

ESTUDO NUMÉRICO DA ONDA DE DETONAÇÃO OBLÍQUA FORMADA POR UM DIEDRO UTILIZANDO A TÉCNICA DE REFINAMENTO ADAPTATIVO

Carlos Alberto Rocha Pimentel - email: cpimentel@iae.cta.br
Centro Técnico Aeroespacial, Instituto Tecnológico de Aeronáutica
CTA/ITA/IEAA – 12228-900 – São José dos Campos, SP, Brasil

L.F. Figueira da Silva, B. Deshaies - email: da-silva@lcd.ensma.fr
Laboratoire de Combustion et de Détonique; UPR 9028 du CNRS - ENSMA
86960 Futuroscope, FRANCE

João Luiz F. Azevedo - email: azevedo@iae.cta.br
Centro Técnico Aeroespacial, Instituto de Aeronáutica e Espaço
CTA/IAE/ASE-N – 12228-904 – São José dos Campos, SP, Brasil

Resumo. *Um estudo numérico da combustão dentro do escoamento supersônico bidimensional, de uma mistura reativa H_2 – ar é apresentado. O objetivo do presente trabalho é investigar a ignição dos gases premisturados atrás de uma onda de choque oblíqua estabilizada por um diedro, assim como, a estrutura que se forma na região de transição a qual separa a onda de choque oblíqua da onda de detonação oblíqua. Além disso, é feito um estudo preliminar das condições aerodinâmicas que podem levar uma onda de detonação oblíqua relaxar até a formação de uma onda de detonação oblíqua do tipo Chapman-Jouguet. Para este propósito, é usado um código computacional em volumes finitos, em malha não estruturada e uma técnica de refinamento adaptativo. As propriedades físico-químicas são funções da composição química da mistura reativa, temperatura e pressão, e são calculadas utilizando o código computacional CHEMKIN-II.*

Palavras-chave: *Escoamento reativo, Combustão supersônica, Onda de choque oblíqua, Onda de detonação oblíqua.*

1. INTRODUÇÃO

A idéia de utilizar uma onda de detonação oblíqua estabilizada por de um diedro para o uso em propulsão hipersônica foi proposta inicialmente nos anos 50 por Dunlap, Brehm & Nicholls (1958). Desde então, um esforço considerável é feito com o objetivo de compreender melhor o mecanismo de formação e estabilização das ondas de detonação oblíquas. Em seu trabalho experimental, Lehr (1972) fornece os resultados de seus estudos sobre a ignição e a estabilização da combustão induzida por projéteis de corpos rombudo e cônico lançados dentro de duas misturas reativas a velocidades supersônicas. O autor observou processos de ignição e de estabilização da combustão diferentes, todos relacionados ao acoplamento entre a zona de reação e a onda de choque formada à frente do projétil, e ambos associados à natureza do escoamento supersônico.

Este trabalho visa estudar a região de transição formada entre a onda de choque oblíqua (OCO) e a onda de detonação oblíqua (ODO). Mais precisamente, pretende-se compreender melhor e descrever a região da transição OCO/ODO estabilizada por um diedro. Faz parte ainda do interesse do trabalho identificar os tipos das transições possíveis entre a onda de choque oblíqua e a onda de detonação oblíqua. Neste trabalho é utilizada a mistura reativa hidrogênio-ar e, para melhor descrever todos os fenômenos químicos que ocorrem em todo o domínio de cálculo, um mecanismo de cinética química detalhado é usado.

Sob o ponto de vista das ferramentas numéricas usadas, o trabalho utiliza malhas não estruturadas e a técnica de refinamento adaptativo. Devido a esta técnica é possível tanto economizar tempo de CPU, graças à possibilidade de refinar somente as regiões de interesse no escoamento, quanto definir melhor as descontinuidades fortes que se formam em regiões de escoamento supersônico, possibilitando assim uma análise melhor. Fort & Pratt (1990) e Li, Kailasanath & Oran (1994), estudaram a estrutura do escoamento quando ocorre a transição OCO/ODO. Entretanto, estes autores utilizaram como ferramenta uma malha computacional estruturada e, como pode ser visto nestes trabalhos, a estrutura OCO/ODO não possui uma boa qualidade de resolução. A utilização de uma malha estruturada não possibilita um refinamento adequado sobre as regiões do domínio de cálculo onde ocorrem fortes descontinuidades e onde a cinética química atua mais fortemente sem que ocorra um aumento significativo do custo computacional.

Em trabalhos recentes (Figueira da Silva & Deshaies, 1995, e Deshaies, Figueira da Silva & René-Corail, 1997, Figueira da Silva & Deshaies, 2000) estudou-se numericamente a iniciação da combustão por um diedro em escoamento supersônico usando um código computacional com malha estruturada e um mecanismo de cinética química detalhado para misturas hidrogênio-ar. Os resultados mostram que, quando a ignição ocorre, possibilidades diferentes existem:

1) A combustão permanece confinada à camada limite desenvolvida sobre a superfície do diedro.

