

**MARCELO MAIA RIBEIRO DAMASCENO**

**DESENVOLVIMENTO DE UMA MODELAGEM PARA  
ESCOAMENTOS REATIVOS EM MALHAS  
ADAPTATIVAS DO TIPO BLOCO-ESTRUTURADA**



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA  
2018

**MARCELO MAIA RIBEIRO DAMASCENO**

**DESENVOLVIMENTO DE UMA MODELAGEM PARA  
ESCOAMENTOS REATIVOS EM MALHAS ADAPTATIVAS DO TIPO  
BLOCO-ESTRUTURADA**

**Tese** apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para a obtenção do título de **DOUTOR EM ENGENHARIA MECÂNICA**.

Área de concentração: Transferência de calor e mecânica dos fluidos.

Orientador: Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto

Uberlândia - MG  
2018

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG, Brasil.

---

D155d  
2018      Damasceno, Marcelo Maia Ribeiro, 1984-  
            Desenvolvimento de uma modelagem para escoamentos reativos em  
            malhas adaptativas do tipo bloco-estruturada / Marcelo Maia Ribeiro  
            Damasceno. - 2018.

134 f. : il.

Orientador: Aristeu da Silveira Neto.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia, Programa  
de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

Disponível em: <http://dx.doi.org/10.14393/ufu.te.2018.771>

Inclui bibliografia.

1. Engenharia mecânica - Teses. 2. Combustão - Teses. 3.  
Turbulência - Teses. 4. Escoamento - Teses. I. Silveira Neto, Aristeu da,  
1955- II. Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-  
Graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.

---

CDU: 621



**ALUNO:** Marcelo Maia Ribeiro Damasceno

**NÚMERO DE MATRÍCULA:** 11313EMC007

**ÁREA DE CONCENTRAÇÃO:** Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos

**LINHA DE PESQUISA:** Dinâmica dos Fluidos e Transferência de Calor

**PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA:** NÍVEL DOUTORADO

**TÍTULO DA TESE:**

***“Desenvolvimento de uma modelagem para escoamentos reativos em malhas adaptativas do tipo bloco-estruturada”***

**ORIENTADOR:** Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto

A Tese foi **APROVADA** em reunião pública, realizada no auditório do Laboratório de Mecânica dos Fluidos, Bloco 5P, Campus Santa Mônica, em 29 de março de 2018, às 13:30 horas, com a seguinte Banca Examinadora:

<b>NOME</b>	<b>ASSINATURA</b>
Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto (Orientador)	UFU
Prof. Dr. Francisco José de Souza	UFU
Prof. Dr. Marcus Antonio Viana Duarte	UFU
Profª. Drª. Carla Eponina Hori	UFU
Prof. Dr. Amir Antônio Martins de Oliveira Júnior	UFSC
Dr. Ricardo Serfaty	Petrobrás

Uberlândia, 29 de março de 2018.

*para a minha família.*



# Agradecimentos

Aos meus pais João Jorge e Rita e ao meu irmão Erick, pelos quais tenho e sempre terei admiração, respeito e amor. O primeiro, além de ser um pai exemplar, me deu o prazer de ser seu aluno em duas oportunidades. A segunda, carinhosa e protetora, sempre soube ponderar elogios e críticas. O terceiro, que não satisfeito em ser apenas irmão, se tornou um grande amigo.

À minha esposa Wlândia, por ser esta pessoa maravilhosa pela qual me apaixonei há vários anos. Também pelo companheirismo, apoio e compreensão, demonstrados durante todo o período em que estamos juntos. Por ser meu porto seguro.

Ao meu filho Téo, por ter realizado meu sonho de ser pai e me ensinado um novo significado para a expressão “amor incondicional”.

Às minhas avós Tereza e Zélia, minha tia Liana e meu primo Tiago, pelos momentos inesquecíveis compartilhados nos curtos períodos em que passamos juntos. Apesar de não poder conviver com estes na frequência que eu desejaria, desempenham um papel importantíssimo em minha vida.

Aos professores Aristeu da Silveira Neto e João Marcelo Vedovoto, pela disposição em orientar-me, compreensão, paciência e, sobretudo, pela amizade adquirida.

Aos companheiros do Laboratório de Mecânica dos Fluidos (MFLab), Abgail, Alex, Bernardo, Denise, Diego, Gabriel, Hélio, Jessica, Lívio, Márcio, Millena, Pedro Ricardo, Renato Pacheco, Renato Pimentel e Ricardo, por todas as contribuições pessoais e profissionais.

Aos membros da banca, professores Amir Antonio Martins Oliveira Jr., Carla Eponina Hori, Francisco José de Souza, Marcus Antonio Viana Duarte e Ricardo Serfaty, pela disposição em participar desta etapa tão importante em minha vida, contribuindo para o enriquecimento deste trabalho.

À Universidade Federal de Uberlândia e ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, pela oportunidade de realizar esta tese.

À Capes, FAPEMIG, CNPq e PETROBRAS pelo apoio financeiro.

A todos aqueles que, de alguma forma, contribuíram com este trabalho.

DAMASCENO, M. M. R., **Desenvolvimento de uma modelagem para escoamentos reativos em malhas adaptativas do tipo bloco-estruturada**. 2018. 134 f. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

## RESUMO

Em grande parte das aplicações técnicas, os escoamentos são turbulentos. A utilização de modelos matemáticos diferenciais, para a modelagem de escoamentos de fluidos, permite a caracterização do mesmo de forma detalhada e precisa, o que resulta em uma vasta quantidade de informações. Por este motivo, a resolução direta deste sistema de equações para casos práticos se torna impossível, fazendo com que a Simulação das Grandes Escalas apareça como uma interessante ferramenta para a caracterização de problemas envolvendo escoamentos turbulentos e reativos. A escolha do esquema numérico para o tratamento do termo advectivo destas equações também é de suma importância, já que esta tem relação direta com a qualidade da representação do fenômeno estudado. A utilização de esquemas TVD (*total variation diminishing*) resulta em soluções livres de oscilações, nas quais problemas, tais como instabilidades numéricas e geração de valores fisicamente impossíveis, são contornados. No presente trabalho, tais esquemas foram avaliados em casos canônicos como, por exemplo, advecção-difusão permanente e advecção linear transiente e em escoamentos complexos, tais como degrau descendente e jato turbulento. Quanto à modelagem das equações de transporte das espécies químicas e da energia térmica, a implementação realizada permite a experimentação numérica de escoamentos reativos com mecanismos complexos, sem a necessidade de utilização da hipótese da igualdade entre as difusividades térmica e mássica. O presente trabalho é baseado nas seguintes abordagens: Discretização da fluidodinâmica através do método dos volumes finitos, resolução do escoamento a partir da metodologia da Simulação das Grandes Escalas, com o uso do modelo de fechamento da turbulência Smagorinsky dinâmico e a aplicação de condições de entrada turbulentas, aplicação de um esquema TVD para o tratamento do termo advectivo das equações de Navier-Stokes e, por fim, utilização de uma biblioteca para a atualização de propriedades relevantes a escoamentos reativos. A aplicação da condição de entrada turbulenta *Random Flow Generation* acarretou em uma melhoria considerável na caracterização do problema estudado, quando o mesmo fora comparado com a aplicação de ruído branco ou sem geradores de perturbações. Quanto aos esquemas advectivos, a metodologia CUBISTA se mostrou a melhor opção dentre as avaliadas, não apresentando dispersão nem difusão numérica significativas. O uso de uma biblioteca para a atualização de propriedades termodinâmicas, cinéticas e de transporte se mostrou viável para a atualização das propriedades relevantes aos estudos de escoamentos reativos. Por fim, a utilização de uma formulação baseada nas difusividades das espécies na mistura, em detrimento da aplicação de uma modelagem derivada da hipótese de número de Lewis unitário, foi responsável por diferenças expressivas nos cálculos das propriedades das espécies estudadas, não sendo interessante a utilização de tal simplificação de forma generalizada.

*Palavras Chave: LES, TVD, condições de entrada turbulentas, escoamentos reativos.*

DAMASCENO, M. M. R., **Development of a reactive flow modeling in a block structured adaptive mesh**. 2018. 134 p. PhD Thesis, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

## ABSTRACT

In most technical applications the flows are turbulent. The use of Navier-Stokes equations for modeling fluid flows allows its characterization in a detailed and precise way, which results in a wide quantity of data. For this reason, the direct resolution of the resulting system of equations for practical cases becomes impossible. As a consequence, Large-eddy Simulations appears as an interesting tool for the characterization of problems involving turbulent and reactive flows. The choice of an appropriate numerical scheme for the advective term of the transport equations description is also very important, as it is directly related to the representation quality of the studied phenomenon. The use of total variation diminishing (TVD) schemes results in oscillation-free solutions, in which problems such as numerical instabilities and generation of unrealistic values are circumvented. In the present work, such schemes were evaluated in canonical situations, such as stationary advection-diffusion and transient linear advection, as well as in complex flows, such as backward-facing step and turbulent jet. According to the transport equations for species and thermal energy, the performed implementation allows the numerical simulation of reactive flows with complex mechanisms, without the need of using the equality hypothesis between thermal and mass diffusivities. The present work is based in the following approaches: Discretization of the fluid dynamics with the use of Finite Volumes Method, flow description based on Large eddy simulations, with the dynamic Smagorinsky turbulence closing model and turbulent inlet conditions, application of TVD schemes for the treatment of the Navier-Stokes equations advective term and, lastly, a library coupling, in order to update all properties related to reactive flows. The use of Random Flow Generation, as a turbulent inlet condition, resulted in a substantial improvement in the characterization of the studied problem when it was compared with white noise or without any source of perturbation. Regarding the advective schemes, CUBISTA methodology was the best option between the evaluated schemes, not presenting substantial dispersion or numerical diffusion. The use of an external library to update thermodynamic, kinetic and transport properties was considered feasible to describe relevant data in the study of reactive flows. Lastly, the use of a formulation based on species diffusivities in the mixture, instead of applying a unity Lewis number modeling, resulted in substantial differences in species properties calculations, which incapacitates the use of Lewis modeling for all situations.

*Keywords: LES, TVD, turbulent inlet conditions, reactive flows.*

# Lista de ilustrações

Figura 2.1 – Espectro de energia cinética turbulenta em função do número de onda. Descrição das metodologias RANS, LES e DNS em termos de faixas de frequências espaciais. $k_c$ é o número de onda de corte utilizado em LES. Adaptado de Poinso e Veynante (2005) . . . . .	6
Figura 2.2 – Passos para a modelagem da combustão. Adaptado de Veynante e Vervisch (2002). . . . .	18
Figura 2.3 – Diagrama de regimes para combustão pré-misturada turbulenta, adaptado de Peters (2000). . . . .	19
Figura 2.4 – Diagrama de regimes para combustão não pré-misturada turbulenta, adaptado de Peters (2000). . . . .	20
Figura 4.1 – Volume de controle elementar . . . . .	43
Figura 4.2 – Plano XY do volume de controle. . . . .	44
Figura 4.3 – Definição de variáveis locais e sistema de coordenadas (ALVES; OLIVEIRA; PINHO, 2003). . . . .	49
Figura 4.4 – Condição inicial típica da simulação de um jato em malha adaptativa. . . . .	51
Figura 5.1 – Advecção-difusão em regime estacionário, com velocidade de transporte de 0,2 m/s. . . . .	63
Figura 5.2 – Advecção-difusão em regime estacionário, com velocidade de transporte de 2,5 m/s. . . . .	63
Figura 5.3 – Advecção-difusão em regime estacionário, com velocidade de transporte de 2,5 m/s e uma melhor resolução de malha. . . . .	64
Figura 5.4 – Condição inicial e solução exata do caso 1. . . . .	65
Figura 5.5 – Experimentação numérica do caso 1. . . . .	65
Figura 5.6 – Condição inicial e solução exata do caso 2. . . . .	65
Figura 5.7 – Experimentação numérica do caso 2. . . . .	66
Figura 5.8 – Condição inicial e solução exata do caso 3. . . . .	66
Figura 5.9 – Experimentação numérica do caso 3. . . . .	66
Figura 5.10–Representação esquemática do experimento realizado por Moreau et al. (1996). . . . .	67
Figura 5.11–Estações verticais de velocidades médias obtidas com os esquemas FOU (esquerda), WENO (centro) e CUBISTA (direita). . . . .	68
Figura 5.12–Linhas de corrente médias de um escoamento em um degrau descendente, simulado com a utilização de esquema distintos para o tratamento da advecção. . . . .	68
Figura 5.13–Condição inicial do jato inerte, turbulento e incompressível Sandia D. . . . .	74
Figura 5.14–Componente $v$ da velocidade em um plano de corte no centro do domínio computacional, $z=1,44 \times 10^{-1}$ m. . . . .	74
Figura 5.15–Decaimento médio da componente da velocidade na direção do escoamento, avaliado na linha de centro do domínio computacional. . . . .	74

Figura 5.16–Taxas de progresso de reação obtidas de forma analítica e com a biblioteca Cantera. . . . .	80
Figura 5.17–Influência do mecanismo cinético na determinação de propriedades razões de equivalência. . . . .	84
Figura 5.18–Otimização da atualização de propriedades. . . . .	84
Figura 5.19–Difusividades do H <sub>2</sub> : Variável (esquerda) e Lewis unitário (direita). . . . .	85
Figura 5.20–Difusividades do O <sub>2</sub> : Variável (esquerda) e Lewis unitário (direita). . . . .	86
Figura 5.21–Frações mássicas de H <sub>2</sub> calculadas com uma formulação baseada em difusividades variáveis (esquerda) e em Lewis unitário (direita). . . . .	87
Figura 5.22–Frações mássicas de O <sub>2</sub> calculadas com uma formulação baseada em difusividades variáveis (esquerda) e em Lewis unitário (direita). . . . .	87
Figura 5.23–Massa específica calculada com uma formulação baseada em difusividades variáveis (esquerda) e em Lewis unitário (direita). . . . .	88
Figura 5.24–Magnitude da vorticidade. . . . .	90
Figura 5.25–Fração mássica de metano. . . . .	91
Figura 5.26–Massa específica da mistura. . . . .	92

# Lista de tabelas

Tabela 3.1 – Massas molares de espécies químicas distintas. . . . .	30
Tabela 3.2 – Coeficientes estequiométricos de espécies químicas distintas. . . . .	30
Tabela 3.3 – Formas de energia e entalpia utilizadas em equações de conservação. . . . .	33
Tabela 4.1 – Parâmetros característicos para a obtenção de renomados esquemas de integração temporal com a utilização do esquema IMEX de dois passos. . . . .	54
Tabela 5.1 – Comprimentos característicos de recirculações em um degrau descendente. . . . .	68
Tabela 5.2 – Comparativo de performance entre escritas binária e ASCII. . . . .	73
Tabela 5.3 – Custo computacional da simulação de equilíbrio químico com as bibliotecas Chemkin e Cantera. . . . .	77
Tabela 5.4 – Taxas de progresso de reação obtidas de forma analítica e com a biblioteca Cantera. . . . .	79
Tabela 5.5 – Difusividades das espécies na mistura, obtidas de forma analítica e com a biblioteca Cantera. . . . .	81
Tabela 5.6 – Propriedades obtidas com mecanismos globais e completos para a queima do metano. . . . .	83
Tabela 5.7 – Propriedades obtidas com os mecanismos global e completo para a queima do metano, em razões de equivalência distintas. . . . .	84

# Lista de símbolos

## Siglas

ADBQUICKEST	<i>ADaptative Bounded Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics</i>
AMR	<i>Adaptive Mesh Refinement</i>
ASCII	<i>American Standard Code for Information Interchange</i>
BDF	<i>Backward Differentiation Formula</i>
BICGSTAB	<i>Bi-Conjugate Gradient Stabilized</i>
CBC	<i>Convection Boundedness Criterion</i>
CDS	<i>Central Differencing Scheme</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CLAM	<i>Curved-Line Advection Method</i>
CNAB	<i>Crank-Nicolson Adams-Bashforth</i>
CNLF	<i>Crank-Nicolson Leap-Frog</i>
CUBISTA	<i>Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection</i>
Da	<i>Número de Damköhler</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulations</i>
EBU	<i>Eddy Break Up</i>
ENO	<i>Essentially Non-Oscillatory</i>
FOU	<i>First Order Upwind</i>
HDF	<i>Hierarchical Data Format</i>
HLP	<i>Hybrid-Linear Parabolic Approximation</i>
HRS	<i>high resolution schemes</i>
IMEX	<i>IMplicit EXplicit</i>

Ka	Número de Karlovitz
Le	Número de Lewis
LES	<i>Large Eddy Simulations</i>
Ma	Número de Mach
MCNAB	<i>Modified Crank-Nicolson Adams-Bashforth</i>
MFLab	Laboratório de Mecânica dos Fluidos
MINMOD	<i>MINimum MODulus</i>
MSIP	<i>Modified Strongly Implicit Procedure</i>
NVD	<i>Normalized Variable Diagram</i>
Pe	Número de Péclet
Pr	Número de Prandtl
QUICK	<i>Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics</i>
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>
Re	Número de Reynolds
RFG	<i>Random Flow Generation</i>
Sc	Número de Schmidt
SEM	<i>Synthetic Eddy Method</i>
SMART	<i>Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport</i>
TVD	<i>Total-Variation-Diminishing</i>
VOF	<i>Volume of Fluid</i>
VONOS	<i>Variable-Order Non-Oscillatory Scheme</i>
WACEB	<i>Weighted Average Coefficient Ensuring Boundedness</i>
WENO	<i>Weighted Essentially Non-Oscillatory</i>
XDMF	<i>eXtensible Data Model and Format</i>

### **Operadores**

$\cdot$	Produto escalar
$\int_{\Omega}$	Integral de volume
$\int_S$	Integral de superfície
$\nabla$	Gradiente

$\nabla$ .	Divergente
$\partial$	Derivada parcial
D	Derivada substantiva
<b><u>Subscritos</u></b>	
B	Centro, fundo do volume finito
b	Face fundo do volume finito
b	Gás queimado
D	<i>Downstream</i>
DB	Banco de dados armazenado
E	Centro, leste do volume finito
e	Face leste do volume finito
F	Combustível
LES	Dados reescalados de entrada
max	Máximo
N	Centro, norte do volume finito
n	Face norte do volume finito
O	Comburente
P	Centro do volume finito
P	Produto
RANS	Campos de velocidades estatísticos desejados
S	Centro, sul do volume finito
s	Face sul do volume finito
T	Centro, topo do volume finito
t	Face topo do volume finito
U	<i>Upstream</i>
u	Gás fresco
W	Centro, oeste do volume finito
w	Face oeste do volume finito

**Sobrescritos**

$\beta$	Termo exponencial da temperatura
$\beta_j$	Termo exponencial da temperatura da reação j
<b>b</b>	Gás queimado
<b>n</b>	Um passo de tempo anterior
<b>n+1</b>	Tempo atual
<b>n-1</b>	Dois passos de tempo anteriores
<b>u</b>	Gás fresco

### **Letras gregas**

$\dot{\omega}_k$	Taxa de reação da espécie k
$\dot{\omega}_{kj}$	Taxa de reação da espécie k na reação j
$\hat{\Delta}$	Segundo filtro do modelo de Smagorinky dinâmico
$\alpha_i$	Parâmetros do termo temporal do método IMEX
$\beta_i$	Parâmetros do termo advectivo do método IMEX
$\delta_{ij}$	Delta de Kronecker
$\epsilon$	Taxa de transformação viscosa
$\lambda$	Condutividade térmica
$\mu$	Viscosidade dinâmica
$\nu$	Viscosidade cinemática
$\nu_k$	Coefficiente estequiométrico líquido da espécie k
$\nu'_k$	Coefficiente estequiométrico da espécie k quando esta é produto
$\nu''_k$	Coefficiente estequiométrico da espécie k quando esta é reagente
$\nu'_{kj}$	Coefficiente estequiométrico da espécie k na reação j, quando esta é produto
$\nu''_{kj}$	Coefficiente estequiométrico da espécie k na reação j, quando esta é reagente
$\omega_{n+1}$	Relação entre dois passos de tempo consecutivos do método IMEX
$\overline{\Delta}$	Filtro com comprimento característico baseado na malha
$\rho$	Massa específica
$\sigma_{ij}$	Tensor tensão total
$\tau_{ij}$	Tensor de tensões viscosas

$\tau_{sgs}$	Escala de tempo submalha
$\tau_t$	Escala de tempo característico da turbulência
$\theta_i$	Parâmetro do termo difusivo do método IMEX
$\underline{\underline{\tau}}$	Tensor de tensões viscosas
$\xi$	Coordenada normalizada

### **Letras latinas**

$\dot{Q}$	Taxa de transformação de energia
$\vec{b}$	Vetor força de campo
$\vec{n}$	Vetor normal à superfície em que o fluido está entrando ou saindo
$\vec{V}$	Vetor velocidade
$\vec{V}^c$	Correção para o vetor velocidade
$c(\vec{x}, t)$	Coefficiente do modelo de Smagorinsky dinâmico
$\overline{u'}$	Componente da flutuação do vetor velocidade filtrado na direção x
$\bar{u}$	Componente do vetor velocidade filtrado na direção x
$\underline{\underline{I}}$	Tensor unitário
$\underline{\underline{T}}$	Tensor de tensões totais
$A_f$	Constante pré-exponencial da reação direta
$A_{fj}$	Constante pré-exponencial da reação j
$a_{ij}$	Decomposição de Cholesky
$C$	Condição CFL
$c$	Progresso de reação
$C_p$	Calor específico da mistura em pressão constante
$C_v$	Calor específico da mistura em volume constante
$C_{EBU}$	Constante do modelo de combustão <i>Eddy Break Up</i>
$C_{p,k}$	Calor específico da espécie k em pressão constante
$D_k$	Difusividade da espécie k na mistura
$D_{pk}$	Coefficiente de difusão mássica binária da espécie p com a espécie k
$E$	Energia de ativação
$E_j$	Energia de ativação da reação j

$e_t$	Energia total
F	Combustível
$f_{k,j}$	Força de campo atuando na espécie k, na direção j
$h_{f,k}^o$	Entalpia de formação da espécie k
$h_k$	Entalpia sensível e química
$h_{sk}$	Entalpia sensível da espécie k
k	Energia cinética turbulenta
$K_f$	Taxa de reação direta
$K_{fj}$	Taxa de reação direta da reação j
$K_{rj}$	Taxa de reação reversa da reação j
$L_{ij}$	Tensor de Leonard global
m	Massa
$M_{ij}$	Tensor cruzado
O	Comburente
P	Produto
p	Pressão
Q	Taxa de progresso de reação
$q_i$	Energia térmica na forma de calor em notação indicial
$Q_j$	Taxa de progresso da reação j
r	Número randômico retirado de uma distribuição normal
$R_u$	Constante universal dos gases
$R_{ij}$	Tensor de Reynolds
$rhs_{NS}$	Lado direito das equações de Navier-Stokes
$rhs_T$	Lado direito da equação de transporte de energia térmica
$rhs_{yk}$	Lado direito das equações de transporte de frações mássicas
$rhs_Z$	Lado direito da equação de transporte do escalar conservado
S	Restrição para o divergente da velocidade
s	Razão estequiométrica
$S_{ij}$	Tensor taxa de deformação

$T$	Temperatura
$t$	Tempo
$t_{adv}$	Tempo advectivo
$t_{dif}$	Tempo difusivo
$T_{ij}$	Tensor subteste
$u$	Componente do vetor velocidade na direção x
$u_i^c$	Correção para a velocidade em notação indicial
$v$	Componente do vetor velocidade na direção y
$V_{k,i}$	Componente i da velocidade de difusão V da espécie química k
$W$	Massa molar média da mistura
$w$	Componente do vetor velocidade na direção z
$W_k$	Massa molar da espécie k
$X_k$	Fração molar da espécie k
$Y_k$	Fração mássica da espécie k

# Sumário

<b>Resumo</b>	<b>viii</b>
<b>Abstract</b>	<b>ix</b>
<b>Lista de ilustrações</b>	<b>x</b>
<b>Lista de tabelas</b>	<b>xi</b>
<b>Lista de símbolos</b>	<b>xix</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Objetivos	2
1.2 Escopo da tese	3
<b>2 Revisão bibliográfica</b>	<b>5</b>
2.1 Equações de Navier-Stokes	5
2.2 Condições de entrada turbulentas	6
2.2.1 Métodos de reciclagem	7
2.2.2 Métodos sintetizadores	8
2.3 Esquemas numéricos para o tratamento do termo advectivo das equações de Navier-Stokes	11
2.4 Saída de dados baseada em HDF5/XDMF	12
2.4.1 HDF5	12
2.4.2 XDMF	13
2.5 Refinamento adaptativo	15
2.6 Escoamentos reativos	16
<b>3 Modelagem matemática</b>	<b>23</b>
3.1 Balanço de quantidade de movimento linear	23
3.2 Modelo de fechamento da turbulência: Smagorinsky dinâmico	24
3.3 Condições de entrada turbulentas	25
3.3.1 <i>Random Flow Generation</i> - RFG	25
3.4 Conservação de massa e balanço de espécies químicas	27
3.4.1 Velocidades de difusão	27
3.4.2 Termo de transformação por reação química	29
3.5 Energia	32
3.6 Modelagem da combustão pré-misturada	36
<b>4 Modelagem numérica</b>	<b>41</b>
4.1 Discretização espacial das equações de transporte	42
4.1.1 Formulações divergente e não divergente	45
4.2 Esquemas numéricos para o tratamento do termo advectivo das equações de Navier-Stokes	47
4.2.1 Esquemas clássicos para o tratamento da advecção	48
4.2.2 Esquemas TVD	49
4.3 Refinamento adaptativo	51
4.4 Integração temporal	52
4.5 Acoplamento pressão-velocidade	55
4.6 Biblioteca de atualização de propriedades: Cantera	58
<b>5 Resultados e discussões</b>	<b>61</b>

---

5.1	Esquemas numéricos para o tratamento do termo advectivo das equações de Navier-Stokes . . . . .	62
5.1.1	Advecção-difusão . . . . .	62
5.1.2	Advecção linear unidimensional . . . . .	64
5.1.3	Degrau descendente . . . . .	67
5.2	Saída de dados baseada em HDF5/XDMF . . . . .	70
5.3	Escoamento turbulento, incompressível e inerte com refinamento adaptativo de malha . . . . .	73
5.4	Biblioteca para a atualização de propriedades . . . . .	75
5.4.1	Validação da biblioteca Cantera . . . . .	78
5.4.2	Influência do mecanismo de cinética química . . . . .	81
5.5	Otimização da atualização de propriedades . . . . .	84
5.6	Influência da modelagem da difusividade mássica . . . . .	85
5.7	Jatos opostos . . . . .	89
<b>6</b>	<b>Conclusões e perspectivas . . . . .</b>	<b>95</b>
	<b>Referências . . . . .</b>	<b>99</b>



# Capítulo 1

## Introdução

Em grande parte das aplicações técnicas os escoamentos são turbulentos. Essa característica é benéfica e interessante quando busca-se um processo aprimorado de mistura ou é inevitável, devido a aspectos relacionados a velocidades, propriedades físicas e geometrias. No âmbito da combustão, exemplifica-se tal situação com a noção de que chamadas tendem a se tornar menores quando a mistura entre o combustível e o comburente é otimizada, permitindo uma combustão mais completa, com uma maior taxa de liberação de energia.

A união dos fenômenos da turbulência e da combustão pode ser encontrada em uma grande faixa de sistemas industriais. No Brasil, por exemplo, 79,8% da matriz energética é gerada por processos envolvendo a combustão (17,5% biomassa de cana, 8% lenha e carvão vegetal, 36,5% petróleo e derivados, 12,3% gás natural e 5,5% carvão mineral), indicativo reportado pelo Ministério de Minas e Energia, no ano de 2017. Tal situação tem motivado pesquisas científicas com o intuito de alcançar uma maior eficiência para os processos que envolvam combustão, com a preocupação de garantir uma menor produção de poluentes.

O estudo de tais fenômenos no âmbito da fluidodinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics* - CFD), divide-se em três principais metodologias: Simulação das Grandes Escalas (*Large Eddy Simulations* - LES), Médias de Reynolds para as Equações de Navier-Stokes (*Reynolds Averaged Navier-Stokes* - RANS) e a Simulação Numérica Direta (*Direct Numerical Simulations* - DNS). A primeira ocupa uma posição intermediária na faixa de ferramentas de predição de escoamentos turbulentos, localizada entre RANS, na qual todas as escalas da turbulência são modeladas e DNS, na qual todas as escalas da turbulência são resolvidas numericamente.

Em LES, as maiores estruturas turbilhonares, as quais são portadoras da maior quantidade de energia, são calculadas numericamente. As escalas submalha, por sua vez, bem como as suas interações com as grandes escalas, são modeladas. As maiores escalas que, usualmente, controlam o comportamento e as propriedades estatísticas dos escoamentos turbulentos, tendem a ser dependentes da geometria do problema, ao passo que as menores estruturas são caracterizadas por serem mais universais e, conseqüentemente, mais fáceis de serem modeladas.

Entretanto, a vantagem da modelagem LES de calcular grande parte das escalas presentes no espectro de energia tem sido questionada para escoamentos reativos. A discussão reside no fato das reações químicas acontecerem somente após os reagentes se tornarem misturados em nível molecular, o que sugere que estas reações ocorram principalmente nas escalas submalha. Desta forma, escoamentos turbulentos reativos não podem ser modelados como universais nas menores escalas e, portanto, os modelos submalha para as reações químicas não podem ser tão simples quanto aqueles característicos de aproximações RANS.

Por outro lado, a presença de reações químicas não invalida a hipótese de isotropia

das menores escalas. Os modelos *flamelet* de combustão turbulenta, por exemplo, pressupõem que existem estruturas de chama universais nas menores escalas. O motivo de haver falhas na utilização de aproximações RANS na predição de escoamentos reativos relaciona-se com a pouca acurácia da modelagem das grandes escalas que esta metodologia produz. Desta forma, mesmo com um modelo relativamente simples para a cinética química, a metodologia LES deve ser capaz de obter melhores resultados do que os originados por simulações RANS empregando modelos de reações químicas mais sofisticados.

Em resumo, DNS é a metodologia a ser escolhida para estudar escoamentos ocorrendo a baixos números de Reynolds, nos quais a faixa de escalas a ser resolvida é pequena. Entretanto, tal metodologia não é viável para a experimentação de escoamentos de interesse prático e industrial, ocorrendo a altos números de Reynolds. A aproximação RANS é utilizada quando o custo computacional ou a rapidez na obtenção de resultados são mais importantes do que a acurácia da solução.

A metodologia LES aparece como uma escolha interessante por prover soluções com boa acurácia e com um custo computacional acessível. Geralmente, o custo da experimentação de um escoamento ocorrendo a altos números de Reynolds com esta aproximação é comparável a uma DNS de um escoamento similar, ocorrendo a baixo número de Reynolds. Entretanto, quando as duas metodologias são avaliadas em uma mesma situação, a diferença é significativa. Sob as mesmas condições, LES é capaz de fornecer informações e acurácia semelhantes às obtidas com DNS para quantidades de interesse de engenharia, mas a um custo computacional bem reduzido. Quando comparado com RANS, LES é capaz de prover resultados com maior acurácia, além de dados mais completos, tais como espectro de frequências e flutuações de pressão, mas a um custo que pode ser superior em várias ordens de magnitude. Por fim, tendo em vista o declínio do custo computacional com o passar dos anos, espera-se que a metodologia LES seja capaz de competir não somente com RANS, mas também com experimentos materiais na obtenção de resultados com significativas acurácia e rapidez e custo computacional.

Neste âmbito, os principais objetivos do presente trabalho são apresentados na seção que se segue.

## 1.1 Objetivos

O presente trabalho tem como principal objetivo a contribuição para o desenvolvimento de uma ferramenta robusta e eficiente para a análise numérica de escoamentos com combustão turbulenta, podendo esta ser utilizada tanto para a análise de situações práticas de engenharia, quanto para estudos detalhados, tendendo à modelagem DNS.

Para a plena realização do objetivo supracitado, uma série de atividades complementares mostrou-se necessária como, por exemplo:

- Realização de pesquisa bibliográfica, visando estabelecer o estado da arte da modelagem do fenômeno da combustão.
- Estudo e implementação de uma estratégia para a otimização do uso de espaço em disco, haja vista a quantidade de dados a serem obtidos pelas experimentações do referido fenômeno.
- Estudo e implementação de esquemas para a caracterização do termo advectivo das equações de Navier-Stokes, com o intuito de evitar oscilações e difusão numérica, por exemplo, nas equações de transporte das frações mássicas (as quais não devem ser negativas ou maiores do que a unidade).

- Implementação de modelagens para a combustão na plataforma de cálculo.
- Acoplamento entre a plataforma de cálculo e uma biblioteca externa para a determinação de propriedades cinéticas, termodinâmicas e de transporte.
- Desenvolvimento de estudos relacionados com a combustão em escoamentos turbulentos, utilizando as metodologias desenvolvidas.

Um breve escopo do conteúdo do presente trabalho é apresentado na seção seguinte.

## 1.2 Escopo da tese

A sequência utilizada na redação do presente trabalho é apresentada a seguir.

No capítulo 2 será apresentada uma revisão bibliográfica, na qual serão discutidos diversos assuntos pertinentes com os objetivos do presente trabalho. A referida seção é iniciada com uma discussão acerca das aplicações das equações de Navier-Stokes em sua forma completa, bem como de possíveis simplificações das mesmas com ênfase em aproximações LES, as quais foram utilizadas no presente trabalho. Em seguida, uma breve apresentação de esquemas numéricos para o tratamento do termo não linear das referidas equações serão abordados. A importância da utilização de condições de entrada turbulentas também será discutida no referido capítulo, seguida pela estratégia utilizada para a realização de uma saída de dados binária, baseada no acoplamento HDF5/XDMF. Por fim, uma breve contemporização de trabalhos envolvendo escoamentos reativos será realizada.

Em seguida, no capítulo 3, a modelagem matemática utilizada no presente trabalho será descrita. Tal descrição abordará a formulação das equações da quantidade de movimento linear em sua forma completa, com posterior apresentação da modelagem de fechamento da turbulência para simulações LES utilizada no presente trabalho. A estratégia de geração de condições de entrada turbulentas também será discutida neste capítulo. Concluídas as seções relacionadas com as equações de Navier-Stokes, parte-se para as equações da continuidade e de transporte de espécies químicas. Neste momento, a determinação das velocidades de difusão e do termo reacional (requeridos pelo transporte das frações mássicas), são explicitados. Após tais discussões, a equação da energia térmica utilizada no presente trabalho, em função da temperatura, é obtida a partir da equação da energia total. Por fim, uma série de hipóteses simplificadoras para o estudo de escoamentos reativos serão apresentadas, culminando na geração de uma equação de transporte de um escalar passivo, a qual será utilizada para a experimentação de processos de combustão pré-misturados.

O capítulo 4, referente à modelagem numérica, é iniciado com uma discussão acerca da discretização espacial utilizada no presente trabalho. Para tal, será realizada uma demonstração da metodologia para uma das componentes de velocidade das equações de Navier-Stokes, sendo este procedimento análogo para as outras componentes desta variável e demais equações utilizadas neste trabalho. Em seguida, será realizada uma comparação entre as formulações divergente e não divergente de uma equação generalizada, com o intuito de demonstrar a diferença entre as duas formulações sob pontos de vista algébrico e numérico. O tópico seguinte apresentará as formulações dos esquemas para o tratamento do termo advectivo das equações de transporte utilizadas no presente trabalho. Neste momento, serão discutidas alternativas para a eliminação de problemas, tais como difusão numérica e oscilações em regiões caracterizadas por fortes gradientes da propriedade sendo transportada. Por fim, serão discutidos os esquemas de integração temporal, o acoplamento pressão velocidade e a biblioteca para atualização de propriedades termodinâmicas, cinéticas e de transporte utilizados no presente trabalho.

No capítulo 5, serão apresentados os resultados e discussões. Esta seção se iniciará com a análise de alguns esquemas numéricos para o tratamento do termo advectivo das equações de Navier-Stokes, aplicados a situações canônicas de estresse numérico. Um resultado contemplando os benefícios da utilização da metodologia de escrita binária será apresentado logo em seguida, acompanhado de uma experimentação de um escoamento turbulento realizado com o advento de condições de entrada turbulentas. A seguir, serão apresentados alguns experimentos, com o intuito de avaliar o desempenho da biblioteca de atualização de propriedades. Dentre estes, situações tais como a influência da utilização de mecanismos globais e completos de cinética química no estudo da combustão, cálculos de taxas de progresso de reação e de difusividades serão avaliados. Por fim, alguns exemplos da aplicabilidade da ferramenta desenvolvida são apresentados.

O capítulo final deste material será aquele em que serão apresentadas as conclusões e perspectivas do presente trabalho.

Com a conclusão deste capítulo introdutório, uma breve revisão bibliográfica acerca de temas relacionados com os objetivos do presente trabalho será apresentada no capítulo seguinte.

# Capítulo 2

## Revisão bibliográfica

No presente capítulo, objetiva-se apresentar uma revisão bibliográfica acerca do tema proposto. Para este fim, nas seções que se seguem estão disponíveis discussões sobre equações de Navier-Stokes, geração de condições de entrada turbulentas, esquemas advectivos, saída de dados binária baseada em HDF5/XDMF, refinamento adaptativo e, por fim, escoamentos reativos. Tais discussões são iniciadas na seção seguinte, a qual trata sobre as equações de Navier-Stokes.

### 2.1 Equações de Navier-Stokes

A utilização das equações de Navier-Stokes, com o intuito de modelar escoamentos de fluidos laminares ou turbulentos, permite a caracterização de um escoamento de forma detalhada e precisa. Tal característica resulta em dificuldades para situações em que há presença de turbulência, pois estas equações descrevem todo o campo de velocidades e de pressão tanto para as maiores, quanto para as menores escalas de comprimento e tempo. A quantidade de informação contida neste campo é vasta e, como consequência, a solução direta deste sistema de equações para casos práticos se torna inviável. Neste âmbito, três principais metodologias de resolução podem ser utilizadas: DNS, realizadas inicialmente por [Orszag e Patterson \(1972\)](#), LES, exploradas por [Deardorff \(1970\)](#) e RANS, realizadas por [Launder e Spalding \(1972\)](#).

A metodologia DNS caracteriza-se pelo cálculo de todas as escalas da turbulência, através da resolução do modelo diferencial sem a imposição de qualquer modelo de fechamento da turbulência. Torna-se necessário, então, um refinamento de malha capaz de capturar todo o espectro de frequências, desde as compreendidas nas maiores estruturas, até aquelas encontradas na escala de Kolmogorov, que denota as menores estruturas características de um escoamento turbulento. Devido à grande quantidade de escalas encontradas em situações de engenharia, trata-se de um método de difícil utilização para aplicações industriais, sendo de grande valia para a descrição de escoamentos base da mecânica dos fluidos. As outras duas metodologias citadas anteriormente surgem desta dificuldade de utilização da metodologia DNS. Neste âmbito, há o aparecimento da decomposição das escalas da turbulência, seja através de médias temporais ou de filtragens espaciais.

A utilização de médias temporais acarreta na decomposição da velocidade em uma parcela média e outra flutuante e na modelagem completa do espectro de energia, sendo esta a metodologia denominada de RANS. Neste método, necessita-se modelar o tensor adicional (tensor de Reynolds), originado do termo advectivo das equações de Navier-Stokes após a realização da decomposição das escalas da turbulência.

As filtragens espaciais, por sua vez, produzem as equações filtradas de Navier-Stokes, as quais são relacionadas com a metodologia LES. O filtro utilizado, associado com a malha de discretização, tem o papel de separar as escalas do escoamento. Tal artifício permite a modelagem das estruturas menores ou iguais a ordem de grandeza da malha utilizada e o cálculo das restantes.

Como esta metodologia visa a modelagem das menores escalas do escoamento, separadas por um processo de filtragem, várias aproximações foram desenvolvidas com o intuito de buscar a construção de modelos de escalas sub malha. Neste grupo, podem-se considerar os modelos de fechamento da turbulência propostos por Smagorinsky (1963), Germano et al. (1991) e Piomelli (1993). Uma descrição simplificada das três metodologias discutidas é apresentada na Fig. 2.1.

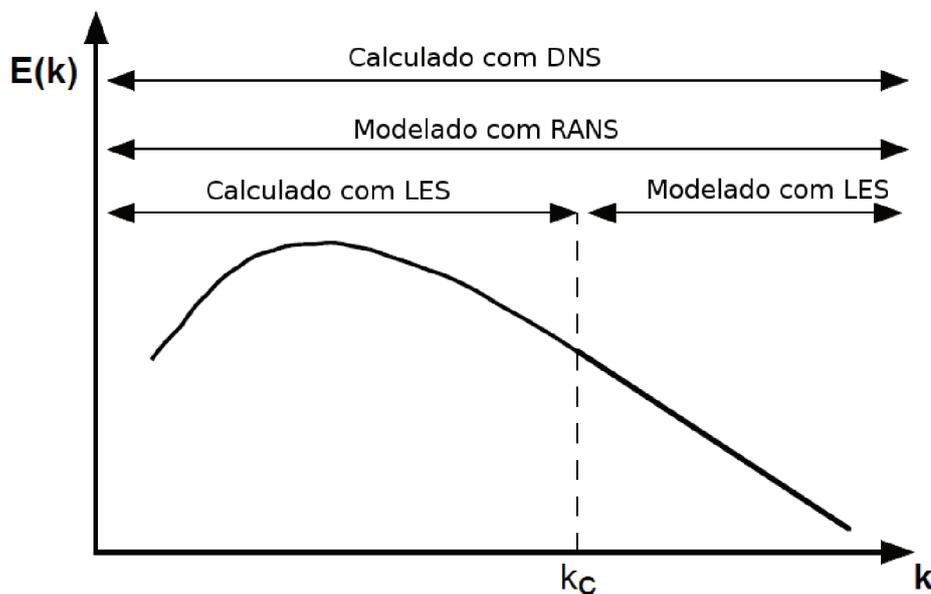


Figura 2.1 – Espectro de energia cinética turbulenta em função do número de onda. Descrição das metodologias RANS, LES e DNS em termos de faixas de frequências espaciais.  $k_c$  é o número de onda de corte utilizado em LES. Adaptado de Poinso e Veynante (2005)

Em resumo, a metodologia RANS necessita de um menor nível de refinamento quando comparada com as outras citadas. Entretanto, uma grande quantidade de informações é perdida na utilização desta aproximação já que todo o espectro de energia é modelado. Por outro lado, DNS caracteriza-se por requerer custos computacionais proibitivos, devido à necessidade de altíssimas resoluções de malha sendo, assim, restrita a problemas acadêmicos. Desta forma, LES aparece como uma interessante ferramenta para a simulação de problemas envolvendo escoamentos turbulentos e reativos.

A turbulência é um fenômeno caracterizado por apresentar peculiaridades em sua experimentação ou simulação. Isto ocorre devido à complexidade e extrema sensibilidade da mesma às condições iniciais dos campos de escoamentos turbulentos. A correta imposição das condições de entrada é, portanto, de grande importância a caracterização satisfatória de um escoamento. Neste âmbito, várias formas de geração de condições de entrada turbulentas vêm sendo desenvolvidas ao longo das últimas décadas, visando uma descrição ainda mais fidedigna do fenômeno da turbulência. Tal assunto será tratado a seguir.

## 2.2 Condições de entrada turbulentas

Um dos principais fatores que fazem da turbulência um fenômeno irregular e imprevisível é a extrema sensibilidade da mesma às condições iniciais e de contorno dos campos de escoamentos turbulentos. Assim, a especificação destas condições de forma realista, ou mais próxima possível da situação experimentada é de suma importância para a descrição do fenômeno estudado.

Em simulações RANS, perfis analíticos ou experimentais simples para as velocidades médias e variáveis turbulentas são usualmente impostas. Tal prática foi justificada por [George e Davidson \(2004\)](#), com a demonstração de que tais simulações atingem um comportamento assintótico universal, independentemente das condições de entrada, em escoamentos cisalhantes simples.

Quando se utiliza as metodologias DNS e LES, as quais apresentam comportamento turbulento, a especificação dos dados de entrada se torna mais complexa. Para estas situações, as condições mencionadas devem apresentar um sinal de velocidades transiente, que represente a turbulência na entrada do domínio.

A simulação do escoamento à entrada do domínio proveria resultados realistas para a simulação principal, porém, o domínio computacional não poderia ser estendido indefinidamente. Desta forma, condições de entrada turbulentas aproximadas devem ser especificadas, fazendo com que a geração das mesmas se torne uma interessante ferramenta para remediar este problema.

Os métodos de geração de condições de entrada dividem-se em duas categorias básicas: metodologias que partem de uma simulação anterior e as sintetizadas. A primeira baseia-se na realização de cálculos anteriores com o intuito de computar alguma forma de turbulência antes dos cálculos principais ([SPODE, 2006](#)). A segunda, por sua vez, caracteriza-se pela geração de alguma forma de flutuação randômica com posterior combinação desta com o escoamento médio à entrada do domínio. No presente trabalho, foram utilizados apenas métodos sintetizadores. Entretanto, uma breve descrição das duas aproximações, revisados por [Tabor e Baba-Ahmadi \(2010\)](#), serão descritas na sequência.

### 2.2.1 Métodos de reciclagem

O método que apresenta maior acurácia para a especificação de flutuações turbulentas para simulações do tipo LES ou DNS é a realização de uma simulação anterior, a qual servirá para prover condições de entrada realistas para a simulação principal. Caso a turbulência à entrada do domínio seja considerada como totalmente desenvolvida, condições periódicas podem ser aplicadas na direção do escoamento médio na simulação anterior. O escoamento no plano de saída é então reciclado e introduzido à entrada, em cada passo de tempo, de forma que a simulação gere seus próprios dados de entrada. Esta metodologia foi utilizada por [Friedrich e Arnal \(1990\)](#) para a simulação das grandes escalas de um degraú descendente.

[Lund, Wu e Squires \(1998\)](#) propuseram um método baseado na utilização de velocidades em um plano localizado a várias espessuras de camada limite à frente da entrada, local denominado de estação de reescalonamento, para determinar o sinal de velocidade no plano de entrada. O campo de velocidades nesta estação é decomposto em partes média e flutuante e o escalonamento é aplicado, separadamente, nas camadas interna e externa das mesmas. Tal ação fora tomada para contabilizar as diferentes leis de similaridade que são observadas nestas duas regiões. Posteriormente, a velocidade reescalada é reintroduzida como uma condição de entrada.

Os autores utilizaram-se deste procedimento para a aquisição de resultados de uma

simulação de camada limite em desenvolvimento espacial, capaz de gerar suas próprias condições de entrada. [Aider e Danet \(2006\)](#) utilizaram esta metodologia para gerar condições de entrada para escoamentos turbulentos sobre um degrau descendente. [Sagaut et al. \(2004\)](#) propuseram uma extensão à metodologia mencionada, para turbulência compressível, baseada na adição do reescalonamento e reciclagem das flutuações de temperatura e pressão às operações propostas por [Lund, Wu e Squires \(1998\)](#).

