June 1998, Brazil.

Mavriplis, D.J., “Multigrid solution of the two-dimensional Euler equation on Unstructured Triangular Meshes”, AIAA Journal, Vol. 26, No. 7, 1988, pp. 824-831.

Pimentel, C. A. R., Etude Numerique de La Transition entre Une Onde de Choc Oblique Stabilisee Par Un Diedre et Une Onde de Detonation Oblique, Thèse Doctorale, Université de Poitiers, 2000.

van Leer, B., “Flux-Vector Splitting for the Euler Equations,” Proceedings of the 8<sup>th</sup> International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, E. Krause, editor, Lecture Notes in Physics, vol. 170, 1995, pp. 507-512.

## **Numerical Simulation of Hypersonic Flow over Re-entry Bodies**

**Carlos Alberto Rocha Pimentel**

Universidade do Vale do Paraíba – UNIVAP

São José dos Campos - SP 12244-000 – BRAZIL

cearapim@univap.br

**Heidi Korzenowski**

Universidade do Vale do Paraíba – UNIVAP

São José dos Campos - SP 12244-000 – BRAZIL

heidi@univap.br

**Abstract.** *The aim of the present work is to calculate the hypersonic fluid flow simulations over a re-entry body, considering chemical reaction effects that occur at high Mach number. The Euler equations will be discretized in an axisymmetric context. The spatial discretization scheme adopted in this work is the second-order van Leer scheme. Time march will be performed by an explicit, second order, 5-stage Runge-Kutta time stepping. The governing equations are discretized in a finite volume procedure using unstructured triangular meshes. A detailed chemical kinetics mechanism is used in the fluid flow simulations. It is composed of five chemical species  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $O$ ,  $N$ ,  $NO$ , with their combination and dissociation reactions. These mechanisms are necessary to obtain the correct prediction for different time and/or length scale, presented in such reactive fluid flow, as well as their variations with the flux conditions. It will be presented Mach number, pressure and temperature contours for freestream Mach number 8 and 9.*

**Keywords.** *reactive flow, hypersonic flow, finite volume, unstructured grid.*