2) A combustão se desenvolve à jusante da onda de choque oblíqua que leva à onda de detonação oblíqua estabilizada, como esquematizada na Fig. 1.

3) A combustão é iniciada pela onda de choque oblíqua que conduz imediatamente a uma onda de detonação oblíqua não estabilizada.

Como mostrado em Deshaies, Figueira da Silva & René-Corail (1997) e Figueira da Silva & Deshaies (2000), quando as condições de escoamento correspondem à situação (2), a transição OCO/ODO pode ser tanto de tipo suave quanto de tipo abrupto. Comparações com os resultados experimentais de Viguier *et al.* (1996) têm mostrado uma boa aproximação em relação à estrutura total do escoamento. Porém, esta comparação evidencia algumas das principais discrepâncias acerca do escoamento na região da transição OCO/ODO. Estas discrepâncias são atribuídas às diferenças que existem entre as condições iniciais e de fronteiras do experimento e aquelas das simulações numéricas.

O objetivo do presente trabalho é especificar com mais detalhe as condições que levam às transições dos tipos suave ou abrupto a ocorrerem entre a OCO e a ODO, bem como a estrutura da região de transição. Para realizar o cálculo computacional utilizam-se as condições de escoamento não perturbado representativas das condições encontradas nos experimentos, resultando em uma estrutura de escoamento na região de transição semelhante à estrutura do escoamento observada experimentalmente. Finalmente, a estrutura aerodinâmica do escoamento que pode levar a uma ODO do tipo Chapman-Jouguet é especificada.

Foi usado um método em volumes finitos, *upwind*, em malha não estruturada com uma técnica de refinamento adaptativo com o objetivo de descrever precisamente todas as escalas relevantes. Escoamentos com composição química variável e taxa de reação finita são considerados, e as propriedades físico-químicas são funções da composição local da mistura, temperatura e pressão, as quais são calculadas utilizando as subrotinas CHEMKIN-II (Kee, Rupley & Miller, 1991).

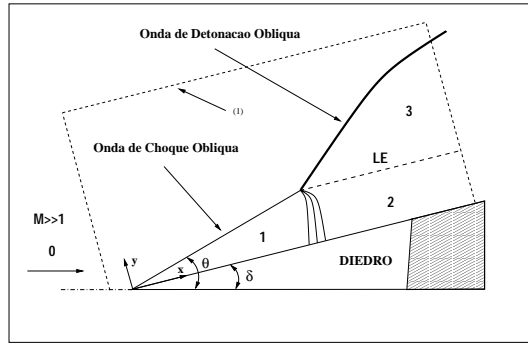


Figura 1: Esquema representativo do domínio computacional e da transição onda de choque oblíqua/onda de detonação oblíqua.

2. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Considerando que os transportes moleculares e a transferência de calor por radiação são desprezíveis, as equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e fração de massa podem ser escritas para um escoamento bidimensional não permanente de gases perfeitos como:

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

onde

$$Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho \mathcal{E} \\ \rho Y_1 \\ \vdots \\ \rho Y_{k-1} \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(\rho \mathcal{E} + p) \\ \rho Y_1 u \\ \vdots \\ \rho Y_{k-1} u \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho \mathcal{E} + p) \\ \rho Y_1 v \\ \vdots \\ \rho Y_{k-1} v \end{bmatrix}, \quad \Omega = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\omega}_1 W_1 \\ \vdots \\ \dot{\omega}_{k-1} W_{k-1} \end{bmatrix}, \quad (2)$$

com p , Y_K e \mathcal{E} dados por

$$Y_K = 1 - \sum_{k=1}^{K-1} Y_k, \quad p = \rho RT \sum_{k=1}^K \frac{Y_k}{W_k}, \quad (3)$$

$$\mathcal{E} = e + \frac{1}{2}(u^2 + v^2) = \sum_{k=1}^K Y_k e_k + \frac{1}{2}(u^2 + v^2), \quad (4)$$

onde

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

Nestas equações ρ é a densidade da mistura, u and v são as componentes cartesianas da velocidade, p é a pressão estática, T é a temperatura estática, \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 espécies químicas k são e_k , h_k^0 e c_{p_k} . Y_k , $\dot{\omega}_k$ e W_k são a fração de massa, a taxa de produção molar e o peso molecular das espécies químicas k , respectivamente.

3. MECANISMO DE CINÉTICA QUÍMICA

O mecanismo de cinética química para a mistura de gases reativos considera 9 espécies (H_2 , O_2 , H , O , OH , HO_2 , H_2O_2 , H_2O , N_2) e 21 reações elementares. Este mecanismo é devido a Balakrishnan & Williams (1994), e é dado na Tabela 1. As taxas de produção química de cada reação elementar são dadas pela lei de Arrhenius:

$$k_f = AT^\beta \exp(-E/RT). \quad (6)$$

O cálculo de k_f e das taxas de produção $\dot{\omega}_k$ é efetuado usando o pacote computacional CHEMKIN-II (Kee, Ruplet & Miller, 1991). As propriedades termodinâmicas são calculadas de acordo com o método desenvolvido por Kee, Rupley & Miller (1991).