Um outro método foi proposto por [Schlüter, Pitsch e Moin \(2004\)](#). Este baseia-se na utilização de um banco de dados contendo planos de velocidade instantâneos, previamente criados por uma simulação LES com condições periódicas ou o método de [Lund, Wu e Squires \(1998\)](#). Flutuações turbulentas de velocidade são extraídas e reescaladas para apresentar as estatísticas desejadas,

$$u_{LES}(t) = \bar{u}_{RANS} + [u_{DB}(t) - \bar{u}_{DB}] \frac{\sqrt{u_{RANS}^2}}{\sqrt{u_{DB}^2}}, \quad (2.1)$$

os subscritos LES, RANS e DB denotam, respectivamente, valores para os dados reescalados de entrada, os campos de velocidades estatísticos desejados e o banco de dados armazenado. Desta forma, em acoplamentos do tipo RANS para LES, o banco de dados pode ser alterado para reproduzir as médias estatísticas que não são conhecidas. [Keating et al. \(2004\)](#) utilizaram esta metodologia para gerar condições de entrada para um escoamento em um canal com  $Re = 6900$ , utilizando um banco de dados de um escoamento ocorrendo a  $Re = 2280$ .

## 2.2.2 Métodos sintetizadores

Os métodos sintetizadores de condições de entrada geram tais condições através de procedimentos estocásticos. Estes procedimentos são baseados em geradores de números aleatórios para a construção de um sinal randômico de velocidades, que se assemelha à turbulência.

Um método básico para a geração de tais condições é a superposição de uma flutuação randômica em um perfil médio de velocidades. A principal desvantagem desta aproximação é a ausência de correlações espaciais ou temporais nos dados de entrada gerados pela mesma. Em outras palavras, ela não apresenta correlações cruzadas entre as componentes de velocidade e as correlações entre dois pontos e dois períodos de tempo. Desta forma, a turbulência gerada é rapidamente destruída pela solução das equações de Navier-Stokes, devido à grande quantidade de energia nas menores escalas de comprimento do escoamento.

Entretanto, a possibilidade de sintetizar as condições iniciais seria de grande valia, pelo fato de possibilitar a parametrização destas condições em uma faixa de valores ajustáveis, podendo-se atingir as especificações desejadas. Neste intuito, técnicas de síntese mais avançadas devem concentrar-se na geração de flutuações, que deverão envolver a introdução de correlações espaciais e ou temporais.

[Lund, Wu e Squires \(1998\)](#) propuseram uma melhoria à metodologia anterior. Trata-se de uma correlação entre as componentes da velocidade, para a situação na qual o tensor de Reynolds estaria disponível. Caso seja possível a utilização do mesmo, a decomposição de Cholesky  $a_{ij}$  pode ser utilizada para reconstruir um sinal que combine com o referido tensor:

$$u = \bar{u} + r_j a_{ij}, \quad (2.2)$$

no qual  $a_{ij}$  denota:

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} \sqrt{R_{11}} & 0 & 0 \\ R_{21}/a_{11} & \sqrt{R_{22} - a_{21}^2} & 0 \\ R_{31}/a_{11} & (R_{32} - a_{21}a_{31})/a_{22} & \sqrt{R_{33} - a_{31}^2 - a_{32}^2} \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

e  $r_j$  corresponde a números randômicos independentes retirados de uma distribuição normal.

Tal aprimoramento garante a reprodução das correlações cruzadas  $R_{ij}$  desejadas, entre as componentes de velocidade  $i$  e  $j$ . Entretanto, este ainda não possui quaisquer correlações tanto no espaço quanto no tempo, situação que resulta em uniformidade na distribuição de energia em todos os números de onda, gerando um excesso da mesma nas menores escalas.

Klein, Sadiki e Janicka (2003) propuseram um procedimento de filtragem digital para remediar esta uniformidade da distribuição de energia nos dados de entrada gerados pelo método anterior. Para uma situação unidimensional, o sinal de velocidade  $u'(j)$  é definido por uma convolução, ou seja

$$u'(j) = \sum_{k=-N}^N b_k r(j+k), \quad (2.4)$$

na qual  $b_k$  são os coeficientes do filtro,  $N$  é o suporte do mesmo e  $r(j+k)$  é o número randômico gerado no ponto  $j+k$ , por uma distribuição normal. A relação entre os coeficientes do filtro e a função correlação de dois pontos de velocidade é dada por:

$$\frac{\overline{u'(j)u'(j+m)}}{\overline{u'(j)u'(j)}} = \frac{\sum_{k=-N+m}^N b_k b_{k-m}}{\sum_{k=-N+m}^N b_k^2}. \quad (2.5)$$

A geração de um campo sintetizado de velocidades em um plano é realizada através da determinação de um campo randômico tridimensional  $r_m(i, j, k)$ , para cada componente  $m$  de velocidade. Neste caso, os índices  $i$ ,  $j$  e  $k$  representam as direções  $x$  (ou tempo  $t$ , pela hipótese de Taylor),  $y$  e  $z$ .

Um filtro tridimensional pode ser obtido pela convolução de três filtros unidimensionais:

$$b_{ijk} = b_i b_j b_k. \quad (2.6)$$

Este é utilizado para filtrar os dados randômicos  $r_m(i, j, k)$  nas três direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ .

$$U_m(1, j, k) = \sum_{i'=-N_x}^{N_x} \sum_{j'=-N_y}^{N_y} \sum_{k'=-N_z}^{N_z} b_{i'j'k'} r_m(i', j+j', k+k'). \quad (2.7)$$

Para a geração de flutuações que reproduzam exatamente as correlações de dois pontos desejadas,  $\overline{u'(j)u'(j+m)}$ , os coeficientes do filtro  $b_k$  devem ser computados pela inversão da Eq. 2.5. Pelo fato do tensor autocorrelação de dois pontos não ser comumente disponibilizado, Klein, Sadiki e Janicka (2003) assumiram uma forma gaussiana dependendo apenas da escala de comprimento,  $L = n\Delta x$ , de forma a tornar possível o cálculo dos coeficientes sem a inversão da equação mencionada anteriormente, de forma analítica:

$$b_k \approx \frac{\tilde{b}_k}{\sum_{j=-N}^N \tilde{b}_j^2}, \quad (2.8)$$

$$\tilde{b}_k = \exp\left(-\frac{\pi k^2}{2n^2}\right). \quad (2.9)$$

Com a determinação do sinal randômico pela Eq. 2.7, a velocidade à entrada é escrita como:

$$u_i = \tilde{u}_i + U_m(1, j, k)a_{i,j}. \quad (2.10)$$

Outra vertente dos métodos sintetizadores de condições de entrada é a metodologia espectral, que parte de uma decomposição do sinal em modos de Fourier. Kraichnan (1970) utilizou essa metodologia para estudar a difusão de um escalar passivo, através de um campo de velocidades sintetizados tridimensional, homogêneo e isotrópico.

$$u'(x) = \sum_k \hat{u}_\kappa e^{-i\kappa x}, \quad (2.11)$$

no qual  $\kappa$  é um número de onda tridimensional. Cada coeficiente complexo de Fourier,  $\tilde{u}_\kappa$ , possui uma amplitude calculada a partir de um espectro de energia isotrópico tridimensional  $E(|\kappa|)$  e uma fase randômica  $\theta_\kappa$ , retirada de uma distribuição uniforme no intervalo  $[0, 2\pi]$  (ROGALLO, 1981). O campo sintetizado de flutuações se torna:

$$u'(x) = \sum_k \sqrt{E(|\kappa|)} e^{-i(\kappa x + \theta_\kappa)}. \quad (2.12)$$

Lee, Lele e Moin (1992) propuseram uma aplicação da metodologia de Kraichnan (1970) que permitiu a utilização da mesma em escoamentos turbulentos em desenvolvimento espacial. Neste trabalho, os autores demonstraram a possibilidade de geração de um sinal turbulento sintetizado no qual é permitida a obtenção de campos de velocidade sintetizados à entrada do domínio, com correlações temporais adequadas.

A partir do trabalho mencionado anteriormente, Le, Moin e Kim (1997) propuseram um método para a geração de sinais randômicos e anisotrópicos. Segundo os autores, um sinal turbulento isotrópico sintetizado é gerado e reescalado através da decomposição de Cholesky (Eq. 2.3). Desta forma, as flutuações geradas correspondem ao tensor de Reynolds fornecido.

Smirnov, Shi e Celik (2001) propuseram uma metodologia capaz de obter um campo turbulento de velocidades a partir de dados estatísticos, denominada de *Random Flow Generation*, RFG. Esta baseia-se em decomposições de Fourier, com coeficientes calculados através de dados espectrais obtidos em diferentes regiões do escoamento, baseados em tempos turbulentos locais e escalas de comprimento.

As aproximações propostas por Klein, Sadiki e Janicka (2003) e por Smirnov, Shi e Celik (2001) foram estudadas e comparadas por Vedovoto et al. (2011). O autor demonstrou que as duas metodologias apresentam um custo computacional equiparável, aproximadamente 25% maior do que uma superposição de ruído branco. Concluiu, também, que o método de Klein, Sadiki e Janicka (2003) não apresenta correlações temporais, além de não ser capaz de gerar campos de velocidade não divergentes à entrada do domínio.

Finalmente, Jarrin et al. (2006) propuseram uma nova metodologia de geração de condições de entrada turbulentas, denominada *Synthetic Eddy Method*, SEM. A mesma, juntamente com aquela proposta por Smirnov, Shi e Celik (2001) foram estudadas por Damasceno, Vedovoto e Silveira-Neto (2015). Tais autores concluíram que a aplicação destas condições acarretou em resultados mais condizentes do que aqueles obtidos sem a referida modelagem, principalmente quando perfis de flutuação de velocidade média foram analisados. Tal fato se deve a uma melhor distribuição da energia cinética turbulenta, a qual se apresenta em maior quantidade contida nas maiores estruturas turbilhonares. Com relação ao desempenho das duas metodologias, os autores concluíram que a aproximação SEM foi aquela que obteve os melhores resultados de

médias de velocidades, ao passo que os perfis de flutuação desta mesma variável foram melhor caracterizados pelo método RFG.

Outro tópico de relativa importância na realização de experimentos numéricos relaciona-se com o cálculo do termo advectivo das equações de Navier-Stokes. Um breve discussão acerca de trabalhos relacionados com o referido tema é realizada na seção seguinte.

## 2.3 Esquemas numéricos para o tratamento do termo advectivo das equações de Navier-Stokes

Em sua maioria, problemas envolvendo escoamentos de fluidos são caracterizados por possuir alto poder advectivo. Desta forma, a correta determinação do termo não linear das equações de Navier-Stokes é um assunto importante, desafiador e que exige o desenvolvimento de esquemas numéricos eficientes, robustos e precisos. Esquemas de ordens superiores tornam-se, portanto, necessários para uma caracterização mais realista da advecção. Entretanto, é preciso se ater ao fato de alguns destes esquemas, tais como diferenças centradas, upwind de segunda ordem, QUICK, dentre outros, não serem incondicionalmente estáveis. Tal característica pode acarretar em oscilações indesejáveis na solução do problema podendo resultar, por exemplo, em frações mássicas negativas ou superiores à unidade, gerando resultados fisicamente impossíveis.

Neste âmbito, a imposição de propriedades delimitadoras acarreta na criação dos chamados esquemas de alta resolução (*high resolution schemes*, HRS), os quais são capazes de representar descontinuidades sem a introdução de oscilações na solução. Uma forma de geração de esquemas HRS é baseada na inserção de funções limitadoras de fluxo, as quais têm como objetivo garantir que valores de uma propriedade transportada se mantenham dentro dos limites impostos por valores vizinhos. Tal metodologia, conhecida por variação total diminuída (*Total-Variation-Diminishing*, TVD) será estudada na presente seção.

Metodologias bastante difundidas na literatura são caracterizadas pela utilização de um esquema numérico de elevada acurácia em regiões suaves e, ao mesmo tempo, pela adição de uma dissipação numérica controlada em regiões de gradientes elevados. Desta forma, tais aproximações visam a obtenção de estabilidade da solução numérica, além de serem capazes de capturar descontinuidades, computacionalmente simples de serem implementados e de baixo custo computacional.

Uma estratégia bastante comum para alcançar esses objetivos tem sido combinar variáveis normalizadas de Leonard (1980), ou limitadores de fluxo (SWEBY, 1984), com as condições para estabilidade não linear TVD de Harten (1983) e CBC (*Convection Boundedness Criterion*) de Gaskell e Lau (1988).

Nas últimas décadas, vários autores têm buscado derivar esquemas advectivos de alta resolução que satisfizessem as exigências mencionadas anteriormente. Dentre estes, destacam-se os trabalhos de Zhu (1992) (*Hybrid-Linear Parabolic Approximation* - HLPA), de Gaskell e Lau (1988) (*Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport* - SMART), de Song et al. (2000) (*Weighted Average Coefficient Ensuring Boundedness* - WACEB), de Varonos e Bergeles (1998) (*Variable-Order Non-Oscillatory Scheme* - VONOS) e, mais recentemente, de Alves, Oliveira e Pinho (2003) (*Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection* - CUBISTA).

Por fim, há outra classe de esquemas de alta resolução, conhecidos como ENO (*Essentially Non-Oscillatory*) e WENO (*Weighted Essentially Non-Oscillatory*), os quais são apropriados para capturar descontinuidades e pontos extremos com alta ordem de precisão (HARTEN, 1987). Nesses esquemas, alta ordem é alcançada usando polinômios interpoladores de graus elevados,

os quais não garantem resultados não oscilatórios. O diferencial de tais metodologias reside no fato das mesmas utilizarem um estêncil variável de células computacionais, o que torna esta técnica mais difícil de ser implementada, além de requerer um número elevado de operações aritméticas a cada passo no tempo.

A diferença entre ENO/WENO e esquemas CBC/TVD é que os esquemas ENO/WENO têm a propriedade de reter a mesma ordem de acurácia espacial em todo o domínio, inclusive em regiões de descontinuidades e pontos extremos, ao passo que os esquemas CBC/TVD oferecem primeira ordem de acurácia em regiões críticas. Em outras palavras, a dissipação numérica contida nos esquemas ENO/WENO é intrinsecamente menor que aquela gerada nos esquemas CBC/TVD.

Em simulações de escoamentos turbulentos e reativos, as reações químicas ocorrem bem abaixo da resolução limite do filtro de LES e, conseqüentemente, sua modelagem torna-se necessária para a predição do estado químico da simulação. Por este motivo, a malha computacional para estes tipos de problemas deve ser bem refinada, o que acarreta na geração de arquivos ocupando uma elevada quantidade de espaço em disco. Por este motivo, uma metodologia de escrita binária para a otimização de tempo de escrita e de armazenamento de dados é discutida na seção seguinte.

## 2.4 Saída de dados baseada em HDF5/XDMF

A metodologia de escrita de dados de forma binária é baseada na utilização de HDF5 ([THE HDF GROUP, 2013](#)), para o armazenamento e organização da grande quantidade de dados a ser gerada e XDMF ([XDMFWEB, 2013](#)), para a tradução destes dados armazenados para um aplicativo de pós-processamento. Nas seções seguintes, tais ferramentas serão discutidas.

### 2.4.1 HDF5

O Formato de Dados Hierárquico (*Hierarchical Data Format*, HDF) é o nome de um conjunto de formatos de arquivos e bibliotecas projetados para armazenar e organizar grandes quantidades de dados numéricos. HDF5, por sua vez, diz respeito a uma atualização do HDF4 e fora desenvolvido para resolver algumas das limitações das bibliotecas de seu predecessor, além de tratar requisitos atuais e futuros de sistemas e aplicações modernas. Este formato simplifica a estrutura de arquivos para incluir apenas dois tipos principais de objetos:

- *Datasets*, que são matrizes multidimensionais de tipo homogêneo
- *Groups*, que são estruturas que podem armazenar *datasets* e outros *groups*.

Um *dataset* é armazenado em um arquivo em duas partes: um cabeçalho e um conjunto de dados. A primeira contém informações que são necessárias para a interpretação dos dados da outra parte do *dataset*, tais como metadados que descrevem este objeto. As informações de cabeçalho incluem o nome do objeto, dimensão, tipo de dados, informações sobre a maneira como estes são armazenados em disco, além de outras informações utilizadas pela biblioteca para acelerar o acesso ao *dataset* ou manter a integridade do arquivo. Há quatro classes essenciais de informações em um cabeçalho: *name*, *datatype*, *dataspace* e layout de armazenamento e estas são brevemente discutidas a seguir.

**Name:** Um nome de *dataset* é uma sequência de caracteres alfanuméricos em ASCII (*American Standard Code for Information Interchange*).

**Datatype:** Tipos de dados. Há quatro tipos de *datatypes*:

- Atomic: são aqueles que não são decompostos no nível de interface do *datatype*, tais como números inteiros e reais.
- NATIVE: são instâncias específicas de *datatypes* do tipo *atomic*.
- Compound: são formados por *datatypes* do tipo *atomic*.
- Named: podem ser *datatypes* do tipo *atomic* ou *compound*, que foram especificamente designados para serem compartilhados entre *datasets*.

Os *datatypes* suportados são: Inteiros (8-bit, 16-bit, 32-bit e 64-bit - nos formatos *little-endian* e *big-endian*), reais (IEEE 32-bit e 64-bit - nos formatos *little-endian* e *big-endian*), referências e *strings*.

**Dataspace:** Um *dataspace* descreve a dimensão do *dataset* e esta pode ser fixa ou ilimitada. Como propriedades desta classe, pode-se citar o *rank* (número de dimensões) do conjunto de dados, o tamanho atual das dimensões deste conjunto, além dos tamanhos máximos das dimensões do mesmo. Um *dataspace* também pode descrever partes de um *dataset*, tornando possível a realização de operações parciais de entrada e saída em seleções.

**Layout de armazenamento:** O formato HDF5 torna possível o armazenamento de dados em diferentes maneiras, sendo que o layout padrão de armazenamento é contíguo, no qual os dados são salvos da mesma forma em que eles são organizados na memória. Há dois outros layouts para este fim: compacto e fragmentado. O primeiro é utilizado quando a quantidade de dados é pequena, podendo ser armazenada diretamente no cabeçalho do objeto, ao passo que o segundo envolve a divisão do *dataset* em fragmentos iguais, que são armazenados separadamente.

Desta forma, os arquivos HDF5 podem ser utilizados para armazenar uma grande variedade de conjuntos de dados e muitas estruturas complexas podem ser decompostas em conjuntos de dados e salvos em arquivos HDF5. Caso um aplicativo (tal como um programa de pós-processamento) necessite fazer a leitura de tais dados em um nível mais complexo de objetos, tais valores devem ser interpretados. O formato de arquivos XDMF provê suporte para a criação de um arquivo XML, que pode ser utilizado para informar este aplicativo sobre a maneira que o mesmo deve interpretar um conjunto de dados em HDF5. Tal ideia é apresentada na próxima seção.

## 2.4.2 XDMF

A ideia básica da utilização do leitor XDMF (*eXtensible Data Model and Format*) consiste na aplicação de um esquema XML (arquivo *.xmf*), com o intuito de traduzir os arquivos de dados em HDF5 para uma linguagem que um aplicativo de pós-processamento possa entender. Desta forma, o arquivo *.xmf* é aberto pelo aplicativo e este faz a leitura dos dados em HDF5 através do plugin de leitura do banco de dados XDMF.

Esta ferramenta é organizada em uma série de elementos, sendo que o primeiro a ser utilizado é o elemento XDMF. Este tem o intuito de prover aos *parsers* uma distinção entre versões anteriores desta ferramenta (através de um atributo do tipo *Version* - atualmente na versão 2.0).

Elementos XDMF contêm um ou mais elementos do tipo *Domain* (domínio computacional) e estes podem possuir um ou mais elementos *Grid* que, por sua vez, contêm elementos do

tipo *Topology*, *Geometry* e zero ou mais *Attributes*. O primeiro especifica a conectividade da malha, enquanto o segundo define a localização dos nós da mesma. Por fim, os elementos *Attribute* são utilizados para especificar valores tais como escalares e vetores que podem localizar-se nos nós, faces e centros de célula ou malha.

Para a especificação de valores para conectividade, geometria ou *attributes*, o XDMF define um elemento *DataItem*, o qual pode prover valores numéricos ou o endereço de um arquivo HDF5, por exemplo. Existem seis tipos de *DataItems*:

- *Uniform*, representando um conjunto simples de valores.
- *Collection*, denotando um conjunto unidimensional de *DataItems*.
- *Tree*, definindo uma estrutura hierárquica de *DataItems*.
- *HyperSlab*, composto por dois *DataItems*, sendo que o primeiro contém o início, tamanho e índices de contadores do segundo *DataItem*.
- *Coordinates*, composto por dois *DataItems*, sendo que o primeiro contém as coordenadas paramétricas do segundo *DataItem*.
- *Function*, que calcula uma expressão.

O elemento *DataItem* é utilizado para definir uma parte do formato de dados do XDMF. É suficiente para especificar estruturas de dados razoavelmente complexas de maneira portátil. O modelo de parte de dados do XDMF é iniciado com o elemento *Grid*, que tem o papel de armazenar informações relacionadas a pontos bi ou tridimensionais, conectividade estruturada ou não estruturada, além de valores atribuídos para a malha a ser utilizada. Este elemento possui um atributo do tipo *GridType*, o qual possui os seguintes argumentos válidos:

- *Uniform*, uma simples malha homogênea.
- *Collection*, um conjunto de malhas uniformes com os mesmos atributos.
- *Tree*, um grupo hierárquico.
- *SubSet*, uma parte de outro elemento *Grid*.

Elementos *Uniform Grid* são os tipos mais simples e devem conter elementos *Topology* e *Geometry*. Caso o *GridType* seja do tipo *Collection*, este deve ser especificado por meio de um atributo *CollectionType*, podendo ser *Spatial* ou *Temporal*. Tal como ocorre com o elemento *DataItem*, os elementos *Grid* do tipo *Tree* e *Collection* contêm outros elementos *Grid* como filhos.

O elemento *Topology* descreve a organização geral dos dados. Para malhas estruturadas a conectividade é implícita, ao passo que, para as não estruturadas, um atributo *Order* deve ser especificado para a definição desta característica. Os seguintes tipos de elementos *Topology* são definidos:

**Linear:** *Polyvertex* (grupo de pontos desconectados), *polyline* (grupo de segmentos de reta), *polygon*, *triangle*, *quadrilateral*, *tetrahedron*, *pyramid*, *wedge*, *hexahedron*.

**Quadratic:** *Edge\_3* (linha quadrática com 3 nós), *tri\_6*, *quad\_8*, *tet\_10*, *pyramid\_13*, *wedge\_15*, *hex\_20*.

**Arbitrary:** *Mixed* (mescla de células não estruturadas).

**Structured:** *2DSMesh* (curvilíneo), *2DRectMesh* (eixos perpendiculares), *2DCoRectMesh* (eixos perpendiculares e espaçamento constante), *3DSMesh*, *3DRectMesh*, *3DCoRectMesh*.

O elemento *Geometry* descreve os valores XYZ da malha. O argumento padrão é XYZ, que consiste na definição de valores de X, Y e Z para cada ponto, iniciando no índice paramétrico 0. Possíveis organizações são:

- XYZ, definindo posições entrelaçadas.
- XY, no qual Z atribui valor de 0.0.
- VXVYVZ, composto por três vetores, um pra cada eixo.
- *ORIGIN\_DXDYDZ*, definido por seis valores:  $O_x, O_y, O_z + D_x, D_y, D_z$ .
- *ORIGIN\_DX DY* composto por quatro valores:  $O_x, O_y + D_x, D_y$ .

O elemento *Attribute* define valores associados com a malha. Os tipos suportados de valores são: *Scalar*, *vector*, *tensor*, *tensor6* (um tensor simétrico), *matrix* (uma matriz NxM arbitrária). Tais valores podem ser posicionados nos centros de nós, faces, células ou malhas.

Por fim, o elemento *Time* é um filho do elemento *Grid*, com o intuito de definir informações temporais para a malha computacional. O tipo de elementos temporais é especificado pelo atributo *TimeType* da seguinte forma:

- *Single*, representando um único valor temporal para toda a malha.
- *HyperSlab*, definindo início, passo de tempo e contador.
- *List*, composto por uma lista de tempos discretos.
- *Range*, com tempos mínimo e máximo.

Experimentos numéricos para caracterizar escoamentos reativos requerem uma malha computacional bem refinada. Desta forma, a utilização de malhas estruturadas e uniformes se torna impraticáveis para os referidos problemas, por resultarem em elevados custos computacionais. A redução de tais custos pode ser obtida, além da alternativa apresentada nesta seção, com a utilização de uma estratégia de refinamento adaptativo de malha, a qual será discutida na seção seguinte.

## 2.5 Refinamento adaptativo

A maioria dos métodos numéricos assume que o domínio de interesse seja dividido em pequenas células e, por consequência, define malha como sendo o conjunto destes elementos. Há dois tipos principais de malhas, as estruturadas e as não estruturada, sendo que as primeiras oferecem certas vantagens sobre as últimas como, por exemplo, o fato de serem de simples implementação e de requerer menor capacidade de armazenamento. Por outro lado, a grande desvantagem de uma malha estruturada é a falta de flexibilidade em ajustar o domínio a uma forma mais complexa, situação facilmente contornada com a utilização de malhas não estruturadas.

Quando se trata de escoamentos reativos, a região de interesse se resume a uma pequena parcela do domínio de cálculo. Tal característica implica na necessidade de um refinamento

localizado, com o intuito de capturar fenômenos físicos locais. Neste âmbito, a adaptatividade aparece como uma técnica importante a ser considerada para a solução eficiente para este tipo de situação. O termo refinamento adaptativo de malhas (*Adaptive Mesh Refinement* - AMR) se resume a concentrar as melhores resoluções dos volumes de controle em regiões de interesse. Esta ideia evita o alto custo computacional necessário para simular um problema em uma malha uniforme tridimensional.

A princípio, distinguem-se dois tipos de aproximação adaptativa: o refinamento estático, no qual as regiões de refinamento no domínio computacional são determinadas antes da execução do método numérico iniciar, e o refinamento dinâmico, no qual as regiões de refinamento são determinadas durante a execução do método numérico, controlado por algum critério de adaptatividade apropriado, tal como vorticidade. Na prática, as duas aproximações podem ser combinadas.

Desenvolvida inicialmente por [Berger e Oliger \(1984\)](#), a metodologia de malhas bloco-estruturadas refinadas localmente permitiu a obtenção da solução de equações diferenciais parciais. Posteriormente, esta aproximação se mostrou efetiva para a simulação de dinâmica de gases em duas dimensões ([BERGER; COLELLA, 1989](#)) e em três dimensões ([BELL et al., 1994](#)). [Howell e Bell \(1997\)](#) aplicaram esse tipo de refinamento em escoamentos incompressíveis, recorrendo ao método de projeção de [Bell, Colella e Glaz \(1989\)](#). [Roma, Peskin e Berger \(1999\)](#) estenderam a metodologia de refinamento adaptativo para escoamentos ao redor de geometrias complexas, onde o problema era tratado empregando o Método da Fronteira Imersa.

No Laboratório de Mecânica dos Fluidos da Universidade Federal de Uberlândia, [Villar \(2007\)](#) estudou escoamentos bifásicos com a aplicação de métodos híbridos *Front-Tracking/Front-Capturing*, os quais levam à separação do problema em dois domínios distintos: um fixo, euleriano, utilizado para discretizar as equações de ambas as fases e outro móvel, lagrangiano, usado para as interfaces. A autora apresentou resultados para escoamentos bifásicos com uma e múltiplas bolhas. [Barbi \(2016\)](#), por sua vez, utilizou o método *Volume of Fluid* (VOF) para a representação deste tipo de escoamento, acoplado com um algoritmo para identificação de bolhas, com o qual tornou-se possível a realização de operações sobre uma mesma bolha em meio à uma população. Por fim, [Melo \(2017\)](#) apresentou uma modelagem para a fronteira imersa térmica, com condições de primeira, segunda e terceira espécies.

Na área de combustão a estratégia AMR vem sendo utilizada por [PEMBER et al. \(1998\)](#), [Bell \(2005\)](#), [Day e Bell \(2000\)](#), [Northrup e Groth \(2009\)](#) e [Gao e Groth \(2010\)](#) na simulação de chamas não pré-misturadas, de chamas de hidrogênio pré-misturadas. Além da estratégia AMR a metodologia destes trabalhos envolve aproximações a baixo número de Mach, modelo de química detalhada para as reações químicas, paralelismo e simulação numérica direta DNS. Neste âmbito, uma breve discussão sobre escoamentos reativos é apresentada na seção seguinte.

## 2.6 Escoamentos reativos

A quantidade de sistemas de combustão utilizados tem aumentado significativamente com o passar dos anos. Tal crescimento está diretamente relacionado com poluição e problemas ambientais, o que implica na necessidade de se obter o controle preciso de chamas turbulentas.

Atualmente, a computação, os experimentos materiais e a teoria se complementam como uma ferramenta de pesquisa para a produção de informações de múltiplas escalas que não se encontram disponíveis. CFD é utilizada de forma eficaz para otimizar o projeto de sistemas aerodinâmicos. Com os mesmos objetivos, uma quantidade significativa de trabalhos se dedicou à modelagem da combustão turbulenta, a partir de uma grande variedade de aproximações e

distintas estratégias de modelagem. Dentre estes trabalhos, se destacam os estudos de Williams (1985), Poinso e Veynante (2005), Veynante e Vervisch (2002), Kuo (2005), Westbrook et al. (2005), Peters (2000), Peters (2009), dentre outros.

Uma grande faixa de problemas acoplados estão relacionados com chamas turbulentas, tais como:

- As propriedades de transporte do sistema de combustão devem ser bem conhecidas, para que haja uma descrição correta do processo de mistura entre os reagentes e, de forma mais genérica, todos os fenômenos de transferência ocorrendo em chamas turbulentas (transferência de energia, difusão molecular, advecção, etc).
- Mecanismos detalhados de reações químicas são necessários para estimar a taxa de consumo de combustível, a formação de produtos da combustão e de poluentes. Conhecimentos de cinética são extremamente necessários para a predição da ignição, estabilização ou extinção das zonas de reação.
- Sistemas com duas e três fases podem ser encontrados. A injeção de combustível líquido representa um procedimento comum e a distribuição espacial tridimensional de reagentes gasosos depende de interações complexas entre o *break up* do líquido, a vaporização do mesmo, a mistura turbulenta e a combustão de gotículas.
- A transferência de energia por radiação é gerada na região interna da chama por algumas espécies químicas e partículas de carbono, oriundas da formação de fuligem e transportadas pelo escoamento. Em fornalhas, as paredes também interagem com a combustão através da radiação.

A partir de tais observações, percebe-se que a modelagem da combustão turbulenta representa um assunto extenso e complexo. A modelagem numérica deste processo é desenvolvida baseada nos seguintes passos, resumidos na Fig. 2.2:

Na referida figura, três diferentes formas de estudo da combustão são apresentados: estudos fundamentais, experimentos materiais simplificados e DNS, os quais são discutidos a seguir:

- Sob hipóteses, tais como limite de energia de ativação alto, a análise assintótica (LIÑAN; WILLIAMS, 1993; CLAVIN, 1994; BUCKMASTER; LUDFORD, 1982) permite a determinação analítica das propriedades da chama em problemas bem definidos (ignição, propagação de frente de chama, instabilidades e acústica, etc.). Esta aproximação, limitada a situações simplificadas, acarreta em resultados analíticos exibindo importantes fatores de escala (números adimensionais) e comportamentos de muitos tipos de chama. Tal análise é particularmente interessante para a realização de comparações quantitativas entre vários fenômenos.
- Experimentos simplificados são úteis para se entender as propriedades básicas da combustão, tais como chamas laminares, interações chama/recirculações, etc. (ROBERTS; DRISCOLL, 1991; MUELLER et al., 1998). Estes experimentos são acompanhados por simulações numéricas de chamas laminares incorporando química complexa e transporte de várias espécies, bem como perdas de energia por radiação (SMOOKE; MITCHELL; KEYES, 1986).
- Com o advento de DNS, todas as escalas da turbulência são calculadas sem a necessidade de recorrer a termos de fechamento.

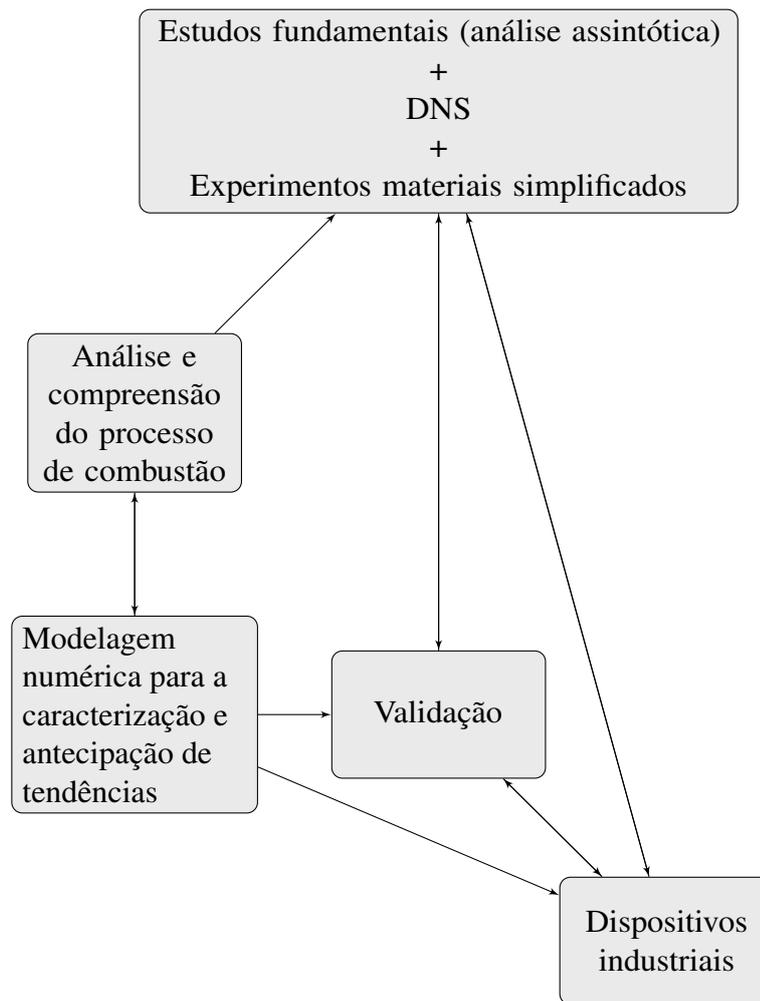


Figura 2.2 – Passos para a modelagem da combustão. Adaptado de [Veynante e Vervisch \(2002\)](#).

Por causa da grande quantidade de graus de liberdade envolvidos no fenômeno da combustão turbulenta, a DNS de um sistema real de engenharia se torna impraticável, o que garante a necessidade de utilização de técnicas de filtragem, as quais acarretam na geração de um sistema de equações aberto. Por este motivo, modelos para as chamas turbulentas foram desenvolvidos requerendo, assim, procedimentos de validação para os mesmos. A modelagem numérica é validada a partir de comparações com medidas obtidas de experimentos materiais, baseados em configurações mais próximas possíveis de sistemas industriais. Por fim, o último passo é a simulação de um dispositivo real de combustão.

Em resumo, a modelagem da combustão turbulenta se define como um ciclo contínuo entre estudos teóricos para analisar a combustão, entender as chamas e aprimorar modelos, implementação dos mesmos em CFD, medidas experimentais e comparações entre estes dados experimentais e os resultados numéricos obtidos. Qualitativamente, pode-se dividir o referido fenômeno em duas categorias: combustão pré-misturada e não pré-misturada.

A combustão pré-misturada requer que combustível e comburente estejam completamente misturados antes que o fenômeno em si ocorra. Como exemplos de aplicações práticas, pode-se citar os motores de combustão interna, turbinas a gás e queimadores domésticos. Em todos os casos mencionados, combustível e ar são misturados antes de entrar na câmara de combustão. Tal pré-mistura somente é possível à temperaturas suficientemente baixas, nas quais a ramificação do

mecanismo que leva à oxidação de hidrogênio e hidrocarbonetos é incapaz de competir com as reações de terceiro corpo. Sob tais condições de temperatura, as reações de combustão são ditas congeladas. O estado congelado é metaestável, pois uma fonte de energia térmica suficientemente forte pode aumentar a temperatura e iniciar o processo de combustão.

Assim que combustível e comburente estiverem homoganeamente misturados e uma fonte de energia térmica for fornecida, torna-se possível a propagação de uma frente de chama através da mistura. Tal situação ocorrerá se a relação combustível-ar estiver entre os limites de flamabilidade, de  $\phi = 0,5$  até  $\phi = 1,5$ , nos quais  $\phi$  representa a relação de equivalência entre combustível e ar. Devido à sensibilidade das taxas de reação com a temperatura, o à montante da frente de chama rapidamente se aproxima do estado de gás queimado, ao passo que a mistura à jusante da mesma se mantém no estado fresco (não queimado). Portanto, este sistema reativo como um todo contém dois estados estáveis, gases frescos e queimados. Em combustão pré-misturada, ambos estados existem no sistema ao mesmo tempo, sendo separados pela frente de chama, na qual a transição de um estado para o outro acontece.

Escoamentos reativos pré-misturados e turbulentos são descritos por uma grande faixa de escalas de tempo e de espaço características. Borghi (1985) e Peters (2000) definiram os possíveis modos de interação entre as estruturas turbilhonares e de chama, a partir da análise de resultados experimentais de chamas turbulentas pré-misturadas. Tais interações são baseadas nas relações entre as escalas de tempo e comprimento turbulentas e da combustão. Desta forma, os regimes de combustão podem ser representados graficamente, por um diagrama conhecido como o diagrama de Borghi, o qual é apresentado na Fig. 2.3.

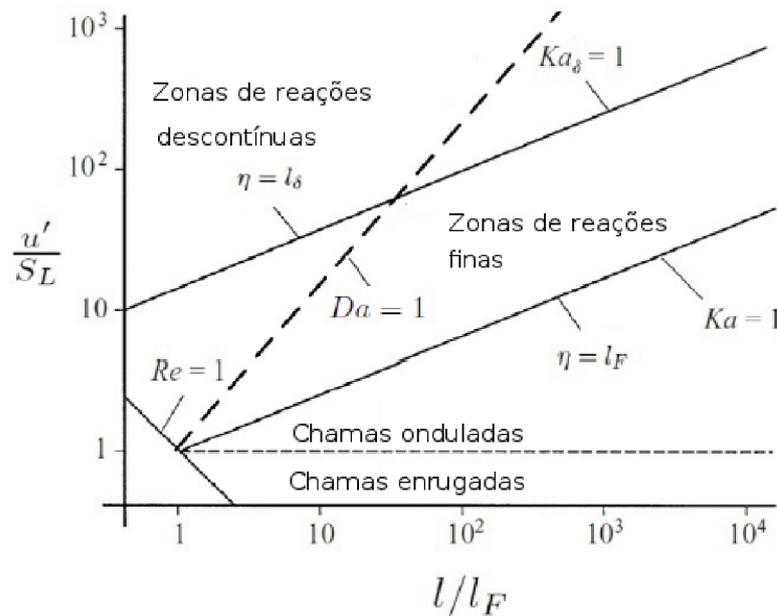


Figura 2.3 – Diagrama de regimes para combustão pré-misturada turbulenta, adaptado de Peters (2000).

No diagrama apresentado na Fig. 2.3, a abcissa expressa a razão  $l/l_F$ , a qual pode ser interpretada como uma medida da escala de comprimento integral da turbulência,  $l$ , interagindo com chamas de espessura  $l_F$ .  $l_F$  representa a espessura total de uma chama laminar, proporcional à espessura da zona de pré-aquecimento. O tamanho da camada interna, na qual grande parte das reações acontece, é denominada  $l_\delta$ . Esta última é, aproximadamente,  $0,1 l_F$ . A ordenada

apresenta a razão  $u'/S_L$ , a qual representa uma medida da intensidade turbulenta  $u'$ , sobre a velocidade de chama laminar  $S_L$ . A linha  $Re_T = 1$ , com  $Re_T = u'l/S_L l_F$  (BORGHI, 1985), delinea o regime de combustão turbulenta ( $Re_T > 1$ ).

A análise do diagrama apresentado na Fig. 2.3 permite a identificação de, pelo menos, quatro diferentes regimes de combustão turbulenta pré-misturada:

1. Regime de chamas enrugadas: é delimitado pela condição  $u'/S_L < 1$ . A velocidade de chama laminar é maior do que a intensidade das flutuações e, portanto, controla a interação chama-turbulência.
2. Regime de chamas onduladas: é delimitado pelas condições  $u'/S_L > 1$  e  $Ka < 1$ , em que o número de Karlovitz ( $Ka = l_F^2/\eta^2 = \tau_c/\tau_\eta$ ), representa a razão entre as escalas de tempo química e de Kolmogorov. A intensidade turbulenta característica é maior do que a velocidade de chama laminar, o que induz a ondulação da frente de chama. As menores estruturas na escala de Kolmogorov, entretanto, são maiores do que a espessura de chama laminar não interferindo, portanto, na estrutura interna da chama.
3. Zonas de reações finas: são delimitadas pelas condições  $Ka > 1$  e  $Ka_\delta = l_\delta^2/\eta^2 < 1$ . A primeira condição indica que a escala de comprimento de Kolmogorov length scale,  $\eta$ , é menor do que a espessura de chama laminar,  $l_F$ . A segunda, por sua vez, denota que  $\eta$  é maior do que a camada interna da chama laminar,  $l_\delta$ . Neste caso, a turbulência pode alterar a estrutura da camada de pré-aquecimento da chama e modificar sensivelmente o transporte das espécies químicas e energia. Entretanto, ainda não há interação entre a turbulência e a parte interna da chama.
4. Zonas de reação descontínuas ou chamas espessas: Acima de  $Ka_\delta > 1$  e número de Damköhler (razão entre as escalas de tempo integral da turbulência e químico,  $Da = \tau_t/\tau_c$ ), menor do que a unidade. A escala de comprimento turbulenta é suficientemente pequena para penetrar na camada interna da chama laminar,  $l_\delta$ . Pode promover extinções locais da reações químicas devido à perdas de calor e de radicais na camada de pré-aquecimento.

Em muitas aplicações, combustível e comburente entram de forma independente na câmara de combustão, na qual estes serão misturados e queimados por inter-difusão contínua. Este processo é denominado de combustão não pré-misturada e, também, combustão difusiva, já que a difusão é quem controla o referido processo. Em outras palavras, o tempo necessário para a difusão, a qual é responsável pela mistura turbulenta, é tipicamente muito maior do que o tempo requerido para que as reações ocorram.

Um exemplo típico é a combustão em fornalhas, a qual é operada sob condições não pré-misturadas principalmente por motivos de segurança. Combustível é fornecido, por exemplo, por jatos no estado gasoso, os quais arrastam uma quantidade suficiente de ar dos arredores, de forma que o combustível possa ser queimado dentro de uma certa distância, denominada de comprimento de chama, do bocal. Outra aplicação de combustão difusiva ocorre nos motores diesel: Ar é comprimido por um pistão pouco antes de um spray de combustível líquido ser injetado na câmara de combustão. Um último exemplo de chamas difusivas é o fogo, propriamente dito. Caso o combustível seja sólido ou líquido, ele será primeiramente gaseificado pelo fluxo de calor radiativo proveniente da chama antes de se misturar com o ar dos arredores.

A identificação de regimes de combustão em casos não pré-misturados é complicada devido à quantidade de escalas de comprimento e de velocidades características. A estrutura da chama é influenciada pelo campo de velocidades e pela taxa de mistura. A frente de chama

é enrugada e afetada pela turbulência. Peters (2000) apresentou um diagrama de regime de combustão não pré-misturada turbulenta como um gráfico log-log de duas quantidades:

1. uma razão entre flutuações de fração de mistura condicionadas em valores estequiométricos e a espessura de chama no campo da fração de mistura ( $Z'_{st}/|\Delta Z|_F$ ).
2. uma razão entre escalas de tempo de taxas de dissipação críticas de escalares para extinção e a taxa de dissipação média condicionada em valores estequiométricos ( $\chi_q/\tilde{\chi}_{st}$ ).

Tal diagrama é apresentado na Fig. 2.4, apresentada a seguir.

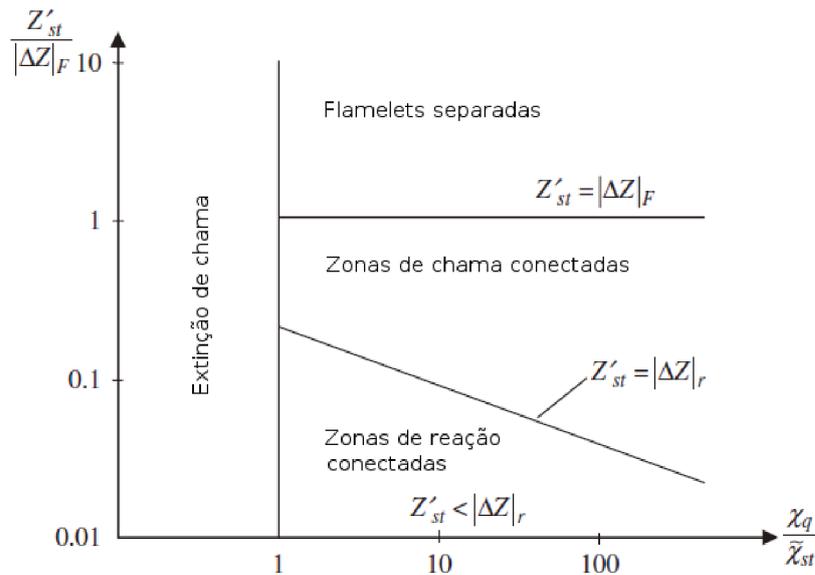


Figura 2.4 – Diagrama de regimes para combustão não pré-misturada turbulenta, adaptado de Peters (2000).

A análise do diagrama apresentado na Fig. 2.4 permite a identificação de quatro diferentes regimes de combustão turbulenta não pré-misturada:

- Quando as flutuações de fração de mistura são relevantes, de forma que  $Z'_{st} > |\Delta Z|_F$ , as camadas difusivas em volta das zonas de reação são separadas.
- Para flutuações de frações de mistura pouco expressivas ( $Z'_{st} < |\Delta Z|_F$ ), quando há mistura intensa ou pré-mistura parcial do fluxo de combustível, as flutuações de fração de mistura são pequenas. Nestes casos, as camadas difusivas que separam a zona de reação não estão muito distantes, de forma que as zonas de chama se mantenham conectadas. Portanto, o critério  $Z'_{st} = |\Delta Z|_F$  representa a demarcação entre estes dois regimes.
- Caso as flutuações de fração de mistura sejam menores do que a espessura das zonas de reação, estas estarão muito próximas entre si, podendo-se considerar que as mesmas encontram-se conectadas. No diagrama de combustão, a linha  $Z'_{st} = |\Delta Z|_r$  tem uma inclinação de  $-1/4$ .
- A extinção da chama ocorrerá quando a taxa de dissipação média de escalares for igual ou maior do que a taxa de dissipação crítica de escalares para a extinção. Este critério é representado por um linha vertical no diagrama de regimes de combustão, definido por  $\tilde{\chi}_{st} = \chi_q$ .