Tabela 1: Mecanismo de reação para a combustão H_2 -ar: A em (cm,mol,s), E em (cal/mol).

Reação	A	β	E
$H + O_2 \rightleftharpoons OH + O$	3.52e16	-0.7	17070.
$H_2 + O \rightleftharpoons OH + H$	5.06e4	2.67	6290.
$H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$	1.17e9	1.3	3626.
$OH + OH \rightleftharpoons H_2O + O$	1.51e9	1.14	99.
$H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$	6.76e19 ^a	-1.42	0.
$H + H + M \rightleftharpoons H_2 + M$	1.80e18 ^b	-1.0	0.
$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$	2.20e22 ^a	-2.0	0.
$O + OH + M \rightleftharpoons HO_2 + M$	1.00e16 ^a	0.0	0.
$H + O + M \rightleftharpoons OH + M$	6.20e16 ^a	-0.6	0.
$O + O + M \rightleftharpoons O_2 + M$	6.17e15 ^a	-0.5	0.
$H + HO_2 \rightleftharpoons H_2 + O_2$	4.28e13	0.0	1411.
$H + HO_2 \rightleftharpoons OH + OH$	1.70e14	0.0	874.
$H + HO_2 \rightleftharpoons O + H_2O$	3.10e13	0.0	1720.
$O + HO_2 \rightleftharpoons OH + O_2$	2.00e13	0.0	0.
$OH + HO_2 \rightleftharpoons H_2O + O_2$	2.89e13	0.0	-497.
$HO_2 + HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2 + O_2$	3.02e12	0.0	1390.
$H_2O_2 + M \rightleftharpoons OH + OH + M$	1.20e17 ^c	0.0	45500.
$H_2O_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + HO_2$	7.08e12	0.0	1430.
$H_2O_2 + H \rightleftharpoons H_2O + OH$	1.00e13	0.0	3590.
$H_2O_2 + H \rightleftharpoons HO_2 + H_2$	4.79e13	0.0	7950.
$H_2 + O_2 \rightleftharpoons OH + OH$	1.70e13	0.0	47780.

Eficiência do terceiro corpo :

$a - f_{H_2O} = 12., f_{H_2} = 2.5, f_{N_2} = f_{O_2} = 1.0$

$b - f_{H_2O} = 6.5, f_{H_2} = 1.0, f_{N_2} = f_{O_2} = 0.4$

$c - f_{H_2O} = 15., f_{H_2} = 2.5, f_{N_2} = f_{O_2} = 1.0$

4. MÉTODO NUMÉRICO

O sistema de equações diferenciais (1) - (5) é discretizado usando um processo numérico em volumes finitos, malhas não estruturadas, *upwind*, *time-split* (Azevedo & Figueira da Silva, 1997). O processo de separação do passo no tempo leva a uma integração separada das partes dinâmica e química do escoamento. Para a marcha no tempo da parte dinâmica utiliza-se um método de Runge-Kutta de cinco estágios, explícito e segunda ordem de precisão (Mavriplis, 1988). O algoritmo usado para a discretização dos vetores de fluxos F e G é o esquema de separação de vetores de fluxo conhecido como AUSM⁺ de Liou (1996), com uma extrapolação de segunda ordem do tipo MUSCL e um limitador MINMOD para as variáveis primitivas (p, u, v, T, Y_k) (Hirsch, 1990). Para a integração dos termos de fonte químicos utiliza-se o algoritmo de solução de equações diferenciais ordinárias VODE (Byrne & Dean, 1993), adaptado à solução de sistemas de equações que são matematicamente rígidas.

Uma técnica de refinamento adaptativo é usada com o objetivo de concentrar pontos da malha nas regiões de interesse dentro do campo de escoamento. Deste modo, é possível fazer um uso mais eficiente dos recursos de memória e CPU. A estratégia de malha adaptativa consiste em refinar regiões onde ocorrem grandes gradientes. Com o objetivo de identificar estas regiões,

utiliza-se um sensor (Figueira da Silva, Azevedo & Korzenowski, 2000) que é baseado no gradiente das variáveis primitivas (p, u, v, T, Y_k). O processo de enriquecimento da malha introduz um nó adicional em cada lado do triângulo marcado para ser refinado, assim fazendo 4 novos triângulos. Figueira da Silva, Azevedo & Korzenowski (2000) mostram que este processo é de interesse particular para os tipos de escoamento considerados neste trabalho. Mais detalhes sobre o algoritmo de solução podem ser encontrados em Azevedo & Figueira da Silva (1997).

O domínio computacional é apresentado na Fig. 1. As condições de entrada são fixadas de acordo com os valores das propriedades do escoamento livre, em ambas as fronteiras a esquerda ($x = 0$) e acima ($y = y_{max}$) do domínio de cálculo. Na fronteira a direita, em ($x = x_{max}$), condições de fronteira não reflexivas são implementadas. Somente condições de escorregamento ($v = \partial u / \partial y = 0$) são consideradas na superfície do diedro ($y = 0$). A superfície do diedro ($y = 0$) é considerada com gradiente normal da temperatura igual a zero ($\partial T / \partial n = 0$), e esta superfície é tratada como não catalítica ($\partial Y_k / \partial n = 0$). O escoamento entra no domínio computacional paralelo ao eixo de simetria do diedro com uma dada temperatura, pressão, número de Mach e composição.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1. A estrutura do campo de escoamento

Como descrito nos trabalhos de Figueira da Silva & Deshaies (2000), Deshaies, Figueira da Silva & René-Corail (1997), Figueira da Silva & Deshaies (1995), Li, Kailasanath & Oran (1994) e Dabora *et al.* (1991), quando ocorre a transição OCO/ODO, três regiões podem ser identificadas no escoamento. Estas regiões estão ilustradas nas Figs. 2 e 3. Seguindo a direção longitudinal, pode-se observar:

I) Uma região de indução onde o calor liberado devido aos processos químicos permanece desprezível. Esta região é localizada entre a OCO e a superfície do diedro, e seu comprimento é determinado pelo tempo de indução (t_i) dos processos químicos.

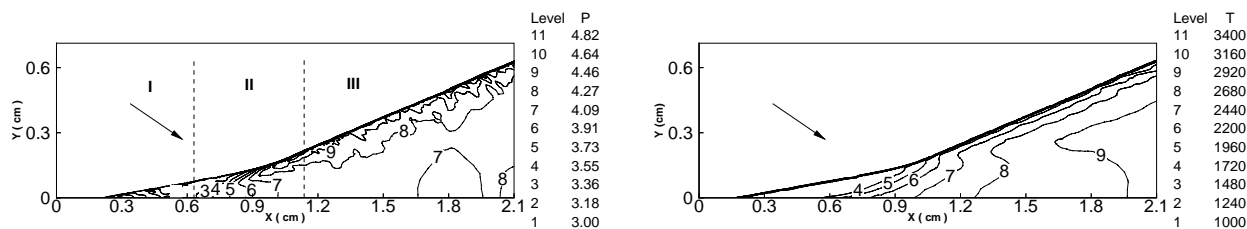


Figura 2: Campo de pressão (atm) e temperatura (K) para o caso 17 (ver Tabela 2). Valores do escoamento livre: $M_0 = 7$, $T_0 = 300$ K, $p_0 = 0.113$ atm, $\delta = 34.1$ graus. Transição suave.

II) Uma região de transição localizada no fim da região de indução, onde a liberação de calor da mistura combustível ocorre. As ondas de pressão que são geradas nesta região de rápido crescimento da temperatura modificam as condições à jusante da OCO levando a um decréscimo no tempo de indução. Estas ondas de pressão podem modificar progressivamente o ângulo da OCO (Fig. 2) ou se unirem para formar uma onda de detonação na região dos gases queimados (Fig. 3). Ambas as transições do tipo suave ou abrupta levam eventualmente à formação de uma ODO no final da região de transição.

III) Uma região de detonação que é o resultado de ambas as transições suave ou abrupta. Uma linha de escorregamento separa os produtos de combustão da ODO dos produtos liberados na região de transição. O ângulo final desta onda de detonação corresponde ao ângulo que pode ser calculado considerando somente o estado inicial e final dos gases queimados. Isto pode ser verificado na Fig. 4, onde são traçadas as polares de choque e de detonação (Dabora *et al.*, 1991) para o escoamento da mistura reativa estequiométrica H_2 -ar para $M_0 = 7$ e 8, $T_0 = 300$ K. Nesta