Com a conclusão das discussões relacionadas com as equações de Navier-Stokes, condições de entrada turbulentas, esquemas numéricos para o termo advectivo das equações de Navier-Stokes, saída de dados binária, refinamento adaptativo e escoamentos reativos, parte-se para a apresentação da modelagem matemática utilizada no presente trabalho. Tal discussão é realizada no capítulo seguinte.

# Capítulo 3

## Modelagem matemática

Este trabalho consiste na análise de escoamentos laminares e turbulentos, modelados pelas equações de balanço de massa, momentum, energia e escalares, já que, tal como fora comentado anteriormente, estas são apropriadas para modelar qualquer escoamento, seja em regime turbulento ou não. Outro importante ponto de partida das modelagens que se seguem é a utilização da hipótese de Boussinesq.

Neste capítulo, o equacionamento utilizado nas simulações numéricas realizadas no presente trabalho é apresentado. Tais modelos visam uma melhor descrição dos escoamentos a serem analisados.

### 3.1 Balanço de quantidade de movimento linear

A equação de balanço da quantidade de movimento linear é a mesma para escoamentos reativos e inertes:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j}, \quad (3.1)$$

na qual  $f_{k,j}$  representa a força de campo atuando na espécie  $k$ , na direção  $j$  e  $\tau_{ij}$  representa o tensor de tensões viscosas, o qual fora modelado por Stokes da seguinte forma:

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij}. \quad (3.2)$$

Uma análise da Eq. 3.1 sugere a seguinte interpretação de seus termos:

Taxa de variação da quantidade de movimento linear por unidade de volume	+	Fluxo advectivo da quantidade de movimento linear por unidade de volume	=	Força resultante devida ao gradiente de pressão	+	
				Fluxo líquido difusivo da quantidade de movimento linear	+	Força de campo atuando em cada espécie química

Pode-se observar que a Eq. 3.1 não inclui termos reacionais explícitos, entretanto, o escoamento é modificado pela presença da combustão. Tal afirmação é comprovada através do comportamento da viscosidade dinâmica,  $\mu$  e da massa específica,  $\rho$ , as quais mudam

significativamente devido à grande variação de temperatura. A dilatação através da frente de chama, resultado da variação da massa específica, acarreta no aumento das velocidades e, como consequência, o número de Reynolds local varia muito mais do que em um escoamento inerte. Em resumo, mesmo que as equações de Navier-Stokes sejam idênticas com e sem combustão, o comportamento do escoamento é sensivelmente diferente.

Tal como fora discutido anteriormente, a utilização destas equações permite a caracterização de um escoamento de forma detalhada e precisa, o que resulta em dificuldades para situações em que há a presença de turbulência. Tais contrastes se relacionam com as escalas de comprimento e tempo, pelo fato da quantidade de informação contida nestes campos serem vastas e, como consequência, a resolução direta deste sistema de equações para casos práticos se torna impraticável. A alternativa utilizada no presente trabalho é baseada na simulação das grandes escalas, a qual divide o espectro de energia com a aplicação de uma filtragem espacial, com o intuito de criar duas regiões de estudo: a primeira, calculada com as equações apresentadas anteriormente e a segunda, que será caracterizada por modelos de fechamento da turbulência.

Na seção seguinte, o modelo de fechamento da turbulência utilizado no presente trabalho será apresentado e discutido.

## 3.2 Modelo de fechamento da turbulência: Smagorinsky dinâmico

Neste tipo de modelagem submalha, determinado por [Germano et al. \(1991\)](#), utiliza-se de uma função capaz de ajustar-se ao escoamento no tempo e no espaço. A metodologia baseia-se em dois filtros com comprimentos característicos diferentes, sendo que um é determinado pelas dimensões da malha para o cálculo deste comprimento e o outro, norteia-se por um múltiplo das dimensões utilizadas pelo filtro anterior. Desta forma, esta metodologia orienta-se pelas informações dos níveis de energia contidos nas menores escalas resolvidas, localizadas entre estes dois filtros, para a modelagem da transferência de energia entre as escalas resolvidas e as modeladas.

Esta metodologia parte das equações de Navier-Stokes e consiste na aplicação destes dois filtros mencionados nas mesmas. Primeiramente, aplica-se um filtro com comprimento característico  $\bar{\Delta}$ , com base na malha, para a definição da equação a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \right]. \quad (3.3)$$

Utiliza-se da definição do tensor global de Germano,  $\tau_{ij} = \bar{u}_i \bar{u}_j - \bar{u}_i \bar{u}_j$  e obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) - \tau_{ij} \right]. \quad (3.4)$$

A segunda filtragem utiliza-se de um comprimento característico  $\hat{\Delta} > \bar{\Delta}$  (geralmente  $\hat{\Delta} = 2\bar{\Delta}$ ) e da definição de um tensor subteste  $T_{ij} = \bar{u}_i \hat{u}_j - \hat{u}_i \bar{u}_j$  para a determinação da Eq. 3.5:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \hat{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \hat{u}_i \hat{u}_j) = -\frac{\partial \hat{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \hat{u}_k}{\partial x_k} \right) - T_{ij} \right]. \quad (3.5)$$

A realização de uma subtração entre a Eq. 3.5 e uma filtragem da Eq. 3.3 (com o mesmo comprimento característico utilizado na segundo procedimento), tem a função de definir o tensor

de Leonard global. Esta equação é conhecida por identidade de Germano e pode ser utilizada para a determinação da função responsável pelo coeficiente dinâmico deste modelo.

$$L_{ij} = \widehat{\overline{u_i u_j}} - \widehat{u_i} \widehat{u_j} = T_{ij} - \hat{\tau}_{ij}. \quad (3.6)$$

Esta função mencionada pode ser determinada pela equação a seguir, sendo que o tensor de Leonard fora definido anteriormente e  $M_{ij} = \widehat{\Delta}^2 |\widehat{S_{ij}}| \widehat{S_{ij}} - \hat{a}$ , com  $a = \overline{\Delta}^2 |\overline{S_{ij}}| \overline{S_{ij}}$

$$c(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} \frac{L_{ij} M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}}. \quad (3.7)$$

Pelo fato de apresentar uma função que ajusta-se ao escoamento no tempo e no espaço, é de se esperar que esta metodologia gere resultados mais interessantes do que modelos tais como Smagorinsky clássico, que parte da utilização de uma constante. Entretanto, [Damasceno, Vedovoto e Silveira-Neto \(2015\)](#) mostraram que caracterizações mais significativas do fenômeno da turbulência são obtidos com a utilização de condições de entrada mais realistas. Neste âmbito, a metodologia de geração de condições de entrada turbulentas apontada por estes autores como a mais promissora será discutida na seção seguinte.

### 3.3 Condições de entrada turbulentas

No capítulo anterior, foi realizada uma breve revisão sobre as metodologias de geração de condições de entrada turbulentas. Nesta revisão, falou-se sobre dois tipos de metodologias possíveis: as de reciclagem e as sintetizadoras. Este trabalho foi realizado com a utilização de uma aproximação advinda dos métodos sintetizadores, aproximação esta que será explicitada a seguir.

#### 3.3.1 *Random Flow Generation* - RFG

Trata-se de uma versão modificada da técnica apresentada por [Kraichnan \(1970\)](#), proposta por [Smirnov, Shi e Celik \(2001\)](#). O modelo RFG resume-se a operações de transformação ortogonais e de escalonamento aplicadas a um campo contínuo de escoamento, gerado por uma superposição de funções harmônicas.

Esta metodologia parte de um tensor anisotrópico de correlação de velocidades,

$$r_{ij} = \overline{\tilde{u}_i \tilde{u}_j}, \quad (3.8)$$

além da determinação de um tensor de transformação ortogonal,  $a_{ij}$ , para diagonalizar  $r_{ij}$ :

$$a_{mi} a_{nj} r_{ij} = \delta_{mn} c_n^2, \quad (3.9)$$

$$a_{ik} a_{kj} = \delta_{ij}. \quad (3.10)$$

Desta forma, tanto  $a_{ij}$ , quanto  $c_n$  se tornam funções conhecidas do espaço, sendo que o último representa as flutuações de velocidade no novo sistema de coordenadas, produzido pelo tensor transformação  $a_{ij}$ .

A seguir, gera-se um campo de escoamento transiente em um domínio tridimensional através do método de Kraichnan modificado:

$$v_i(\vec{x}, t) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=1}^N [p_i^n \cos(\tilde{k}_j^n \tilde{x}_j + \omega_n \tilde{t}) + q_i^n \text{sen}(\tilde{k}_j^n \tilde{x}_j + \omega_n \tilde{t})], \quad (3.11)$$

no qual são introduzidos os seguintes números adimensionais:

$$\tilde{x}_j = \frac{x_j}{l_t}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{\tau_t}, \quad c = \frac{L}{\tau_t}, \quad (3.12)$$

$$\tilde{k}_j^n = k_j^n \frac{c}{c(j)}.$$

Os parâmetros remanescentes são calculados da seguinte maneira:

$$p_i^n = \epsilon_{ijm} \zeta_j^n k_m^n \quad (3.13)$$

e

$$q_i^n = \epsilon_{ijm} \xi_j^n k_m^n, \quad (3.14)$$

com  $\zeta_j^n, \xi_j^n, \omega_n \in N(0, 1)$  e  $k_i^n \in N(0, 1/2)$ .

Nas expressões adimensionais,  $l_t$  e  $\tau_t$  denotam as escalas de comprimento e de tempo da turbulência,  $\epsilon_{ijk}$  é o tensor de permutação utilizado no produto vetorial,  $c_i (i = 1, 2, 3)$ <sup>1</sup> corresponde às componentes de flutuação de velocidade  $u'_i$  em um novo sistema de coordenadas, obtido após a aplicação do tensor transformação  $a_{ij}$ .  $N(M, \sigma)$  é uma distribuição normal, com média  $M$  e desvio padrão  $\sigma$ . Os números  $k_j^n$  e  $\omega_n$  representam uma amostra de  $n$  vetores número de onda e frequências do espectro de turbulência modelado

$$E(k) = 16 \left( \frac{2}{\pi} \right)^{1/2} k^4 \exp(-2k^2). \quad (3.15)$$

Por fim, aplica-se transformações escalonares e ortogonais ao campo  $v_i$  gerado anteriormente para se obter um novo campo  $u_i$ :

$$w_i = c_{(i)} v_{(i)}, \quad (3.16)$$

$$u_i = a_{ik} w_k$$

O resultado do procedimento é um campo transiente  $u_i(x_j, t)$  com funções de correlação  $\overline{u_i u_j}$  iguais a  $r_{ij}$  e escalas de comprimento e tempo turbulentos iguais a  $l_t$  e  $\tau_t$ . Trata-se de um campo não divergente para qualquer caso de turbulência homogênea e, para casos de turbulência não homogênea, apresenta altas ordens de convergência.

Com a conclusão da apresentação das metodologias de fechamento da turbulência e de geração de condições de contorno turbulentas, parte-se para a discussão do restante da modelagem matemática utilizada no presente trabalho: Equações de conservação de massa, de balanço das espécies químicas e da energia térmica, as quais serão apresentadas a seguir.

### 3.4 Conservação de massa e balanço de espécies químicas

A equação de conservação da massa total é a mesma utilizada em escoamentos inertes, já que o processo de combustão não transforma massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0. \quad (3.17)$$

<sup>1</sup> De acordo com a notação utilizada por Smirnov, Shi e Celik (2001), sub-índices repetidos denotam somatório, ao passo que parêntesis nos mesmos não permitem tal operação.

A equação de balanço para a espécie  $k$ , por sua vez, é definida da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i}[\rho(u_i + V_{k,i})Y_k] = \dot{\omega}_k, \quad (3.18)$$

na qual  $V_{k,i}$  representa a componente  $i$  da velocidade de difusão  $V$  da espécie química  $k$  e  $\dot{\omega}_k$  denota a taxa de reação desta mesma espécie. Por definição:

$$\sum_{k=1}^N Y_k V_{k,i} = 0 \quad (3.19)$$

e

$$\sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k = 0. \quad (3.20)$$

Por se tratar de variáveis de suma importância para escoamentos reativos, além de apresentarem uma certa complexidade, as velocidades de difusão e o termo de transformação por reação química serão explicitados nas subseções que se seguem.

### 3.4.1 Velocidades de difusão

Para fins didáticos, fragmenta-se o segundo termo da Eq. 3.18 de forma a se obter uma parcela advectiva e uma difusiva, da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho V_{k,i} Y_k) = \dot{\omega}_k. \quad (3.21)$$

As velocidades de difusão  $V_{k,i}$  das  $N$  espécies são obtidas através da resolução do seguinte sistema (WILLIAMS, 1985):

$$\nabla X_p = \sum_{k=1}^N \frac{X_p X_k}{D_{pk}} (V_k - V_p) + (Y_p - X_p) \frac{\nabla P}{P} + \frac{\rho}{P} \sum_{k=1}^N Y_p Y_k (f_p - f_k),$$

para  $p = 1, N$ , (3.22)

no qual  $D_{pk} = D_{kp}$  representa o coeficiente de difusão mássica binária da espécie  $p$  com a espécie  $k$  e  $X_k$  denota a fração molar da espécie  $k$ :

$$X_k = Y_k \frac{W}{W_k}, \quad (3.23)$$

na qual  $W$  e  $W_k$  correspondem, respectivamente, às massas molares média da mistura e da espécie  $k$ .

A Eq. 3.22 é um sistema linear de tamanho  $N^2$ , o qual deve ser resolvido em cada direção, a cada ponto e em cada instante de tempo, para escoamentos transientes. Matematicamente, esta tarefa é difícil e dispendiosa (ERN; GIOVANGIGLI, 1994) e, por este motivo, será usada uma hipótese proposta por Hirschfelder, Curtiss e Bird (1954), a qual é a melhor aproximação de primeira ordem para a solução exata da Eq. 3.22 (ERN; GIOVANGIGLI, 1994; GIOVANGIGLI, 1999):

$$V_{k,i} Y_k = -D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad \text{com } D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} \frac{X_j}{D_{j,k}}}, \quad (3.24)$$

na qual  $D_k$  representa a difusividade da espécie  $k$  na mistura. A obtenção da Eq. 3.24 em base mássica é baseada na aplicação da definição de fração molar, Eq. 3.23, na mesma, resultando em

$$V_{k,i}Y_k = -D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}. \quad (3.25)$$

Como consequência, a Eq. 3.21 é definida como sendo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k. \quad (3.26)$$

A conservação de massa pode ser um problema quando escoamentos reativos são estudados. Sabe-se que a soma das frações mássicas deve ser unitária,  $\sum_{k=1}^N Y_k = 1$ . A soma de tal equação às  $N$  equações das espécies, Eq. 3.26, gera um sistema de equações superdeterminado, já que há apenas  $N$  indeterminações (frações mássicas) e  $N+1$  equações. Caso as equações das espécies sejam somadas e as identidades  $\sum_{k=1}^N Y_k V_{k,i} = 0$  e  $\sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k = 0$  sejam garantidas, a equação da conservação da massa é recuperada.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho \sum_{k=1}^N Y_k V_{k,i} \right) + \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k = 0. \quad (3.27)$$

Esta equação mostra que há apenas  $N$  equações independentes e que qualquer uma das  $N$  equações de espécies (Eq. 3.26) ou a equação de conservação de massa (Eq. 3.17) podem ser eliminadas, o que não é um problema quando expressões exatas para as velocidades de difusão são utilizadas. Entretanto, a utilização da lei de Hirschfelder faz com que o lado direito da Eq. 3.27 se torne  $\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho \sum_{k=1}^N D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right)$ , que não é nulo não conservando, assim, a massa total. Dois métodos podem ser utilizados para solucionar tal problema:

- Resolver a equação de conservação de massa (Eq. 3.17) e apenas  $N-1$  equações de espécies. A última fração mássica é obtida partindo-se do conceito de que a soma de todas as frações mássicas deve ser unitária:

$$\sum_{k=1}^N Y_k = 1. \quad (3.28)$$

A retirada da última variável deste somatório resulta em

$$Y_N = 1 - \sum_{k=1}^{N-1} Y_k. \quad (3.29)$$

Desta forma, a espécie diluente absorve todas as inconsistências introduzidas pela utilização da hipótese de Hirschfelder. Tal simplificação é perigosa e deve ser usada somente quando a chama está fortemente diluída (POINSOT; VEYNANTE, 2005). Um exemplo de chama diluída é a queima do combustível em ar, de forma que  $Y_{N_2}$  é significativamente maior do que as outras frações mássicas.

- Adicionar uma correção de velocidade  $\vec{V}^c$  ao termo advectivo das equações das espécies químicas (Eq. 3.26):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i}[\rho(u_i + u_i^c)Y_k] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k. \quad (3.30)$$

A velocidade de correção  $V^c$  é determinada para garantir a conservação de massa global. Desta forma, se todas as equações das espécies forem somadas, a equação de conservação de massa deve ser recuperada:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho \sum_{k=1}^N D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} - \rho u_i^c \right) = 0. \quad (3.31)$$

Para que o lado direito da equação acima seja anulado, a velocidade de correção é definida como sendo:

$$u_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}. \quad (3.32)$$

Em cada passo de tempo a correção da velocidade é calculada e adicionada ao campo advectivo para garantir a compatibilidade entre as equações de balanço das espécies químicas e da massa global. Neste caso também é possível resolver apenas N-1 equações de espécies e a da massa total mas, diferentemente da outra metodologia apresentada, o resultado para a última fração mássica será correto, independente da condição da mistura em termos de diluição. Por este motivo, tal método foi aplicado no presente trabalho.

Com a conclusão da discussão acerca do tratamento das velocidades de difusão, resta apresentar o termo de transformação por reação química para o completo detalhamento das equações de balanço das espécies químicas. Tal tarefa é realizada a seguir.

### 3.4.2 Termo de transformação por reação química

Para discutir o termo de transformação por reação química,  $\dot{\omega}_k$ , a reação global de queima de metano com oxigênio será considerada:



A análise desta reação química, em sua forma estequiométrica, permite concluir que são necessários dois moles de oxigênio (comburente) para cada um mol de metano (combustível), para que sejam formados um mol de monóxido de carbono e dois moles de água.

O termo de transformação por reação química é, então, calculado da seguinte forma:

$$\dot{\omega}_k = W_k \nu_k Q, \quad (3.34)$$

no qual  $W_k$  representa a massa molar da espécie  $k$ ,  $\nu_k$  denota o coeficiente estequiométrico líquido desta espécie e  $Q$ , a taxa de progresso de reação.

A massa molar se relaciona com a Constante de Avogadro ( $6,02 \times 10^{23}$ ) por meio do seguinte conceito: O número de entidades elementares contidas em 1 mol correspondem à constante de Avogadro, cujo valor é  $6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ . Sendo assim, a massa molar é a massa de  $6,02 \times 10^{23}$  entidades químicas e é expressa em kg/kmol.

A massa molar é definida pela soma das massas atômicas de cada átomo que forma a respectiva molécula. Portanto, para determinar tal quantidade, a massa atômica de cada átomo da espécie a ser avaliada é necessária, dado presente na Tabela Periódica dos elementos. Para o exemplo em questão, há apenas três átomos distintos presentes: carbono (C), hidrogênio (H) e oxigênio (O), os quais apresentam, respectivamente, massas de 12, 1 e 16 u.m.a. (unidade por

Tabela 3.1 – Massas molares de espécies químicas distintas.

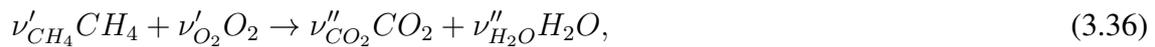
Espécie	C=12 [u.m.a.]	H=1 [u.m.a.]	O=16 [u.m.a.]	W [kg/kmol]
$CH_4$	1	4	0	$1 \times 12 + 4 \times 1 = 16$
$O_2$	0	0	2	$2 \times 16 = 32$
$CO_2$	1	0	2	$1 \times 12 + 2 \times 16 = 44$
$H_2O$	0	2	1	$2 \times 1 + 1 \times 16 = 18$

massa atômica). A determinação das massas molares das espécies químicas presentes no referido exemplo são apresentadas na Tab. 3.1.

O coeficiente estequiométrico líquido, por sua vez, é definido pela subtração entre os coeficientes das espécies quando estas são produzidas ( $\nu_k''$ ) e quando agem como reagentes ( $\nu_k'$ ), ou seja:

$$\nu_k = \nu_k'' - \nu_k'. \quad (3.35)$$

Para fins didáticos, a Eq. 3.33 é reescrita levando-se em conta a notação que acaba de ser apresentada:



a qual permite, com uma simples comparação, determinar os coeficientes necessários para a resolução da Eq. 3.35. Os resultados obtidos estão dispostos na Tab. 3.2, que apresenta os coeficientes estequiométricos de todas as espécies químicas presentes no referido exemplo.

Tabela 3.2 – Coeficientes estequiométricos de espécies químicas distintas.

Espécie	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$
$CH_4$	1	0	-1
$O_2$	2	0	-2
$CO_2$	0	1	1
$H_2O$	0	2	2

Por fim, a taxa de progresso de reação é definida da seguinte forma:

$$Q = K_f \prod_{k=1}^N [X_k]^{\nu_k'}, \quad (3.37)$$

na qual  $K_f$  representa a taxa de reação,  $[X_k]$  denota a concentração molar da espécie e  $\nu_k'$  é o coeficiente estequiométrico das espécies quando estas agem como reagentes. A taxa de reação é determinada da seguinte forma:

$$K_f = A_f T^\beta \exp -\frac{E}{R_u T}, \quad (3.38)$$

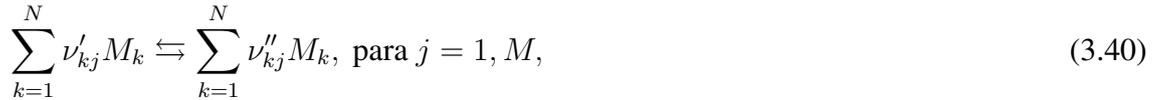
em que  $A_f$  representa a constante pré-exponencial da reação química,  $T$  é a temperatura em que a mesma se encontra,  $\beta$  diz respeito ao exponencial da temperatura,  $E$  denota a energia de ativação e  $R_u$  é a constante universal dos gases.

A concentração molar da espécie, por sua vez, é determinada da seguinte forma:

$$[X_k] = \frac{\rho Y_k}{W_k}, \quad (3.39)$$

na qual  $\rho$  representa a massa específica da mistura,  $Y_k$  denota a fração mássica da espécie química e  $W_k$  é a massa molar da mesma.

Um sistema reativo mais complexo, composto de  $N$  espécies reagindo através de  $M$  reações, é descrito da seguinte forma:



no qual  $M_k$  é um símbolo para a espécie  $k$  ( $M_k = \text{CH}_4$ , por exemplo),  $\nu'_{kj}$  e  $\nu''_{kj}$  representam os coeficientes estequiométricos da espécie  $k$  na reação  $j$ . Nesta situação, o termo de transformação por reação química representa a soma de todas as taxas  $\dot{\omega}_{kj}$  produzidas por todas as  $M$  reações, ou seja:

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} Q_j. \quad (3.41)$$

Por se tratar de um sistema composto de múltiplas reações químicas, a taxa de progresso da reação  $j$  deve contemplar, inclusive, reações reversíveis. Portanto,

$$Q_j = K_{fj} \prod_{k=1}^N [X_k]^{\nu'_{kj}} - K_{rj} \prod_{k=1}^N [X_k]^{\nu''_{kj}}, \quad (3.42)$$

na qual  $K_{fj}$  e  $K_{rj}$  representam, respectivamente, as taxas de reação direta (*forward*) e reversa (*reverse*) da reação  $j$ . A taxa de reação direta para um sistema com múltiplas reações é definida da seguinte forma:

$$K_{fj} = A_{fj} T^{\beta_j} \exp\left(-\frac{E_j}{R_u T}\right). \quad (3.43)$$

Portanto, expressar as taxas de progresso individuais  $Q_j$  para cada reação significa prover dados para a constante pré exponencial  $A_{fj}$ , para o expoente da temperatura  $\beta_j$  e para a energia de ativação  $E_j$ . Por fim, a taxa de reação reversa  $K_{rj}$  é calculada a partir da taxa de reação direta, da seguinte maneira:

$$K_{rj} = \frac{K_{fj}}{\left(\frac{p_a}{R_u T}\right)^{\sum_{k=1}^N \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{R_u} - \frac{\Delta H_j^0}{R_u T}\right)}, \quad (3.44)$$

na qual  $p_a = 1$  bar,  $\Delta H_j^0$  e  $\Delta S_j^0$  são, respectivamente, mudanças na entalpia e na entropia para a reação  $j$ .

Concluída a discussão acerca da modelagem das equações de balanço das espécies químicas, parte-se para a apresentação da equação da energia. Tal tarefa é realizada a seguir.

### 3.5 Energia

Devido à significativa quantidade de espécies químicas a serem utilizadas neste trabalho, uma equação de conservação de energia para um sistema multicomponente deve ser utilizada. Por este motivo, esta seção tem o intuito de descrever, de forma didática, a referida equação.

Kuo (2005), bem como Poinot e Veynante (2005), partem da equação da energia total,  $e_t$ , para derivar diferentes equações de balanços:

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i e_t) = - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} u_i). \quad (3.45)$$

Tal equação pode ser interpretada da seguinte maneira:

Taxa de variação de energia	+	Fluxo líquido advectivo da energia total	=	Fluxo líquido de energia térmica na forma de calor entre uma partícula elementar e sua vizinhança
		Taxa de transformação de uma energia em outra	+	Fluxo líquido de trabalho realizado sobre o elemento de fluido pelas vizinhanças

Dos termos discutidos, aqueles que costumam causar um maior desconforto são os relacionados com o fluxo de energia térmica e com o trabalho realizado pelas vizinhanças, respectivamente a segunda e as duas últimas parcelas da Eq. 3.45.

Com relação ao primeiro termo, há vários efeitos que contribuem com o fluxo de energia térmica. Sabe-se, a partir da Lei de Fourier para a condução de energia térmica, que os gradientes de temperatura são os grandes responsáveis pela manutenção desta variável. Entretanto, há dois efeitos adicionais que podem contribuir com este termo em situações em que há a presença de mais de uma espécie:

- Efeito do fluxo entálpico, causado por processos de interdifusão. É relacionado com a diferença entre as velocidades das espécies,  $u_{k,i}$ , e a velocidade da mistura,  $u_i$ . O fluxo extra de entalpia, transportado pelas  $k$  espécies através da superfície de controle, é definido como sendo  $h_k \rho_k V_{k,i}$  ou  $\rho h_k V_{k,i}$ . Desta forma, o fluxo global de entalpia, transportado por todas as espécies da mistura é descrito como sendo

$$q_{interdif} = \rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k V_{k,i}. \quad (3.46)$$

- Efeito Dufour. Com o aparecimento de velocidades de difusão devido a gradientes de temperatura (difusão térmica ou efeito de Soret), gradientes de concentração ( $\nabla X_k$ ) devem produzir um fluxo de energia térmica. É comum expressar tais gradientes em termos de diferenças das velocidades de difusão. Em outras palavras, o fluxo de energia térmica de Dufour é definido como sendo

$$q_{Dufour} = R_u T \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \left( \frac{X_l \alpha_k}{M w_k D_{kl}} \right) (V_{k,i} - V_{l,i}). \quad (3.47)$$

Entretanto, no presente trabalho o efeito Dufour foi desprezado. Portanto, o fluxo de energia térmica ( $q_i$ ) é definido como sendo:

$$q_i = q_{cond} + q_{interdif},$$

ou seja,

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k V_{k,i}. \quad (3.48)$$

A parcela da equação de balanço que contempla o trabalho realizado pelas vizinhanças sobre o elemento de fluido é composta por duas partes:

- Tensor tensão total, que age nos contornos do volume de controle. Este tensor contempla as tensões viscosas, além da pressão em cada direção do escoamento.
- Forças de campo, atuando em uma espécie  $k$  é definida como sendo o produto entre a massa específica da mistura em que ela se encontra, a fração mássica da espécie e a força de campo atuante, ou seja,  $\rho Y_k f_{k,i}$ . A potência realizada no fluido por esta componente da força é o produto da mesma pela componente da velocidade da espécie  $k$  na direção analisada, ou seja,  $\rho Y_k f_{k,i} u_k$  ou  $\rho Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i})$ . Ao somar os valores referentes a todas as espécies da mistura, obtém-se a contribuição total da força de campo:  $\rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i})$ .

Há diferentes formas de energia e entalpia, relacionadas com as possíveis combinações entre as parcelas sensível, cinética e química. Tais alternativas são apresentadas na Tab. 3.3, discutida por [Poinsot e Veynante \(2005\)](#).

Tabela 3.3 – Formas de energia e entalpia utilizadas em equações de conservação.

Forma	Energia	Entalpia
Sensível	$e_s = \int_{T_0}^T C_v dT - \frac{R_u T_0}{W}$	$h_s = \int_{T_0}^T C_p dT$
Sensível + química	$e = e_s + \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^o Y_k$	$h = h_s + \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^o Y_k$
Total	$e_t = e + \frac{1}{2} u_i u_i$	$h_t = h + \frac{1}{2} u_i u_i$
Total (sem química)	$E = e_s + \frac{1}{2} u_i u_i$	$H = h_s + \frac{1}{2} u_i u_i$

O presente trabalho visa a modelagem e a simulação computacional de escoamentos reativos. Por este motivo, há a necessidade de utilização de uma equação que contemple os efeitos de transformação das espécies químicas. De acordo com a Tab. 3.3, sabe-se que  $e_t$  diz respeito a energia total, ou seja, um compilado das energias sensível, química e cinética. Portanto, a obtenção da equação da energia em sua forma sensível e química é realizada através da remoção de sua parcela cinética, a qual é obtida a partir da multiplicação da equação de balanço de quantidade de movimento linear, em sua forma não divergente, por  $u_j$

$$u_j \rho \frac{D u_j}{D t} = u_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + u_j \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j}, \quad (3.49)$$

com posterior aplicação do conceito de derivada substantiva

$$\rho \left( u_j \frac{\partial u_j}{\partial t} + u_i u_j \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) = u_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + u_j \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j}. \quad (3.50)$$

Os termos entre parêntesis podem ser trabalhados a partir da propriedade da derivada do produto, ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial t} (u_j u_j) = u_j \frac{\partial u_j}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_j}{\partial t},$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (u_j u_j) = 2u_j \frac{\partial u_j}{\partial t},$$

$$u_j \frac{\partial u_j}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (u_j u_j) = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} u_j u_j \right). \quad (3.51)$$

De forma análoga,

$$u_j \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{1}{2} u_j u_j \right). \quad (3.52)$$

Por consequência, tais relações são aplicadas na Eq. 3.50, obtendo-se a equação de transporte da energia cinética,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho u_j u_j \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{1}{2} \rho u_i u_j u_j \right) = \rho \frac{D}{Dt} \left( \frac{1}{2} u_j u_j \right) = u_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + \rho u_j \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j}. \quad (3.53)$$

De acordo com a Tab. 3.3, é possível obter a equação da energia em sua forma sensível e química através da remoção de sua parcela cinética,  $e = e_t - \frac{1}{2} u_j u_j$ . Portanto, subtraindo-se as Eqs. 3.45 e 3.53 obtém-se:

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i e) = \rho \frac{De}{Dt} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (3.54)$$

Utilizando a relação entre energia e entalpia,  $h = e + p/\rho$ , pode-se obter a seguinte equação:

$$\frac{De}{Dt} = \frac{Dh}{Dt} - \frac{1}{\rho} \frac{Dp}{Dt} + \frac{p}{\rho^2} \frac{D\rho}{Dt}. \quad (3.55)$$

Com o conceito de derivada substantiva, pode-se abrir o último termo da equação acima, obtendo-se

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i}. \quad (3.56)$$

Pela definição de derivada do produto, sabe-se que

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (3.57)$$

que, com uma simples manipulação matemática, é rearranjada da seguinte forma:

$$u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} = \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} - \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i}. \quad (3.58)$$

A aplicação deste resultado na Eq. 3.56 acarreta na seguinte equação:

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} - \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i}. \quad (3.59)$$

a qual apresenta a equação da continuidade 3.17 em seus dois termos após a igualdade. Pela referida equação, sabe-se que  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0$ , portanto, a Eq. 3.56 pode ser resumida a

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \quad (3.60)$$

a qual, ao ser aplicada na Eq. 3.55 acarreta em:

$$\frac{De}{Dt} = \frac{Dh}{Dt} - \frac{1}{\rho} \frac{Dp}{Dt} - \frac{p}{\rho} \frac{\partial u_i}{\partial x_i}. \quad (3.61)$$

De posse de tal informação, torna-se possível a obtenção da equação de balanço da entalpia em sua forma sensível e química:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h) = \rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (3.62)$$

Através da definição da entalpia sensível e química,  $h = h_s + \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^o Y_k$ , pode-se determinar a equação de balanço da entalpia sensível:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h_s) = \rho \frac{Dh_s}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i} + \\ + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \omega_T, \end{aligned} \quad (3.63)$$

na qual  $\omega_T = -\sum \Delta h_{f,k}^o \dot{\omega}_k$ . Por fim, pela definição de entalpia sensível, pode-se determinar a equação para a temperatura:

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{\omega}'_T, \quad (3.64)$$

com  $\dot{\omega}'_T = -\sum(\Delta h_{f,k}^o + h_{sk})\dot{\omega}_k$  e  $C_p$  representa o calor específico da mistura, a pressão constante. O fluxo de energia térmica é definido, tal como fora discutido anteriormente, pelo efeito dos gradientes de temperatura (Lei de Fourier) e do fluxo entálpico, causado por processos de interdifusão. Em resumo,

$$\frac{\partial q_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \rho \frac{\partial T}{\partial x_i} \sum_{k=1}^N C_{p,k} V_{ki} Y_k. \quad (3.65)$$

A aplicação da definição de fluxo de energia térmica na equação anterior conclui o equacionamento geral para determinar a temperatura da grande maioria das chamas a serem estudadas com exceção, por exemplo, de situações supercríticas e de detonação:

$$\begin{aligned} \rho C_p \frac{DT}{Dt} = & \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \rho \frac{\partial T}{\partial x_i} \sum_{k=1}^N C_{p,k} V_{ki} Y_k + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i} + \\ & + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \sum_{k=1}^N (\Delta h_{f,k}^o + h_{sk}) \dot{\omega}_k. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Para o presente trabalho, as seguintes hipóteses simplificadoras foram realizadas na referida equação:

- Aplicação da hipótese proposta por [Hirschfelder, Curtiss e Bird \(1954\)](#), Eq. 3.25.
- $Dp/Dt = 0$ , pois em chamas de deflagração (número de Mach bem menor que a unidade,  $Ma \ll 1$ ), a pressão é praticamente constante, além do presente trabalho se concentrar em estudos ocorrendo em ambiente aberto.

Com a aplicação das hipóteses simplificadoras mencionadas a equação da energia térmica, em termos de temperatura, utilizada no presente trabalho é:

$$\begin{aligned} \rho C_p \frac{DT}{Dt} = & \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \rho \frac{\partial T}{\partial x_i} \sum_{k=1}^N C_{p,k} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} - \rho \sum_{k=1}^N f_{ki} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} + \\ & + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \sum_{k=1}^N (\Delta h_{f,k}^o + h_{sk}) \dot{\omega}_k. \end{aligned} \quad (3.67)$$

A modelagem discutida até o presente momento foi desenvolvida no código computacional utilizado no presente trabalho. Tal conjunto de equações possibilita, por exemplo, a aplicação de mecanismos detalhados de cinética química, os quais são necessários para o estudo de elementos precursores de fuligem, bem como dos poluentes gerados pelos mesmos.

Concluída a discussão acerca da modelagem das equações da energia, parte-se para a apresentação de uma série de hipóteses simplificadoras, com o intuito de diminuir a complexidade do conjunto de equações utilizado. Tal tarefa é realizada a seguir.

### 3.6 Modelagem da combustão pré-misturada

Definidas as equações gerais para a simulação de escoamentos reativos, torna-se interessante a utilização de hipóteses simplificadoras, a fim de se obter um modelo para o estudo de escoamentos regidos por uma reação global e irreversível. Para desenvolver tal tarefa, há a necessidade de se apresentar três números adimensionais importantes para o escoamento em questão, os número de Prandtl,  $Pr$ , Schmidt,  $Sc$  e Lewis,  $Le$ .

O número de Prandtl é definido como sendo a razão entre as difusividades de quantidade de movimento linear e térmica de um fluido. Tal adimensional é, portanto determinado da seguinte forma:

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\mu}{\rho} \times \frac{\rho C_p}{\lambda} = \frac{\mu C_p}{\lambda}. \quad (3.68)$$

O número de Schmidt, por sua vez, expressa a razão entre as difusividades de quantidade de movimento linear e de massa. Fisicamente relaciona a espessura relativa da camada fluidodinâmica e uma camada limite de transferência de massa. É definido da seguinte forma:

$$Sc = \frac{\nu}{D} = \frac{\mu}{\rho D}. \quad (3.69)$$

Por fim, o número de Lewis representa uma razão entre as difusividades térmica e mássica sendo, inclusive, uma combinação entre os dois adimensionais apresentados anteriormente:

$$Le = \frac{Sc}{Pr} = \frac{\mu}{\rho D} \times \frac{\lambda}{\mu C_p} = \frac{\lambda}{\rho D C_p} = \frac{\alpha}{D}. \quad (3.70)$$

Com a apresentação dos referidos números adimensionais, são aplicadas as seguintes hipóteses simplificadoras ao problema em questão:

1. O processo de combustão é regido por apenas reação global ( $M = 1$ ) e irreversível ( $K_r = 0$ ) ou seja,



na qual F representa o combustível, O denota o comburente, P diz respeito aos produtos de combustão e s é a massa de comburente necessária para reagir com uma unidade de massa de combustível.

2. O combustível é a espécie reagente que se encontra em menor quantidade, ou seja,  $[X_C] \ll [X_O]$ . Como consequência,

$$Y_O = \frac{m_O}{m_O + m_C} \approx 1 = cte. \quad (3.72)$$

3. As difusividades molecular do combustível e térmica da mistura são equivalentes, ou seja,

$$Le = \frac{Sc}{Pr} = \frac{\mu}{\rho D} \times \frac{\lambda}{\mu C_p} = \frac{\lambda}{\rho D C_p} = \frac{\alpha}{D} = 1 \quad (3.73)$$

Como consequência, as equações de transporte de frações mássicas e de entalpia se tornam formalmente idênticas, já que se a consideração de  $Le = 1$  garante que  $Sc = Pr$  e, com isso,

$$\frac{\lambda}{\rho D C_p} = 1,$$

garantindo que

$$\frac{\lambda}{C_p} = \rho D.$$

4. Escoamento ocorrendo a baixo número de Mach,  $Ma \ll 1$

Em combustão pré-misturada, velocidades de chama laminar e turbulenta e um parâmetro conhecido como a variável de progresso de reação são usados para a formulação de modelos. Definindo  $T_u$ ,  $T_b$  e  $T$ , respectivamente como as temperaturas de gás queimado, de gás fresco e da chama, tem-se que a variável progresso de reação  $c$  é definida como sendo:

$$c = \frac{T - T_u}{T_b - T_u} = \frac{Y_F - Y_F^u}{Y_F^b - Y_F^u}, \quad (3.74)$$

na qual  $Y_F$ ,  $Y_F^u$  e  $Y_F^b$  correspondem, respectivamente, às frações mássicas local, fresca e queimada de combustível. Com estas definições, o valor da variável progresso de reação é zero quando a mistura encontra-se fresca e 1 quando a mesma é composta de gases totalmente queimados. A aplicação de todas essas hipóteses simplificadoras e definições nas equações das espécies químicas e de temperatura resultam no transporte da variável de progresso de reação, a qual é definida como sendo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i c) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}, \quad (3.75)$$

ou, como consequência de se assumir Lewis unitário,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i c) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}. \quad (3.76)$$

Para a finalização da modelagem da combustão pré-misturada, falta a explicitação do termo de transformação por reação química,  $\dot{\omega}$ . Há uma série de modelos para o referido fim, sendo o *Eddy Break Up* (EBU), proposto por Spalding (b), Spalding (a) e Kuo (1986), um dos mais difundidos na literatura.

Este modelo é baseado em uma análise fenomenológica da combustão turbulenta, assumindo números de Reynolds e de Damköhler (razão entre os tempos característicos da turbulência e da cinética química) elevados ( $Re \gg 1$  e  $Da \gg 1$ ). Os referidos autores assumem que a cinética química não desempenha um papel relevante nestes casos, ao passo que a turbulência controla a taxa de reação: a zona reacional é vista como uma coleção de pacotes de gases frescos e queimados, transportados por estruturas turbilhonares. Portanto, a taxa média de reação é controlada, principalmente, por uma escala de tempo de mistura característica  $\tau_t$ , sendo definida:

$$\dot{\omega} = C_{EBU} \rho c \frac{(1 - c)}{\tau_t}. \quad (3.77)$$

$C_{EBU}$  representa uma constante do modelo, da ordem da unidade. A escala de tempo turbulenta  $\tau_t$  é estimada a partir da energia cinética turbulenta  $k$  e da sua taxa de transformação viscosa  $\epsilon$  quando são realizadas médias de Reynolds para as equações de Navier-Stokes, da seguinte forma:

$$\tau_t = \frac{k}{\epsilon}. \quad (3.78)$$

Em contrapartida, se a metodologia LES é utilizada, tal como no presente trabalho, a escala de tempo turbulenta passa a ser avaliada a partir da escala de tempo submalha, definida como sendo:

$$\tau_{sgs}^{-1} = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, \quad (3.79)$$

na qual

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.80)$$

é o tensor taxa de deformação.

Este modelo é interessante pelo fato da taxa de reação ser escrita como uma simples função de quantidades filtradas conhecidas, sem equações de transporte adicionais e, por este motivo, é encontrado na maioria dos códigos comerciais. Apesar do sucesso atingido, este modelo tem uma limitação: não inclui qualquer efeito de cinética química, já que não apresenta dados como a constante pré-exponencial ou a energia de ativação em sua formulação.

Com a conclusão das discussões acerca da formulação matemática utilizada no presente trabalho, no capítulo seguinte a modelagem numérica empregada no mesmo será apresentada.



# Capítulo 4

## Modelagem numérica

Neste capítulo, são apresentados os procedimentos numéricos utilizados para a obtenção das soluções das equações de transporte apresentadas anteriormente. O presente trabalho foi realizado a partir de duas ferramentas computacionais, que se encontram em desenvolvimento no Laboratório de Mecânica dos Fluidos (MFLab) da Universidade Federal de Uberlândia. Em uma primeira etapa, os desenvolvimentos foram aplicados no código computacional Fluids3D, desenvolvido por [Vedovoto et al. \(2011\)](#) ao passo que, em um segundo momento, tais estudos foram transportados para o código MFSim, desenvolvido por [Villar \(2007\)](#). Por este motivo, as duas ferramentas serão discutidas neste capítulo.

Ambos os códigos supracitados são baseados em uma discretização em volumes finitos, com variáveis deslocadas, tridimensional e com equações diferenciais descritas por formulações divergente e não divergente. Entretanto, no presente trabalho se utilizou apenas a primeira formulação mencionada pois, apesar de serem matematicamente idênticas, diferem sob o ponto de vista numérico. Tal afirmação é discutida e exemplificada na seção [4.1.1](#).

A discretização de uma equação diferencial, originalmente proposta no contínuo, resulta em perda de acurácia e de informações. A escolha apropriada do método numérico a ser utilizado acarreta em uma diminuição desta perda. Tal escolha deve se realizar de acordo os seguintes fatores: o arranjo de variáveis a ser utilizado, o tipo e a taxa de convergência do esquema numérico escolhido para realizar as discretizações espacial e temporal.

Com relação ao primeiro fator mencionado, salienta-se que o posicionamento das variáveis primárias na malha computacional deve ser avaliado com cautela. Pode-se realizar tal tarefa de forma deslocada, na qual as variáveis vetoriais são armazenadas nas faces dos volumes de controle, ao passo que as escalares se encontram nos centros dos mesmos. A colocação, por sua vez, parte da armazenagem dos dois tipos de variáveis nas mesmas posições (centro dos volumes de controle). Nos dois códigos computacionais em que o presente trabalho foi realizado, se utiliza um arranjo do tipo deslocado.

O conceito de arranjo deslocado para coordenadas cartesianas foi introduzido por [Harlow e Welch \(1965\)](#). A utilização de esquemas de segunda ordem de precisão, para discretizações espaciais em malhas deslocadas, resulta na falta de necessidade de interpolações adicionais, situação diferente daquela em que é utilizada uma malha colocalizada. A principal vantagem da utilização de arranjos deslocados é o forte acoplamento entre pressão e velocidade, gerado pela discretização dos termos de pressão por interpolação linear de segunda ordem de precisão. Tal situação evita o aparecimento de instabilidades no campo de pressão calculado.

As contribuições difusivas das equações de transporte são caracterizadas com o advento de interpolações lineares, ao passo que vários esquemas numéricos foram testados para a utilização no termo advectivo das equações de transporte. Por fim, uma estratégia semi-implícita

é adotada para a integração temporal, na qual o termo difusivo é resolvido implicitamente e os termos advectivo e de pressão são tratados de forma explícita. Os sistemas lineares resultantes para as componentes da velocidade são solucionados através da utilização do procedimento MSIP - *Modified Strongly Implicit Procedure* (SCHNEIDER; ZEDAN, 1981) no código Fluids3D e multigrid-multinível para a ferramenta MFSim. A malha utilizada é do tipo cartesiana e estruturada para o primeiro código e bloco-estruturada para o segundo.

Em ambos os códigos computacionais, adota-se uma aproximação baseada na pressão, o que implica na necessidade de utilização de um algoritmo para o acoplamento pressão-velocidade. Por este motivo, um método de projeção baseado na técnica de passos fracionados é aplicado, resultando em uma equação de Poisson com coeficientes variáveis que é solucionada com o *solver* BICGSTAB - *Bi-Conjugate Gradient Stabilized* (VORST, 1981) no código Fluids3D e multigrid-multinível, discutido por BRANDT (1977) e BRIGGS (1987), para a ferramenta MFSim.

A metodologia utilizada para a discretização espacial das equações de transporte será discutida na seção seguinte.

## 4.1 Discretização espacial das equações de transporte

Todas as equações de transporte utilizadas para modelar um problema devem ser discretizadas no espaço e no tempo. No presente trabalho, as discretizações se resumem às equações de Navier-Stokes e de transporte de escalares. Parte-se, portanto, das equações de Navier-Stokes na forma vetorial para a demonstração da metodologia:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} (\rho \vec{V}) d\Omega + \int_S \rho \vec{V} (\vec{V} \cdot \vec{n}) dS = \int_S \underline{\underline{T}} \cdot \vec{n} dS + \int_{\Omega} \rho \vec{b} d\Omega, \quad (4.1)$$

na qual  $\vec{V}$  representa o vetor velocidade,  $\vec{n}$  denota o vetor normal à superfície em que o fluido está entrando ou saindo,  $\vec{b}$  é o vetor força de campo e  $\underline{\underline{T}}$  é o tensor de tensões totais, definido da seguinte forma:

$$\underline{\underline{T}} = \underline{\underline{\tau}} - p \underline{\underline{I}}, \quad (4.2)$$

em que  $\underline{\underline{\tau}}$  representa o tensor de tensões viscosas,  $p$  é a pressão exercida sobre o volume de fluido e  $\underline{\underline{I}}$  é o tensor unitário. O objetivo desta seção é o estudo da discretização espacial das equações de transporte utilizadas no presente trabalho. Por este motivo, se considerará que a Eq. 4.1 se encontra em regime permanente. Em um momento oportuno, a parcela transiente da mesma também será avaliada. Desta forma, a referida equação se torna:

$$\int_S \rho \vec{V} (\vec{V} \cdot \vec{n}) dS = \int_S \underline{\underline{\tau}} \cdot \vec{n} dS - \int_S p \underline{\underline{I}} \cdot \vec{n} dS + \int_{\Omega} \rho \vec{b} d\Omega. \quad (4.3)$$

As integrais de superfície da Eq. 4.3 correspondem à soma das integrais sobre as 6 faces do volume de controle, ou seja:

$$\int_S f dS = \sum_{k=1}^6 \int_{S_k} f dS, \quad (4.4)$$

na qual  $f$  representa a componente do vetor fluxo advectivo ou difusivo, na direção normal à face do volume de controle. A Fig. 4.1 apresenta um volume de controle elementar com

comprimentos  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $\Delta z$ . Nesta figura, as letras maiúsculas denotam posições centrais deste volume, ao passo que os caracteres minúsculos se relacionam com posições localizadas nas faces dos mesmos. As letras e, w, n, s, t e b, bem como as apresentadas em forma maiúscula representam, respectivamente, as posições leste (*east*), oeste (*west*), norte (*north*), sul (*south*), topo (*top*) e fundo (*bottom*), relativas ao ponto P - posição central do volume de controle de referência.

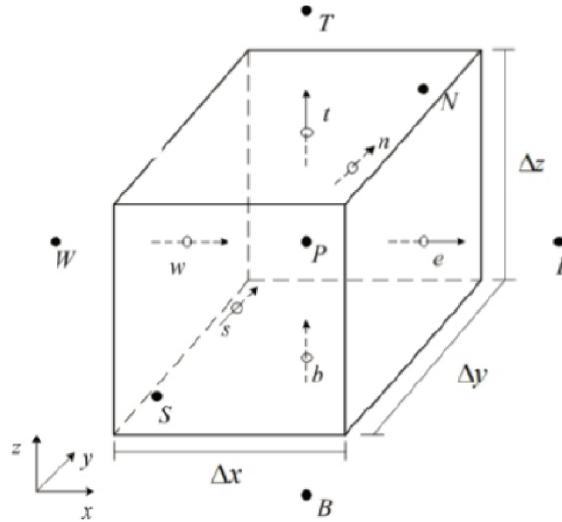


Figura 4.1 – Volume de controle elementar

Para calcular as integrais de superfície da Eq. 4.4 de forma exata, seria necessário conhecer o integrando em todas as posições da superfície  $S_k$  avaliada. Esta informação não está disponível, pois somente os valores nodais (centros do volume de controle) são calculados. Portanto, uma aproximação deve ser realizada. A maneira mais simples de resolver tal indeterminação baseia-se na definição da integral como um produto entre o integrando no centro da face e a área da mesma:

$$\int_{S_e} f dS = \bar{f}_e S_e \approx f_e S_e. \quad (4.5)$$

Para as integrais de volume da Eq. 4.3, a estratégia consiste na substituição do referido operador pelo produto entre o valor médio do integrando e o volume do volume de controle, definindo tal substituição como o valor no centro deste volume, ou seja:

$$\int_{\Omega} q d\Omega = \bar{q} \Delta\Omega \approx q_P \Delta\Omega, \quad (4.6)$$

em que q representa o produto entre a força de campo e a massa específica. Como consequência da aplicação das referidas metodologias na Eq. 4.3, obtém-se o seguinte resultado para a componente de velocidade u:

$$\begin{aligned} & (\rho uu|_e - \rho uu|_w) \Delta y \Delta z + (\rho vu|_n - \rho vu|_s) \Delta x \Delta z + (\rho wu|_t - \rho wu|_b) \Delta x \Delta y = \\ & \left\{ \mu \left[ 2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right] \right\} \Big|_e - \mu \left[ 2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right] \Big|_w \Big\} \Delta y \Delta z + \left[ \mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] \Big|_n - \mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \Big|_s \Big] \Delta x \Delta z + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left[ \mu \left( \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \Big|_t - \mu \left( \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \Big|_b \right] \Delta x \Delta y - (p|_e - p|_w) \Delta y \Delta z + \\
& + \rho b_x \Delta x \Delta y \Delta z.
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Dividindo a equação anterior pelo volume elementar ( $\Delta x \Delta y \Delta z$ ) resulta em:

$$\begin{aligned}
\frac{\rho u u|_w^e}{\Delta x} + \frac{\rho v v|_s^n}{\Delta y} + \frac{\rho w w|_b^t}{\Delta z} = & - \frac{p|_w^e}{\Delta x} + \frac{1}{\Delta x} \left\{ \mu \left[ 2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right] \Big|_w^e \right\} + \\
& + \frac{1}{\Delta y} \left[ \mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \Big|_s^n \right] + \frac{1}{\Delta z} \left[ \mu \left( \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \Big|_b^t \right] + \\
& + \rho b_x.
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Analogamente, são obtidas as seguintes equações para as componentes de velocidade  $v$  e  $w$ , respectivamente:

$$\begin{aligned}
\frac{\rho u v|_w^e}{\Delta x} + \frac{\rho v v|_s^n}{\Delta y} + \frac{\rho w v|_b^t}{\Delta z} = & - \frac{p|_s^n}{\Delta y} + \frac{1}{\Delta x} \left[ \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \Big|_w^e \right] + \\
& + \frac{1}{\Delta y} \left\{ \mu \left[ 2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right] \Big|_s^n \right\} + \\
& + \frac{1}{\Delta z} \left[ \mu \left( \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \Big|_b^t \right] + \rho b_y,
\end{aligned} \tag{4.9}$$

e

$$\begin{aligned}
\frac{\rho u w|_w^e}{\Delta x} + \frac{\rho v w|_s^n}{\Delta y} + \frac{\rho w w|_b^t}{\Delta z} = & \frac{1}{\Delta x} \left[ \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \Big|_w^e \right] + \frac{1}{\Delta y} \left[ \mu \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \Big|_s^n \right] + \\
& + \frac{1}{\Delta z} \left\{ \mu \left[ 2 \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right] \Big|_b^t \right\} - \\
& - \frac{p|_b^t}{\Delta z} + \rho b_z.
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Por fim, a discretização da equação da continuidade resulta em:

$$\frac{u_e - u_w}{\Delta x} + \frac{v_n - v_s}{\Delta y} + \frac{w_t - w_b}{\Delta z} = 0, \tag{4.11}$$

Os termos difusivo e de pressão, além dos fluxos do termo advectivo das Eqs. 4.8, 4.9 e 4.10 são determinados através de interpolações lineares. A avaliação das variáveis transportadas pelos fluxos dos termos advectivos ( $u$ ,  $v$ ,  $w$  ou um escalar  $\phi$  qualquer), por sua vez, será discutida na seção seguinte. Um breve exemplo da aplicação da interpolação mencionada é explicitada com o auxílio da Fig. 4.2, a qual apresenta uma vista bidimensional de uma típica malha de cálculo.

As malhas a serem utilizadas podem ser de espaçamento uniforme ou não, sendo o primeiro tipo aquele que fora utilizado no presente trabalho. Entretanto, para que se realize uma apresentação mais genérica, o equacionamento do segundo tipo servirá de exemplo para a explicitação da utilização da interpolação linear no cálculo de um escalar  $\phi$  (localizado no centro de um volume de controle) em uma face, da seguinte maneira:

$$\phi_e = \phi_E \lambda_e + \phi_P (1 - \lambda_e), \tag{4.12}$$

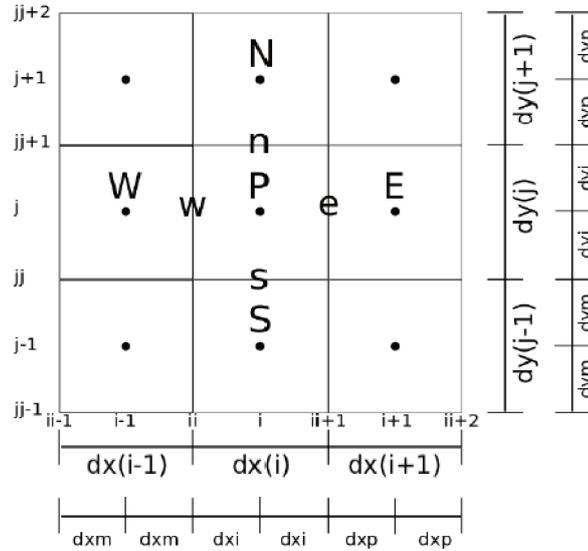


Figura 4.2 – Plano XY do volume de controle.

no qual o fator de interpolação linear,  $\lambda$  é definido da seguinte forma:

$$\lambda_e = \frac{x_e - x_P}{x_E - x_P} = \frac{dx_i}{dx_i + dx_p}. \quad (4.13)$$

Por se tratar de uma malha uniforme, tem-se que  $dx_i = dx_p$ , o que resulta em:

$$\lambda_e = \frac{dx_i}{dx_i + dx_i} = \frac{1}{2}. \quad (4.14)$$

Desta forma, a aplicação da Eq. 4.14 na Eq. 4.12 garante que

$$\phi_e = \phi_E \frac{1}{2} + \phi_P \left(1 - \frac{1}{2}\right) = \frac{\phi_E + \phi_P}{2}, \quad (4.15)$$

ou seja, o valor de um escalar em uma face do volume de controle em malhas uniformes nada mais é do que uma média aritmética entre os dois pontos centrais adjacentes à mesma. Tal situação não se repete em casos em que são utilizadas malhas não uniformes. Os valores de  $\lambda_e$ ,  $dx_i$  e  $dx_p$  serão calculados em cada ponto do domínio,  $dx_i = dx(i)/2$ ,  $dx_p = dx(i+1)/2$  e  $\lambda_e$  é calculado com a Eq. 4.13.

Tal metodologia pode, então, ser aplicada nos termos referidos anteriormente. Há a possibilidade de utilização desta interpolação nas variáveis transportadas pelos fluxos dos termos advectivos, porém, é necessária uma certa cautela. Uma discussão sobre a utilização de diferentes esquemas numéricos nestas variáveis supracitadas será na seção 4.2.

Com o término da apresentação da metodologia de discretização espacial das equações de transporte, é interessante salientar o motivo da escolha da formulação divergente ao invés da não divergente. Tal discussão é realizada a seguir.

#### 4.1.1 Formulações divergente e não divergente

Partindo-se de uma ótica puramente algébrica, pode-se dizer que o transporte de uma quantidade  $\phi$  qualquer é retratada de forma idêntica pelas formulações divergente,

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \phi}{\partial x_i} = RHS \quad (4.16)$$

e não divergente,

$$\rho \frac{D\phi}{Dt} = RHS, \quad (4.17)$$

sendo que esta última utiliza o conceito de derivada substantiva, definido por

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + u_i \frac{\partial\phi}{\partial x_i}. \quad (4.18)$$

A comprovação de que os dois equacionamentos levam ao mesmo resultado matemática é realizada através de simples manipulações matemáticas. Partindo-se da formulação divergente (Eq. 4.16), aplica-se a regra do produto para diferenciações (Lei de Leibniz): a derivada de um produto de duas funções pode ser substituída pela multiplicação da primeira pela derivada da segunda, somada à segunda multiplicada pela derivada da primeira (STEWART, 2008), ou seja,  $\frac{\partial}{\partial x}(uv) = u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial x}$ . Desta forma, obtém-se

$$\frac{\partial\rho\phi}{\partial t} + \frac{\partial\rho u_i\phi}{\partial x_i} = \rho \frac{\partial\phi}{\partial t} + \phi \frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial\phi}{\partial x_i} + \rho\phi \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + u_i\phi \frac{\partial\rho}{\partial x_i}. \quad (4.19)$$

Pode-se, então, agrupar a variável transportada  $\phi$

$$\frac{\partial\rho\phi}{\partial t} + \frac{\partial\rho u_i\phi}{\partial x_i} = \rho \frac{\partial\phi}{\partial t} + \phi \left( \frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + u_i \frac{\partial\rho}{\partial x_i} \right) + \rho u_i \frac{\partial\phi}{\partial x_i}, \quad (4.20)$$

o que acarreta no aparecimento do resultado de uma derivada do produto. Agrupando tal resultado, obtém-se

$$\frac{\partial\rho\phi}{\partial t} + \frac{\partial\rho u_i\phi}{\partial x_i} = \rho \frac{\partial\phi}{\partial t} + \phi \left( \frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\rho u_i}{\partial x_i} \right) + \rho u_i \frac{\partial\phi}{\partial x_i}. \quad (4.21)$$

Como resultado de tal operação, há o aparecimento da equação da continuidade, a qual pode ser negligenciada, já que

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (4.22)$$

portanto, a Eq. 4.21 se resume a

$$\frac{\partial\rho\phi}{\partial t} + \frac{\partial\rho u_i\phi}{\partial x_i} = \rho \left( \frac{\partial\phi}{\partial t} + u_i \frac{\partial\phi}{\partial x_i} \right), \quad (4.23)$$

que é o resultado da aplicação do conceito de derivada material (Eq. 4.18) em uma equação na forma não divergente (Eq. 4.17). Assim, comprova-se que as duas abordagens convergem para os mesmos resultados matemáticos, ou seja,

$$\frac{\partial\rho\phi}{\partial t} + \frac{\partial\rho u_i\phi}{\partial x_i} = \rho \frac{D\phi}{Dt}. \quad (4.24)$$

Entretanto, partindo-se de um ponto de vista estritamente numérico, MALISKA (2012) comprovou que tal afirmação não é verdadeira. Tal comprovação foi realizada a partir do lado esquerdo das Eqs. 4.16 e 4.17, em suas formas estacionárias, de maneira que o termo a ser avaliado destas formulações se resume a

$$\frac{\partial\rho u_i\phi}{\partial x_i} = \frac{\partial\rho u\phi}{\partial x} + \frac{\partial\rho v\phi}{\partial y} + \frac{\partial\rho w\phi}{\partial z} \quad (4.25)$$

e

$$\rho u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \rho v \frac{\partial \phi}{\partial y} + \rho w \frac{\partial \phi}{\partial z}, \quad (4.26)$$

respectivamente. Para simplificação, apenas a primeira derivada das referidas equações será avaliada. Partindo-se, portanto, da formulação divergente, a discretização de um volume centrado em  $P$ , com dimensão  $\Delta x$  resulta em:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u \phi) \Big|_P d\Omega = (\rho u \phi|_e - \rho u \phi|_w) \Delta y \Delta z, \quad (4.27)$$

ao passo que a utilização de um volume centrado em  $E$ , com dimensão a mesma dimensão  $\Delta x$  garante que:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u \phi) \Big|_E d\Omega = (\rho u \phi|_{ee} - \rho u \phi|_e) \Delta y \Delta z. \quad (4.28)$$

Por fim, ao se avaliar o volume de controle centrado na face  $e$ , com dimensão  $2\Delta x$ , tem-se:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u \phi) \Big|_e d\Omega = (\rho u \phi|_{ee} - \rho u \phi|_w) \Delta y \Delta z. \quad (4.29)$$

Pode-se perceber que a soma das Eqs. 4.27 e 4.28 resulta na Eq. 4.29, o que garante que os fluxos da propriedade que deixam o volume de controle sejam iguais aos que entram no volume de controle vizinho.

Partindo-se do mesmo raciocínio, mas com a utilização da formulação não divergente, a realização da discretização de um volume centrado em  $P$ , com dimensão  $\Delta x$ , resulta em:

$$\int_{\Omega} \rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} d\Omega = \rho_P u_P (\phi_e - \phi_w) \Delta y \Delta z, \quad (4.30)$$

ao passo que a utilização de um volume centrado em  $E$ , com a mesma dimensão  $\Delta x$  garante que:

$$\int_{\Omega} \rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} d\Omega = \rho_E u_E (\phi_{ee} - \phi_e) \Delta y \Delta z. \quad (4.31)$$

Por fim, ao se colocar o volume de controle centrado em  $e$ , com dimensão  $2\Delta x$ , obtém-se:

$$\int_{\Omega} \rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} d\Omega = \rho_e u_e (\phi_{ee} - \phi_w) \Delta y \Delta z. \quad (4.32)$$

A soma das Eqs. 4.30 e 4.31 resulta em:

$$\rho_P u_P (\phi_e - \phi_w) \Delta y \Delta z + \rho_E u_E (\phi_{ee} - \phi_e) \Delta y \Delta z, \quad (4.33)$$

que é diferente da eq. 4.32. Desta forma, os fluxos da propriedade  $\phi$  que deixam um volume de controle não são os mesmos que entram no volume de controle vizinho, o que pode acarretar em valores locais equivocados da propriedade calculada. Como consequência, tal característica pode gerar transtornos para o estudo de escoamentos reativos, já que espécies químicas podem ser destruídas ou criadas de forma puramente numérica.

Na seção seguinte, uma comparação entre pontos positivos e negativos de esquemas numéricos clássicos para o tratamento do termo advectivo das equações de Navier-Stokes, bem como a apresentação de esquemas mais robustos para o mesmo fim serão apresentados.

## 4.2 Esquemas numéricos para o tratamento do termo advectivo das equações de Navier-Stokes

Um ponto de suma importância, quando estuda-se problemas envolvendo simulações numéricas de escoamentos de fluidos, é a representação do termo advectivo das equações de Navier-Stokes. Sabe-se que o esquema *upwind* de primeira ordem (*First Order Upwind*, FOU), bem como aqueles relacionados com o mesmo, tais como *Hybrid* e *Power-law*, embora altamente estáveis, são inadequados para a correta caracterização de um fenômeno físico. Isto se deve ao fato destes esquemas serem responsáveis por uma geração excessiva de difusão numérica (LEONARD; DRUMMOND, 1995) e, por este motivo, esquemas de ordens superiores tornam-se necessários. Tais esquemas garantem resultados mais precisos do que os obtidos com FOU mas, pelo fato de não serem delimitados, podem gerar oscilações em regiões caracterizadas por fortes gradientes da propriedade sendo transportada.

Neste âmbito, a seção seguinte apresentará os equacionamentos referentes a alguns dos esquemas mais utilizados pela literatura.

### 4.2.1 Esquemas clássicos para o tratamento da advecção

Para a discussão acerca dos esquemas clássicos de interpolação para o termo advectivo das equações de transporte, parte-se do referido termo em coordenadas cartesianas:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w \phi), \quad (4.34)$$

no qual  $\phi$  representa a variável a ser transportada, tal como velocidades ( $u_i$ ), escalar passivo ( $z$ ), temperatura ( $T$ ), etc.

O esquema FOU define os valores de  $\phi$  nas faces do volume de controle da seguinte forma:

$$\phi_i = \max(\rho u_i, 0)\phi_P + \min(\rho u_i, 0)\phi_I, \quad (4.35)$$

nesta nomenclatura,  $i$  representa a variável de face analisada ( $i = e, w, n, s, t, b$ ),  $\rho u_i$  denota o fluxo avaliado ( $\rho u_i = \rho u, \rho v, \rho w$ ) e, por fim,  $I$  diz respeito a variável de centro ( $I = E, W, N, S, T, B$ ).

Este esquema se caracteriza por ser numericamente consistente, pois se baseia em expressões coerentes para calcular através de faces de volumes de controle. É dito delimitado, já que apresenta todos os coeficientes positivos quando o escoamento satisfaz a equação da continuidade, além de garantir que  $a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B$ , situação desejada para uma solução iterativa estável de um sistema linear. Por fim, é um esquema transportivo, pois a direção do escoamento se encontra embutida em sua formulação.

O esquema de diferenças centradas (*Central Differencing Scheme*, CDS) assume os seguintes valores para  $\phi$  nas faces do volume de controle:

$$\phi_i = \frac{\phi_I + \phi_P}{2}, \quad (4.36)$$

segundo a nomenclatura anterior,  $i$  representa a variável de face analisada ( $i = e, w, n, s, t, b$ ) e  $I$  diz respeito a variável de centro ( $I = E, W, N, S, T, B$ ).

Este esquema é classificado como consistente, por se basear em expressões coerentes para a determinação de fluxos advectivos e difusivos nas faces do volume de controle. É definido

como sendo condicionalmente delimitado, já que os coeficientes se tornam negativos quando o número de Péclet (adimensional que representa a razão entre a advecção e a difusão), é maior do que 2 ( $Pe > 2$ ). Por fim, é um esquema condicionalmente transportivo, pois o nó  $P$  é influenciado por todas as direções, ou seja, não reconhece a direção do escoamento ou a relação entre a advecção e a difusão, o que significa que o mesmo não é transportivo em altos  $Pe$ .

Por fim, o esquema *QUICK Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics* adota os seguintes valores de  $\phi$  nas faces do volume de controle:

$$\phi_i = \max(\rho u_i, 0) \left( \frac{6}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_I - \frac{1}{8}\phi_{I-2} \right) + \min(\rho u_i, 0) \left( \frac{6}{8}\phi_I + \frac{3}{8}\phi_P - \frac{1}{8}\phi_{I+1} \right), \quad (4.37)$$

utilizando-se, novamente, da nomenclatura anterior,  $i$  representa a variável de face analisada ( $i = e, w, n, s, t, b$ ),  $\rho u_i$  denota o fluxo avaliado ( $\rho u_i = \rho u, \rho v, \rho w$ ) e, por fim,  $I$  diz respeito a variável de centro ( $I = E, W, N, S, T, B$ ).

Este esquema, por sua vez, se caracteriza por ser consistente por usar perfis quadráticos coerentes. É dito condicionalmente delimitado, já que os coeficientes se tornam negativos para  $Pe > 8/3$ . Por fim, é um esquema transportivo, pois a função quadrática é baseada em dois pontos à montante e um à jusante do avaliado.

Portanto, tal como fora comentado anteriormente, esquemas de ordens superiores tornam-se necessários para uma caracterização mais realista da advecção. Entretanto, devido ao fato de não serem incondicionalmente estáveis, podem gerar oscilações indesejáveis na solução do problema. Tal afirmação é confirmada no capítulo seguinte, no qual uma série de testes são apresentados para vários tipos de funções descontínuas.

Neste âmbito, a imposição de propriedades delimitadoras acarreta na criação dos chamados esquemas de alta resolução, HRS, os quais são capazes de representar discontinuidades sem a introdução de oscilações na solução. Uma forma de geração de esquemas HRS é baseada na inserção de funções limitadoras de fluxo, as quais têm como objetivo garantir que valores de uma propriedade transportada se mantenham dentro dos limites impostos por valores vizinhos. Tal metodologia, conhecida por variação total diminuída, TVD será estudada na presente seção.

## 4.2.2 Esquemas TVD

A partir da aproximação baseada no diagrama de variáveis normalizadas (*Normalized Variable Diagram*, NVD), introduzida por [Gaskell e Lau \(1988\)](#), [Leonard \(1988\)](#) e [Leonard \(1991\)](#), diz-se que a variável advectada,  $\phi$ , é normalizada como sendo:

$$\hat{\phi} = \frac{\phi - \phi_U}{\phi_D - \phi_U}, \quad (4.38)$$

na qual os subscritos  $U$  e  $D$  dizem respeito às células à montante (*upstream*) e à jusante (*downstream*) da célula a ser determinada. Esta, por sua vez, localiza-se à montante da face  $f$ , como pode-se avaliar através da Fig. 4.3.

Para o caso geral de uma malha não uniforme, utiliza-se a formulação de variáveis e espaço normalizados (*normalized variable and space formulation*, NVSF), proposta por [Darwish e Moukalled \(1994\)](#). Em resumo, o valor normalizado da face da célula de qualquer variável se torna uma função de seus valores *upwind* normalizados mais próximos e sua correspondente localização normalizada, ou seja,

$$\hat{\phi}_f = f(\hat{\phi}_P, \hat{\xi}_P, \hat{\xi}_f), \quad (4.39)$$

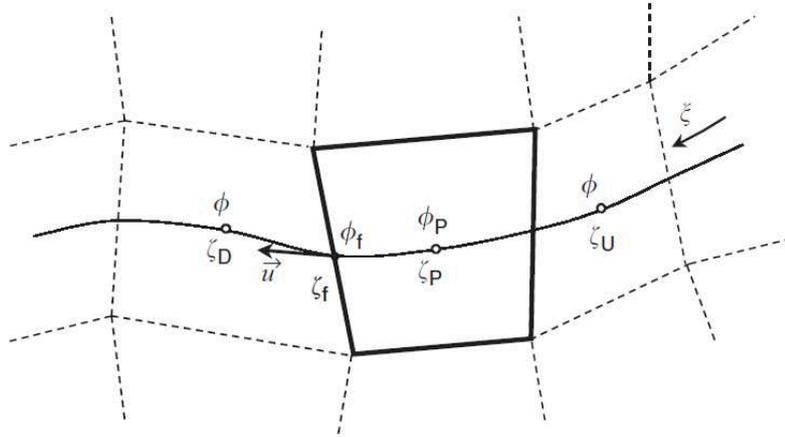


Figura 4.3 – Definição de variáveis locais e sistema de coordenadas (ALVES; OLIVEIRA; PINHO, 2003).

na qual as coordenadas normalizadas são definidas como:

$$\hat{\xi}_P = \frac{\xi_P - \xi_U}{\xi_D - \xi_U} \quad (4.40)$$

e

$$\hat{\xi}_f = \frac{\xi_f - \xi_U}{\xi_D - \xi_U}. \quad (4.41)$$

A partir de tais definições, torna-se possível a derivação de uma quantidade significativa de esquemas TVD baseados em FOU (*upwind biased schemes*). No presente trabalho, os esquemas MINMOD, SMART, WACEB, CUBISTA, ADBQUICKEST e CLAM foram estudados. A seguir, as formulações dos mesmos serão apresentadas, em sua forma não uniforme.

- MINMOD (*MINimum MODulus*), proposto por Harten (1983):

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \hat{\xi}_f \hat{\phi}_P, & 0 < \hat{\phi}_P < \hat{\xi}_P \\ \hat{\xi}_P \\ \frac{1 - \hat{\xi}_f}{1 - \hat{\xi}_P} \hat{\phi}_P + \frac{\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P}{1 - \hat{\xi}_P}, & \hat{\xi}_P \leq \hat{\phi}_P < 1 \\ \hat{\phi}_P, & \text{no restante.} \end{cases}$$

- SMART (*Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport*), derivado por Gaskell e Lau (1988):

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \frac{\hat{\xi}_f(1 - 3\hat{\xi}_P + 2\hat{\xi}_f)}{\hat{\xi}_P(1 - \hat{\xi}_P)} \hat{\phi}_P, & 0 < \hat{\phi}_P < \frac{\hat{\xi}_P}{3} \\ \frac{\hat{\xi}_f(1 - \hat{\xi}_f)}{\hat{\xi}_P(1 - \hat{\xi}_P)} \hat{\phi}_P + \frac{\hat{\xi}_f(\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P)}{1 - \hat{\xi}_P}, & \frac{\hat{\xi}_P}{3} \leq \hat{\phi}_P \leq \frac{\hat{\xi}_P}{\hat{\xi}_f}(1 + \hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P) \\ 1, & \frac{\hat{\xi}_P}{\hat{\xi}_f}(1 + \hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P) < \hat{\phi}_P < 1 \\ \hat{\phi}_P, & \text{no restante.} \end{cases}$$

- WACEB (*Weighted-Average Coefficient Ensuring Boundedness*), apresentado por Song et al. (2000):

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} 2\hat{\phi}_P, & 0 < \hat{\phi}_P < \frac{\hat{\xi}_P \hat{\xi}_f (\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P)}{2\hat{\xi}_P(1 - \hat{\xi}_P) - \hat{\xi}_f(1 - \hat{\xi}_f)} \\ \frac{\hat{\xi}_f(1 - \hat{\xi}_f)}{\hat{\xi}_P(1 - \hat{\xi}_P)} \hat{\phi}_P + \frac{\hat{\xi}_f(\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P)}{1 - \hat{\xi}_P}, & \frac{\hat{\xi}_P \hat{\xi}_f (\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P)}{2\hat{\xi}_P(1 - \hat{\xi}_P) - \hat{\xi}_f(1 - \hat{\xi}_f)} \leq \hat{\phi}_P \leq \frac{\hat{\xi}_P}{\hat{\xi}_f} (1 + \hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P) \\ 1, & \frac{\hat{\xi}_P}{\hat{\xi}_f} (1 + \hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P) < \hat{\phi}_P < 1 \\ \hat{\phi}_P, & \text{no restante.} \end{cases}$$

- CUBISTA (*Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for Treatment of Advection*), desenvolvido por Alves, Oliveira e Pinho (2003)

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \left[ 1 + \frac{\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P}{3(1 - \hat{\xi}_P)} \right] \frac{\hat{\xi}_f}{\hat{\xi}_P} \hat{\phi}_P, & 0 < \hat{\phi}_P < \frac{3}{4} \hat{\xi}_P \\ \frac{\hat{\xi}_f(1 - \hat{\xi}_f)}{\hat{\xi}_P(1 - \hat{\xi}_P)} \hat{\phi}_P + \frac{\hat{\xi}_f(\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P)}{1 - \hat{\xi}_P}, & \frac{3}{4} \hat{\xi}_P \leq \hat{\phi}_P \leq \frac{1 + 2(\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P)}{2\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P} \hat{\xi}_P \\ 1 - \frac{1 - \hat{\xi}_f}{2(1 - \hat{\xi}_P)} (1 - \hat{\phi}_P), & \frac{1 + 2(\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P)}{2\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P} \hat{\xi}_P < \hat{\phi}_P < 1 \\ \hat{\phi}_P, & \text{no restante.} \end{cases}$$

- ADBQUICKEST (*ADaptative Bounded Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics*), obtido por Ferreira et al. (2007):

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} (2 - \theta) \hat{\phi}_P, & 0 < \hat{\phi}_P < b \\ \hat{\phi}_P + \frac{1}{2}(1 - |\theta|)(1 - \hat{\phi}_P) - \frac{1}{6}(1 - \theta^2)(1 - 2\hat{\phi}_P), & b \leq \hat{\phi}_P \leq c \\ 1 - \theta + \theta \hat{\phi}_P, & c < \hat{\phi}_P < 1 \\ \hat{\phi}_P, & \text{no restante,} \end{cases}$$

sendo que  $\theta = a \frac{\delta_t}{\delta_x}$ ,  $a$  é uma velocidade de advecção,  $b = \frac{2 - 3|\theta| + \theta^2}{7 - 6\theta - 3|\theta| + 2\theta^2}$  e  $c = \frac{-4 + 6\theta - 3|\theta| + \theta^2}{-5 + 6\theta - 3|\theta| + 2\theta^2}$ .

- CLAM (*Curved-Line Advection Method*), proposto por Leer (1974):

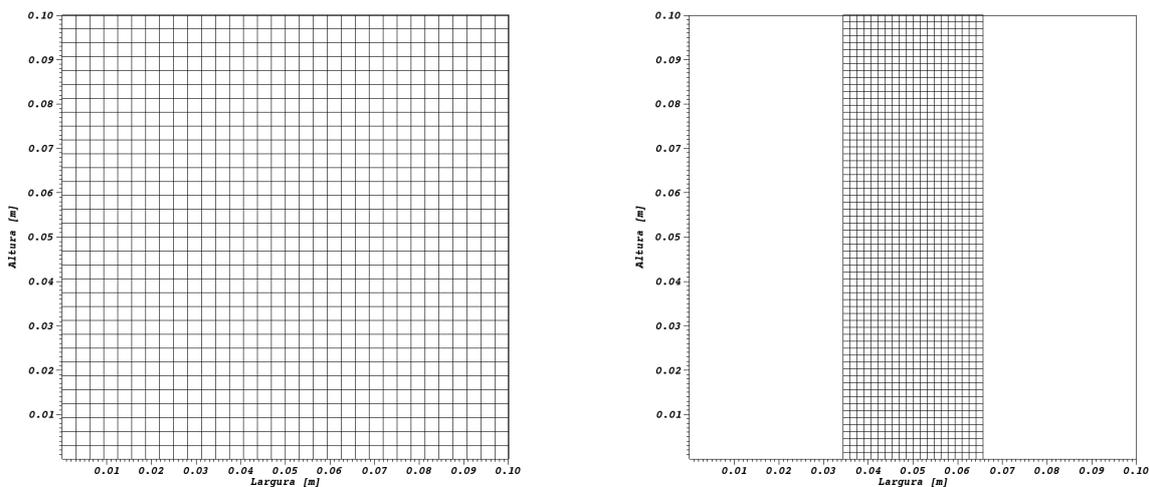
$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \frac{\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P^2}{\hat{\xi}_P(1 - \hat{\xi}_P)} \hat{\phi}_P - \frac{\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_P}{\hat{\xi}_P(1 - \hat{\xi}_P)} \hat{\phi}_P^2, & 0 < \hat{\phi}_P < 1 \\ \hat{\phi}_P, & \text{no restante.} \end{cases}$$

A performance de tais esquemas será avaliada no capítulo seguinte em situações distintas, cujo ponto em comum é o aparecimento de descontinuidades. Em seguida, será realizada uma breve discussão acerca do refinamento de malha utilizado no presente trabalho, o qual garante uma considerável redução de custo computacional na realização de experimentos numéricos.

### 4.3 Refinamento adaptativo

A grande maioria das simulações numéricas realizadas visa a experimentação computacional de escoamentos transientes. Nestas situações, há constante movimentação dos fenômenos a serem estudados, tais como o desenvolvimento de estruturas turbilhonares, a posição de uma frente de chama, dentre outros. Acontece que, em grande parte dos trabalhos, o domínio de interesse a ser estudado é dividido em volumes menores de mesma dimensão, sendo o conjunto destes sub-domínios definido como malha de cálculo. Desta forma, um estudo detalhado dos processos supracitados requer uma maior resolução de malha em todo o domínio estudado. O problema é que, quando se trata de escoamentos reativos, as regiões de interesse são muito pequenas quando comparadas com todo o domínio de cálculo.

Neste âmbito, a estratégia conhecida por refinamento adaptativo de malhas (*Adaptive Mesh Refinement* - AMR), aparece como uma alternativa eficiente e robusta, capaz de captar fenômenos locais sem elevado custo computacional. Tal metodologia consiste em concentrar o poder computacional em regiões de interesse, através do aumento da resolução da malha nestes locais. Esta ideia evita o alto custo computacional necessário para simular um problema em uma malha uniforme tridimensional. Um exemplo de tal metodologia é apresentado pela Fig. 4.4, a qual retrata a condição inicial típica da simulação de um jato neste tipo de refinamento.

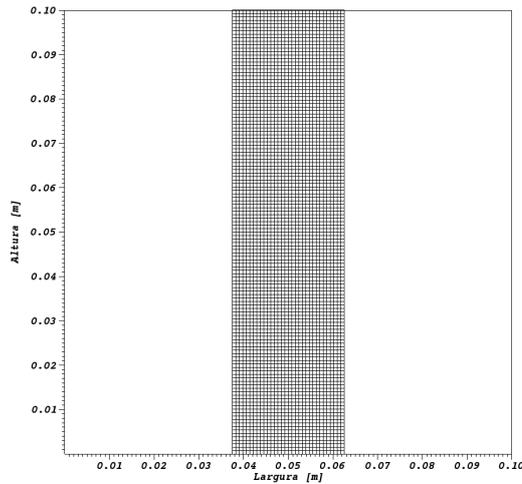


(a) Nível base

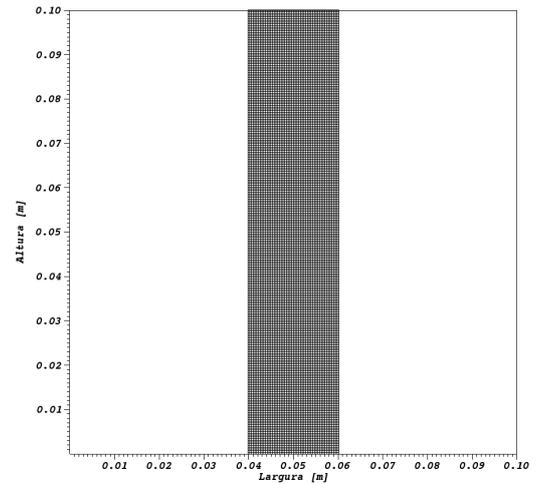
(b) Nível 2

Portanto, a discretização de um domínio físico em malha uniforme cartesiana é substituída por uma hierarquia de malhas devidamente agrupadas, com espaçamentos sucessivamente menores. O refinamento local adaptativo permite a adição ou a remoção de pontos quando se faz necessário, recorrendo apenas a interpolações lineares para o transporte da solução entre as diferentes configurações de malhas. O algoritmo de remalhagem é chamado a cada  $n$  passos no tempo, para redefinir as malhas acima do nível base, de  $l_{base+1}$  a  $l_{topo}$ . Caso haja novos pontos a serem selecionados, o algoritmo de geração de malhas é chamado e as mesmas são criadas. Uma discussão mais detalhada acerca das referidas metodologias é apresentada por Villar (2007).

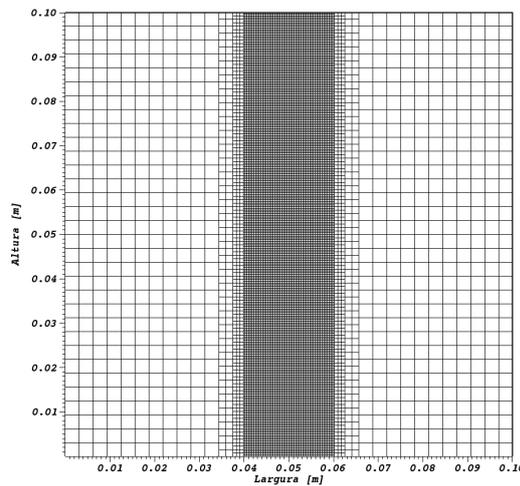
Pelo fato de serem transientes, as equações de transporte utilizadas no presente trabalho também serão integradas no tempo, situação que requer a escolha de um procedimento adequado de desenvolvimento temporal. A metodologia utilizada no presente trabalho para este fim é discutida na seção que se segue.



(c) Nível 3



(d) Nível 4



(e) Malha final

Figura 4.4 – Condição inicial típica da simulação de um jato em malha adaptativa.

## 4.4 Integração temporal

Quando se utiliza a metodologia LES, o tamanho do passo de tempo necessário para capturar as menores escalas resolvidas pode ser muito restritivo. Assim, o método de integração temporal deve ser escolhido com cautela.

A utilização de um tratamento explícito para os termos advectivo e difusivo gera um tamanho de passo de tempo da ordem  $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ , principalmente pelo termo difusivo (FERZIGER; PERIC, 2001). A definição destas variáveis é apresentada a seguir:

$$\Delta t = C \left( \frac{1}{t_{adv}} + \frac{1}{t_{dif}} \right)^{-1}, \quad (4.42)$$

$$t_{adv} = \frac{\Delta x}{|u|_{max}} + \frac{\Delta y}{|v|_{max}} + \frac{\Delta z}{|w|_{max}}, \quad (4.43)$$

$$t_{dif} = \frac{\Delta x^2}{\nu} + \frac{\Delta y^2}{\nu} + \frac{\Delta z^2}{\nu}, \quad (4.44)$$

na qual  $C$  é a condição CFL (COURANT; FRIEDRICHS; LEWY, 1967), compreendida entre 0 e 1,  $t_{adv}$  e  $t_{dif}$  são os tempos advectivo e difusivo e  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $\Delta z$  dizem respeito ao comprimento de discretização da malha nas direções x, y e z, respectivamente. A variável  $\nu = \mu/\rho$  determina a viscosidade cinemática, ao passo que  $|u|_{max}$ ,  $|v|_{max}$  e  $|w|_{max}$  são os valores máximos das velocidades u, v e w.

Tal limitação numérica não ocorre em discretizações implícitas ou semi-implícitas. Estas duas metodologias apresentam uma estabilidade mais elevada, porém, uma implementação mais complicada. O tratamento implícito do termo difusivo faz com que a restrição temporal de ordem  $\mathcal{O}(\Delta x^2)$  se torne  $\mathcal{O}(\Delta x)$  (VILLAR, 2007).

Ascher, Ruuth e Wetton (1995) e Wang e Ruuth (2008) propuseram esquemas temporais, denominados IMEX (métodos implícitos-explicitos - *IMplicit EXplicit*), que têm como principal característica o tratamento dos termos advectivo e difusivo de forma explícita e implícita, respectivamente. A explicitação do termo advectivo é importante por contornar a solução de um sistema não linear, ao passo que a implicação do termo difusivo evita a necessidade de escolha de um passo de tempo muito restritivo, da ordem  $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ . Portanto, a utilização de tal metodologia faz com que o passo de tempo seja calculado baseado, apenas, no termo advectivo, ou seja

$$\Delta t = C \left( \frac{1}{t_{adv}} \right)^{-1}, \quad (4.45)$$

com  $t_{adv}$  definido pela Eq. 4.43.

Os métodos IMEX são obtidos por meio de uma expansão em série de Taylor da seguinte equação

$$\frac{\partial u(t)}{\partial t} = g[u(t)] + f[u(t)], \quad (4.46)$$

na qual  $g[u(t)]$  e  $f[u(t)]$  representam os termos advectivo e difusivo, respectivamente. Wang e Ruuth (2008) apresentam uma forma geral de um método de  $s$  passos, caracterizada por apresentar ordem de aproximação  $s$  com a utilização de passos de tempo variáveis. No presente trabalho, o esquema IMEX de dois passos foi utilizado (portanto, de segunda ordem de aproximação) e, por este motivo, o mesmo é discutido a seguir.

Por se tratar de um método de segunda ordem, necessita-se de um estêncil de três tempos distintos, sendo dois anteriores ao que se deseja calcular,  $t^{n-1}$  e  $t^n$  e o tempo atual,  $t^{n+1}$ , de forma que os passos de tempo são definidos como  $\Delta t^n = t^n - t^{n-1}$  e  $\Delta t^{n+1} = t^{n+1} - t^n$ . Desta maneira, a forma geral do esquema de dois passos com um tamanho de passo de integração variável é definida da seguinte maneira:

$$\frac{\alpha_2 u^{n+1} + \alpha_1 u^n + \alpha_0 u^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} = \theta_2 f(u)^{n+1} + \theta_1 f(u)^n + \theta_0 f(u)^{n-1} + \beta_1 g(u)^n + \beta_0 g(u)^{n-1}, \quad (4.47)$$

na qual os parâmetros  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$  e  $\theta_i$  são definidos como

$$\alpha_0 = \frac{(2\gamma - 1)\omega_{n+1}^2}{1 + \omega_{n+1}}, \quad \alpha_1 = (1 - 2\gamma)\omega_{n+1} - 1, \quad \alpha_2 = \frac{1 + 2\gamma\omega_{n+1}}{1 + \omega_{n+1}},$$

$$\beta_0 = -\gamma\omega_{n+1}, \quad \beta_1 = 1 + \gamma\omega_{n+1},$$

$$\theta_0 = \frac{c}{2}, \quad \theta_1 = 1 - \gamma - \left(1 + \frac{1}{\omega_{n+1}}\right) \frac{c}{2}, \quad \theta_2 = \gamma + \frac{c}{2\omega_{n+1}}, \quad (4.48)$$

sendo que  $\omega_{n+1} = \Delta t_{n+1}/\Delta t_n$  é a relação entre dois passos de tempo consecutivos. A apresentação paramétrica do esquema IMEX em função de  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$  e  $\theta_i$  facilita a escolha de diferentes métodos. Com esta metodologia, é possível a obtenção dos esquemas Crank-Nicolson Adams-Bashforth (CNAB), *Modified* Crank-Nicolson Adams-Bashforth (MCNAB), *Backward Differentiation Formula* (BDF) e Crank-Nicolson *Leap-Frog* (CNLF). Tais esquemas são obtidos através da escolha das constantes  $\gamma$  e  $c$ , da seguinte maneira: CNAB ( $\gamma = 0,5$  e  $c = 0,0$ ), MCNAB ( $\gamma = 0,5$  e  $c = 0,125$ ), CNLF ( $\gamma = 0,0$  e  $c = 1,0$ ) e BDF ( $\gamma = 1,0$  e  $c = 0,0$ ), que foi a formulação utilizada no presente trabalho. Os parâmetros obtidos para cada esquema de integração temporal mencionado são dispostos na Tab. 4.1.

Tabela 4.1 – Parâmetros característicos para a obtenção de renomados esquemas de integração temporal com a utilização do esquema IMEX de dois passos.