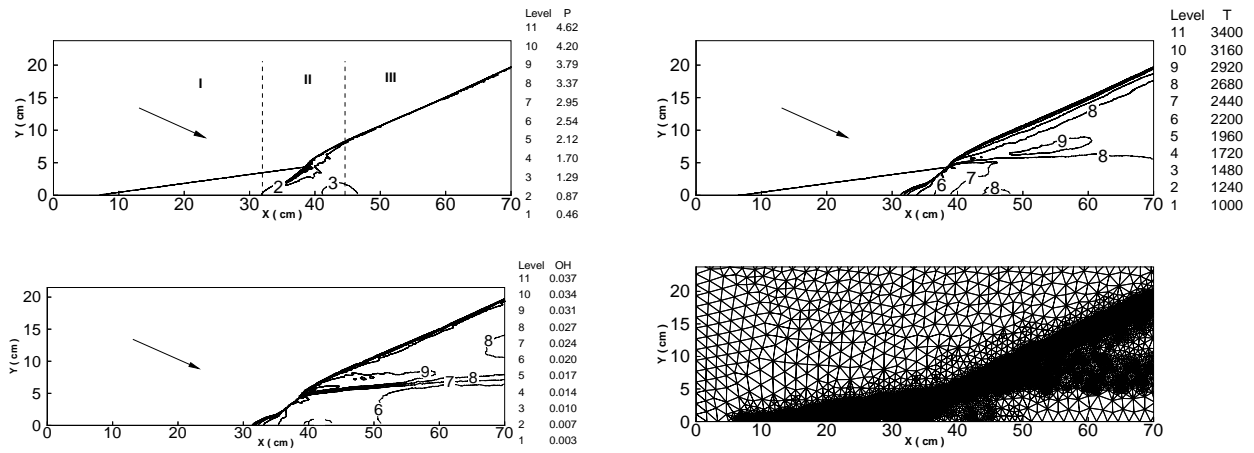


Figura 3: Campo de pressão (atm), temperatura (K), produção de OH e a malha final para o caso 19 (ver Tabela 2). Valores do escoamento livre: $M_0 = 7$, $T_0 = 300$ K, $p_0 = 0.0393$ atm, $\delta = 24.5$ graus. Transição abrupta.

figura também são mostrados os ângulos das ODO que são obtidos como resultado do cálculo do escoamento não permanente bidimensional em malhas estruturadas e não estruturadas.

Uma análise da Fig. 4 mostra que ambos os resultados previamente obtidos com o código computacional estruturado e aqueles obtidos usando um código não estruturado estão em bom acordo com aqueles fornecidos pela análise baseada nas polares de detonação. Além disso, o cálculo em malhas não estruturadas permite encontrar soluções para valores do ângulo do diedro δ próximos àqueles correspondentes a $d\theta/d\delta \rightarrow \infty$, acima dos quais soluções permanentes de ODO planas coladas ao diedro deixam de existir.

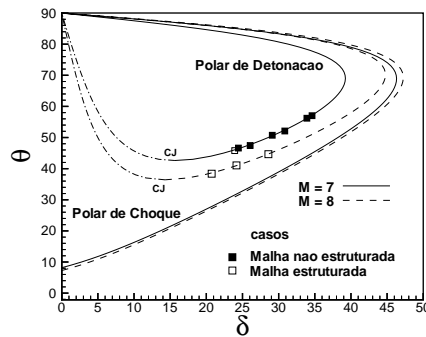


Figura 4: Polares de choque e de detonação. Os símbolos correspondem aos cálculos em malhas estruturadas e não estruturadas.

Uma das vantagens de usar um código computacional com malhas não estruturadas fica claramente evidente na Fig. 3, onde é apresentada uma malha computacional adaptada, a qual contém 21236 nós e 42160 volumes após 4 refinamentos sucessivos. De fato, a Fig. 3 mostra que os pontos da malha estão concentrados somente na região de interesse, em particular, na região de transição OCO/ODO. Deste modo, isto permite calcular situações correspondentes a um tempo de liberação de calor mais curto do que usando um código computacional com malha estruturada.

5.2. Análise da região de transição

Em trabalho recente, Figueira da Silva & Deshaies (2000) mostram que o tipo de transição obtida, suave ou abrupta, parece estar relacionado às magnitudes relativas do tempo de indu-

Tabela 2: Pressões e ângulos de incidência usados na simulação numérica da mistura reativa estequiométrica H_2 -air para $M_0 = 7$, $T_0 = 300$ K.

casos	14	15	16	17	18	19	20	21
p_0 (atm)	0.0127	0.185	0.168	0.113	0.284	0.0393	0.266	0.219
δ (graus)	25.7	29.2	30.9	34.1	34.1	24.5	30.9	34.7

ção (t_i) e de reação (t_r). Estes tempos são definidos aqui como correspondendo, respectivamente, a 10% e 90% da máxima temperatura devida à combustão. Neste trabalho é mostrado que transições abruptas parecem ocorrer mais provavelmente quando t_i aproxima-se de t_r , significando que o tempo de liberação de calor torna-se muito pequeno em comparação a t_i , enquanto que transições suaves parecem ser obtidas quando $t_i \ll t_r$. Estão traçados nas Figs. 5 e 6 o tempo de indução (t_i) e a razão entre t_i e o tempo de reação total (t_r), respectivamente, como função da temperatura e pressão para o mistura reativa estequiométrica H_2 -ar.

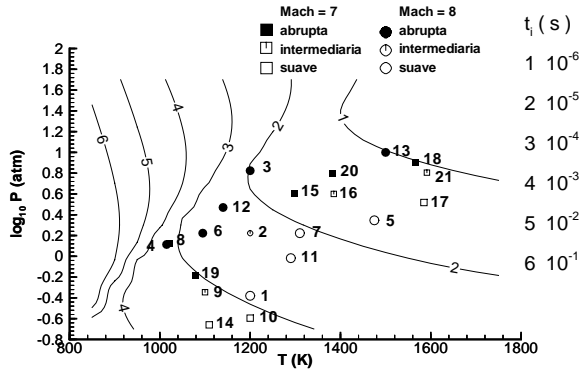


Figura 5: Tempo de indução t_i como função da temperatura e da pressão. Os símbolos correspondem aos tipos de transições obtidas.

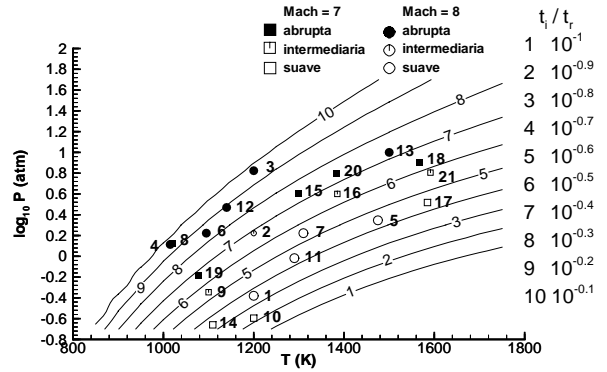


Figura 6: Razão t_i/t_r como função da temperatura e da pressão. Os símbolos correspondem aos tipos de transições obtidas.

Também encontram-se nestas figuras os pontos correspondentes às transições calculadas por Figueira da Silva & Deshaies (2000) (círculos) e ao presente cálculo (quadrados), estes obtidos para uma mistura reativa estequiométrica H_2 -ar para $M_0 = 7$ e $T_0 = 300$ K para as condições específicas da Tabela 2. É necessário dizer que a temperatura e a pressão usadas para relatar os resultados dos cálculos bidimensionais correspondem àquelas dos gases à jusante da OCO inicial. A tendência previamente observada em relação à influência de t_i e t_r no tipo de transição obtida parece ser confirmada aqui. Devido às interações complexas do escoamento com a combustão que ocorrem na região de transição, uma explicação mais geral sobre esta influência parece impossível de se deduzir até o momento. Portanto, pode-se afirmar que as transições do tipo abrupta são mais prováveis de serem observadas quando $t_i \rightarrow t_r$, seja por um crescimento da pressão ou por um decréscimo da temperatura dos gases à jusante da OCO.

É necessário salientar que somente transições do tipo abrupto são observadas experimentalmente (Desbordes, Hamada & Gueraud, 1995). Além disto, as observações experimentais mostram uma estrutura da região de transição com algumas diferenças em relação às simulações numéricas anteriores (Viguiet *et al.*, 1996). Uma das diferenças entre os resultados experimentais e os das simulações numéricas diz respeito ao ângulo da onda de detonação na região de transição. Esta foi atribuída à diferença que existe entre as condições iniciais e de fronteira entre o experimento e a simulação numérica.

Portanto, começando das condições de escoamento livre que levam a transição do tipo suave da Fig. 2, porém aumentando a pressão inicial (ver Tabela 2), a transição do tipo abrupta apre-

sentada na Fig. 7 é obtida. Uma comparação entre as Figs. 3 e 7 mostra uma drástica diferença no que diz respeito ao ângulo da onda de detonação que ocorre na região de transição. A transição mostrada na Fig. 7 possui uma clara similaridade com aquela observada experimentalmente por Dabora *et al.* (1991) e Desbordes, Hamada & Gueraud (1995). Os parâmetros que controlam a mudança no tipo de transição abrupta, como observados nas Figs. 3 e 7, não são conhecidos no presente momento. Portanto, é necessário examiná-los em maior detalhe em trabalhos futuros. Cabe notar, porém, que a cada vez que é obtida esta onda de detonação transversal similar à observada experimentalmente, os parâmetros do escoamento são tais que $t_i \sim t_r$ e o ângulo do diedro (δ) é próximo do valor crítico $d\theta/d\delta \rightarrow \infty$.

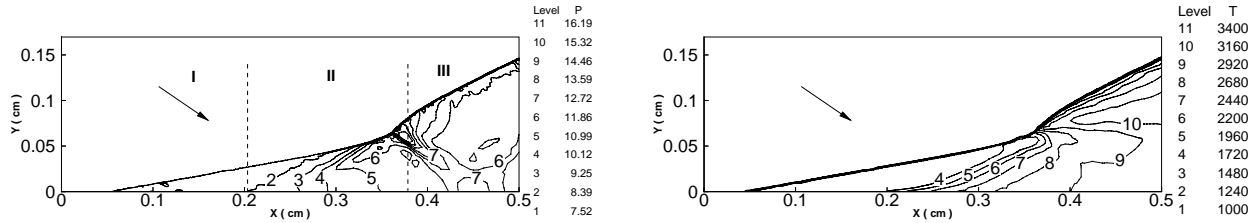


Figura 7: Campo de pressão (atm) e temperatura (K) para o caso 18 (ver Tabela 2). Valores do escoamento livre: $M_0 = 7$, $T_0 = 300$ K, $p_0 = 0.284$ atm, $\delta = 34.1$ graus.