Parâmetros	MCNAB	CNAB	SBDF	Euler	CNLF
$\alpha_2$	1	1	1,5	1	0,5
$\alpha_1$	-1	-1	-2	0	0
$\alpha_0$	0	0	0,5	-1	-0,5
$\beta_1$	1,5	1,5	2	0	1
$\beta_0$	-0,5	-0,5	-1	1	0
$\theta_2$	0,5625	0,5	1	1	0,5
$\theta_1$	0,375	0,5	0	0	0
$\theta_0$	0,0625	0	0	0	0,5

A Eq. 4.47 é, então, reformulada para caracterizar as equações de Navier-Stokes, da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_2(\rho u_i)^{n+1} + \alpha_1(\rho u_i)^n + \alpha_0(\rho u_i)^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} = & - \frac{\partial p}{\partial x_i} \Big|^{n+1} + \theta_2 f(\rho u_i)^{n+1} + \\ & + \theta_1 f(\rho u_i)^n + \theta_0 f(\rho u_i)^{n-1} + \\ & + \beta_1 g(\rho u_i)^n + \beta_0 g(\rho u_i)^{n-1} + \\ & + r h_{NS}, \end{aligned} \quad (4.49)$$

na qual os termos  $f(\rho u_i)$  e  $g(\rho u_i)$  são definidos como:

$$f(\rho u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right], \quad (4.50)$$

$$g(\rho u_i) = - \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i), \quad (4.51)$$

$$r h_{NS} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j}. \quad (4.52)$$

Para a equação de transporte das frações mássicas, esta mesma estratégia foi utilizada. Desta forma, a Eq. 4.47 se torna:

$$\frac{\alpha_2(\rho Y_k)^{n+1} + \alpha_1(\rho Y_k)^n + \alpha_0(\rho Y_k)^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} = \theta_2 f(\rho Y_k)^{n+1} + \theta_1 f(\rho Y_k)^n +$$

$$\begin{aligned}
& + \theta_0 f(\rho Y_k)^{|n-1} + \beta_1 g(\rho Y_k)^{|n} + \\
& + \beta_0 g(\rho Y_k)^{|n-1} + rhs_{yk}, \tag{4.53}
\end{aligned}$$

na qual os termos  $f(\rho Y_k)$ ,  $g(\rho Y_k)$  e  $rhs_{yk}$  são definidos como:

$$f(\rho Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right), \tag{4.54}$$

$$g(\rho Y_k) = -\frac{\partial}{\partial x_j} [\rho(u_j + V_j^c) Y_k], \tag{4.55}$$

$$rhs_{yk} = \dot{\omega}_k. \tag{4.56}$$

Tal metodologia também fora empregada para a equação de transporte do escalar conservado, obtendo-se:

$$\begin{aligned}
\frac{\alpha_2(\rho Z)^{|n+1} + \alpha_1(\rho Z)^{|n} + \alpha_0(\rho Z)^{|n-1}}{\Delta t^{n+1}} & = \theta_2 f(\rho Z)^{|n+1} + \theta_1 f(\rho Z)^{|n} + \\
& + \theta_0 f(\rho Z)^{|n-1} + \beta_1 g(\rho Z)^{|n} + \\
& + \beta_0 g(\rho Z)^{|n-1} + rhs_Z, \tag{4.57}
\end{aligned}$$

na qual os termos  $f(\rho Z)$ ,  $g(\rho Z)$  e  $rhs_Z$  são definidos como:

$$f(\rho Z) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right), \tag{4.58}$$

$$g(\rho Z) = -\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Z), \tag{4.59}$$

$$rhs_Z = \dot{\omega}_k. \tag{4.60}$$

Por fim, obtém a equação da temperatura:

$$\begin{aligned}
\frac{\alpha_2(T)^{|n+1} + \alpha_1(T)^{|n} + \alpha_0(T)^{|n-1}}{\Delta t^{n+1}} & = \theta_2 f(T)^{|n+1} + \theta_1 f(T)^{|n} + \\
& + \theta_0 f(T)^{|n-1} + \beta_1 g(T)^{|n} + \\
& + \beta_0 g(T)^{|n-1} + rhs_T, \tag{4.61}
\end{aligned}$$

na qual os termos  $f(T)$ ,  $g(T)$  e  $rhs_T$  são definidos como:

$$f(T) = \frac{1}{\rho C_p} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right), \tag{4.62}$$

$$g(T) = -u_i \frac{\partial T}{\partial x_j}, \tag{4.63}$$

$$rhs_T = \frac{1}{\rho C_p} \left( \rho \frac{\partial T}{\partial x_i} \sum_{k=1}^N C_{p,k} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} - \rho \sum_{k=1}^N f_{ki} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \sum_{k=1}^N h_k \dot{\omega}_k \right). \tag{4.64}$$

Com a conclusão das discussões relacionadas com as discretizações das equações de transporte apresenta-se, na seção seguinte, o acoplamento pressão-velocidade utilizado.

## 4.5 Acoplamento pressão-velocidade

Por possuírem uma derivada temporal para o campo de velocidades, as equações de balanço de movimento linear podem ser utilizadas para determinar a velocidade no próximo passo de tempo, caso a pressão seja conhecida. A equação da continuidade é uma condição que deve ser satisfeita ao final de cada passo e, embora a pressão deva ser ajustada de maneira a garantir tal condição, não há uma equação explícita para esta variável na formulação descrita pelas Eqs. 4.49 e da continuidade. Torna-se necessária, portanto, a derivação de uma estratégia para resolver tais equações na ordem correta, na qual todas as informações estejam disponíveis no momento em que as mesmas sejam necessárias. Para tal estratégia, dá-se o nome de acoplamento pressão velocidade. No presente trabalho, foi utilizado o método da projeção, proposto por CHORIN (1968) para a realização da referida tarefa.

O método da projeção consiste na separação da Eq. 4.49 em duas partes:

- Passo preditor, no qual um campo de velocidades auxiliar  $V^* = (u^*, v^*, w^*)$  é projetado, baseando-se na hipótese de que com o intuito de determinar a correção da pressão  $q$ .
- Passo corretor, no qual os campos de velocidades e de pressão são recalculados, com a correção da pressão obtida no passo anterior.

Entretanto, escoamentos reativos com baixo número de Mach incluem variações de massa específica. Desta forma, a restrição no divergente do campo de velocidades deixa de ser homogênea, tal como ocorre em escoamentos incompressíveis. Como alternativa para contornar tal situação, mantendo a utilização da metodologia mencionada, decompõe-se um campo de velocidades auxiliar da seguinte maneira:

$$u_i^* = u_i|_d^{n+1} + \nabla \xi + \frac{\Delta t |^{n+1} \nabla q|^{n+1}}{\alpha_2 \rho |^{n+1}}, \quad (4.65)$$

no qual  $\nabla \cdot \nabla \xi = S$ , com  $S = \nabla \cdot V$ . Neste caso,  $\nabla \cdot V|_d^{n+1} = 0$ , mas  $\nabla \cdot V^* \neq 0$ . Como consequência, projetando-se o campo vetorial  $V^* - \nabla \xi$  no espaço vetorial dos campos com divergente nulo, determina-se o campo de velocidades

$$V = V|_d^{n+1} + \nabla \xi, \quad (4.66)$$

no qual a aplicação do operador divergente resulta em

$$\nabla \cdot V = S. \quad (4.67)$$

A restrição para o divergente da velocidade é, então, obtida a partir das equações da continuidade (Eq. 3.17) e do estado termodinâmico,

$$p = \frac{\rho R u T}{W}. \quad (4.68)$$

Derivando a Eq. 4.68 em relação ao tempo, resulta em

$$\frac{Dp}{Dt} = \frac{RuT}{W} \frac{D\rho}{Dt} + \frac{\rho Ru}{W} \frac{DT}{Dt} + \rho Ru T \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{W} \right). \quad (4.69)$$

Partindo da definição de fração molar média,

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k}, \quad (4.70)$$

a Eq. 4.69 pode ser reescrita, obtendo-se:

$$\frac{Dp}{Dt} = \frac{RuT}{W} \frac{D\rho}{Dt} + \frac{\rho Ru}{W} \frac{DT}{Dt} + \rho RuT \sum_{k=1}^N \frac{1}{W_k} \frac{DY_k}{Dt} \quad (4.71)$$

Em escoamentos permanentes, ocorrendo a altos Reynolds, as mudanças na média da pressão são da ordem de  $Ma^2$ , ao passo que tais alterações ocorrem na ordem de  $Ma$  em situações transientes. Para combustão subsônica, tais variações são negligenciadas e a pressão pode ser considerada contante (POINSOT; VEYNANTE, 2005). Desta forma, a Eq. 4.71 pode ser reescrita em função da derivada substantiva da massa específica:

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\frac{\rho}{T} \frac{DT}{Dt} - \rho W \sum_{k=1}^N \frac{1}{W_k} \frac{DY_k}{Dt}. \quad (4.72)$$

A partir da comparação entre a equação da continuidade em suas formas divergente e não divergente, é possível isolar o divergente do campo de velocidades e, por consequência, determinar a restrição para o divergente da velocidade a partir da Eq. 4.67:

$$\nabla \cdot V = S = -\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt}, \quad (4.73)$$

a qual é explicitada com a aplicação da Eq. 4.72,

$$S = \frac{1}{T} \frac{DT}{Dt} + W \sum_{k=1}^N \frac{1}{W_k} \frac{DY_k}{Dt} \quad (4.74)$$

e, por fim, com a aplicação do conceito de derivada substantiva:

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{T} \left( \frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + W \sum_{k=1}^N \left[ \frac{1}{W_k} \left( \frac{\partial Y_k}{\partial t} + u_j \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) \right], \\ &= \frac{1}{\rho T} \left( \frac{\partial \rho T}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j T}{\partial x_j} \right) + \frac{W}{\rho} \sum_{k=1}^N \left[ \frac{1}{W_k} \left( \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_k}{\partial x_j} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.75)$$

A aplicação deste método no código computacional de trabalho é, então, realizada com uma reorganização da Eq. 4.65, com posterior aplicação do operador divergente, resultando em

$$\frac{\alpha_2}{\Delta t |^{n+1}} \nabla \cdot u_i^* = \nabla \cdot u_i |_d^{n+1} + \nabla \cdot \nabla \xi + \nabla \cdot \left[ \frac{1}{\rho |^{n+1}} \nabla q |^{n+1} \right], \quad (4.76)$$

porém, tal como fora comentado anteriormente,  $\nabla \cdot u_i |_d^{n+1} = 0$  e  $\nabla \cdot \nabla \xi = S$ . Portanto

$$\frac{\alpha_2}{\Delta t |^{n+1}} \nabla \cdot u_i^* = S + \nabla \cdot \left[ \frac{1}{\rho |^{n+1}} \nabla q |^{n+1} \right], \quad (4.77)$$

que é a equação de Poisson para a correção da pressão. A atualização da pressão é realizada através de algumas operações com a Eq. 4.49, a qual é reescrita, levando em conta o campo auxiliar definido anteriormente, com a pressão sendo avaliada no tempo  $n$ , ou seja

$$\frac{\alpha_2 (\rho u_i)^* + \alpha_1 (\rho u_i)^n + \alpha_0 (\rho u_i)^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} = - \left. \frac{\partial p}{\partial x_i} \right|^n + \theta_2 f(\rho u_i)^{n+1} +$$

$$\begin{aligned}
& + \theta_1 f(\rho u_i)^n + \theta_0 f(\rho u_i)^{n-1} + \\
& + \beta_1 g(\rho u_i)^n + \beta_0 g(\rho u_i)^{n-1}.
\end{aligned} \tag{4.78}$$

Em seguida, substitui-se o campo de velocidades auxiliar (Eq. 4.65) na Eq. 4.78, obtendo-se.

$$\begin{aligned}
\frac{\alpha_2(\rho u_i)^{n+1} + \alpha_1(\rho u_i)^n + \alpha_0(\rho u_i)^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} = & - \left. \frac{\partial p}{\partial x_i} \right|^n - \left. \frac{\partial q}{\partial x_i} \right|^{n+1} + \theta_2 f(\rho u_i)^{n+1} + \\
& + \theta_1 f(\rho u_i)^n + \theta_0 f(\rho u_i)^{n-1} + \\
& + \beta_1 g(\rho u_i)^n + \beta_0 g(\rho u_i)^{n-1},
\end{aligned} \tag{4.79}$$

A atualização da pressão é obtida a partir da subtração entre as Eqs. 4.79 e 4.49:

$$\nabla p|^{n+1} = \nabla p|^n + \nabla q|^{n+1} \tag{4.80}$$

A Eq. 4.80 garante uma aproximação de segunda ordem no tempo e no espaço para a pressão (BROWN; CORTEZ; MINION, 2001). Quando a massa específica do fluido é constante, esta equação se reduz a

$$p|^{n+1} = p|^n + q|^{n+1}, \tag{4.81}$$

o que faz com que a ordem de aproximação seja, no mínimo, unitária (BROWN; CORTEZ; MINION, 2001).

De forma resumida, a utilização do Método dos Passos Fracionados em uma ferramenta computacional é apresentada no algoritmo a seguir:

---

**Algoritmo 1: MÉTODO DOS PASSOS FRACIONADOS**

---

- 1 Calcular o campo de velocidade estimado  $u_i^*$  com a utilização da Eq. 4.78;
  - 2 Determinar a restrição para o divergente da velocidade, S, com a Eq. 4.75;
  - 3 De posse de  $u_i^*$  e S, calcular a correção da pressão com a Eq. 4.77
  - 4 Corrigir o campo de velocidade utilizando a Eq. 4.65.
  - 5 Corrigir a pressão com a Eq. 4.80.
- 

Com o fim da discussão referente a metodologia do acoplamento pressão-velocidade, parte-se para a descrição da biblioteca responsável pela atualização de propriedades, a qual fora acoplada ao código computacional utilizado no presente trabalho.

## 4.6 Biblioteca de atualização de propriedades: Cantera

A biblioteca Cantera (GOODWIN; MOFFAT; SPETH, 2016) se resume a uma coleção de ferramentas orientadas a objeto, desenvolvidas para o tratamento de problemas envolvendo processos de cinética química, termodinâmica e transporte.

Esta ferramenta consiste de objetos que representam componentes de uma simulação como, por exemplo, misturas de gases, reatores, modelos cinéticos, superfícies, equações de estado, chamadas, integradores de equações diferenciais ordinárias, diagramas de caminhos de reações, etc. A mesma fornece capacidades avançadas, necessárias para a utilização em pesquisas, tais como algoritmos rápidos e eficientes, a capacidade de trabalhar com mecanismos extensos de reação, além de interfaces para MATLAB, Python, Fortran 90 e C++.

Também é importante salientar que trata-se de um software de código aberto, o que confere a possibilidade de avaliação das operações que o mesmo desempenha internamente, além de permitir a customização do mesmo para que se adeque às necessidades das aplicações do usuário.

Para o presente trabalho, o papel desta biblioteca se resume a prover propriedades relevantes ao problema estudado, de acordo com o estado termodinâmico atual do volume de controle local. Em outras palavras, dados temperatura, pressão e composição química (molar ou mássica), a biblioteca disponibiliza uma série de propriedades, tais como entalpia, energia interna, entropia, potenciais químicos, viscosidade, massa específica, condutividade térmica, coeficientes de difusividade, taxas de progresso de reação, de criação e de destruição de espécies, etc. No código computacional de trabalho, a atualização do estado termodinâmico da mistura é, então, realizada da seguinte maneira:

Código 4.1 – Atualização do estado termodinâmico da mistura.

```
call setTemperature ( gas , temp ( i , j , k ) )
call setPressure ( gas , patm )
call setMassFractionsByName ( gas , ( y_string ( i , j , k ) )
```

Neste trecho de código, *gas* representa a fase da mistura estudada, *temp* denota a temperatura do volume de controle, obtida pela Eq. 3.67, *patm* é a pressão atmosférica (101325 Pa) e *y\_string* diz respeito a um conjunto de caracteres (*string*) de frações mássicas deste mesmo volume, obtidos pelas Eqs. 3.30. Tal variável deve apresentar-se da seguinte forma, para o exemplo de uma mistura estequiométrica de metano e ar: CH4:0.055,O2:0.220,N2:0.725.

Das três informações necessárias para a atualização do estado termodinâmico da mistura estudada, aquela que necessita de maior atenção é a última mencionada. Isto por que as frações mássicas obtidas representam números reais de dupla precisão, contendo 16 casas decimais, o que implica na necessidade de conversão das mesmas para *string*, respeitando o formato supracitado. Tal tarefa é realizada com a função `write(react_var_string,'(f7.5)')react_var(i,j,k)` a qual, neste caso, tem o papel de truncar a variável `react_var(i,j,k)`, que representa a fração mássica de uma espécie química, na quinta casa decimal e de transformar o resultado na *string* `react_var_string`. Em seguida, realiza-se a concatenação do resultado obtido com outros caracteres necessários para a geração do formato desejado, tais como os nomes das espécies químicas, “:” e “,”. De forma resumida, a implementação de tais operações é apresentada a seguir.

Código 4.2 – Criação da string de frações mássicas.

```
if (ns/= n_species) then
  write (react_var_string , '(f7.5)') react_var ( i , j , k )
  y_string ( i , j , k ) = trim ( y_string ( i , j , k ) ) // trim ( cantera_names ( ns ) ) // &
  ' : ' // trim ( react_var_string ) // ' , '
else
  write (react_var_string , '(f7.5)') react_var ( i , j , k )
  y_string ( i , j , k ) = trim ( y_string ( i , j , k ) ) // trim ( cantera_names ( n_species ) ) &
  // ' : ' // trim ( react_var_string )
endif
```

O êxito na atualização do estado termodinâmico da mistura estudada permite, portanto, a determinação de propriedades necessárias para a resolução do conjunto de equações que caracteriza as situações que foram estudadas no presente trabalho. Uma análise das equações de conservação de massa e de balanço de quantidade de movimento linear, de espécies químicas e de energia, respectivamente, Eqs. 3.17, 3.1, 3.30 e 3.67, sugere a necessidade de obtenção das seguintes propriedades da mistura:

- massa específica,  $[\rho]=\text{kg/m}^3$ ,
- viscosidade dinâmica,  $[\mu]=\text{kg/m/s}$ ,
- calor específico,  $[C_p]=\text{J/kg/K}$ ,
- condutividade térmica mistura,  $[\lambda]=\text{W/m/K}$  e
- difusividade mássica das espécies,  $[D_k]=\text{m}^2/\text{s}$ .

As quais são obtidas diretamente da referida biblioteca por já se encontrarem no Sistema Internacional de Unidades, SI. Desta forma, as mesmas são determinadas da seguinte forma no código computacional de trabalho:

Código 4.3 – Obtenção das propriedades da mistura.

```
rho(i,j,k)=density(gas)
mu(i,j,k)=viscosity(gas)
cp_mix(i,j,k)=cp_mass(gas)
k_mix(i,j,k)=thermalConductivity(gas)
call getMixDiffCoeffs(gas, diff)
```

Da mesma forma, tem-se a necessidade de obtenção de algumas propriedades para as espécies químicas, tais como:

- taxa líquida de produção das espécies,  $[\dot{\omega}_k]=\text{kg/m}^3/\text{s}$ ,
- calor específico das espécies,  $[C_{p,k}]=\text{J/kg/K}$  e
- entalpias das espécies,  $[h_k]=\text{J/kg}$ .

Entretanto, há a necessidade de adequação das unidades das mesmas, já que as quantidades obtidas via Cantera ou se encontram em base molar, ou são adimensionais.

A taxa líquida de produção das espécies é obtida em  $\text{kmol/m}^3/\text{s}$ , porém, a mesma deve ser aplicada em base mássica, já que todo o equacionamento deste trabalho encontra-se desta forma. Para tal mudança de unidades, basta multiplicar o resultado obtido via Cantera pela massa molar da espécie em questão, ou seja,

$$\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3\text{s}} \times \frac{\text{kg}}{\text{kmol}} = \frac{\text{kg}}{\text{m}^3\text{s}}, \quad (4.82)$$

a qual foi aplicada ao referido código computacional:

Código 4.4 – Obtenção das propriedades das espécies químicas: Taxa líquida de produção.

```
call getNetProductionRates(gas, omega_k)
wdot_k(i,j,k)=w_i(ns)*omega_k(ns)
```

O calor específico das espécies, por sua vez, é obtido na forma adimensional, o que implica na necessidade de converter tal variável para uma base mássica. Tal conversão é realizada a partir da multiplicação do resultado obtido via Cantera pelo quociente entre a constante universal dos gases ( $R_u=8,314 \text{ J/K/mol}$ ) e a massa molar da espécie em questão, ou seja,

$$\frac{\text{J}}{\text{mol} \times \text{K}} \times \frac{\text{mol}}{\text{kg}} = \frac{\text{J}}{\text{kg} \times \text{K}}, \quad (4.83)$$

a qual foi aplicada ao referido código computacional:

Código 4.5 – Obtenção das propriedades das espécies químicas: Calor específico.

```
call getCp_R(gas, n_species, cp_r)
cp_k(i, j, k) = cp_r(ns) * Ru / w_i(ns)
```

Por fim, a entalpia das espécies também é obtida na forma adimensional. A conversão da mesma para uma base mássica é realizada a partir da multiplicação do resultado obtido via Cantera pelo produto entre a constante universal dos gases ( $R_u=8,314 \text{ J/K/mol}$ ) e a temperatura. O resultado de tal operação é, então, dividido pela massa molar da espécie em questão, ou seja,

$$\frac{J}{mol \times K} \times K \times \frac{mol}{kg} = \frac{J}{kg}, \quad (4.84)$$

a qual foi aplicada ao referido código computacional:

Código 4.6 – Obtenção das propriedades das espécies químicas: Entalpia.

```
call getEnthalpies_RT(gas, h_rt)
h_k(i, j, k) = h_rt(ns) * Ru * temperature(gas) / w_i(ns)
```

Neste capítulo foram apresentadas as metodologias utilizadas para discretizações espaciais e temporais, além do acoplamento pressão-velocidade utilizados neste trabalho. A seguir, serão apresentados os resultados obtidos pelas simulações numéricas realizadas.

# Capítulo 5

## Resultados e discussões

No presente capítulo, são apresentados resultados relacionados com as modelagens discutidas nos capítulos anteriores, bem como alternativas propostas para contornar problemas originados ao longo da realização do presente trabalho.

A referida seção se inicia com comparações entre vários esquemas numéricos para o tratamento do termo advectivo das equações de Navier-Stokes. Em um primeiro momento, tal estudo foi realizado a partir de simulações de casos representando os fenômenos da advecção e da difusão em regime permanente, com a utilização de três esquemas bem difundidos pela literatura: *upwind* de primeira ordem, CDS e QUICK. Em seguida, foram simulados casos teste de advecção linear unidimensional transiente, nos quais esquemas clássicos, tais como *upwind* de primeira ordem e CDS foram comparados com uma série de esquemas TVD, para a escolha daquele com melhor desempenho frente a situações de estresse numérico, o qual seria utilizado no presente trabalho.

Em seguida, resultados relacionados com a saída de dados binária, baseada em um acoplamento entre HDF5 e XDMF, são discutidos e comparados com a metodologia de escrita utilizada anteriormente, a qual era realizada em ASCII.

A discussão seguinte é desenvolvida com base em um experimento amplamente difundido pela comunidade científica, um jato turbulento tridimensional. Nesta simulação, algumas metodologias comentadas anteriormente são utilizadas, tais como refinamento adaptativo de malha, modelo de fechamento da turbulência e métodos de geração de condições de entrada turbulentas.

A seguir, resultados envolvendo a biblioteca de atualização de propriedades cinéticas, termodinâmicas e de transporte são apresentados. Casos de equilíbrio químico, realizados com mecanismos de reação globais e detalhados são comparados, com posterior análise do desvio relativo entre resultados obtidos de forma analítica e advindos desta biblioteca, tais como taxas de progresso de reação e difusividades de espécies químicas.

Por fim, a estratégia de descrição da combustão a partir do transporte de um escalar conservado é discutida. Para tal, a simulação de um escoamento reativo, na qual o termo reacional fora modelado por uma aproximação bem conhecida pela comunidade científica, é apresentada.

Na seção seguinte, são discutidos esquemas numéricos para o tratamento do termo advectivo das equações de Navier-Stokes.

## 5.1 Esquemas numéricos para o tratamento do termo advectivo das equações de Navier-Stokes

Nas seções que se seguem, são realizadas discussões acerca do desempenho dos esquemas para o tratamento do termo não linear das equações de Navier-Stokes discutidos anteriormente. Tais discussões são baseadas em simulações de casos retratando os fenômenos de advecção-difusão e de advecção linear transiente.

### 5.1.1 Advecção-difusão

Uma análise interessante sobre a descrição do termo advectivo por meio de esquemas numéricos foi realizada através de simulações de casos representando os fenômenos da advecção e da difusão em regime permanente. Para tal, partiu-se da equação generalizada de transporte de uma propriedade  $\phi$  em estado estacionário, definida da seguinte maneira:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right), \quad (5.1)$$

na qual  $\Gamma$  assume os valores de  $\mu$ ,  $\lambda$  ou 0 nas equações de balanço da quantidade de movimento linear, de energia térmica e da continuidade, respectivamente. Trabalhando com esta equação em apenas uma dimensão, tem-se:

$$\frac{d}{dx}(\rho u \phi) = \frac{d}{dx} \left( \Gamma \frac{d\phi}{dx} \right). \quad (5.2)$$

A aplicação do método dos volumes finitos, discutido na seção 4.1, na equação anterior resulta em

$$(\rho u \phi)_e - (\rho u \phi)_w = \left( \Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left( \Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_w, \quad (5.3)$$

na qual os subscritos  $e$  e  $w$  representam valores da variável  $\phi$  e de sua derivada nas faces do volume de controle.

$$(\rho u)_e \phi_e - (\rho u)_w \phi_w = \frac{\Gamma_e}{\Delta x} (\phi_E - \phi_P) - \frac{\Gamma_w}{\Delta x} (\phi_P - \phi_W), \quad (5.4)$$

Para fins didáticos, considera-se que as variáveis  $\rho$ ,  $u$  e  $\Gamma$  são constantes ao longo de todo o domínio, o que garante que

$$\rho u (\phi_e - \phi_w) = \frac{\Gamma}{\Delta x} (\phi_E + \phi_W), \quad (5.5)$$

simplificando este problema para a determinação de  $\phi_e$  e  $\phi_w$ , já que os valores desta variável nos centros do domínio,  $\phi_E$  e  $\phi_W$ , já são conhecidos.

Para a resolução do referido problema, utilizou-se um domínio de comprimento  $L = 1,0$  m, no qual o fluido era transportado por uma velocidade  $u = 0,1$  m/s e possuía massa específica  $\rho = 1,0$  kg/m<sup>3</sup> e viscosidade dinâmica  $\Gamma = \mu = 0,1$  kg/m/s. As seguintes condições de contorno foram aplicadas:

- $\phi(x = 0) = 1$  e

- $\phi(x = L) = 0$ .

As indeterminações  $\phi_e$  e  $\phi_w$  foram obtidas através da utilização dos esquemas *upwind*, CDS e QUICK, discutidos na seção 4.2.1. Tais informações foram implementadas em um código computacional criado para este fim e os resultados obtidos foram, então, comparados com a solução analítica do referido problema,

$$\phi = \phi_0 + (\phi_L - \phi_0) \left[ \frac{\exp(\rho u x / \Gamma) - 1}{\exp(\rho u L / \Gamma) - 1} \right], \quad (5.6)$$

sendo apresentados na Fig. 5.1, disposta a seguir.

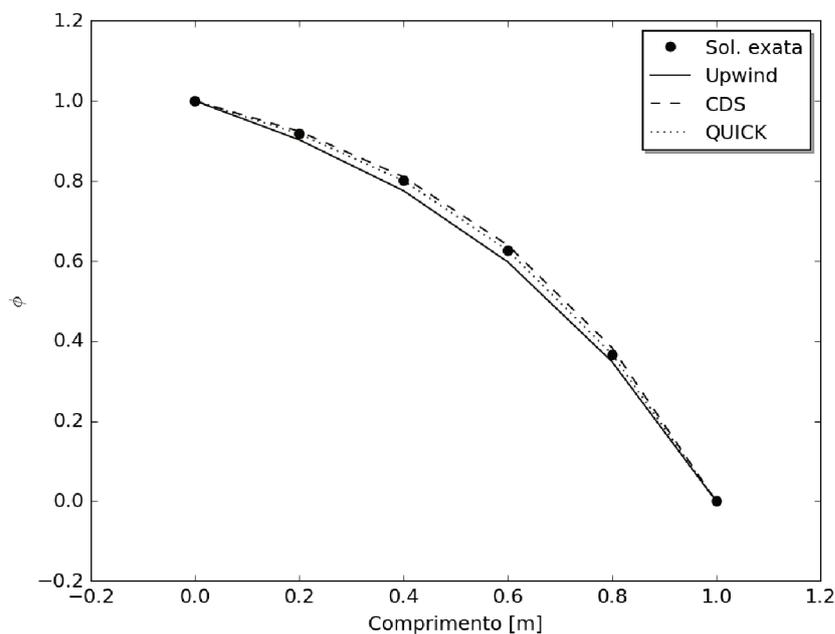


Figura 5.1 – Advecção-difusão em regime estacionário, com velocidade de transporte de 0,2 m/s.

A análise da referida figura sugere que os três esquemas estudados foram capazes de descrever o comportamento do experimento de forma satisfatória, sendo que o melhor resultado foi obtido com o esquema QUICK. Com relação as outras metodologias, pôde-se perceber subestimação e superestimação do resultado exato pelos esquemas *upwind* e CDS, respectivamente.

O referido problema foi, então, simulado novamente com um aumento considerável na velocidade de transporte, a qual passou para 2,5 m/s. Os resultados obtidos são apresentados pela Fig. 5.2.

O aumento na velocidade de transporte acarretou em mudanças significativas nos resultados obtidos. A utilização do esquema *upwind*, por exemplo, resultou em uma caracterização ainda mais subestimada do que a anterior, sendo este fenômeno conhecido por difusão numérica.

Os resultados relacionados com as metodologias de ordens mais elevadas apresentaram uma significativa dispersão, gerando soluções ora subestimadas, ora superestimadas. Tais resultados corroboram com a discussão realizada na seção 4.2.1 acerca da delimitação condicionada destes esquemas. Naquele momento, relatou-se que os esquemas CDS e QUICK se tornariam instáveis, respectivamente, quando  $Pe > 2$  e  $Pe > 8/3$ . O cálculo do referido número

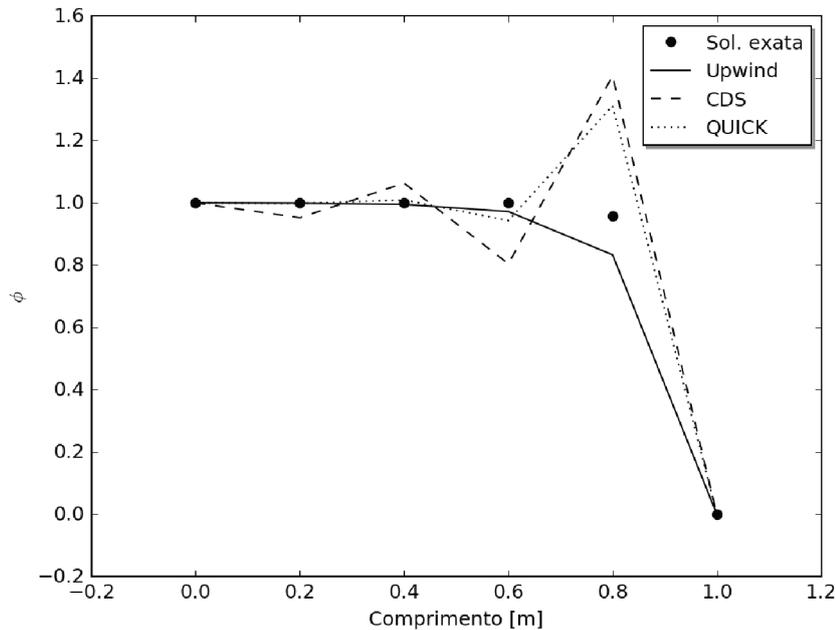


Figura 5.2 – Advecção-difusão em regime estacionário, com velocidade de transporte de 2,5 m/s.

adimensional para a situação estudada é, então, apresentado a seguir:

$$\begin{aligned}
 Pe &= \frac{\rho u \Delta x}{\Gamma}, \\
 &= \frac{1,0 \times 2,5 \times 0,2}{0,1} = 5,0,
 \end{aligned} \tag{5.7}$$

o qual se encontra acima dos limites mencionados. Entretanto, a análise da definição deste adimensional sugere duas alternativas para a utilização de tais esquemas, sem a necessidade de alterar o fluido estudado: diminuição na velocidade de transporte ou melhores resoluções de malha (menor espaçamento). Tal constatação pode ser verificada na Fig. 5.3, a qual apresenta resultados referentes ao mesmo problema, mas com um aumento considerável na resolução de malha utilizada, a qual passou de 5 para 25 pontos.

Na seção seguinte, uma comparação entre vários esquemas para o tratamento do termo não linear das equações de transporte será apresentada. Tal análise se baseou em simulações de casos retratando o fenômeno da advecção linear em regime transiente.

### 5.1.2 Advecção linear unidimensional

Um modelo simplificado é utilizado para a avaliação do desempenho dos esquemas numéricos para o termo advectivo das equações de Navier-Stokes. Trata-se da advecção linear unidimensional transiente, cuja modelagem matemática é disposta a seguir:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} &= 0, \\
 u(x, 0) &= u_0(x), \quad x \in [x_L, x_R], \\
 u(x_L, t) &= u_L \quad e \quad u(x_R, t) = u_R,
 \end{aligned} \tag{5.8}$$

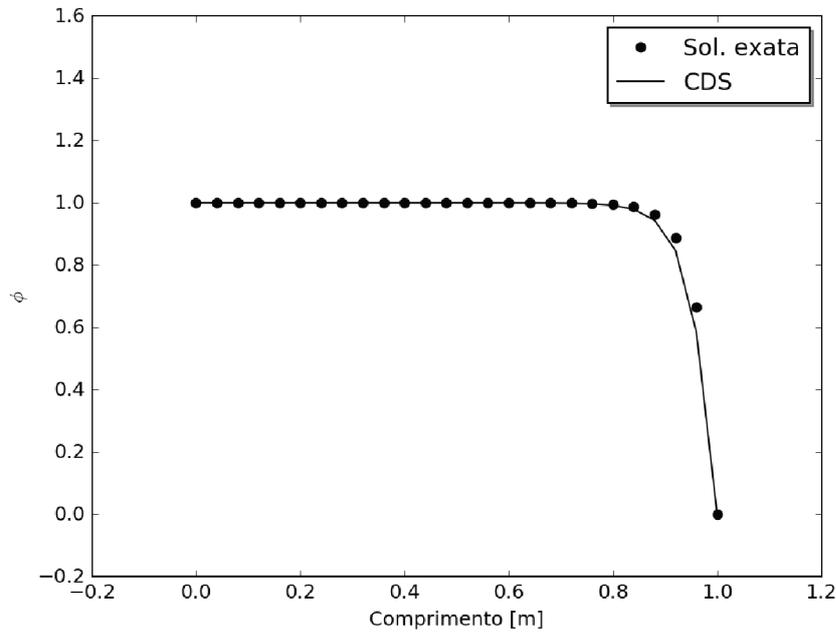


Figura 5.3 – Advecção-difusão em regime estacionário, com velocidade de transporte de 2,5 m/s e uma melhor resolução de malha.

nas quais  $t$  diz respeito ao tempo,  $u$  denota a velocidade do escoamento em um meio fluido,  $a$  é uma constante, representando uma velocidade de transporte,  $u_0(x)$  é a condição inicial e, por fim,  $x_L$  e  $x_R$  representam, respectivamente, os extremos esquerdo e direito dos domínios unidimensionais estudados. A solução exata da Eq. 5.8, segundo Morton e Mayers (2005), é  $u(x, t) = u_0(x - at)$ .

A referida modelagem é altamente dependente das condições iniciais impostas. Por este motivo, o estudo do desempenho dos esquemas para o termo advectivo das equações de transporte foi realizado a partir de três casos distintos, objetivando a caracterização de diferentes tipos de discontinuidades. A busca por discontinuidades se deve à vontade de caracterizar, por exemplo, um escoamento reativo, o qual caracteriza-se por mudanças bruscas de propriedades em curtos espaços. Tais casos são apresentados a seguir.

- Caso 1:

Nesta simulação, considerou-se a Eq. 5.8, com  $a = 1$ ,  $x \in [0; 2]$  e condição inicial proposta por Kurokawa et al. (2007):

$$u_0(x) = \begin{cases} \exp \left[ -\log 50 \left( \frac{x - 0,15}{0,05} \right)^2 \right], & x \in [0; 0,2) \\ 1, & x \in (0,3; 0,4) \\ 20x - 10, & x \in (0,5; 0,55) \\ -20x + 12, & x \in [0,55; 0,66) \\ \sqrt{1 - \left( \frac{x - 0,75}{0,05} \right)^2}, & x \in (0,7; 0,8) \\ 0, & x \in I \end{cases}$$

em que  $I = [0, 2; 0, 3] \cup [0, 4; 0, 5] \cup [0, 66; 0, 7] \cup [0, 8; 2, 0]$ . Uma representação da condição inicial e da solução exata desta simulação é apresentada na Fig. 5.4, disposta a

seguir.

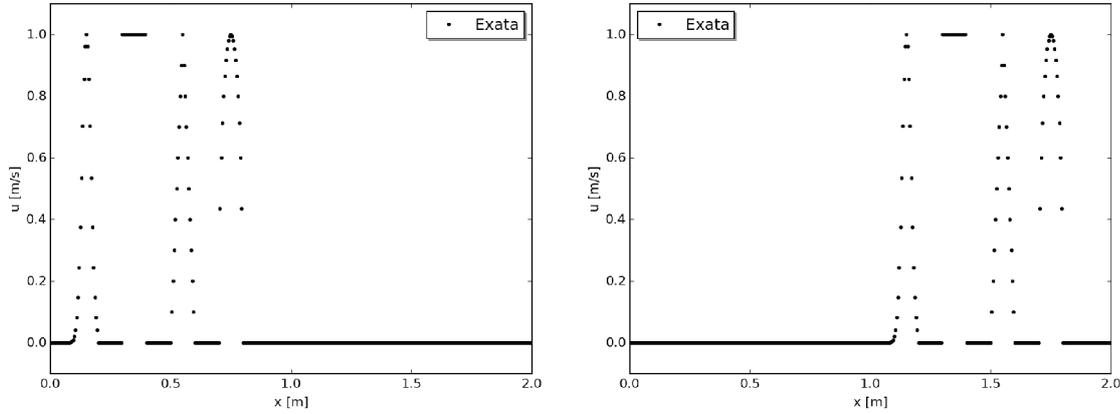


Figura 5.4 – Condição inicial e solução exata do caso 1.

Para a experimentação numérica desta situação, foram utilizadas 400 células computacionais, o que acarretou em um espaçamento de  $\delta_x = 5 \times 10^{-3}$  m,  $2,5 \times 10^{-3}$  s de passo de tempo, resultando em um CFL de  $\theta = a\delta_t/\delta_x = 2,5 \times 10^{-3}/5 \times 10^{-3} = 0,5$  em 1,0 s de simulação. Os resultados obtidos nesta configuração são dispostos na Fig. 5.5.

A análise da referida figura permite, por exemplo, confirmar uma das conclusões apontadas por Leonard e Drummond (1995): O esquema *upwind* de primeira ordem é significativamente difusivo, apesar de ser bastante estável. O esquema diferenças centradas (*centered differences scheme*, CDS), por sua vez, mostrou-se excessivamente dispersivo, divergindo rapidamente. Como solução para este problema, tentou-se restringir os valores mínimo e máximo deste esquema, baseando-se nos respectivos valores da solução exata. Como resposta para tal ação, percebe-se que o objetivo fora alcançado, entretanto, tal solução não foi capaz de representar corretamente a função aplicada. Quanto aos esquemas TVD, observou-se que as metodologias ADBQUICKEST, MINMOD e SMART apresentaram-se mais difusivos do que os restantes.

- Caso 2:

Nesta simulação, denominada de *W-shape*, considerou-se a Eq. 5.8, com  $a = 1$ ,  $x \in [-1; 1]$  e condição inicial proposta por Wei e Gu (2002):

$$u_0(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0; 0, 2] \\ 4x - 0, 6, & x \in (0, 2; 0, 4] \\ -4x + 2, 6, & x \in (0, 4; 0, 6] \\ 1, & x \in (0, 6; 0, 8] \\ 0, & x \in S \end{cases}$$

em que  $S = [-1, 0; 0, 0) \cup (0, 8; 1, 0]$ . Uma representação da condição inicial e da solução exata desta simulação é apresentada na Fig. 5.6, disposta a seguir.

Para a experimentação desta situação, tal como no experimento anterior, foram utilizados 400 células computacionais ( $\delta_x = 5 \times 10^{-3}$  m),  $2,5 \times 10^{-3}$  s de passo de tempo ( $CFL = 0,5$ ), porém, em 0,125 s de simulação. Os resultados obtidos são apresentados na Fig. 5.7.

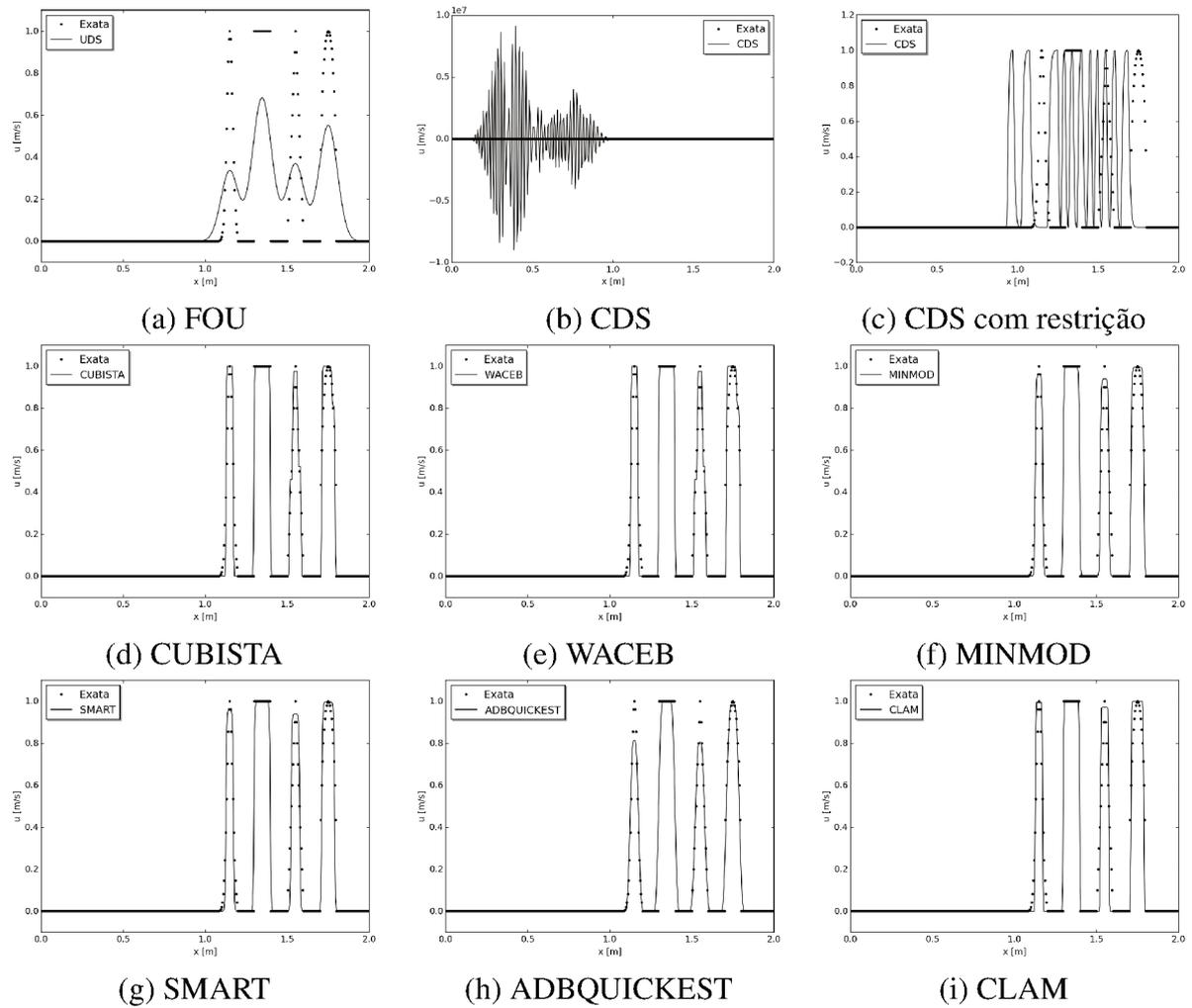


Figura 5.5 – Experimentação numérica do caso 1.

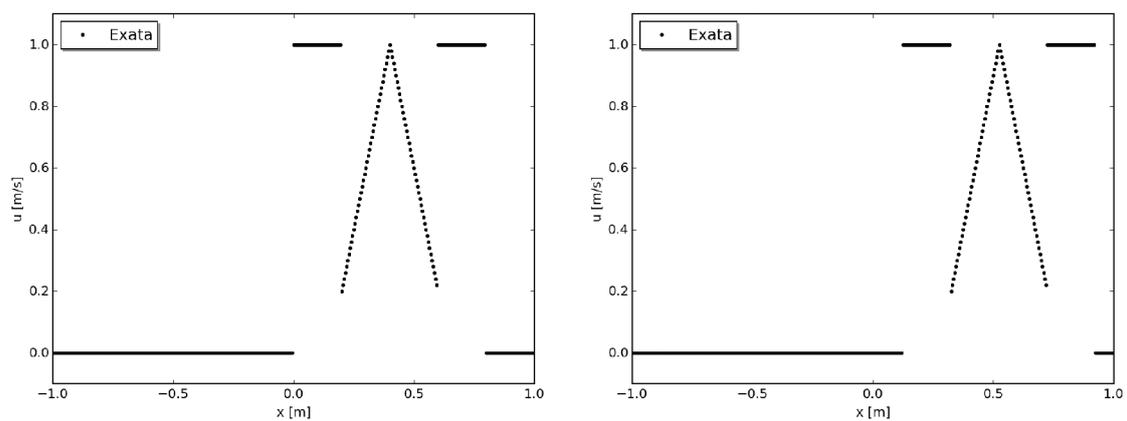


Figura 5.6 – Condição inicial e solução exata do caso 2.

A análise dos referidos resultados sugere conclusões semelhantes às apresentadas anteriormente mantendo, ainda, os esquemas CUBISTA, WACEB e CLAM como aqueles que melhor representaram o problema proposto.

- Caso 3:

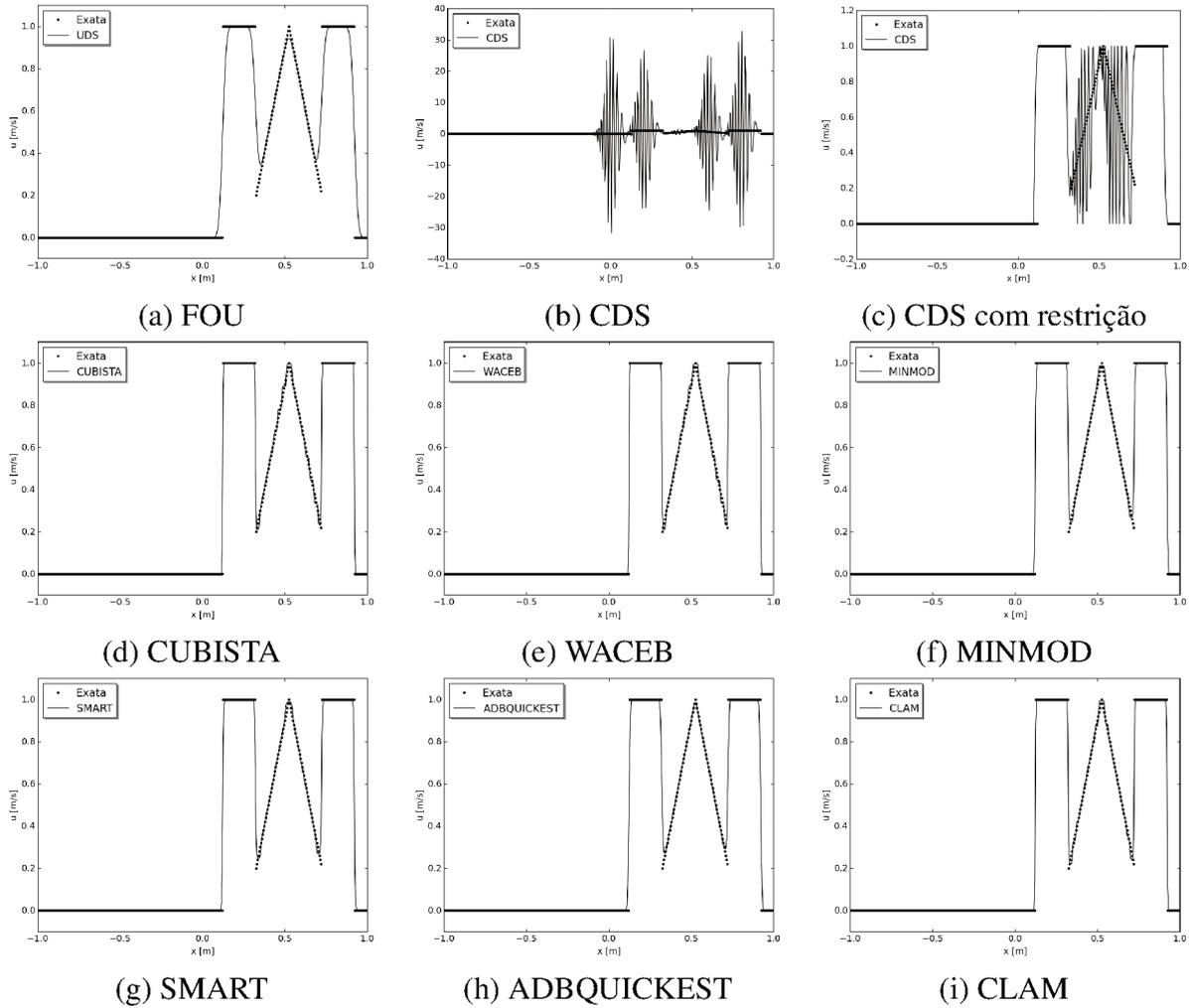


Figura 5.7 – Experimentação numérica do caso 2.

Por fim, para a realização desta experimentação, considerou-se a Eq. 5.8, com  $a = 1$ ,  $x \in [-1; 1]$ , com a condição inicial proposta por Harten (1989):

$$u_0(x) = \begin{cases} -x \operatorname{Sen}\left(\frac{3\pi x^2}{2}\right), & x \in \left[-1; -\frac{1}{3}\right] \\ |\operatorname{Sen}(2\pi x)|, & x \in \left[-\frac{1}{3}; \frac{1}{3}\right] \\ 2x - 1 - \frac{1}{6}\operatorname{Sen}(3\pi x), & x \in \left[\frac{1}{3}; 1\right] \end{cases}$$

Uma representação da condição inicial e da solução exata desta simulação é apresentada na Fig. 5.8, disposta a seguir.

Para a experimentação desta situação, tal como nos experimentos anteriores, foram utilizados 400 células computacionais ( $\delta_x = 5 \times 10^{-3}$  m),  $2,5 \times 10^{-3}$  s de passo de tempo ( $CFL = 0,5$ ), porém, em 0,25 s de simulação. Os resultados obtidos são apresentados na Fig. 5.9.

A análise dos referidos resultados sugere, novamente, conclusões semelhantes às apresentadas anteriormente mantendo, ainda, os esquemas CUBISTA, WACEB e CLAM como aqueles que melhor representaram o problema proposto.

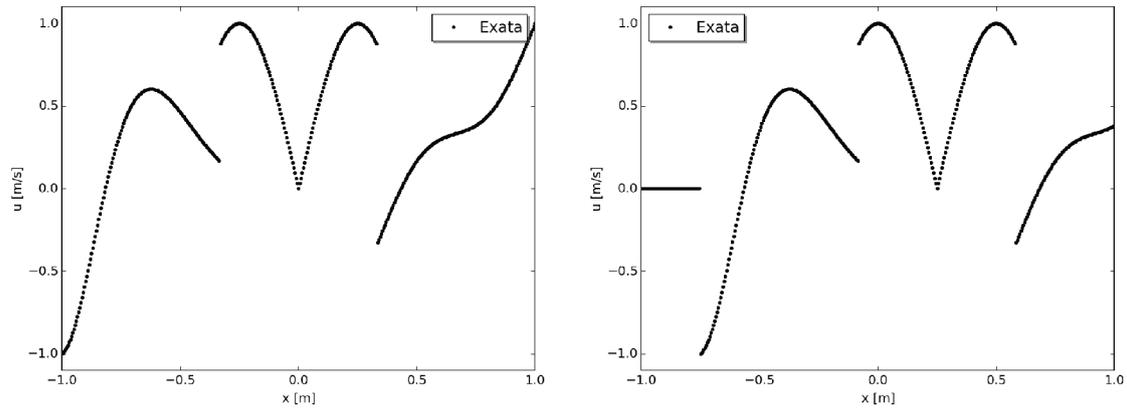


Figura 5.8 – Condição inicial e solução exata do caso 3.

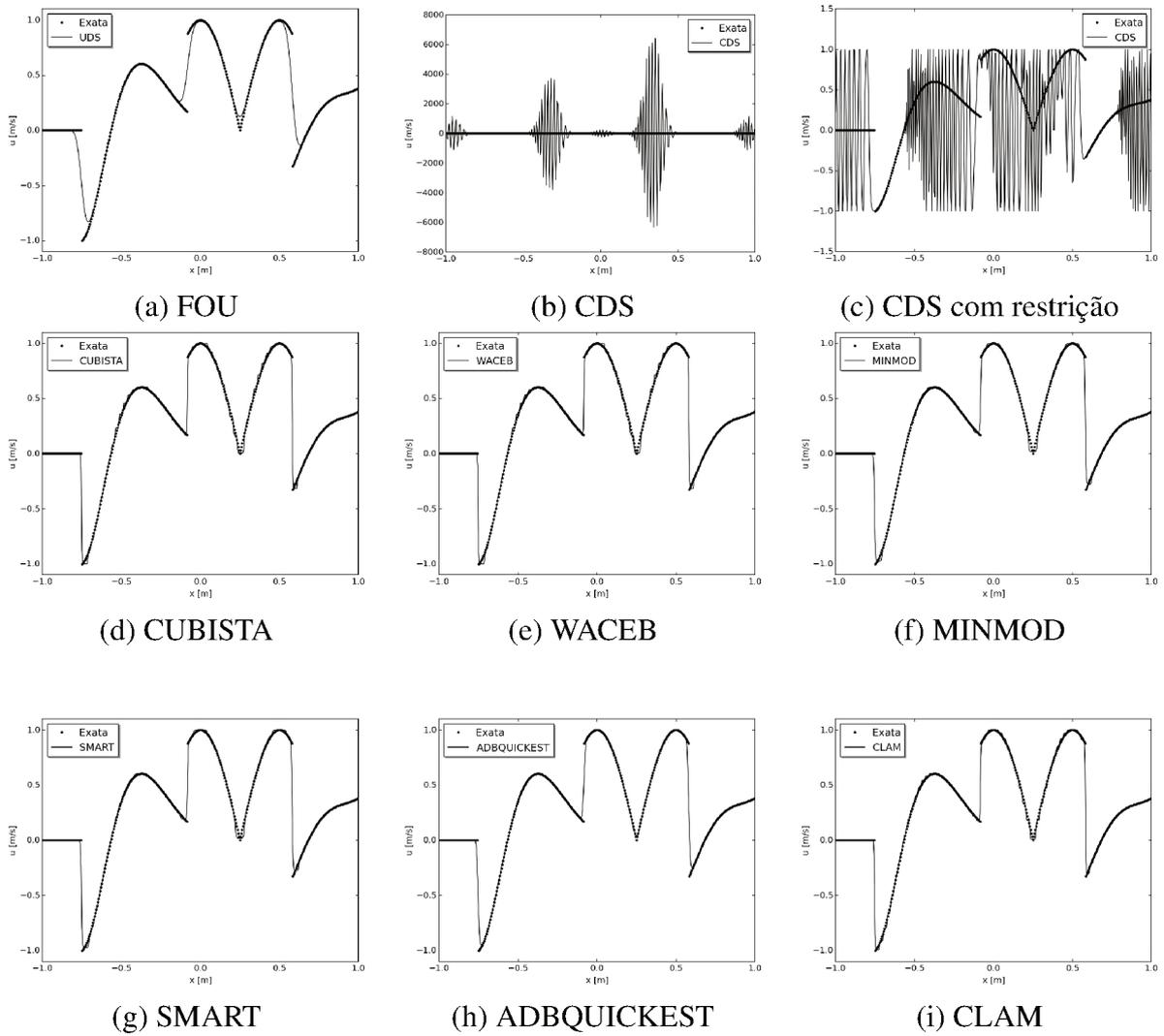


Figura 5.9 – Experimentação numérica do caso 3.

Com a conclusão do estudo anterior, partiu-se para a avaliação de três diferentes esquemas em um escoamento do tipo expansão brusca, ou degrau descendente.

### 5.1.3 Degrau descendente

A câmara de combustão A3C fora experimentada de forma material por [Moreau et al. \(1996\)](#) e de forma numérica por [Courtois \(2005\)](#). Tal experimento consiste de um domínio de  $0,9 \times 0,1 \times 0,1$  m, o qual apresenta um degrau medindo  $0,1 \times 0,1 \times 0,035$  m, localizado à entrada do domínio. A Fig. 5.10 apresenta uma representação esquemática do referido experimento.



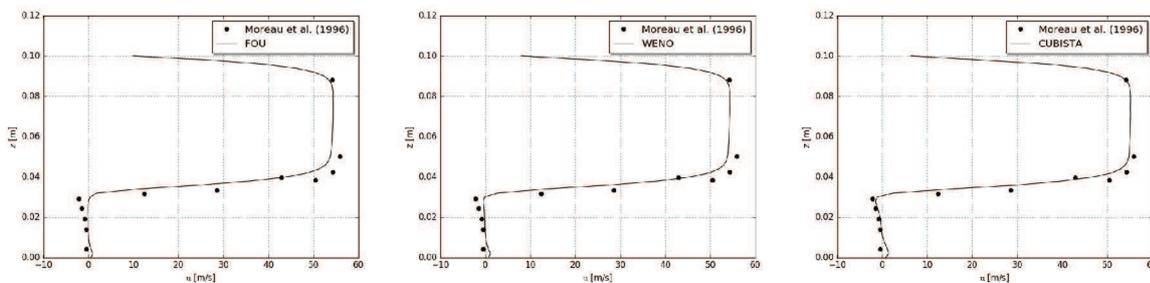
Figura 5.10 – Representação esquemática do experimento realizado por [Moreau et al. \(1996\)](#).

O escoamento acontece a  $Re=48750$ , e o perfil de velocidades médias à entrada do domínio, que fora ajustado a partir dos dados experimentais, é definido por

$$u(z) = C \left\{ 1 - \left[ \frac{z - \left( \frac{a}{2} + h \right)}{\frac{a}{2}} \right]^\gamma \right\}, \quad (5.9)$$

com  $C=55$  m/s,  $a=0,065$  m,  $h=0,035$  m e  $\gamma = 10$ . A massa específica do fluido e sua viscosidade dinâmica são constantes,  $\rho = 0,65$  kg/m<sup>3</sup> e  $\mu = 2,6 \times 10^{-5}$  kg/m/s. A simulação foi realizada em uma malha estruturada e uniforme, composta por  $450 \times 50 \times 50$  volumes.

Por se tratar de um escoamento turbulento, houve a necessidade de aplicação de um modelo de fechamento da turbulência. No presente trabalho, utilizou-se a modelagem denominada Smagorinsky dinâmico, proposta por [Germano et al. \(1991\)](#), a qual foi discutida anteriormente, na seção 3.2. Para melhor retratar tal fenômeno, aplicou-se a metodologia de geração de condições de entrada turbulentas RFG, proposta por [Smirnov, Shi e Celik \(2001\)](#), a qual foi apresentada na seção 3.3. Na Fig. 5.11, são apresentados resultados retirados de seis estações verticais, localizadas a 1, 2, 4, 6, 10 e 12 cm do degrau descendente, os quais se relacionam com velocidades médias obtidas com a utilização dos esquemas FOU, WENO e CUBISTA.



(a)  $x_m = 1$  cm

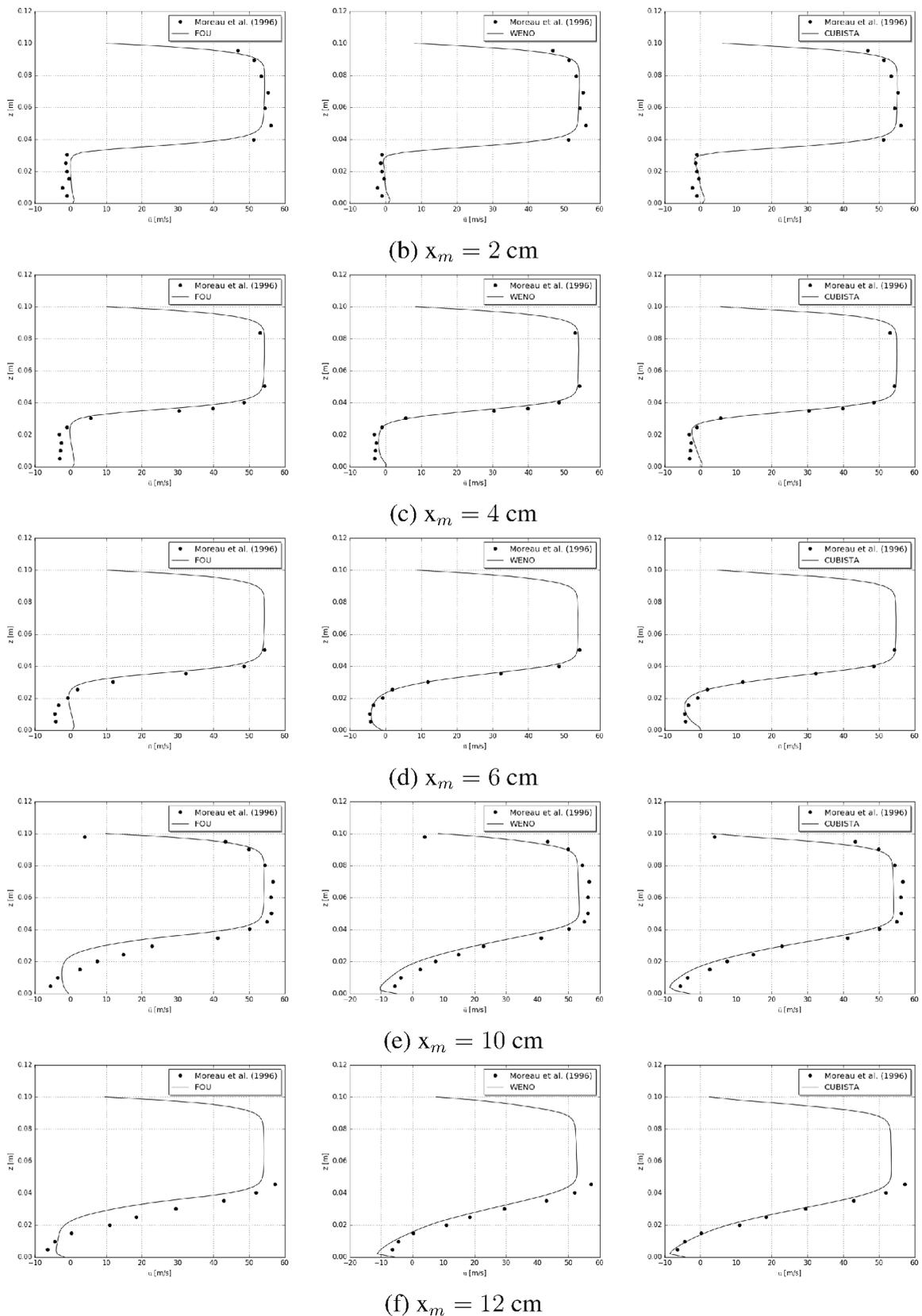


Figura 5.11 – Estações verticais de velocidades médias obtidas com os esquemas FOU (esquerda), WENO (centro) e CUBISTA (direita).

A análise da referida figura permite concluir que o esquema CUBISTA foi, novamente,

aquele que melhor caracterizou o fenômeno estudado, obtendo resultados significativos em quase todas as estações avaliadas. O esquema WENO, por sua vez, foi aquele que mais se aproximou da acurácia alcançada pela metodologia proposta por [Alves, Oliveira e Pinho \(2003\)](#), obtendo uma melhor caracterização da recirculação presente na estação localizada a 6 cm do degrau.

Uma análise interessante para escoamentos ocorrendo em um degrau descendente relaciona-se com o comprimento da recirculação gerada devido à expansão brusca. No presente trabalho, tal recirculação foi determinada através da análise das linhas de corrente médias das simulações realizadas, as quais são apresentadas pela Fig. 5.12.

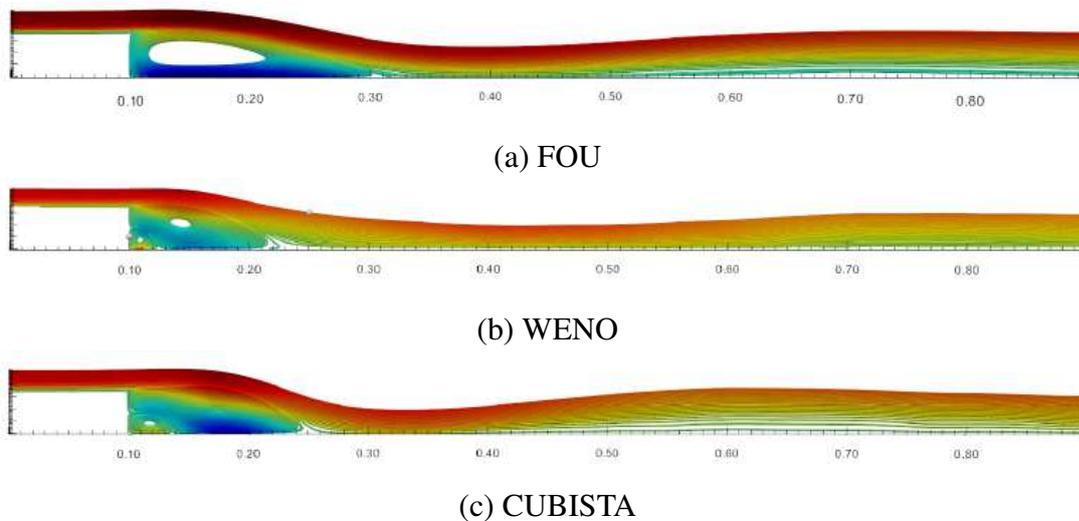


Figura 5.12 – Linhas de corrente médias de um escoamento em um degrau descendente, simulado com a utilização de esquema distintos para o tratamento da advecção.

A Tab. 5.1, por sua vez, apresenta os dados relacionados com os comprimentos das bolhas de recirculação obtidos da análise supracitada. São apresentados, também, os desvios relativos destes resultados, quando comparados com os obtidos por [Moreau et al. \(1996\)](#).

Tabela 5.1 – Comprimentos característicos de recirculações em um degrau descendente.

	x/h	Desvio (%)
<a href="#">Moreau et al. (1996)</a>	4,3	—
Presente trabalho: FOU	5,71	32,89
Presente trabalho: WENO	3,71	13,62
Presente trabalho: CUBISTA	4,29	0,33

A análise dos referidos resultados permite concluir que, dentre as alternativas apresentadas, o esquema advectivo CUBISTA se mostrou a melhor opção para a simulação do escoamento proposto, com um desvio ínfimo de 0,33%, quando comparado com o experimento material realizado por [Moreau et al. \(1996\)](#). Portanto, pelas conclusões retiradas desta seção, este esquema foi escolhido para a continuidade do presente trabalho.

Com a finalização das análises relacionadas com os esquemas numéricos para o tratamento do termo não linear das equações de transporte, na seção a seguir são mostrados resultados referentes à saída de dados baseada no acoplamento entre HDF5 e XDMF.

## 5.2 Saída de dados baseada em HDF5/XDMF

Tal como fora comentado anteriormente, a malha computacional para a caracterização de escoamentos turbulentos e reativos deve ser bem refinada. Tal necessidade acarreta na geração de arquivos ocupando uma elevada quantidade de espaço em disco, além do considerável tempo necessário para a escrita dos referidos resultados. O código computacional de trabalho era caracterizado pela utilização do formato ASCII para a geração de tais arquivos de resultados. Entretanto, há dois motivos principais que tornam este formato inviável quando há a necessidade de se trabalhar com uma grande quantidade de dados: o tempo de escrita e o tamanho dos arquivos. Tais problemas são contornados com o acoplamento proposto.

Em resumo, a biblioteca HDF5 é utilizada para escrever os resultados, ao passo que XDMF serve como um interpretador de tais dados para um formato que seja compreendido pela ferramenta de pós processamento. Para exemplificar esta metodologia, parte-se de um exemplo simplificado, no qual apenas quatro variáveis são gravadas: as coordenadas x, y e z, bem como a componente u da velocidade. A utilização da biblioteca HDF5 é apresentada no trecho de código a seguir:

Código 5.1 – Exemplo de utilização da biblioteca HDF5.

```
CALL h5open_f(error)
CALL h5fcreate_f(filename, H5F_ACC_TRUNC_F, file_id, error)
!-----
!  Dataspace/dataset z
!-----
CALL h5screate_simple_f(rank2, dims_z, z_space_id, error)
CALL h5dcreate_f(file_id, dsetname_z, H5T_NATIVE_DOUBLE, z_space_id, &
z_id, error)
CALL h5dwrite_f(z_id, H5T_NATIVE_DOUBLE, z(1:ztot), data_dims2, error)
CALL h5dclose_f(z_id, error)
CALL h5sclose_f(z_space_id, error)
!-----
!  Dataspace/dataset y
!-----
CALL h5screate_simple_f(rank2, dims_y, y_space_id, error)
CALL h5dcreate_f(file_id, dsetname_y, H5T_NATIVE_DOUBLE, y_space_id, &
y_id, error)
CALL h5dwrite_f(y_id, H5T_NATIVE_DOUBLE, y(1:ytot), data_dims2, error)
CALL h5dclose_f(y_id, error)
CALL h5sclose_f(y_space_id, error)
!-----
!  Dataspace/dataset x
!-----
CALL h5screate_simple_f(rank2, dims_x, x_space_id, error)
CALL h5dcreate_f(file_id, dsetname_x, H5T_NATIVE_DOUBLE, x_space_id, &
x_id, error)
CALL h5dwrite_f(x_id, H5T_NATIVE_DOUBLE, x(1:xtot), data_dims2, error)
CALL h5dclose_f(x_id, error)
CALL h5sclose_f(x_space_id, error)
!-----
!  Dataspace/dataset u
!-----
CALL h5screate_simple_f(rank, dims, u_space_id, error)
CALL h5dcreate_f(file_id, dsetname_u, H5T_NATIVE_DOUBLE, u_space_id, &
u_id, error)
CALL h5dwrite_f(u_id, H5T_NATIVE_DOUBLE, un(1:xtot,1:ytot,1:ztot), &
```

```

data_dims , error)
CALL h5dclose_f(u_id , error)
CALL h5sclose_f(u_space_id , error)
!_____
CALL h5fclose_f(file_id , error)
CALL h5close_f(error)

```

No trecho de código apresentado, as sub-rotinas `h5open_f` e `h5fcreate_f` têm o simples papel de, respectivamente, abrir a interface HDF5 e criar o arquivo no qual os dados serão armazenados. Em seguida, `h5screate_simple_f` e `h5dcreate_f` criam o espaço necessário para o vetor a ser gravado, além da variável em si (*dataspace* e *dataset*). Por fim, a variável é escrita por `h5dwrite_f` e todas as estruturas que foram abertas ou criadas são fechadas. Para tal, são chamadas as rotinas `h5dclose_f`, `h5sclose_f`, `h5fclose_f` e `h5close_f`. Desta forma, no caso da realização de uma simulação em paralelo, cada processo escreve sua própria saída de dados de forma independente, sendo as mesmas agrupadas pelo interpretador XDMF.

O trecho a seguir apresenta um exemplo deste arquivo XDMF, o qual servirá de interpretador dos arquivos que acabaram de ser escritos pela biblioteca HDF5.

#### Código 5.2 – Exemplo do interpretador XDMF para descrição espacial dos resultados.

```

<?xml version="1.0" ?>
<Xdmf Version="2.0">
  <Domain>
    <Grid Name="mesh" GridType="Collection" CollectionType="Spatial">
      <Time Type="Single" Value="0"/>
      <Grid Name="mesh0" GridType="Uniform">
        <Topology TopologyType="3DRectMesh" NumberOfElements="11 11 46"/>
        <Geometry GeometryType="VXVYZ">
          <DataItem Dimensions="46" NumberType="Float" Precision="8"
            Format="HDF">
            ./ hdf5 / output_000_0000 . h5: / X
          </DataItem>
          <DataItem Dimensions="11" NumberType="Float" Precision="8"
            Format="HDF">
            ./ hdf5 / output_000_0000 . h5: / Y
          </DataItem>
          <DataItem Dimensions="11" NumberType="Float" Precision="8"
            Format="HDF">
            ./ hdf5 / output_000_0000 . h5: / Z
          </DataItem>
        </Geometry>
        <Attribute Name="VEL_U" AttributeType="Scalar" Center="Node">
          <DataItem Dimensions="11 11 46" NumberType="Float" Precision="8"
            Format="HDF">
            ./ hdf5 / output_000_0000 . h5: / VEL_U
          </DataItem>
        </Attribute>
      </Grid>
      <Grid Name="mesh1" GridType="Uniform">
        <Topology TopologyType="3DRectMesh" NumberOfElements="11 11 46"/>
        <Geometry GeometryType="VXVYZ">
          <DataItem Dimensions="46" NumberType="Float" Precision="8"
            Format="HDF">
            ./ hdf5 / output_000_0000 . h5: / X
          </DataItem>

```

```

    <DataItem Dimensions="11" NumberType="Float" Precision="8"
      Format="HDF">
      ./ hdf5 / output_000_0000 . h5: / Y
    </DataItem>
    <DataItem Dimensions="11" NumberType="Float" Precision="8"
      Format="HDF">
      ./ hdf5 / output_000_0000 . h5: / Z
    </DataItem>
  </Geometry>
  <Attribute Name="VEL_U" AttributeType="Scalar" Center="Node">
    <DataItem Dimensions="11 11 46" NumberType="Float" Precision="8"
      Format="HDF">
      ./ hdf5 / output_000_0000 . h5: / VEL_U
    </DataItem>
  </Attribute>
</Grid>
</Grid>
</Domain>
</Xdmf>

```

A análise deste trecho de código permite concluir que se trata de uma simulação que fora realizada em paralelo, pois existem duas definições de malha, mesh0 e mesh1, cada uma com 46x11x11 elementos. Em outras palavras, tal arquivo é responsável pela interpretação espacial dos resultados escritos pela biblioteca anterior.

O último trecho de código, por sua vez, nada mais é do que um compilado de todos os arquivos com dados espaciais gerados pela ferramenta de trabalho. O papel do mesmo é organizar os resultados de acordo com o tempo da simulação, de forma que seja possível a visualização do desenvolvimento temporal do caso estudado.

### Código 5.3 – XDMF temporal.

```

<?xml version="1.0" ?>
<Xdmf Version="2.0">
  <Domain>
    <Grid GridType="Collection" CollectionType="Temporal">
      <xi:include href="output_0000.xml"
        xpointer="xpointer (//Xdmf/Domain/Grid)"
        xmlns:xi="" http://www.w3.org/2001/XInclude "" />
      <xi:include href="output_0001.xml"
        xpointer="xpointer (//Xdmf/Domain/Grid)"
        xmlns:xi="" http://www.w3.org/2001/XInclude "" />
      <xi:include href="output_0002.xml"
        xpointer="xpointer (//Xdmf/Domain/Grid)"
        xmlns:xi="" http://www.w3.org/2001/XInclude "" />
      <xi:include href="output_0003.xml"
        xpointer="xpointer (//Xdmf/Domain/Grid)"
        xmlns:xi="" http://www.w3.org/2001/XInclude "" />
    </Grid>
  </Domain>
</Xdmf>

```

Para exemplificar a eficácia da referida metodologia, foram gerados dois campos de resultados, sendo um de cada método de escrita, de um caso discretizado espacialmente por 9000000 de volumes. Os resultados obtidos são apresentados na Tab. 5.2.

A análise da referida tabela permite concluir que tal metodologia trouxe resultados expressivos na gravação de arquivos de saída. Para o exemplo realizado, obteve-se uma queda

Tabela 5.2 – Comparativo de performance entre escritas binária e ASCII.

Formato	Tempo de escrita (s)	Tamanho de arquivos (gb)
ASCII	291,4	8,1
Binário	0,048	1,9
Redução	99%	75%

de 99% no tempo de escrita dos referidos dados, além de uma redução de 75% no tamanho dos arquivos gerados. Em outras palavras, o tempo de gravação, bem como o tamanho dos arquivos gerados com a utilização da escrita binária, foram significativamente menores, viabilizando a utilização de tal acoplamento.

Na seção seguinte, muitas das metodologias descritas anteriormente serão aplicadas na simulação de um escoamento turbulento, incompressível e inerte. Para uma melhor caracterização do fenômeno estudado, fez-se uso de adaptatividade de malha, de um modelo de fechamento da turbulência e de um modelo de geração de condições de contorno turbulentas. Tal estudo é apresentado a seguir.

### 5.3 Escoamento turbulento, incompressível e inerte com refinamento adaptativo de malha

Para o estudo de um escoamento turbulento, incompressível e inerte com refinamento adaptativo de malha, optou-se pela simulação de um jato, o qual fora baseado nos dados experimentais da chama de difusão D, descrita por [Balow e Frank \(2007\)](#) e simulada numericamente por [Pitsch e Steiner \(2000\)](#) e [Kempf, Flemming e Janicka \(2005\)](#). Tal experimento se caracteriza por possuir diâmetros do bocal e da região piloto de, respectivamente,  $d_0 = 7,2 \times 10^{-3}$  m e  $d_1 = 1,8 \times 10^{-2}$  m. O domínio computacional utilizado foi de  $40d_0 \times 80d_0 \times 40d_0$ , resultando em 0,288 m x 0,576 m x 0,288 m. A massa específica do fluido e sua viscosidade dinâmica são constantes,  $\rho = 1,184$  kg/m<sup>3</sup> e  $\mu = 1,85 \times 10^{-5}$  kg/m/s.

As componentes de velocidade na entrada do domínio são definidas como nulas nas direções  $x$  e  $z$  ( $u = w = 0$  m/s). Na direção remanescente, a componente  $v$  da velocidade é definida como sendo:

$$v = v_{d_0} + v_{d_1}, \quad (5.10)$$

com

$$v_{d_0} = \frac{v_2 + v_0}{2} - \left( \frac{v_2 - v_0}{2} \right) \tanh \left[ 25 \left( \frac{r_j}{r_0} - \frac{r_0}{r_j} \right) \right] \quad (5.11)$$

e

$$v_{d_1} = \frac{v_1 + v_0}{2} - \left( \frac{v_1 - v_0}{2} \right) \tanh \left[ 25 \left( \frac{r_j}{r_1} - \frac{r_1}{r_j} \right) \right], \quad (5.12)$$

nas quais  $r_j = \sqrt{(z - 0,5 \cdot D)^2 + (x - 0,5 \cdot L)^2}$ ,  $v_0 = 0,9$  m/s,  $v_1 = 11,4$  m/s e  $v_2 = 49,6$  m/s.  $r_1$  e  $r_0$  correspondem, respectivamente, aos raios da região piloto e do bocal, ao passo que  $L$  e  $D$  dizem respeito aos tamanhos do domínio nas direções  $x$  e  $z$ , respectivamente. O número de Reynolds, baseado no diâmetro do bocal, é  $Re=22400$ . A simulação foi realizada

em uma malha bloco-estruturada composta por uma malha base (composta por  $32 \times 64 \times 32$  volumes), mais três níveis de refinamento adaptativo. Desta forma, o nível mais refinado possui espaçamento de  $1,125 \times 10^{-3}$  m, o qual garante que o diâmetro do bocal contenha 6 volumes. Tais informações são apresentadas pela Fig. 5.13.

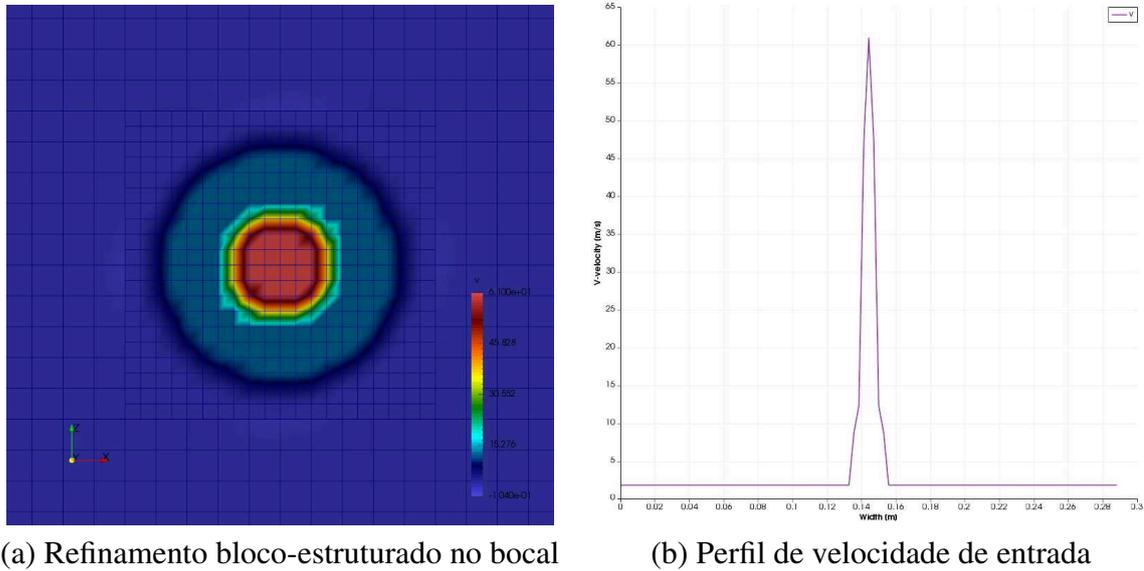


Figura 5.13 – Condição inicial do jato inerte, turbulento e incompressível Sandia D.

Por fim, foi aplicado o modelo de fechamento da turbulência Smagorinsky dinâmico, proposto por [Germano et al. \(1991\)](#), juntamente com a metodologia de geração de condições de entrada turbulentas RFG, proposta por [Smirnov, Shi e Celik \(2001\)](#). Para fins de comparação, tal escoamento também fora simulado sem o método de geração RFG.

Na Fig. 5.14, são apresentados resultados relacionados com o problema em questão. Tais resultados representam o campo de velocidade  $v$  e a adaptatividade da malha, a qual foi baseada na vorticidade do escoamento.

O perfil de velocidade na linha de centro das simulações com e sem a metodologia RFG foram comparados com dados experimentais, colhidos por [Hussein, Capp e George \(1994\)](#) e com uma expressão matemática, com a qual é possível retratar o decaimento médio da velocidade de jatos turbulentos incompressíveis na linha de centro. Tal expressão é descrita como sendo

$$\frac{v}{v_{d_0}} = \frac{B_u d_0}{y - y_0}, \quad (5.13)$$

na qual  $B_u = 5,8$  e  $y_0 = 4d_0 = 0,0288$  ([HUSSEIN; CAPP; GEORGE, 1994; BOERSMA; BRETHOUWER; NIEUWSTADT, 1998](#)). Tais comparações são apresentadas na Fig. 5.15.

A análise da referida figura permite concluir que a utilização da metodologia RFG, para a geração de condições de entrada turbulentas, acarretou em uma melhoria considerável na caracterização do problema estudado. Tal afirmação é realizada com base nos resultados da simulação sem ruído, a qual se apresentou mais distante dos dados experimentais de [Hussein, Capp e George \(1994\)](#).

Com a validação da metodologia para a simulação de escoamentos turbulentos, incompressíveis e inertes, parte-se para uma discussão acerca da biblioteca utilizada para a atualização de propriedades termodinâmicas, cinéticas e de transporte. Neste âmbito, na seção seguinte apresenta-se uma breve comparação entre duas ferramentas bem difundidas pela literatura:

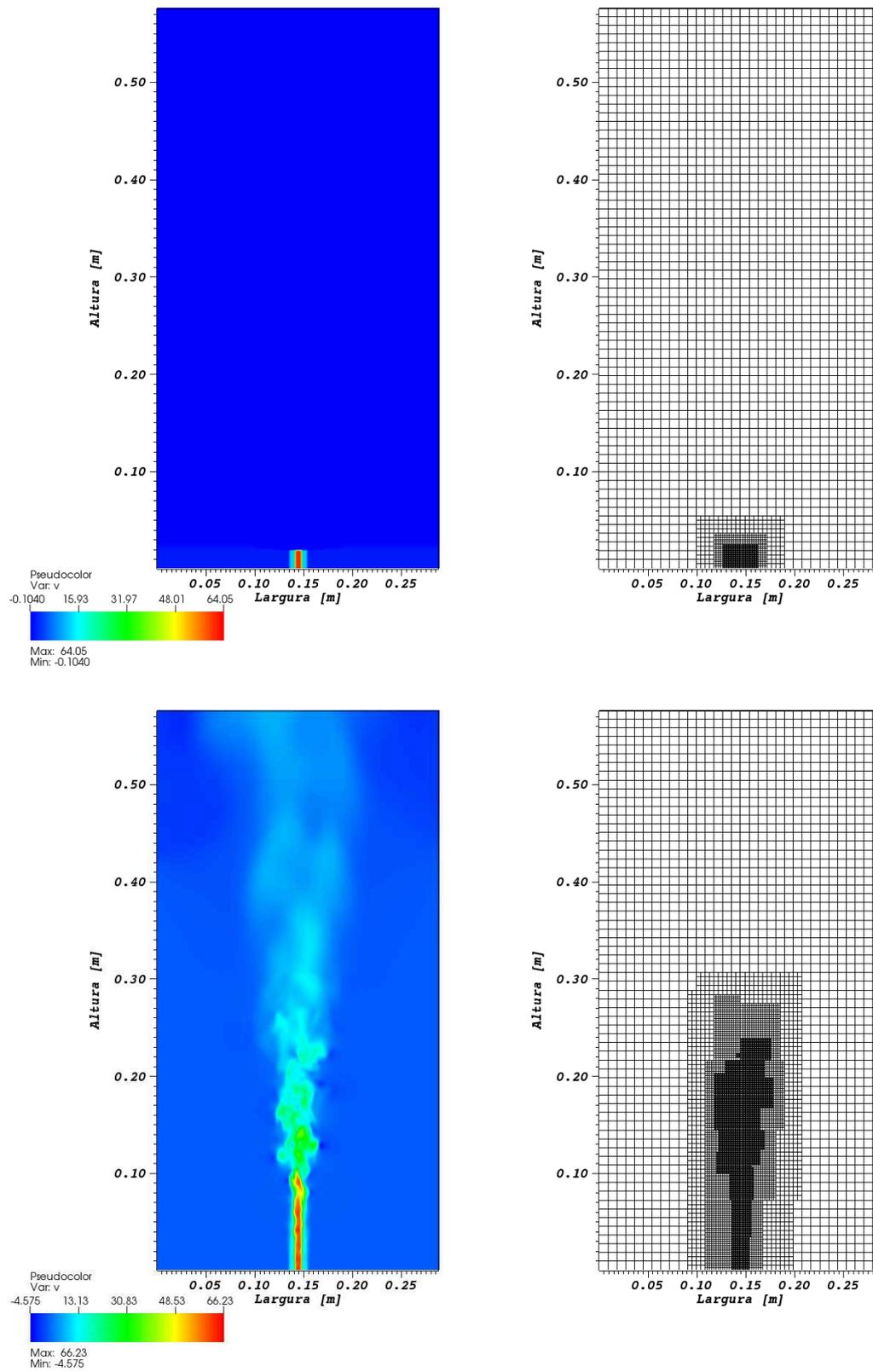


Figura 5.14 – Componente  $v$  da velocidade em um plano de corte no centro do domínio computacional,  $z=1,44 \times 10^{-1}$  m.

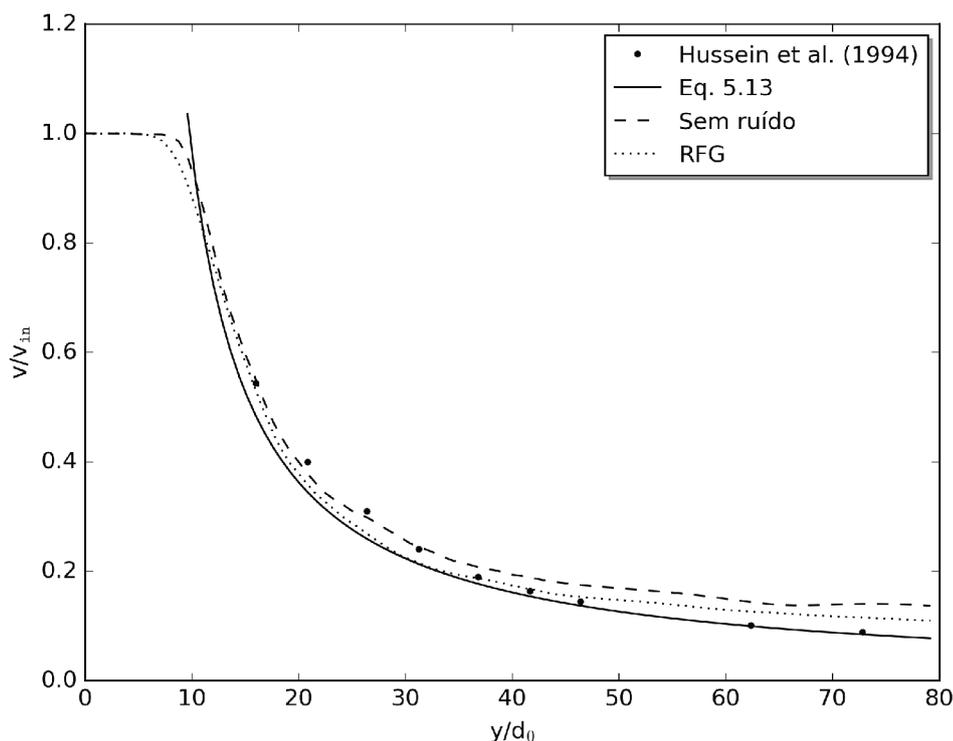


Figura 5.15 – Decaimento médio da componente da velocidade na direção do escoamento, avaliado na linha de centro do domínio computacional.

Chemkin (KEE; RUPLEY; MILLER, 1989) e Cantera (GOODWIN; MOFFAT; SPETH, 2016). Em seguida, aquela que apresentar o melhor desempenho será avaliada a partir de resultados obtidos pela referida biblioteca e de forma analítica, além de análises da influência da utilização de mecanismos cinéticos simples e complexos.

## 5.4 Biblioteca para a atualização de propriedades

Uma comparação entre as bibliotecas Chemkin, desenvolvida por Kee, Rupley e Miller (1989) e Cantera, disponibilizada por Goodwin, Moffat e Speth (2016), foi realizada tendo como base o equilíbrio químico de uma mistura estequiométrica de metano e ar, com a utilização do mecanismo GRI-Mech (SMITH et al., 2016). Os resultados obtidos são apresentados a seguir

Saída de dados 5.1 – Equilíbrio químico calculado com o auxílio da biblioteca Cantera, para uma chama estequiométrica e pré-misturada de metano e ar, descrita por 53 espécies e 325 reações.

```
#####
Adiabatic Flame Temperature
#####
```

	INITIAL STATE	EQUILIBRIUM STATE
P (Pa)	0.10132E+06	0.10133E+06
T (K)	0.30000E+03	0.22255E+04
H (J/kg)	-0.25459E+06	-0.25459E+06
U (J/kg)	-0.34486E+06	-0.92922E+06
S (J/kg-K)	0.72478E+04	0.98766E+04
W (amu)	0.27633E+02	0.27428E+02

Mole fractions		
H2	0.00000E+00	0.36045E-02
H	0.00000E+00	0.39035E-03
O	0.00000E+00	0.21566E-03
O2	0.19011E+00	0.46222E-02
OH	0.00000E+00	0.28754E-02
H2O	0.00000E+00	0.18347E+00
HO2	0.00000E+00	0.49892E-06
H2O2	0.00000E+00	0.45732E-07
C	0.00000E+00	0.22178E-16
CH	0.00000E+00	0.33615E-17
CH2	0.00000E+00	0.98273E-17
CH2(S)	0.00000E+00	0.59563E-18
CH3	0.00000E+00	0.62236E-16
CH4	0.95057E-01	0.30330E-16
CO	0.00000E+00	0.89879E-02
CO2	0.00000E+00	0.85364E-01
HCO	0.00000E+00	0.79498E-09
CH2O	0.00000E+00	0.13195E-10
CH2OH	0.00000E+00	0.41141E-16
CH3O	0.00000E+00	0.65751E-18
CH3OH	0.00000E+00	0.34929E-17
C2H	0.00000E+00	0.36711E-23
C2H2	0.00000E+00	0.91467E-21
C2H3	0.00000E+00	0.69215E-26
C2H4	0.00000E+00	0.72300E-26
C2H5	0.00000E+00	0.78436E-31
C2H6	0.00000E+00	0.56972E-32
HCCO	0.00000E+00	0.53665E-19
CH2CO	0.00000E+00	0.71060E-19
HCCOH	0.00000E+00	0.69685E-22
N	0.00000E+00	0.14245E-07
NH	0.00000E+00	0.23597E-08
NH2	0.00000E+00	0.94092E-09
NH3	0.00000E+00	0.26865E-08
NNH	0.00000E+00	0.75558E-09
NO	0.00000E+00	0.18882E-02
NO2	0.00000E+00	0.34628E-06
N2O	0.00000E+00	0.10019E-06
HNO	0.00000E+00	0.33664E-07
CN	0.00000E+00	0.67740E-13
HCN	0.00000E+00	0.19307E-10
H2CN	0.00000E+00	0.54774E-17
HCNN	0.00000E+00	0.13167E-20
HCNO	0.00000E+00	0.10202E-15
HOCN	0.00000E+00	0.11312E-11
HNCO	0.00000E+00	0.38646E-09
NCO	0.00000E+00	0.15438E-10
N2	0.71483E+00	0.70858E+00
AR	0.00000E+00	0.00000E+00
C3H7	0.00000E+00	0.35410E-46
C3H8	0.00000E+00	0.24284E-47
CH2CHO	0.00000E+00	0.29529E-24
CH3CHO	0.00000E+00	0.58548E-25

Processing time: 0.4000E-02 s

Saída de dados 5.2 – Equilíbrio químico calculado com o auxílio da biblioteca CHEMKIN, para uma chama estequiométrica e pré-misturada de metano e ar, descrita por 53 espécies e 325 reações.

```

CKLIB:  Chemical Kinetics Library
CHEMKIN-II Version 4.9, April 1994

Constant pressure and enthalpy problem:

EQUIL:  Chemkin interface for Stanjan-III
CHEMKIN-II Version 3.0, December 1992
DOUBLE PRECISION

INITIAL STATE:      EQUILIBRIUM STATE:
P (atm)              1.0000E+00      1.0000E+00
T (K)                3.0000E+02      2.2255E+03
V (cm3/gm)           8.9081E+02      6.6580E+03
H (erg/gm)           -2.5458E+09     -2.5458E+09
U (erg/gm)           -3.4484E+09     -9.2920E+09
S (erg/gm-K)         7.2474E+07      9.8756E+07
W (gm/mole)          2.7633E+01      2.7428E+01

Mole Fractions
H2                   0.0000E+00      3.6046E-03
H                    0.0000E+00      3.9031E-04
O                    0.0000E+00      2.1562E-04
O2                   1.9011E-01      4.6217E-03
OH                   0.0000E+00      2.8751E-03
H2O                  0.0000E+00      1.8347E-01
HO2                  0.0000E+00      4.9912E-07
H2O2                 0.0000E+00      4.5766E-08
C                    0.0000E+00      2.2200E-17
CH                   0.0000E+00      3.3656E-18
CH2                  0.0000E+00      9.8411E-18
CH2(S)              0.0000E+00      5.9656E-19
CH3                  0.0000E+00      6.2335E-17
CH4                  9.5057E-02      3.0389E-17
CO                   0.0000E+00      8.9866E-03
CO2                  0.0000E+00      8.5366E-02
HCO                  0.0000E+00      7.9548E-10
CH2O                 0.0000E+00      1.3210E-11
CH2OH               0.0000E+00      4.1212E-17
CH3O                 0.0000E+00      6.5882E-19
CH3OH               0.0000E+00      3.5004E-18
C2H                  0.0000E+00      3.6781E-24
C2H2                 0.0000E+00      9.1651E-22
C2H3                 0.0000E+00      6.9397E-27
C2H4                 0.0000E+00      7.2515E-27
C2H5                 0.0000E+00      7.8716E-32
C2H6                 0.0000E+00      5.7201E-33
HCCO                 0.0000E+00      5.3757E-20
CH2CO               0.0000E+00      7.1202E-20
HCCOH               0.0000E+00      6.9843E-23
N                    0.0000E+00      1.4251E-08
NH                   0.0000E+00      2.3611E-09
NH2                  0.0000E+00      9.4171E-10
NH3                  0.0000E+00      2.6894E-09
NNH                  0.0000E+00      7.5628E-10

```

NO	0.0000E+00	1.8882E-03
NO2	0.0000E+00	3.4648E-07
N2O	0.0000E+00	1.0027E-07
HNO	0.0000E+00	3.3686E-08
CN	0.0000E+00	6.7806E-14
HCN	0.0000E+00	1.9326E-11
H2CN	0.0000E+00	5.4871E-18
HCNN	0.0000E+00	1.3195E-21
HCNO	0.0000E+00	1.0219E-16
HOCN	0.0000E+00	1.1326E-12
HNCO	0.0000E+00	3.8686E-10
NCO	0.0000E+00	1.5453E-11
N2	7.1483E-01	7.0858E-01
AR	0.0000E+00	0.0000E+00
C3H7	0.0000E+00	0.0000E+00
C3H8	0.0000E+00	0.0000E+00
CH2CHO	0.0000E+00	2.9607E-25
CH3CHO	0.0000E+00	5.8724E-26

Processing time: 1.2000000000000000E-002 s

Com a análise dos referidos resultados, decidiu-se pela utilização da biblioteca Cantera, pois a mesma retorna resultados idênticos aos obtidos com a ferramenta Chemkin, mas com um terço do custo computacional, tal como pode ser avaliado na Tab. 5.3.