5.3. Obtenção de uma ODO do tipo Chapman-Jouguet

Os resultados obtidos em trabalhos anteriores (Li, Kailasanath & Oran, 1994, e Figueira da Silva & Deshaies, 2000) e aqueles apresentados aqui dizem respeito principalmente ao caso de ODO forte (*overdriven*), as quais permanecem sempre suportados pelas condições de contorno ao longo da superfície do diedro. Porém, estas ODO fortes não podem ser mantida indefinidamente por um diedro de comprimento infinito. Assim sendo, é necessário investigar o resultado da interação entre um leque de expansão gerado por uma deflexão na superfície do diedro (Fig. 8) com a ODO forte. Esta interação pode levar ou a um apagamento da combustão ou à estabilização de uma ODO do tipo Chapman-Jouguet. O apagamento pode vir a ocorrer devido ao resfriamento da zona de combustão pelo leque de expansão, que teria por efeito o “congelamento” das reações químicas. A ODO do tipo Chapman-Jouguet tem como uma de suas características principais o fato de ser limitada à jusante por uma superfície sônica, o que é benéfico para aplicações propulsivas. além do mais, esta ODO do tipo Chapman-Jouguet apresenta uma melhor eficácia de conversão de energia química-energia térmica do que as ODO fortes, levando a um melhor rendimento global de combustão.

Na Fig. 9 são apresentados os primeiros resultados de simulação numérica com escoamento reativo sobre esta configuração que permite que a ODO forte relaxe até a formação de uma ODO do tipo Chapman-Jouguet. É possível distinguir um certo número de características e fenômenos importantes. Na Fig. 9, observa-se que a estrutura OCO/ODO é corretamente resolvida. Na região da deflexão do diedro é possível notar presença do leque da expansão, bem como sua interação com a onda de detonação oblíqua. O resultado é pouco perceptível nesta figura devido a pequena diferença entre os valores do ângulo da detonação forte ($\theta = 46.5$ graus) e da detonação Chapman-Jouguet ($\theta = 41.0$ graus). Estuda-se atualmente esta mesma configuração para maiores ângulos de diedro.

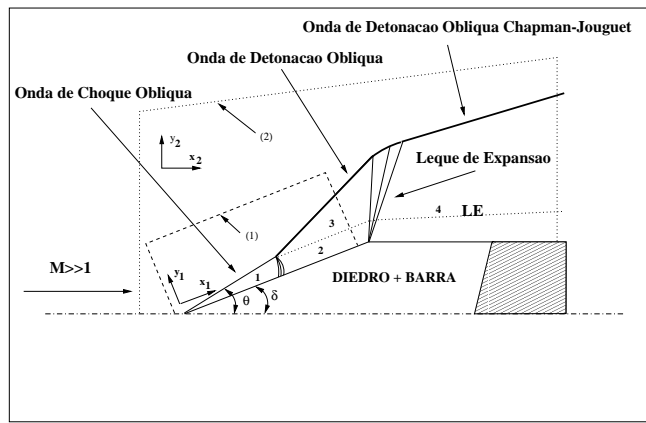


Figura 8: Esquema representativo do domínio computacional usado no estudo da interação onda de detonação oblíqua- leque de expansão.

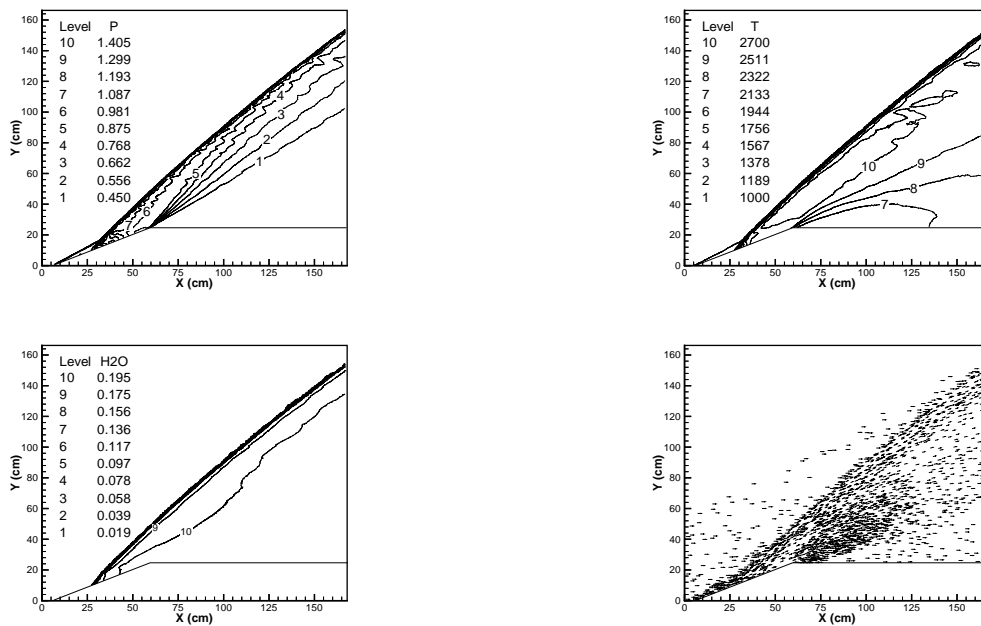


Figura 9: Campo de pressão (atm) e temperatura (K) e de fração de massa de H_2O e o vetor velocidade. Escoamento livre: $M_0 = 7$, $T_0 = 300$ K, $p_0 = 0.0393$ atm, $\delta = 24.5$ graus.