Tabela 5.3 – Custo computacional da simulação de equilíbrio químico com as bibliotecas Chemkin e Cantera.

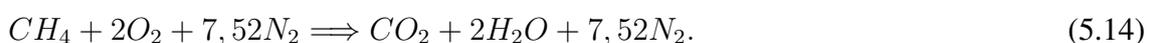
Biblioteca	Custo computacional (s)
Chemkin	$1,2 \times 10^{-2}$
Cantera	$4,0 \times 10^{-3}$

Por este motivo, a biblioteca Cantera foi acoplada ao código MFSim. Tal acoplamento, bem como as modificações relacionadas com a saída de dados do referido código computacional, permitiram a utilização de quaisquer mecanismos cinéticos no formato cti, os quais são amplamente difundidos pela literatura.

Na seção seguinte, serão apresentadas validações desta biblioteca, as quais foram realizadas a partir de comparações entre taxas de progresso de reação e difusividades mássicas obtidas de duas formas: com a utilização da referida biblioteca, já acoplada ao MFSim, e calculadas de forma analítica. Discussões acerca da influência da complexidade dos mecanismos utilizados também serão realizadas.

### 5.4.1 Validação da biblioteca Cantera

Para fins didáticos, a realização da validação da biblioteca Cantera será realizada com uma reação global e irreversível do metano. A combustão estequiométrica entre este hidrocarboneto e ar é definida como sendo:



Assim, a taxa de progresso de reação global, Eq. 3.37, é calculada da seguinte forma:

$$Q = A_f \exp\left(-\frac{E}{R_u T}\right) [CH_4]^a [O_2]^b \quad (5.15)$$

WESTBROOK e DRYER (1981) apresentaram vários mecanismos reacionais simplificados para a oxidação de hidrocarbonetos. Segundo os referidos autores, a combustão do metano é caracterizada pelo seguinte conjunto de dados: constante pré-exponencial  $A_f = 1,3 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ , energia de ativação  $E = 48400 \text{ cal/mol}$  e expoentes com valores de  $a = -0,3$  e  $b = 1,3$ . Note que os expoentes  $a$  e  $b$  não representam os coeficientes estequiométricos da reação, o que denota que a mesma não se trata de uma reação elementar.

Através da energia de ativação e da constante universal dos gases compatível com as unidades utilizadas, é possível calcular a temperatura de ativação:

$$T_a = \frac{E}{R_u} = 48400 \left[ \frac{\text{cal}}{\text{mol}} \right] \times \frac{1}{1,987} \left[ \frac{\text{K} \cdot \text{mol}}{\text{cal}} \right] = 24358 \text{K}.$$

Desta forma, a Eq. 5.15 se torna:

$$Q = 1,3 \times 10^8 \exp\left(-\frac{24358}{T}\right) [CH_4]^{-0,3} [O_2]^{1,3}. \quad (5.16)$$

Resta, ainda, calcular as concentrações molares de combustível e de oxigênio. Tais molaridades devem ser avaliadas na temperatura de análise da taxa de progresso de reação. Tais concentrações, determinadas a partir da lei dos gases ideais, são definidas como sendo:

$$C_k = \frac{pX_k}{R_u T}. \quad (5.17)$$

Portanto, para determinar a referida concentração, necessita-se das frações molares das espécies presentes na mistura (metano, oxigênio e nitrogênio). A queima estequiométrica de  $CH_4$  segue a Eq. 5.14, a qual permite concluir que a seguinte quantidade de mols está presente nos reagentes:  $N_{CH_4} = 1$ ,  $N_{O_2} = 2$  e  $N_{N_2} = 7,52$  e  $N = \sum N_k = 1 + 2 + 7,52 = 10,52$ . De posse dos números de mols que caracterizam a mistura estudada, torna-se possível definir as frações molares das mesmas com uma simples ponderação, ou seja:

$$X_k = \frac{N_k}{N}. \quad (5.18)$$

As frações molares de metano e oxigênio valem, portanto:

$$X_{CH_4} = \frac{1}{10,52} = 0,095 \quad (5.19)$$

e

$$X_{O_2} = \frac{2}{10,52} = 0,19 \quad (5.20)$$

e as mesmas são aplicadas na Eq. 5.17 para determinar as respectivas concentrações:

$$\begin{aligned} [CH_4] &= 101,325[\text{kPa}] \times 0,095 \times \frac{1}{8,314} \left[ \frac{\text{kmol} \cdot \text{K}}{\text{kPa} \cdot \text{m}^3} \right] \times \frac{1}{T} \left[ \frac{1}{\text{K}} \right] \\ &= \frac{1,1574}{T} \left[ \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right] \end{aligned}$$

e

$$[O_2] = 101,325[\text{kPa}] \times 0,19 \times \frac{1}{8,314} \left[ \frac{\text{kmol} \cdot \text{K}}{\text{kPa} \cdot \text{m}^3} \right] \times \frac{1}{T} \left[ \frac{1}{\text{K}} \right]$$

$$= \frac{2,322}{T} \left[ \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right].$$

Com a conclusão dos referidos cálculos pode-se, finalmente, determinar a taxa de progresso da reação global de acordo com a temperatura a ser avaliada, ou seja:

$$Q = 3,72 \times 10^8 \times \exp\left(-\frac{24358}{T}\right) \times \left(\frac{1}{T}\right). \quad (5.21)$$

Os resultados obtidos para esta propriedade em temperaturas distintas, determinados de forma analítica e através do Cantera, são apresentados na Tab. 5.4 e na Fig. 5.16.

Tabela 5.4 – Taxas de progresso de reação obtidas de forma analítica e com a biblioteca Cantera.

Temperatura [K]	Exata	Cantera	Desvio (%)
300	$6,785491 \times 10^{-30}$	$6.813292 \times 10^{-30}$	0,4097
600	$1,450306 \times 10^{-12}$	$1.450983 \times 10^{-12}$	0,0467
900	$7,283461 \times 10^{-7}$	$7.278071 \times 10^{-7}$	0,0740
1200	0,000474	0,000473	0,1343
1500	0,021982	0,021944	0,1705
1800	0,274332	0,273799	0,1946
2100	1,625165	1,621723	0,2118
2400	6,061511	6,047891	0,2247

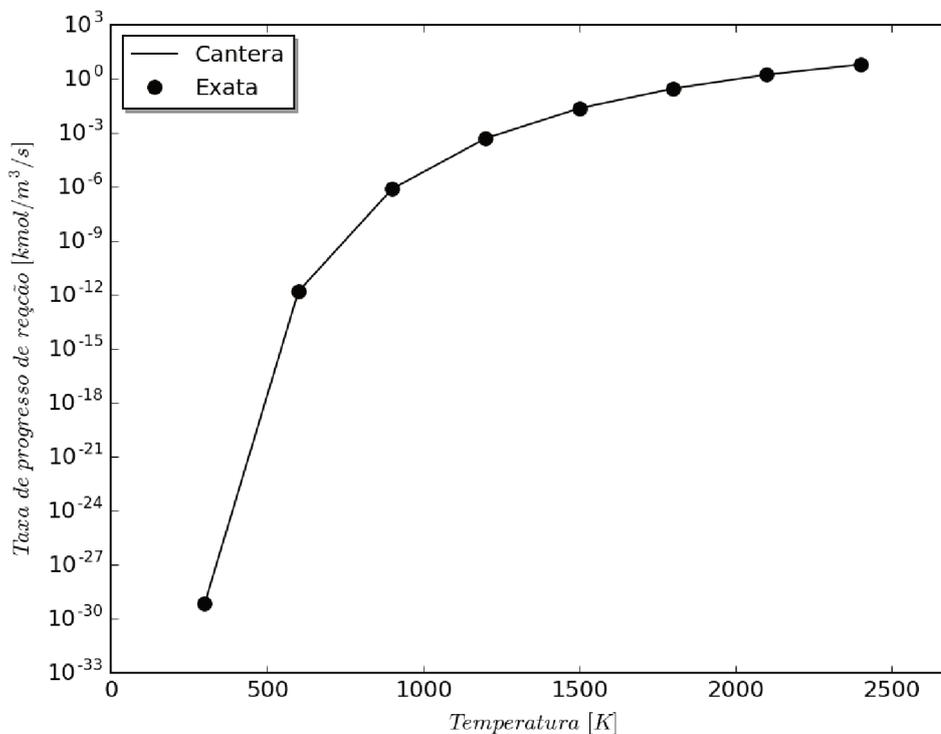


Figura 5.16 – Taxas de progresso de reação obtidas de forma analítica e com a biblioteca Cantera.

A análise de tais resultados permite concluir que a biblioteca Cantera é capaz de caracterizar a propriedade estudada de forma bem satisfatória, já que o desvio máximo obtido,

quando a mesma fora comparada com a solução analítica, foi de 0,4%. A seguir, tal comparação será realizada com base nas difusividades mássicas das espécies na mistura estudada. Para tal, parte-se da Eq. 3.24:

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} \frac{X_j}{D_{j,k}}},$$

a qual é função das frações molares e mássicas das espécies, além das difusividades binárias das mesmas. As frações molares, tal como fora realizado anteriormente, são determinadas pela Eq. 5.18. A conversão das mesmas em frações mássicas segue a Eq. 3.23 e, por fim, as difusividades binárias são dados tabelados. Desta forma, tem-se:

$$\begin{aligned} Y_{O_2} &= 0,22015, Y_{CH_4} = 0,055186, Y_{N_2} = 0,72467, \\ X_{O_2} &= 0,19011, X_{CH_4} = 0,095057, X_{N_2} = 0,71483, \\ D_{O_2,CH_4} &= D_{CH_4,O_2} = 5,703 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}, \\ D_{N_2,CH_4} &= D_{CH_4,N_2} = 5,629 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}, \\ D_{O_2,N_2} &= D_{N_2,O_2} = 5,1506 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}. \end{aligned} \quad (5.22)$$

De posse de tais dados pode-se, então, calcular as difusividades do metano, do oxigênio e do nitrogênio na mistura:

$$\begin{aligned} D_{CH_4} &= \frac{1 - Y_{CH_4}}{\frac{X_{O_2}}{D_{O_2,CH_4}} + \frac{X_{N_2}}{D_{N_2,CH_4}}} = \frac{1 - 0,055186}{\frac{0,19011}{5,703 \times 10^{-4}} + \frac{0,71483}{5,629 \times 10^{-4}}} \\ &= 5,89309 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}, \end{aligned} \quad (5.23)$$

$$\begin{aligned} D_{O_2} &= \frac{1 - Y_{O_2}}{\frac{X_{CH_4}}{D_{CH_4,O_2}} + \frac{X_{N_2}}{D_{N_2,O_2}}} = \frac{1 - 0,22015}{\frac{0,095057}{5,703 \times 10^{-4}} + \frac{0,71483}{5,1506 \times 10^{-4}}} \\ &= 5,01661 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}, \end{aligned} \quad (5.24)$$

$$\begin{aligned} D_{N_2} &= \frac{1 - Y_{N_2}}{\frac{X_{CH_4}}{D_{CH_4,N_2}} + \frac{X_{O_2}}{D_{O_2,N_2}}} = \frac{1 - 0,72467}{\frac{0,095057}{5,629 \times 10^{-4}} + \frac{0,19011}{5,1506 \times 10^{-4}}} \\ &= 5,11792 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Os resultados obtidos para esta propriedade, determinados de forma analítica e através do Cantera, são apresentados na Tab. 5.5.

A análise de tais resultados demonstra que a biblioteca Cantera também é capaz de caracterizar esta propriedade de forma bem satisfatória, já que o desvio máximo obtido desta vez, quando a mesma fora comparada com a solução analítica, foi de 0,0032654%. Desta forma, considerou-se viável a utilização desta biblioteca para a atualização destas e de outras propriedades relevantes aos estudos de escoamentos reativos.

Na seção seguinte, será estudada a influência do mecanismo de cinética química na obtenção de propriedades, partindo-se da hipótese do equilíbrio químico.

Tabela 5.5 – Difusividades das espécies na mistura, obtidas de forma analítica e com a biblioteca Cantera.

Espécie	Exata	Cantera	Desvio (%)
$CH_4$	$5,89309 \times 10^{-4}$	$5,8929 \times 10^{-4}$	0,0032654
$O_2$	$5,01661 \times 10^{-4}$	$5,0166 \times 10^{-4}$	0,0001457
$N_2$	$5,11792 \times 10^{-4}$	$5,1179 \times 10^{-4}$	0,0003335

### 5.4.2 Influência do mecanismo de cinética química

Os resultados apresentados a seguir representam um exemplo de equilíbrio químico. Para a caracterização de tal fenômeno, são utilizados dois mecanismos de cinética:

- Global, composto por 5 espécies e 1 reação global e irreversível, proposto por [WEST-BROOK e DRYER \(1981\)](#),
- Completo, composto por 53 espécies e 325 reações, proposto por [Smith et al. \(2016\)](#),

com os quais almeja-se determinar temperatura, pressão, massa específica, viscosidade e frações molares e mássicas no estado de equilíbrio.

A condição inicial deste problema se caracteriza por uma mistura estequiométrica de metano e ar (composto por oxigênio e nitrogênio), a uma temperatura  $T = 300K$ . Partindo-se da hipótese de equilíbrio químico, pôde-se obter os resultados apresentados a seguir.

Saída de dados 5.3 – Equilíbrio químico calculado com o auxílio da biblioteca Cantera, para uma chama estequiométrica e pré-misturada de metano e ar, descrita por 5 espécies e uma reação global e irreversível.

Mecanismo global		
Propriedades no estado inicial:		
#####		
Temperatura:	300,00	K
Pressao:	0,10132E+06	Pa
Massa especifica	1,1225	kg/m3
Viscosidade:	0,18026E-04	Pa-s
Fracoes molares (X) e massicas (Y) das especies:		
	X	Y
O2	0,19011	0,22015
CH4	0,09506	0,05519
N2	0,71483	0,72467
Propriedades no estado de equilibrio:		
#####		
Temperatura:	2326,9	K
Pressao:	0,10133E+06	Pa
Massa especifica	0,14472	kg/m3
Viscosidade:	0,73100E-04	Pa-s
Fracoes molares (X) e massicas (Y) das especies:		
	X	Y
H2O	0,19011	0,12394

CO2	0,09506	0,15139
N2	0,71483	0,72467

Os dados de entrada para a obtenção de tais resultados foram, simplesmente, as frações molares (ou mássicas), temperatura e pressão da mistura alimentada. Uma análise sucinta dos referidos resultados sugere a elevação da temperatura da mistura de  $300K$  para  $2326,9K$ , bem como a geração de produtos devido ao consumo de reagentes. Tais mudanças, acarretaram em uma adequação das propriedades desta mistura, como pode-se observar nos valores de massa específica e viscosidade atualizados:

- $\rho_0 = 1,1225, \text{ kg/m}^3, \rho = 0,14472 \text{ kg/m}^3,$
- $\mu_0 = 1,803 \times 10^{-5} \text{ kg/m/s}, \mu = 7,310 \times 10^{-5} \text{ kg/m/s}.$

O resultado a seguir denota a mesma situação anterior, salvo do mecanismo utilizado. Enquanto na primeira situação utilizou-se 5 espécies químicas e uma reação global e irreversível, na seguinte fez-se uso do mecanismo GRI-MECH, proposto por [Smith et al. \(2016\)](#), composto por 53 espécies e 325 reações químicas.

Saída de dados 5.4 – Equilíbrio químico calculado com o auxílio da biblioteca Cantera, para uma chama estequiométrica e pré-misturada de metano e ar, descrita por 53 espécies e 325 reações químicas.

```
Mecanismo completo

Propriedades no estado inicial:
#####
Temperatura:      300,00      K
Pressao:          0,10132E+06 Pa
Massa especifica  1,1225      kg/m3
Viscosidade:     0,18025E-04 Pa-s

Fracoes molares (X) e massicas (Y) das especies:
-----
           X      Y
O2        0,19011 0,22015
CH4       0,09506 0,05519
N2        0,71483 0,72467

Propriedades no estado de equilibrio:
#####
Temperatura:      2225,5      K
Pressao:          0,10133E+06 Pa
Massa especifica  0,15019      kg/m3
Viscosidade:     0,70979E-04 Pa-s

Fracoes molares (X) e massicas (Y) das especies:
-----
           X      Y
H2        0,00360 0,00026
H         0,00039 0,00001
O         0,00022 0,00013
O2        0,00462 0,00539
OH        0,00288 0,00178
H2O       0,18347 0,12050
CO        0,00899 0,00918
```

CO2	0,08536	0,13697
NO	0,00189	0,00207
N2	0,70858	0,72370

A utilização de um mecanismo de reações químicas mais detalhado acarretou em uma menor elevação da temperatura, quando comparado com o caso anterior (de 300K para 2225,5K), além de um maior quantidade de espécies químicas produzidas. Por esse motivo observou-se, também, uma diferença nos valores de massa específica e viscosidade atualizados:

- $\rho_0 = 1,1225, \text{ kg/m}^3, \rho = 0,15019 \text{ kg/m}^3,$
- $\mu_0 = 1,803 \times 10^{-5} \text{ kg/m/s}, \mu = 7,098 \times 10^{-5} \text{ kg/m/s}.$

Uma comparação entre as propriedades obtidas nas duas simulações propostas é apresentada na Tab. 5.6.

Tabela 5.6 – Propriedades obtidas com mecanismos globais e completos para a queima do metano.

Propriedade	Global	Completo	Desvio (%)
Temperatura (K)	2326,9	2225,5	4,56
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	0,14472	0,15019	3,64
$\mu$ (kg/m/s)	$7,310 \times 10^{-5}$	$7,098 \times 10^{-5}$	2,99
$X_{CO_2}$	0,09506	0,08536	11,36
$X_{H_2O}$	0,19011	0,18347	3,62
$X_{N_2}$	0,71483	0,70858	0,88

A análise da referida tabela permite concluir que a utilização de mecanismos simplificados acarreta na superestimação da temperatura de equilíbrio, a qual apresentou um desvio de 4,56% quando comparada com o valor obtido a partir do mecanismo completo. Como consequência, obteve-se superestimações das frações molares de produtos e da viscosidade dinâmica e subestimação da massa específica.

A comparação apresentada anteriormente foi realizada somente para razão de equivalência unitária,  $\phi = 1$ , representando uma mistura estequiométrica de combustível e ar. Esta variável representa um parâmetro importante para a combustão:  $\phi > 1$  representando excesso de combustível (mistura rica), ao passo  $\phi < 1$  denota excesso de ar (mistura pobre). Tal parâmetro é definido da seguinte maneira:

$$\phi = \left( \frac{Y_F}{Y_O} \right) \times \left( \frac{\nu'_O W_O}{\nu'_F W_F} \right), \quad (5.26)$$

no qual  $Y_O, Y_F, \nu'_O, \nu'_F, W_O$  e  $W_F$  representam, respectivamente, as frações mássicas, coeficientes estequiométricos de reagentes e massas molares de oxigênio e combustível. Neste âmbito, foram realizadas simulações com as mesmas condições apresentadas anteriormente, mas com razões de equivalência distintas. Na Tab. 5.7, os resultados obtidos com os dois mecanismos supracitados são apresentados.

Tais resultados são apresentados na Fig. 5.17, a qual apresenta os valores obtidos de temperatura, massa específica e viscosidade dinâmica com a utilização dos mecanismos cinéticos global e completo.

Tabela 5.7 – Propriedades obtidas com os mecanismos global e completo para a queima do metano, em razões de equivalência distintas.

$\phi$	Mecanismo global			Mecanismo completo		
	T (K)	$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]	$\mu$ [kg/m/s]	T (K)	$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]	$\mu$ [kg/m/s]
0,5	1482,25	0,2319	5,4537E-05	1480,18	0,2323	5,4490E-05
0,6	1670,73	0,2049	5,8929E-05	1665,95	0,2055	5,8826E-05
0,7	1848,37	0,1844	6,2914E-05	1838,62	0,1854	6,2714E-05
0,8	2016,33	0,1684	6,6564E-05	1996,89	0,1699	6,6173E-05
0,9	2175,57	0,1554	6,9929E-05	2134,24	0,1580	6,9100E-05
1,0	2326,92	0,1447	7,3051E-05	2225,52	0,1502	7,0979E-05
1,1	2291,09	0,1464	7,2090E-05	2210,38	0,1487	7,0545E-05
1,2	2256,83	0,1480	7,1166E-05	2136,52	0,1506	6,8837E-05
1,3	2224,04	0,1496	7,0276E-05	2057,30	0,1532	6,6994E-05
1,4	2192,61	0,1512	6,9419E-05	1979,78	0,1560	6,5169E-05
1,5	2162,46	0,1528	6,8592E-05	1904,79	0,1590	6,3384E-05

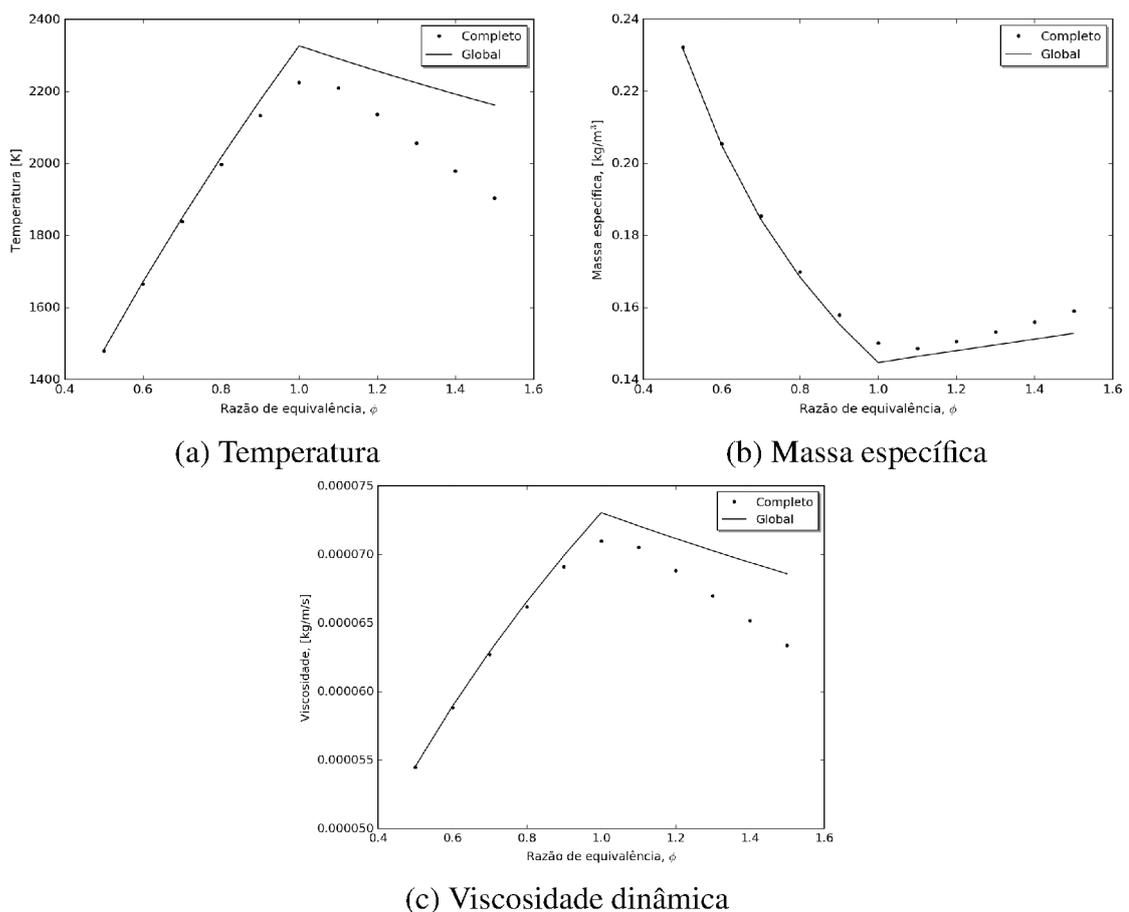


Figura 5.17 – Influência do mecanismo cinético na determinação de propriedades razões de equivalência.

A análise da referida figura sugere não haver diferenças significativas na utilização dos dois mecanismos até a razão de equivalência unitária. Entretanto, quando analisa-se a situação em que há excesso de combustível,  $\phi > 1$ , tal afirmação não é válida.

Na seção seguinte, será realizada uma discussão acerca de uma estratégia para a redução do tempo computacional requerido para a montagem da *string* de frações mássicas, com a qual a biblioteca Cantera atualizará as propriedades do escoamento estudado.

## 5.5 Otimização da atualização de propriedades

Na seção 4.6 foi apresentado o algoritmo de geração da *string* de frações mássicas. Tal algoritmo é realizado em cada volume finito discretizado, já que cada um desses é considerado como sendo um reator.

Entretanto, há regiões do domínio nas quais não há uma variação significativa nos módulos das frações mássicas como, por exemplo, posições distantes da frente de chama. Nestas situações, portanto, não há a necessidade de atualização de propriedades podendo, assim, manter as últimas propriedades disponíveis. Tal constatação fora, então, implementada na ferramenta de trabalho e um exemplo do ganho obtido com a mesma é apresentado na Fig. 5.18.

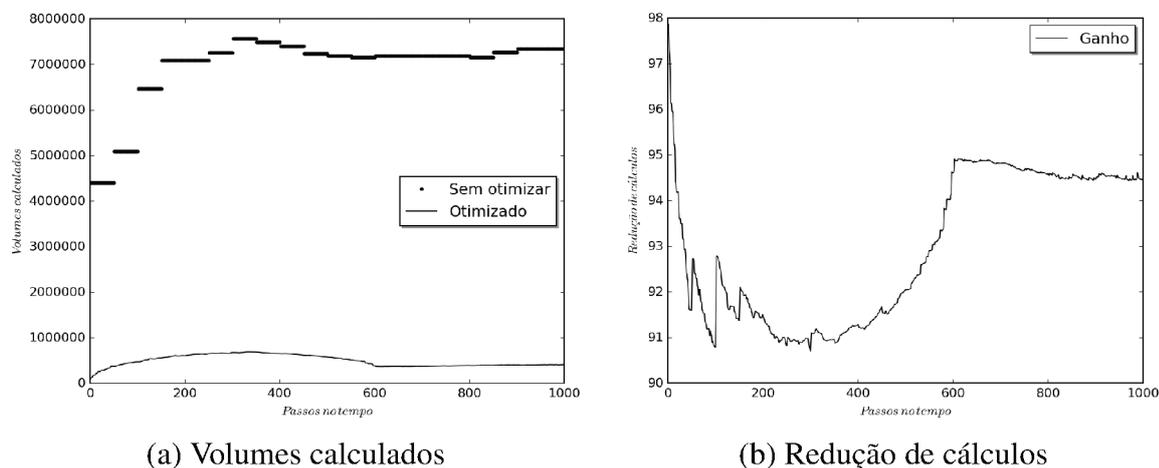


Figura 5.18 – Otimização da atualização de propriedades.

A referida figura apresenta dois resultados significativos: a quantidade de volumes nos quais as propriedades devem ser calculadas com e sem a estratégia proposta e a redução percentual de cálculos obtida com a utilização de tal metodologia. A análise destes resultados permite perceber uma quantidade variável de cálculos ao longo do tempo, situação que é explicada com a utilização do refinamento adaptativo de malha. Observa-se um pico de 8000000 de volumes a serem atualizados ao passo que, com a utilização da estratégia proposta, são necessários pouco menos de 1000000 de volumes. Em termos de redução de cálculos, obteve-se valores entre 90 e 98%.

Para exemplificar tal economia em um estudo de casos, foram realizadas duas simulações numéricas, as quais tinham o intuito de descrever um segundo de um processo de mistura pura entre metano e ar, com e sem a metodologia de otimização proposta. Para a experimentação de tais situações, foram utilizados 32 processos, com a aplicação de refinamento de malha adaptativo. Ao final dos cálculos, os tempos totais de simulação, bem como os tempo requeridos pela biblioteca de atualização de propriedades nas duas situações foi analisada.

Para a situação em que a metodologia não foi utilizada, foram necessárias 838 horas para a conclusão da tarefa, as quais equivalem a 35 dias de simulação, sendo que a biblioteca de atualização de propriedades requeria 8,2 segundos por passo de tempo. Por outro lado, a utilização da otimização proposta acarretou na redução do tempo de simulação para 196 horas,

as quais equivalem a 8 dias. Tal metodologia também foi responsável pela diminuição do tempo de atualização de propriedades para 0,18 segundos comprovando, assim, a eficácia da otimização proposta.

Na seção seguinte, a influência da utilização de uma formulação baseada nas difusividades das espécies na mistura será avaliada através de comparações entre resultados oriundos da mesma e de uma modelagem derivada da hipótese de número de Lewis unitário.

## 5.6 Influência da modelagem da difusividade mássica

A influência do uso de difusividades das espécies na mistura e da hipótese de Le unitário é avaliada a partir do estudo da difusão de um disco de hidrogênio em um domínio repleto de oxigênio. As Figs. 5.19 e 5.20 apresentam tais propriedades em tempos distintos, calculadas de acordo com as duas metodologias citadas.

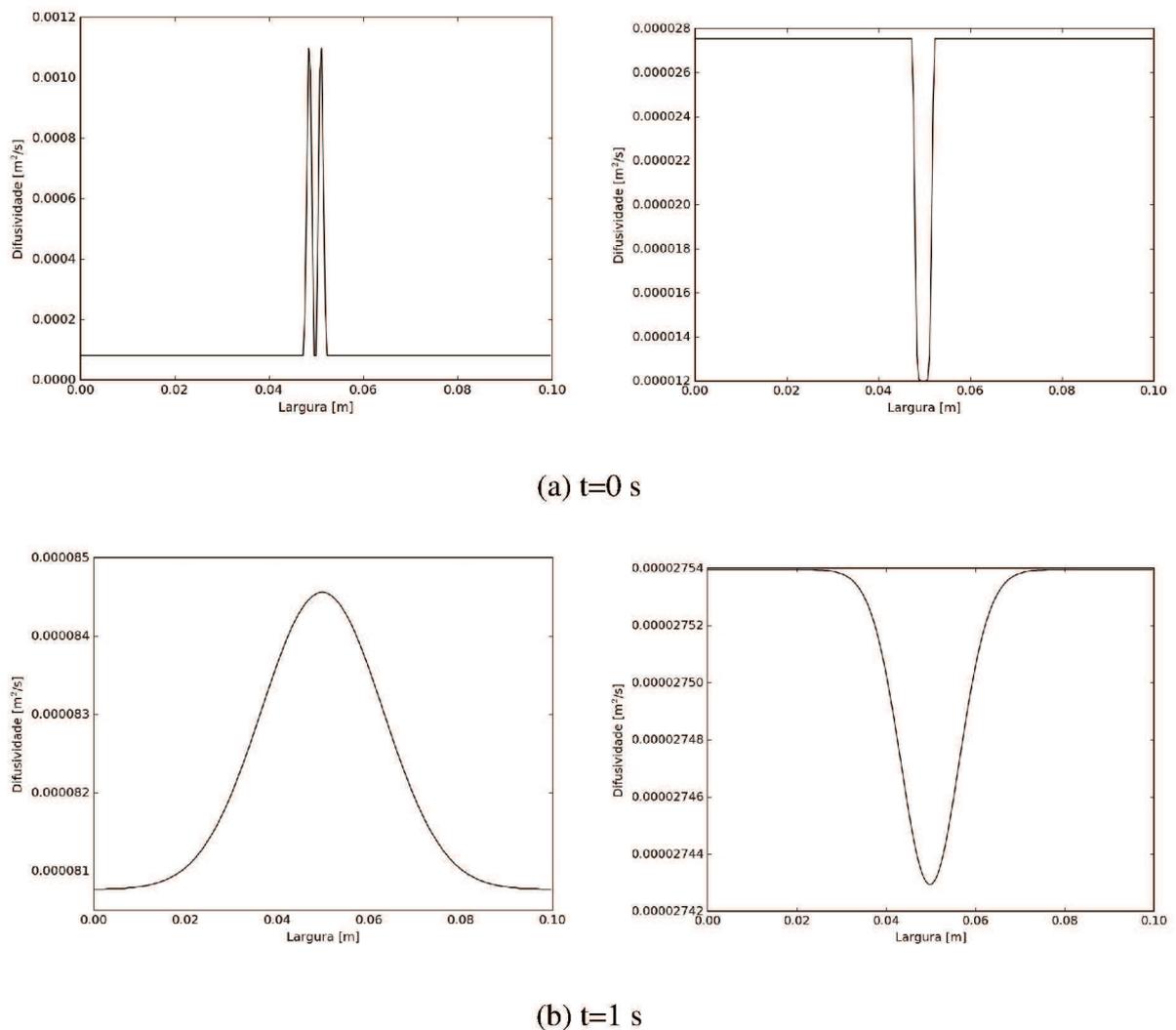
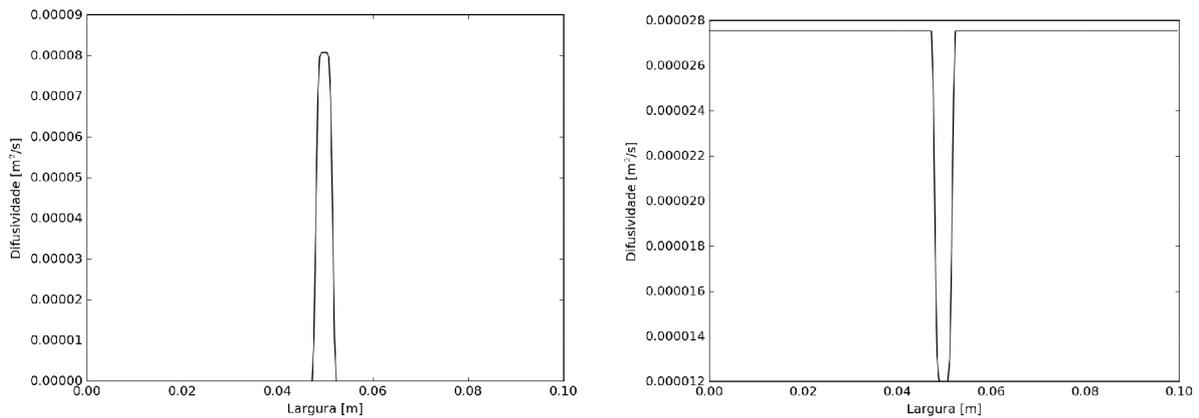
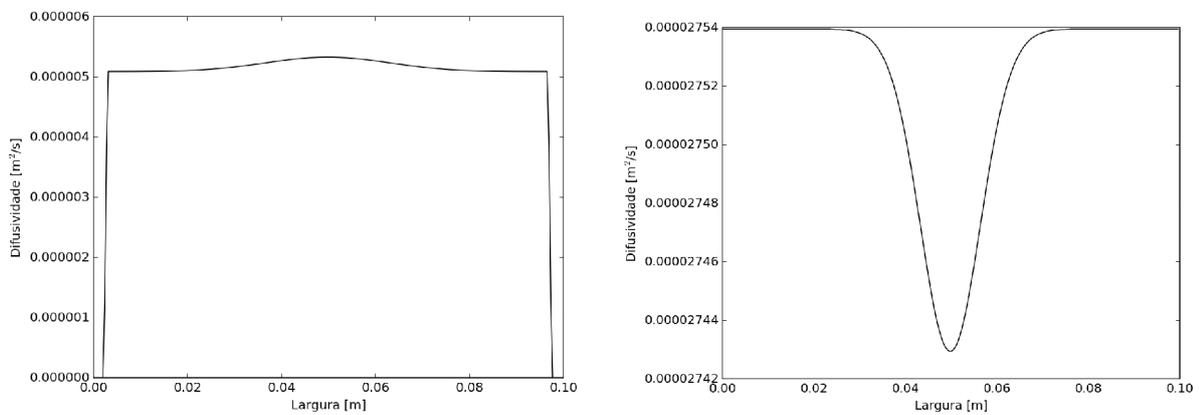


Figura 5.19 – Difusividades do  $H_2$ : Variável (esquerda) e Lewis unitário (direita).

(a)  $t=0$  s(b)  $t=1$  sFigura 5.20 – Difusividades do  $O_2$ : Variável (esquerda) e Lewis unitário (direita).

A análise das referidas figuras permite observar uma sensível diferença entre as difusividades das espécies químicas calculadas pelas duas metodologias. Como esperado, a formulação baseada na igualdade dos coeficiente de difusão ( $Le=1$ ) resulta em valores idênticos desta propriedade para os dois gases estudados, situação diferente ao observado com a utilização das difusividade das espécies na mistura.

As Figs. 5.21 e 5.22, por sua vez, representam as frações mássicas dos dois gases estudados. É de se esperar que tais variáveis sejam influenciadas pela diferença entre as difusividades, já que a equação de transporte das espécies químicas é calculada em função das mesmas. Tal estimativa é comprovada com a análise das referidas figuras, as quais apresentam desvios significativos entre as frações mássicas calculadas pelas duas modelagens. Para o hidrogênio, por exemplo, são obtidas frações  $Y_{H_2} = 0,003160$ , quando calcula-se as difusividades das espécies na mistura e  $Y_{H_2} = 0,007036$ , com a hipótese de  $Le$  unitário, resultando em um desvio de 122%.

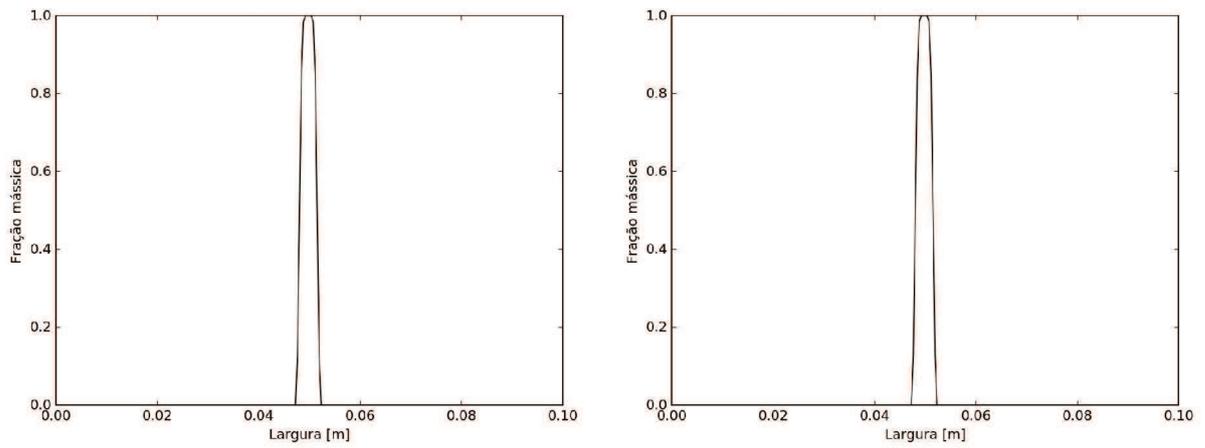
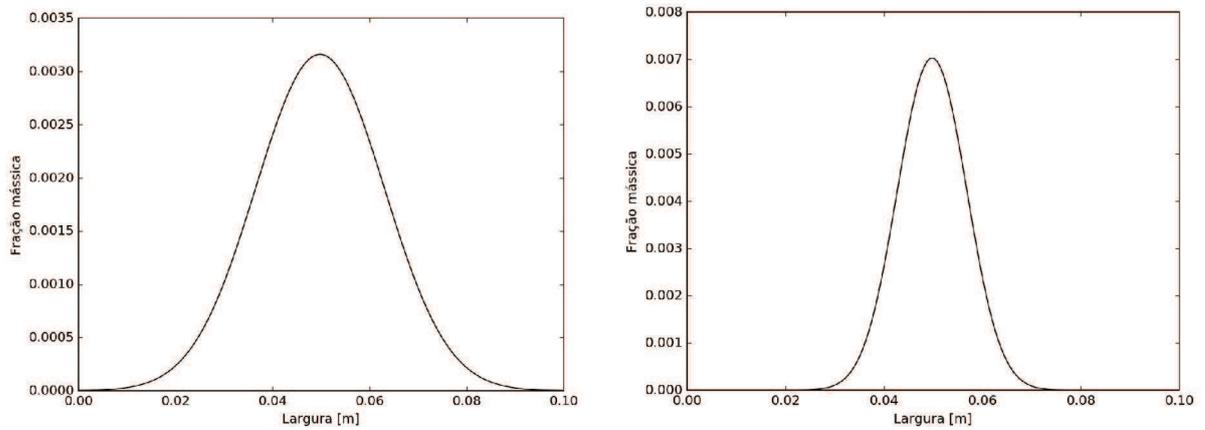
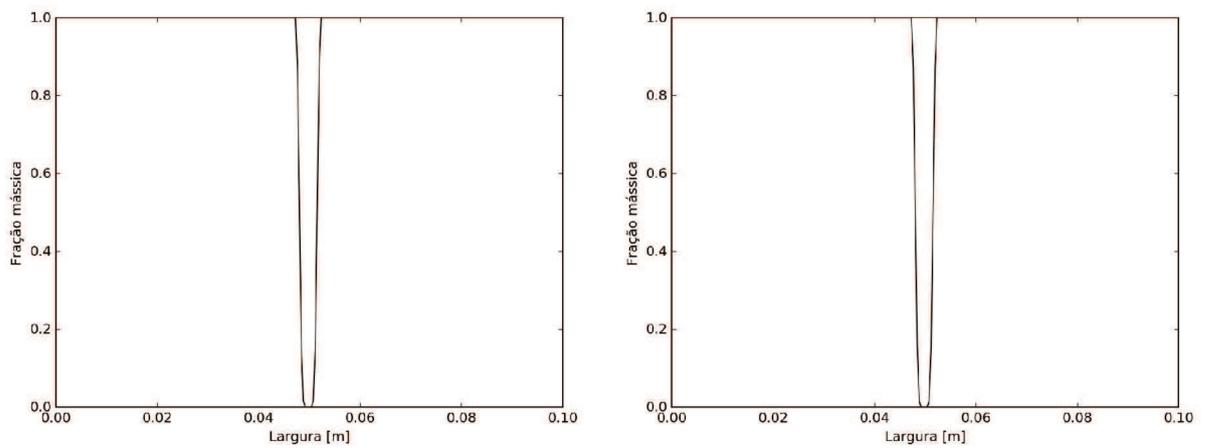
(a)  $t=0$  s(b)  $t=1$  s

Figura 5.21 – Frações mássicas de  $H_2$  calculadas com uma formulação baseada em difusividades variáveis (esquerda) e em Lewis unitário (direita).

(a)  $t=0$  s

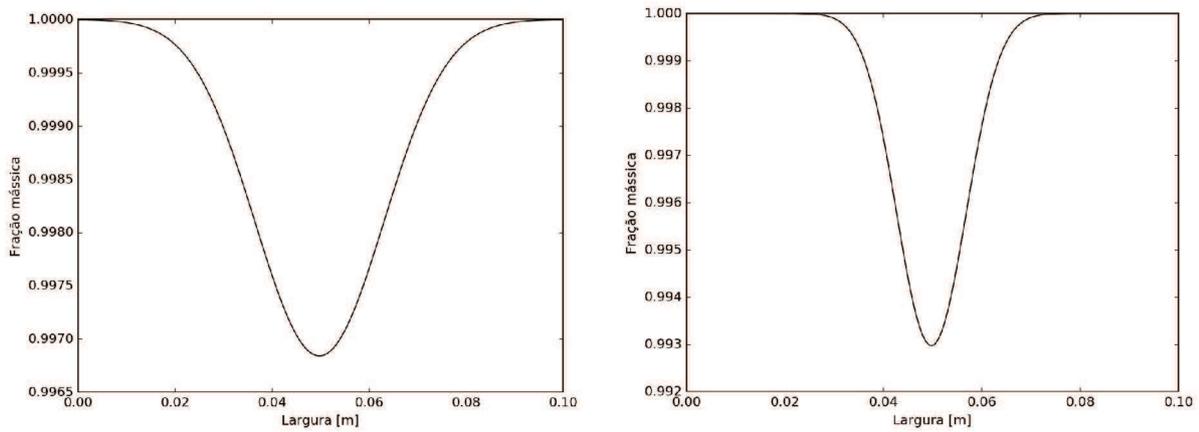
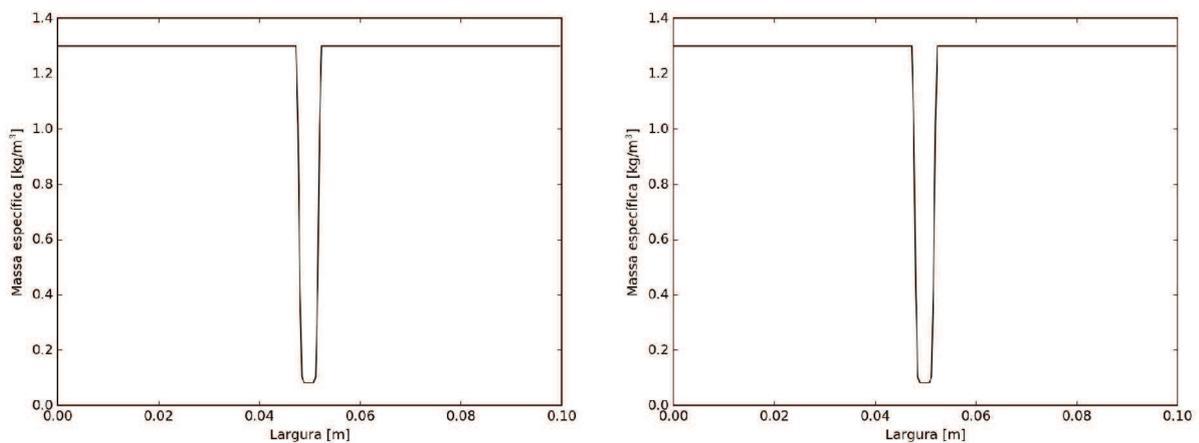
(b)  $t=1$  s

Figura 5.22 – Frações mássicas de  $O_2$  calculadas com uma formulação baseada em difusividades variáveis (esquerda) e em Lewis unitário (direita).