5. AGRADECIMENTOS

Este trabalho foi realizado dentro do contexto de um acordo de cooperação internacional entre o Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e o Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), durante o período em que o primeiro autor passou em Poitiers como parte de seu programa de doutorado sanduíche com bolsa da Fundação Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES). O trabalho recebeu também suporte parcial do CNPq através do Projeto Integrado de Pesquisa No. 522413/96-0.

REFERÊNCIAS

- Azevedo, J.L.F., and Figueira da Silva, L.F., 1997, The development of an unstructured grid solver for reactive compressible flow applications, AIAA Paper 97-3239, 33rd AIAA/ASME/SAE/ASEE, Joint Propulsion Conference & Exhibit, Seattle, WA.
- Balakrishnan, G., and Williams, F.A., 1994, Turbulent combustion regimes for hypersonic propulsion employing hydrogen-air diffusion flames, *Journal of Propulsion and Power*, vol. 10, n. 3, pp. 434-436.
- Byrne, G.D., and Dean, A.M., 1993, The numerical solution of some kinetics models with VODE and CHEMKIN II, *Computers Chem.* vol. 17, n. 3, pp. 297-302.
- Dabora, E.K., Desbordes, D., Gueraud, C., and Wagner, H.G., 1991, Dynamics of detonations and explosions: detonations, *Progress in Astronautics and Aeronautics*, Borisov, A.A., Kuhl, A.L., Leyer, J.C., and Sirignano, W.A., Editors, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Washington, vol. 133, p. 187.
- Desbordes, D., Hamada, L., and Gueraud, C., 1995, Supersonic $H_2 - air$ combustions behind oblique shock waves, *Shock Waves*, vol. 4, pp. 339-345.
- Deshaies, B., Figueira da Silva, L.F., and René-Corail, M., 1997, Some generic problems related to combustion of hydrogen and air in supersonic flows, IUTAM Symposium on Combustion in Supersonic Flows, pp. 15-42.
- Dunlap, R., Brehm, R.L., and Nicholls, J., 1958, A preliminary study of the application of steady-state detonative combustion to a reaction Engine, *Jet Propulsion*, vol. 28, n. 7, pp. 451-456.
- Figueira da Silva, L.F., Azevedo, J.L.F., and Korzenowski, H., 2000, Unstructured adaptive grid flow simulations of inert and reactive gas mixtures, *Journal Computational Physics*, vol. 160, pp. 522-540.
- Figueira da Silva, L.F., and Deshaies, B., 1995, Numerical analysis of the self-ignition of hydrogen-air supersonic flows over a wedge, 3rd Asian-Pacific International Symposium on Combustion and Energy Utilization, vol. II, pp. 673-678.
- Figueira da Silva, L.F., and Deshaies, B., 2000, Stabilization of an oblique detonation wave by a wedge: a parametric numerical study, *Combustion and Flame*, vol. 121, pp. 152-166.
- Fort, J., and Pratt, D., 1990, Supersonic flameholding by attached oblique shock waves, AIAA Paper 90-0735, AIAA 28th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Reno, NV.
- Kee, R.J., Rupley, F.M., and Miller, J.A., 1991, CHEMKIN-II: A fortran chemical kinetics package for the analysis of gas phase chemical kinetics, Sandia National Laboratories Technical Rep. SAND86-8009B/UC-706.
- Hirsch, C., 1990, Numerical computations of internal and external flow, Wiley, Eds. p. 493.
- Lehr, H.F., 1972, Experiments on shock-induced combustion, *Astronautica Acta.*, vol. 17, n. 4 & 5, pp. 589-597.
- Li, C., Kailasanath, K., and Oran, E.S., 1994, Detonation structures behind oblique shocks, *Physics of Fluids*, vol. 6, n. 4, pp. 1600-1611.
- Liou, M.S., 1996, A sequel to AUSM: AUSM+, *Journal of Computational Physics*, vol. 129, pp. 364-382.
- Mavriplis, D.J., 1988, Multigrid solution of the two-dimensional Euler equations on unstructured triangular meshes, *AIAA Journal*, vol. 26, n. 7, pp. 824-831.
- Viguier, C., Figueira da Silva, L.F., Desbordes, D., and Deshaies, B., 1996, Onset of oblique detonation waves: comparison between experimental and numerical results for hydrogen-air mixtures, *Proceedings of the Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 3023-3031.