Por fim, A Fig. 5.23 apresenta a massa específica resultante da aplicação das duas modelagens. Tal propriedade, tal como fora comentado anteriormente, é atualizada pela biblioteca Cantera, a qual necessita de dados, tais como pressão termodinâmica, temperatura e frações mássicas das espécies presentes na mistura, para a atualização da massa específica e da viscosidade dinâmica, por exemplo. Portanto, pelo fato das frações mássicas serem afetadas pela aproximação da difusividade utilizada, tal como fora comentado anteriormente, espera-se que tais modelagens também tenham efeito na determinação da massa específica. Tal afirmação é comprovada com a análise da referida figura, a qual apresenta valores mínimos diferentes para a propriedade analisada,  $\rho = 1,242 \text{ kg/m}^3$  com o uso das difusividades das espécies na mistura e  $\rho = 1,177 \text{ kg/m}^3$  com a utilização da hipótese de Lewis unitário.

(a)  $t=0$  s

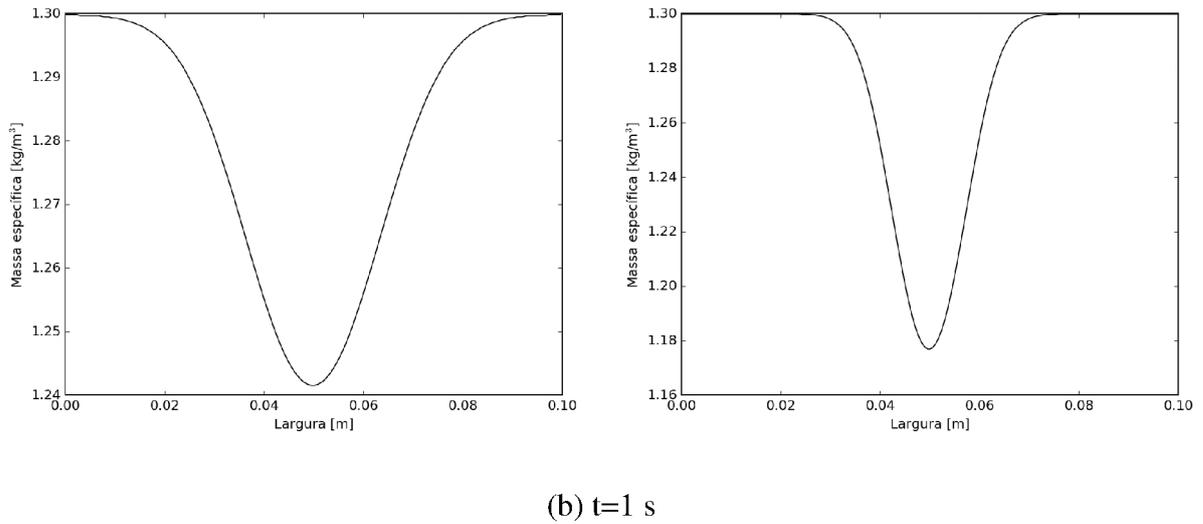


Figura 5.23 – Massa específica calculada com uma formulação baseada em difusividades variáveis (esquerda) e em Lewis unitário (direita).

Portanto, deve-se ter cautela com as hipóteses simplificadoras utilizadas já que, na situação estudada, obteve-se desvios de até 120% na determinação de variáveis relevantes para a caracterização do problema.

Com o intuito de demonstrar a aplicabilidade da ferramenta implementada no presente trabalho, na seção seguinte serão apresentados resultados relacionados com um escoamento de jatos opostos, os quais são compostos por uma pré-mistura estequiométrica de metano e ar.

## 5.7 Jatos opostos

Neste experimento, os jatos opostos de pré-mistura criam um plano de estagnação, cuja localização depende das magnitudes relativas dos fluxos de quantidade de movimento. Para fluxos de quantidade de movimento linear iguais, tal como acontece no presente trabalho, o plano de estagnação se estabelece na metade da distância entre as saídas dos dois bocais.

Os resultados obtidos da simulação de jatos opostos, escoando a uma velocidade  $v=0,7$  m/s, são apresentados nas Figs. 5.24, 5.25 e 5.26 as quais representam, respectivamente, a magnitude da vorticidade, fração mássica de metano e massa específica da mistura em diferentes tempos de simulação.

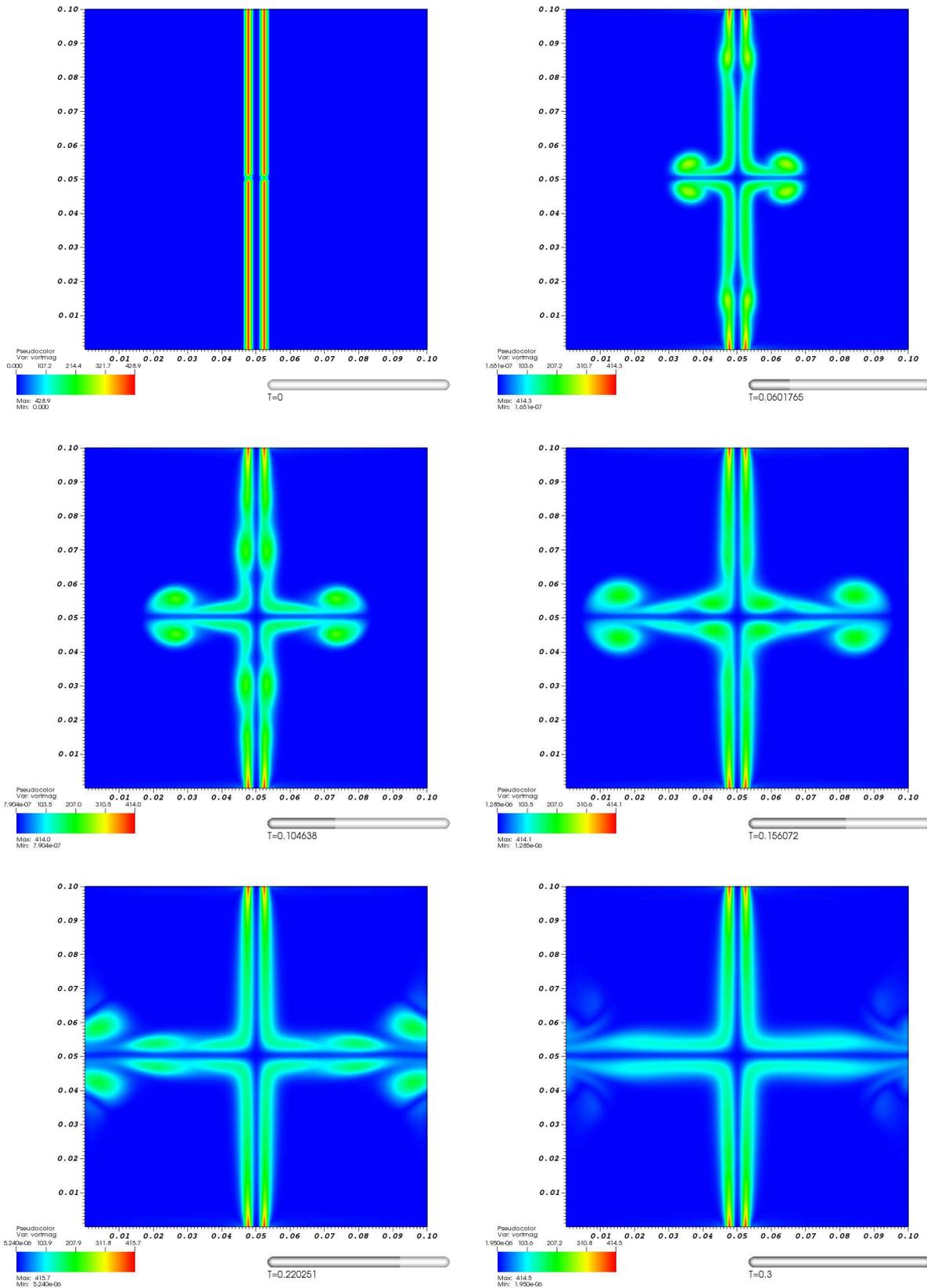


Figura 5.24 – Magnitude da vorticidade.

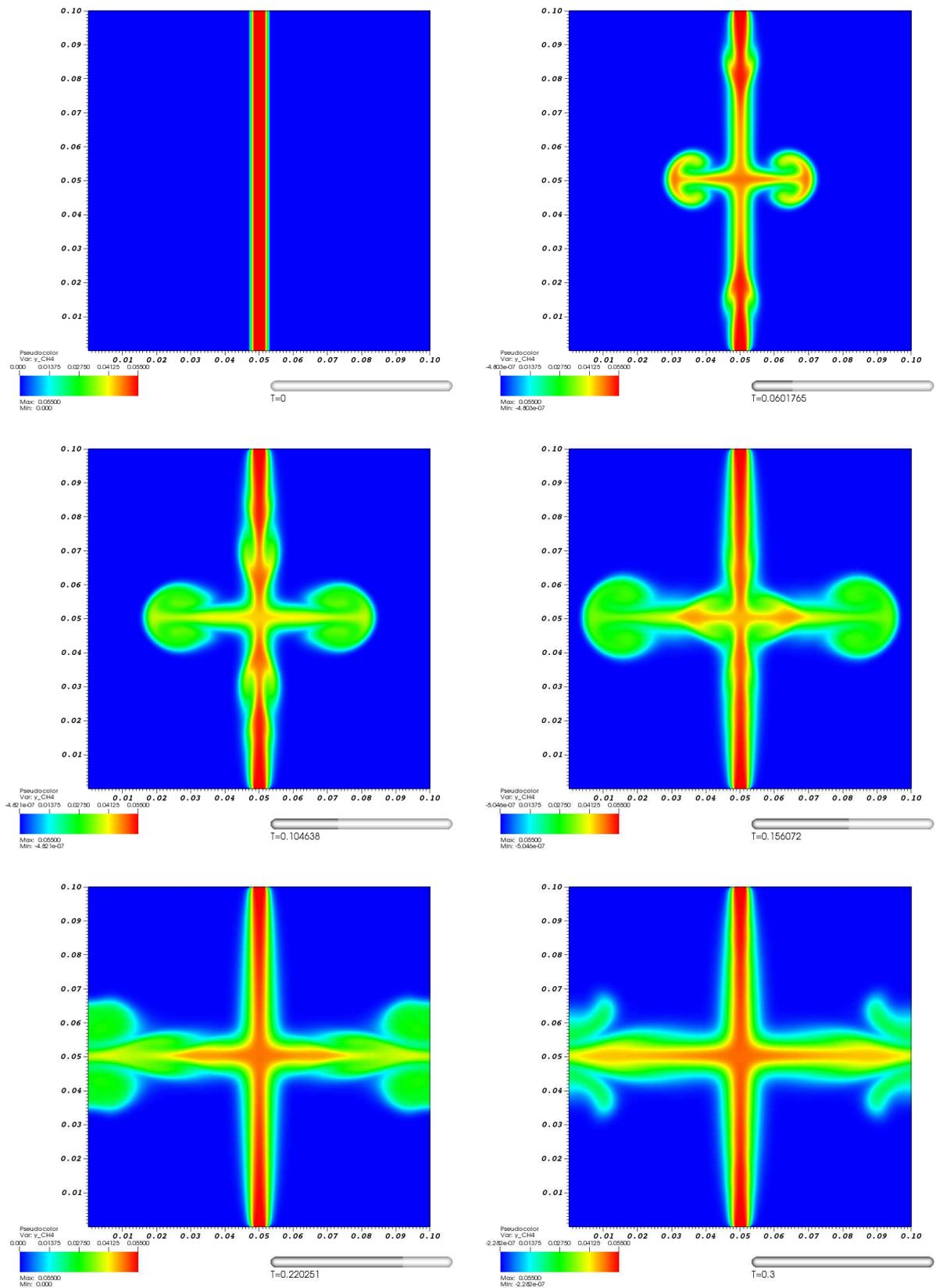


Figura 5.25 – Fração mássica de metano.

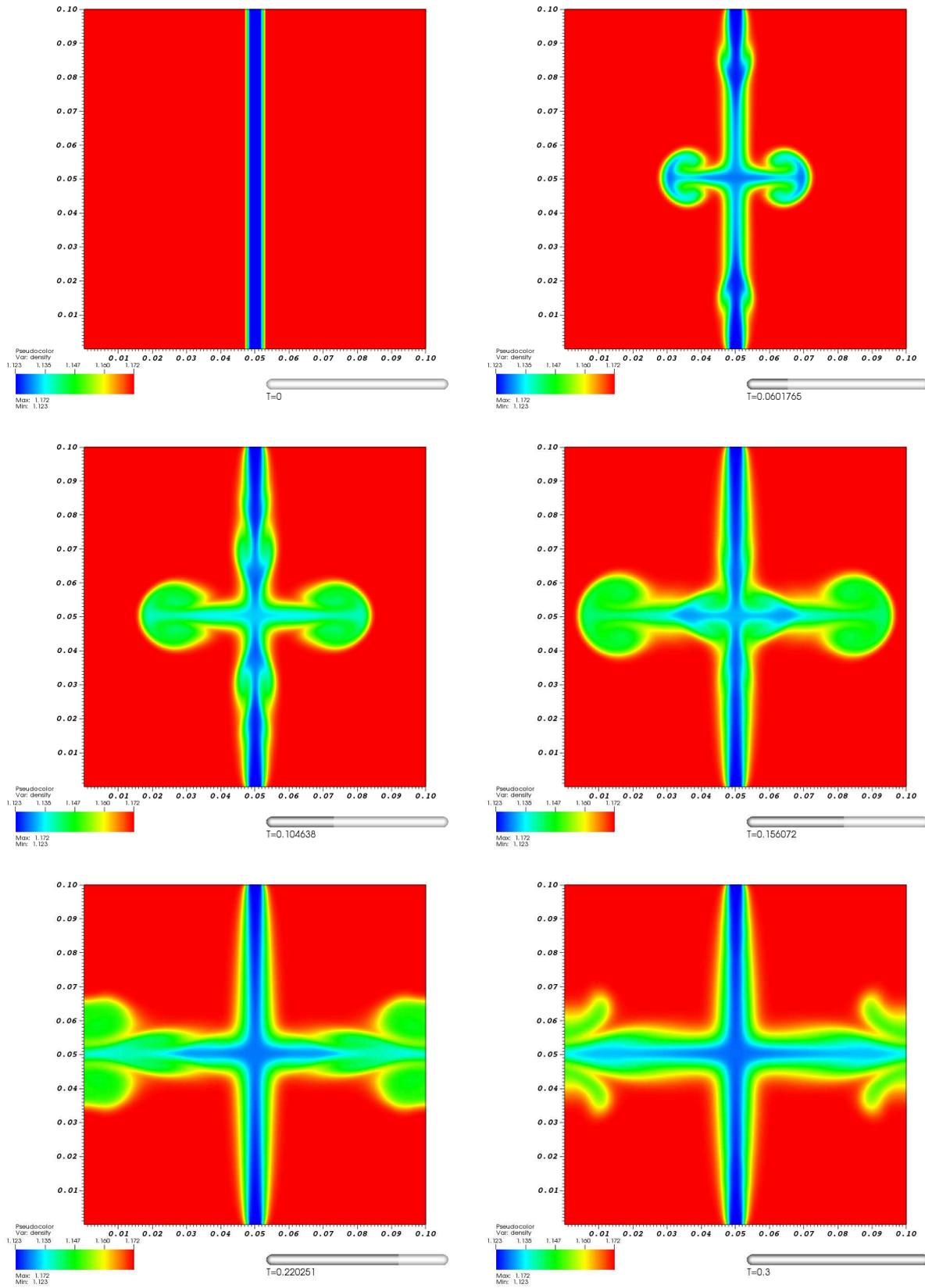


Figura 5.26 – Massa específica da mistura.

A análise das referidas figuras permite observar o aparecimento da região de estagnação mencionada anteriormente. Por representar um problema com fluxos de quantidade de movimento linear iguais, este plano fora gerado, como esperado, na metade da distância entre as saídas dos dois bocais.

A mistura, em si, foi bem representada pelo código computacional de trabalho, podendo ser avaliada na Fig. 5.25, através da diluição do gás metano com posterior redução de sua fração mássica, bem como na Fig. 5.26, na qual a massa específica atinge valores intermediários aos iniciais do problema em questão.

Por fim, no capítulo seguinte serão apresentadas as conclusões e perspectivas relacionadas com o presente trabalho.



# Capítulo 6

## Conclusões e perspectivas

Para a definição do esquema advectivo mais adequado a ser utilizado em escoamentos reativos, uma série de simulações foi realizada em casos canônicos e em escoamentos complexos. Foram analisados vários esquemas bem difundidos pela literatura, tais como *upwind*, diferenças centradas, QUICK, WACEB, MINMOD, SMART, ADBQUICKEST, CLAM, WENO e CUBISTA. A análise dos referidos resultados permitiu concluir que, dentre as alternativas apresentadas, o esquema CUBISTA se mostrou a melhor opção para a simulação dos casos estudados. Na simulação do escoamento ocorrendo em um degrau descendente, por exemplo, tal esquema resultou em um desvio de 0,33%, quando comparado com o experimento material realizado por [Moreau et al. \(1996\)](#). Na ótica de escoamentos reativos, tal esquema não apresentou dispersão nem difusão numérica significativa impossibilitando, assim, o aparecimento de resultados não físicos (massa específica negativa, frações mássicas maiores do que a unidade, etc).

A utilização da metodologia de escrita binária gerou resultados expressivos na gravação de arquivos de saída. Tal proposta foi responsável por uma queda de 99% no tempo de escrita de dados para pós-processamento, além de uma redução de 75% no tamanho dos arquivos gerados. Em outras palavras, o tempo de gravação, bem como o tamanho dos arquivos gerados com a utilização da escrita binária, foram significativamente menores, viabilizando a utilização da metodologia proposta.

Quanto ao estudo do jato turbulento, pôde-se concluir que a utilização da metodologia RFG, para a geração de condições de entrada turbulentas, acarretou em uma melhoria considerável na caracterização do problema estudado, já que foram obtidos resultados bem próximos aos dados experimentais apresentados por [Hussein, Capp e George \(1994\)](#). A adaptatividade de malhas também desempenhou um papel considerável neste experimento, concentrando esforços computacionais apenas nas regiões de interesse.

A escolha de uma biblioteca para a atualização de propriedades termodinâmicas, cinéticas e de transporte se deu através de uma breve comparação entre duas ferramentas bem difundidas pela literatura: Chemkin ([KEE; RUPLEY; MILLER, 1989](#)) e Cantera ([GOODWIN; MOFFAT; SPETH, 2016](#)). Tal avaliação foi realizada tendo como base o equilíbrio químico de uma mistura estequiométrica de metano e ar, com a utilização do mecanismo GRI-Mech ([SMITH et al., 2016](#)). Como resultado, optou-se pela utilização da biblioteca Cantera, pois a mesma retornou resultados idênticos aos obtidos com a ferramenta Chemkin, gastando um terço do tempo de simulação.

Validações da referida biblioteca foram realizadas, em um primeiro momento, a partir de comparações entre taxas de progresso de reação obtidas com a utilização da referida biblioteca e calculadas de forma analítica. Tais comparações permitiram concluir que esta biblioteca foi capaz de caracterizar a propriedade estudada de forma bem satisfatória, já que o desvio máximo obtido, quando a mesma fora comparada com a solução analítica, foi de 0,4%. Em seguida, tal

validação foi realizada com base nas difusividades mássicas das espécies na mistura estudada, através da qual foi obtido um desvio máximo de 0,0032654%. Desta forma, considerou-se viável a utilização desta biblioteca para a atualização destas e de outras propriedades relevantes aos estudos de escoamentos reativos. Como consequência, esta ferramenta fora acoplada ao código MFSim e, juntamente com as modificações relacionadas com a saída de dados, permitiu a utilização de quaisquer mecanismos cinéticos no formato cti, os quais são facilmente encontrados na literatura, para a experimentação numérica de escoamentos reativos.

A influência do mecanismo de cinética química na obtenção de propriedades também fora estudada. Para tal análise, partiu-se da hipótese do equilíbrio químico, da utilização de uma mistura estequiométrica de metano e ar e de dois mecanismos de cinética: um composto por 5 espécies e 1 reação global e irreversível (WESTBROOK; DRYER, 1981) e outro caracterizado por 53 espécies e 325 reações (SMITH et al., 2016). Este estudo permitiu concluir que a utilização de mecanismos simplificados acarretou na superestimação da temperatura de equilíbrio e, por consequência, em superestimações das frações molares de produtos e da viscosidade dinâmica, além da subestimação da massa específica. O referido estudo também fora realizado com razões de equivalência distintas. Tais avaliações permitiram concluir que não há diferenças significativas na utilização dos dois mecanismos até a razão de equivalência unitária. Entretanto, quando há excesso de combustível, não é recomendável a utilização de mecanismos globais.

A estratégia proposta para a otimização do uso da biblioteca Cantera se mostrou bastante interessante, resultando em uma redução de cálculos variando entre 90 e 98%. Em termos práticos, tal proposta foi capaz de reduzir o tempo necessário para a conclusão de simulações semelhantes de 35 para 8 dias. Tal resultado se relacionou com a diminuição da atuação da referida biblioteca devido a otimização proposta. Desta forma o tempo gasto pela atualização de propriedades passou de 8,2 para 0,18 segundos por passo de tempo comprovando, assim, a eficácia da otimização proposta.

A influência da utilização de uma formulação baseada nas difusividades das espécies na mistura, em detrimento da aplicação de uma modelagem derivada da hipótese de número de Lewis unitário, foi avaliada através do estudo da difusão de um disco de hidrogênio em um domínio repleto de oxigênio. Como esperado, a formulação baseada na igualdade dos coeficiente de difusão ( $Le=1$ ) resultou em valores idênticos para as difusividades dos dois gases estudados, situação diferente ao observado com a utilização das difusividade das espécies na mistura. Tal discrepância foi responsável por diferenças nos cálculos de massa específica e das frações mássicas das espécies estudadas, chegando a desvios de até 122%. Desta forma, conclui-se que tal hipótese simplificadora deve ser utilizada com cautela.

Por fim, foi realizada a experimentação numérica de um escoamento de jatos opostos, os quais eram compostos por uma pré-mistura estequiométrica de metano e ar. Neste experimento, é esperado que os jatos opostos de pré-mistura criem um plano de estagnação, cuja localização depende das magnitudes relativas dos fluxos de quantidade de movimento linear. Ao final da simulação proposta, pôde-se observar o aparecimento da região de estagnação mencionada anteriormente, a qual localizou-se na metade da distância entre as saídas dos dois bocais, já que os fluxos de quantidade de movimento linear dos dois jatos eram iguais. A mistura, em si, foi bem representada pelo código computacional de trabalho, podendo ser avaliada através da diluição do gás metano com posterior redução de sua fração mássica, bem como no aparecimento de valores intermediários de massa específica ao final da simulação. Portanto, a ferramenta desenvolvida mostrou-se capaz de caracterizar o escoamento estudado.

Como perspectivas, sugere-se a exploração da metodologia de transporte de múltiplos escalares desenvolvida no presente trabalho. Esta permite, por exemplo, o estudo da corrosão, fenômeno muito comum em indústrias de óleo e gás. Neste âmbito, indica-se a utilização da

referida metodologia em aplicações industriais, tais como fornos e caldeiras, o que leva ao estudo de casos com combustíveis heterogêneos, contemplando, por exemplo, fenômenos de atomização e mudança de fase. Entretanto, de acordo com comparações apresentadas no presente trabalho, a correta caracterização de escoamentos reativos não deve ser realizada com a utilização de mecanismos globais de reação mas, ao mesmo tempo, a utilização de mecanismos cinéticos completos em simulações práticas de engenharia é inviável. Desta forma, o desenvolvimento de algoritmos de redução de cinética química em tempo de execução aparece como uma interessante contribuição para o estudo de escoamentos reativos. Por fim, a implementação de uma modelagem para a radiação também é indicada para uma melhor caracterização da combustão, principalmente com relação à fuligem.



## Referências

AIDER, J.; DANET, A. Large-eddy simulation study of upstream boundary conditions influence upon a backward-facing step flow. *Comptes Rendus Mecanique*, v. 334, p. 447–453, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.crme.2006.05.004>>. Citado na página 7.

ALVES, M. A.; OLIVEIRA, P. J.; PINHO, F. T. A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 41, p. 47–75, jan. 2003. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/flid.428>>. Citado nas páginas x, 11, 49, 50 e 68.

ASCHER, U. M.; RUUTH, S. J.; WETTON, B. T. R. Implicit-explicit methods for time-dependent partial differential equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v. 32, n. 3, p. 797–823, 1995. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1137/0732037>>. Citado na página 52.

BALOW, R.; FRANK, J. *Piloted ch4/air flames c, d, e and f*. Livermore, Estados Unidos, 2007. Citado na página 73.

BARBI, F. *Experimentação numérica de bolhas em ascensão*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, 2016. Citado na página 16.

BELL, J. Amr for low mach number reacting flow. In: PLEWA, T.; LINDE, T.; WEIRS, V. G. (Ed.). *Adaptive Mesh Refinement - Theory and Applications*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2005. p. 203–221. ISBN 978-3-540-27039-3. Disponível em: <[https://doi.org/10.1007/3-540-27039-6\\_14](https://doi.org/10.1007/3-540-27039-6_14)>. Citado na página 16.

BELL, J. et al. Three-dimensional adaptive mesh refinement for hyperbolic conservation laws. *SIAM J. Sci. Comput.*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, v. 15, n. 1, p. 127–138, jan. 1994. ISSN 1064-8275. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1137/0915008>>. Citado na página 16.

BELL, J. B.; COLELLA, P.; GLAZ, H. M. A second-order projection method for the incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, v. 85, n. 2, p. 257 – 283, 1989. ISSN 0021-9991. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0021-9991\(89\)90151-4](https://doi.org/10.1016/0021-9991(89)90151-4)>. Citado na página 16.

BERGER, M.; COLELLA, P. Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, v. 82, n. 1, p. 64 – 84, 1989. ISSN 0021-9991. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0021-9991\(89\)90035-1](https://doi.org/10.1016/0021-9991(89)90035-1)>. Citado na página 16.

BERGER, M. J.; OLIGER, J. Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, v. 53, n. 3, p. 484 – 512, 1984. ISSN 0021-9991. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0021-9991\(84\)90073-1](https://doi.org/10.1016/0021-9991(84)90073-1)>. Citado na página 16.

- BOERSMA, B. J.; BRETHEROUWER, G.; NIEUWSTADT, F. T. M. A numerical investigation on the effect of the inflow conditions on the self-similar region of a round jet. *Physics of Fluids*, v. 10, n. 4, p. 899–909, 1998. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.869626>>. Citado na página 74.
- BORGHI, R. On the structure and morphology of turbulent premixed flames. In: \_\_\_\_\_. *Recent Advances in the Aerospace Sciences: In Honor of Luigi Crocco on His Seventy-fifth Birthday*. Boston, MA: Springer US, 1985. p. 117–138. ISBN 978-1-4684-4298-4. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4684-4298-4\\_7](http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4684-4298-4_7)>. Citado na página 19.
- BRANDT, A. Multi-level adaptive solutions to boundary-value problems. *Math. Comp.*, v. 31, n. 38, p. 333–390, 1977. Disponível em: <<https://doi.org/10.1090/S0025-5718-1977-0431719-X>>. Citado na página 42.
- BRIGGS, W. L. *A Multigrid Tutorial*. [S.l.]: SIAM - Society for Industrial and Applied Mathematics, 1987. Citado na página 42.
- BROWN, D. L.; CORTEZ, R.; MINION, M. L. Accurate projection methods for the incompressible navier–stokes equations. *Journal of Computational Physics*, v. 168, n. 2, p. 464 – 499, 2001. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<https://doi.org/10.1006/jcph.2001.6715>>. Citado na página 57.
- BUCKMASTER, J. D.; LUDFORD, G. S. S. *Theory of Laminar Flames*. Cambridge University Press, 1982. (Cambridge Monographs on Mechanics). Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1017/CBO9780511569531>>. Citado na página 17.
- CHORIN, A. J. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of Computation*, v. 22, p. 745–762, 1968. Disponível em: <<https://doi.org/10.1090/S0025-5718-1968-0242392-2>>. Citado na página 55.
- CLAVIN, P. Premixed combustion and gasdynamics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 26, n. 1, p. 321–352, 1994. Disponível em: <<https://doi.org/10.1146/annurev.fl.26.010194.001541>>. Citado na página 17.
- COURANT, R.; FRIEDRICHS, K.; LEWY, H. On the partial difference equations of mathematical physics. *IBM J. Res. Dev.*, IBM Corp., Riverton, NJ, USA, v. 11, n. 2, p. 215–234, mar. 1967. ISSN 0018-8646. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1147/rd.112.0215>>. Citado na página 52.
- COURTOIS, R. *Simulation aux grandes échelles de l'écoulement dans un chambre de combustion en forme de marche descendante*. 1 vol (223 p.) p. Tese (Doutorado), 2005. Thèse de doctorat dirigée par Veynante, Denis Énergétique Châtenay-Malabry, Ecole centrale de Paris 2005. Disponível em: <<http://www.theses.fr/2005ECAP1004>>. Citado na página 67.
- DAMASCENO, M. M. R.; VEDOVOTO, J. M.; SILVEIRA-NETO, A. Turbulent inlet conditions modeling using large-eddy simulations. *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, v. 104, n. 2, p. 105–132, 2015. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.3970/cmcs.2015.104.105>>. Citado nas páginas 10 e 25.
- DARWISH, M. S.; MOUKALLED, F. H. Normalized variable and space formulation methodology for high-resolution schemes. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, v. 26, n. 1, p. 79–96, 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/10407799408914918>>. Citado na página 49.

DAY, M. S.; BELL, J. B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry. *Combustion Theory and Modelling*, Taylor & Francis, v. 4, n. 4, p. 535–556, 2000. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1364-7830/4/4/309>>. Citado na página 16.

DEARDORFF, J. W. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large reynolds numbers. *J. Fluid Mech.*, v. 41, p. 453, 1970. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/S0022112070000691>>. Citado na página 5.

ERN, A.; GIOVANGIGLI, V. *Multicomponent Transport Algorithms*. Heidelberg: Springer Verlag, 1994. Citado na página 28.

FERREIRA, V. G. et al. A combination of implicit and adaptive upwind tools for the numerical solution of incompressible free surface flows. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, John Wiley & Sons, Ltd., v. 23, n. 6, p. 419–445, 2007. ISSN 1099-0887. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/cnm.900>>. Citado na página 50.

FERZIGER, J.; PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Berlin Heidelberg, 2001. ISBN 9783540420743. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=1D3EQgAACAAJ>>. Citado na página 52.

FRIEDRICH, R.; ARNAL, M. Analysing turbulent backward-facing step flow with the lowpass-filtered navier-stokes equation. *Journal of Wind Engineering and its Applications*, v. 35, p. 101–128, 1990. Citado na página 7.

GAO, X.; GROTH, C. P. T. A parallel solution - adaptive method for three-dimensional turbulent non-premixed combustions flows. *J. Comput. Phys.*, Academic Press Professional, Inc., San Diego, CA, USA, v. 229, n. 9, p. 3250–3275, maio 2010. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2010.01.001>>. Citado na página 16.

GASKELL, P. H.; LAU, A. K. C. Curvature-compensated convective transport: Smart, a new boundedness- preserving transport algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, John Wiley & Sons, Ltd, v. 8, n. 6, p. 617–641, 1988. ISSN 1097-0363. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/flid.1650080602>>. Citado nas páginas 11, 49 e 50.

GEORGE, W.; DAVIDSON, L. Role of initial conditions in establishing asymptotic flow behaviour. *AIAA Journal*, v. 42, p. 438–446, 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-1-4612-1580-6>>. Citado na página 6.

GERMANO, M. et al. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, v. 3, n. 7, p. 1760, 1991. ISSN 08998213. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/10.1063/1.857955>>. Citado nas páginas 6, 24, 67 e 74.

GIOVANGIGLI, V. *Multicomponent Flow Modeling*. Boston: Birkhäuser, 1999. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-1-4612-1580-6>>. Citado na página 28.

GOODWIN, D. G.; MOFFAT, H. K.; SPETH, R. L. *Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes*. 2016. <<http://www.cantera.org>>. Version 2.2.1. Citado nas páginas 58, 74, 75 e 95.

Harlow, F. H.; Welch, J. E. Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface. *Physics of Fluids*, v. 8, p. 2182–2189, dez. 1965. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.1761178>>. Citado na página 41.

- HARTEN, A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, v. 49, n. 3, p. 357 – 393, 1983. ISSN 0021-9991. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(83\)90136-5](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(83)90136-5)>. Citado nas páginas 11 e 50.
- HARTEN, A. Uniformly high order essentially nonoscillatory schemes. *Journal of Computational Physics*, v. 71, p. 303 – 321, 1987. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0021-9991\(87\)90031-3](https://doi.org/10.1016/0021-9991(87)90031-3)>. Citado na página 11.
- HARTEN, A. Eno schemes with subcell resolution. *Journal of Computational Physics*, v. 83, n. 1, p. 148 – 184, 1989. ISSN 0021-9991. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(89\)90226-X](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(89)90226-X)>. Citado na página 66.
- HIRSCHFELDER, J. O.; CURTISS, C. F.; BIRD, R. B. *Molecular theory of gases and liquids*. New York, Estados Unidos: Wiley, 1954. Citado nas páginas 28 e 36.
- HOWELL, L. H.; BELL, J. B. An adaptive mesh projection method for viscous incompressible flow. *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 18, n. 4, p. 996–1013, 1997. Disponível em: <<https://doi.org/10.1137/S1064827594270555>>. Citado na página 16.
- HUSSEIN, H. J.; CAPP, S. P.; GEORGE, W. K. Velocity measurements in a high-reynolds-number, momentum-conserving, axisymmetric, turbulent jet. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 258, p. 31–75, 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1017/S002211209400323X>>. Citado nas páginas 74 e 95.
- JARRIN, N. et al. A synthetic-eddy-method for generating inflow conditions for large-eddy simulations. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, v. 27, n. 4, p. 585–593, ago. 2006. ISSN 0142727X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2006.02.006>>. Citado na página 10.
- KEATING, A. et al. A priori and a posteriori test of inflow conditions for large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, v. 16, p. 4696–4712, 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1811672>>. Citado na página 8.
- KEE, R. J.; RUPLEY, F. M.; MILLER, J. A. *CHEMKIN-II: A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics*. [S.l.], 1989. Citado nas páginas 74, 75 e 95.
- KEMPF, A.; FLEMMING, F.; JANICKA, J. Investigation of lengthscales, scalar dissipation, and flame orientation in a piloted diffusion flame by {LES}. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 30, n. 1, p. 557 – 565, 2005. ISSN 1540-7489. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.182>>. Citado na página 73.
- KLEIN, M.; SADIKI, A.; JANICKA, J. A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations. *Journal of Computational Physics*, v. 186, p. 652 – 665, 2003. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0021-9991\(03\)00090-1](https://doi.org/10.1016/S0021-9991(03)00090-1)>. Citado nas páginas 8, 9 e 10.
- KRAICHNAN, R. H. Diffusion by a random velocity field. *The Physics of Fluids*, v. 13, n. 1, p. 22–31, 1970. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1692799>>. Citado nas páginas 9, 10 e 25.
- KUO, K. *Principles of combustion*. 1. ed. New York: John Wiley, 1986. Citado na página 38.

KUO, K. *Principles of combustion*. 2. ed. Hoboken, Estados Unidos: Wiley, 2005. Citado nas páginas 16 e 32.

KUROKAWA, F. A. et al. A comparison of high order upwind schemes for solving strong convection problems. In: *Proceedings of the XXVIII CILAMCE - Congresso Íbero Latino-Americano sobre Métodos computacionais em Engenharia*. [S.l.: s.n.], 2007. Citado na página 64.

LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. *Mathematical Models of Turbulence*. London, Inglaterra: Academic Press, 1972. Citado na página 5.

LE, H.; MOIN, P.; KIM, J. Direct numerical simulation of turbulent flow over a backward-facing step. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 330, p. 349–374, 1997. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1017/S0022112096003941>>. Citado na página 10.

LEE, S.; LELE, S. K.; MOIN, P. Simulation of spatially evolving turbulence and the applicability of Taylor's hypothesis in compressible flow. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, v. 4, n. 7, p. 1521–1530, 1992. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.858425>>. Citado na página 10.

LEER, B. van. Towards the ultimate conservative difference scheme. ii. monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of Computational Physics*, v. 14, n. 4, p. 361 – 370, 1974. ISSN 0021-9991. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(74\)90019-9](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(74)90019-9)>. Citado na página 51.

Leonard, B. P. The QUICK algorithm - A uniformly third-order finite-difference method for highly convective flows. In: \_\_\_\_\_. *Computer Methods in Fluids*. [S.l.: s.n.], 1980. p. 159–195. Citado na página 11.

LEONARD, B. P. Simple high-accuracy resolution program for convective modelling of discontinuities. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, John Wiley & Sons, Ltd, v. 8, n. 10, p. 1291–1318, 1988. ISSN 1097-0363. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/fld.1650081013>>. Citado na página 49.

LEONARD, B. P. The ultimate conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 88, n. 1, p. 17 – 74, 1991. ISSN 0045-7825. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825\(91\)90232-U](http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825(91)90232-U)>. Citado na página 49.

LEONARD, B. P.; DRUMMOND, J. E. Why you should not use 'hybrid', 'power-law' or related exponential schemes for convective modelling—there are much better alternatives. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, John Wiley & Sons, Ltd, v. 20, n. 6, p. 421–442, 1995. ISSN 1097-0363. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/fld.1650200602>>. Citado nas páginas 47 e 65.

LIÑAN, A.; WILLIAMS, F. A. *Fundamental Aspects of Combustion*. [S.l.]: Oxford University Press, 1993. Citado na página 17.

LUND, T.; WU, X.; SQUIRES, D. Generation of turbulent inflow data for spatially-developing boundary layer simulations. *Journal of Computational Physics*, v. 140, p. 233–258, 1998. Disponível em: <<https://doi.org/10.1006/jcph.1998.5882>>. Citado nas páginas 7 e 8.

- MALISKA, C. *TRANSFERENCIA DE CALOR E MECANICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL*. [S.l.]: LTC, 2012. ISBN 9788521610465. Citado na página 46.
- MELO, R. R. da S. *Modelagem e simulação de escoamentos turbulentos com efeitos térmicos, utilizando a metodologia da fronteira imersa e malha adaptativa*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, 2017. Citado na página 16.
- MOREAU, P. et al. *Validation expérimentale du modèle peul et du code diamant dans le cadre de l'opération a3c*. Paris, França, 1996. Citado nas páginas x, 67, 68, 69 e 95.
- MORTON, K.; MAYERS, D. *Numerical Solution of Partial Differential Equations: An Introduction*. Cambridge University Press, 2005. ISBN 9781139443203. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/CBO9780511812248>>. Citado na página 64.
- MUELLER, C. J. et al. Vorticity generation and attenuation as vortices convect through a premixed flame. *Combustion and Flame*, v. 112, n. 3, p. 342 – 358, 1998. ISSN 0010-2180. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/S0010-2180\(97\)00122-3](http://dx.doi.org/10.1016/S0010-2180(97)00122-3)>. Citado na página 17.
- NORTHRUP, S. A.; GROTH, C. P. Solution of laminar combusting flows using a parallel implicit adaptive mesh refinement algorithm. In: DECONINCK, H.; DICK, E. (Ed.). *Computational Fluid Dynamics 2006*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2009. p. 341–346. ISBN 978-3-540-92779-2. Disponível em: <[https://doi.org/10.1007/978-3-540-92779-2\\_52](https://doi.org/10.1007/978-3-540-92779-2_52)>. Citado na página 16.
- ORSZAG, S. A.; PATTERSON, G. S. Numerical simulation of turbulence: statistical models and turbulence. *Lecture Notes in Physics*, v. 12, p. 127 – 147, 1972. Disponível em: <[https://doi.org/10.1007/3-540-05716-1\\_8](https://doi.org/10.1007/3-540-05716-1_8)>. Citado na página 5.
- PEMBER, R. B. et al. An adaptive projection method for unsteady, low-mach number combustion. *Combustion Science and Technology*, Taylor & Francis, v. 140, n. 1-6, p. 123–168, 1998. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/00102209808915770>>. Citado na página 16.
- PETERS, N. *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, 2000. (Cambridge Monographs on Mechanics). Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1017/CBO9780511612701>>. Citado nas páginas x, 16, 19 e 20.
- PETERS, N. Multiscale combustion and turbulence. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 32, n. 1, p. 1 – 25, 2009. ISSN 1540-7489. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.proci.2008.07.044>>. Citado na página 16.
- PIOMELLI, U. High reynolds number calculations using the dynamic subgrid scale stress model. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, v. 5, p. 1484 – 1490, 1993. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.858586>>. Citado na página 6.
- PITSCH, H.; STEINER, H. Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (sandia flame d). *Physics of Fluids*, v. 12, n. 10, p. 2541–2554, 2000. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.1288493>>. Citado na página 73.
- POINSOT, T.; VEYNANTE, D. *Theoretical and Numerical Combustion*. Filadélfia, Estados Unidos: Edwards, 2005. ISBN 9781930217102. Citado nas páginas x, 6, 16, 29, 32, 33 e 56.

ROBERTS, W. L.; DRISCOLL, J. F. A laminar vortex interacting with a premixed flame: Measured formation of pockets of reactants. *Combustion and Flame*, v. 87, n. 3, p. 245 – 256, 1991. ISSN 0010-2180. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0010-2180\(91\)90111-N](http://dx.doi.org/10.1016/0010-2180(91)90111-N)>. Citado na página 17.

ROGALLO, R. *Numerical experiments in homogeneous turbulence*. National Aeronautics and Space Administration, 1981. (NASA technical memorandum). Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=2eRCAQAIAAJ>>. Citado na página 10.

ROMA, A. M.; PESKIN, C. S.; BERGER, M. J. An adaptive version of the immersed boundary method. *Journal of Computational Physics*, v. 153, n. 2, p. 509 – 534, 1999. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<https://doi.org/10.1006/jcph.1999.6293>>. Citado na página 16.

SAGAUT, P. et al. Turbulent inflow conditions for les of compressible wall bounded flows. *AIAA Journal*, v. 42, p. 469–477, 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.2514/1.3461>>. Citado na página 7.

SCHLÜTER, J. U.; PITTSCH, H.; MOIN, P. Large-eddy simulation inflow conditions for coupling with reynolds-averaged flow solvers. *AIAA Journal*, v. 42, p. 478–484, 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.2514/1.3488>>. Citado na página 7.

SCHNEIDER, G. E.; ZEDAN, M. A modified strongly implicit procedure for the numerical solution of field problems. *Numerical Heat Transfer*, v. 4, n. 1, p. 1–19, 1981. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/01495728108961775>>. Citado na página 42.

SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly Weather Review*, American Meteorological Society, v. 91, n. 3, p. 99–164, 1963. Citado na página 6.

SMIRNOV, A.; SHI, S.; CELIK, I. Random flow generation technique for large eddy simulations and particle-dynamics modeling. *Journal of Fluids Engineering*, v. 123, p. 359–371, 2001. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1115/1.1369598>>. Citado nas páginas 10, 25, 26, 67 e 74.

SMITH, G. P. et al. *GRI-Mech 3.0*. 2016. Disponível em: <[http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)>. Citado nas páginas 75, 81, 82, 95 e 96.

SMOOKE, M. D.; MITCHELL, R. E.; KEYES, D. E. Numerical solution of two-dimensional axisymmetric laminar diffusion flames. *Combustion Science and Technology*, v. 67, n. 4-6, p. 85–122, 1986. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/00102208908924063>>. Citado na página 17.

SONG, B. et al. On a higher-order bounded discretization scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, John Wiley & Sons, Ltd., v. 32, n. 7, p. 881–897, 2000. ISSN 1097-0363. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0363\(20000415\)32:7<881::AID-FLD2>3.0.CO;2-6](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1097-0363(20000415)32:7<881::AID-FLD2>3.0.CO;2-6)>. Citado nas páginas 11 e 50.

SPALDING, D. B. Development of the eddy-break-up model of turbulent combustion. In: INSTITUTE, T. C. (Ed.). *16th Symp. (Int.) on Combustion*. [s.n.]. p. 1657–1663. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/B978-0-08-030937-8.50024-6>>. Citado na página 38.

SPALDING, D. B. Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. In: INSTITUTE, T. C. (Ed.). *13th Symp. (Int.) on Combustion*. [s.n.]. p. 649–657. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(71\)80067-X](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(71)80067-X)>. Citado na página 38.

SPODE, C. *Simulação de grandes escalas e simulação híbrida RANS/LES do escoamento sobre o degrau com condições de contorno turbulentas*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2006. Citado na página 7.

STEWART, J. *Cálculo: volume 1*. São Paulo, Brasil: Pioneira Thomson Learning, 2008. Citado na página 45.

SWEBY, P. K. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v. 21, n. 5, p. 995–1011, 1984. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1137/0721062>>. Citado na página 11.

TABOR, G. R.; BABA-AHMADI, M. H. Inlet conditions for large eddy simulation: A review. *Computers & Fluids*, v. 39, p. 553–567, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2009.10.007>>. Citado na página 7.

THE HDF GROUP. *Introduction to HDF5*. 2013. [Online; acessado em 23 de julho de 2013]. Disponível em: <<http://www.hdfgroup.org/HDF5/doc/H5.intro.html>>. Citado na página 12.

VARONOS, A.; BERGELES, G. Development and assessment of a variable-order non-oscillatory scheme for convection term discretization. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, John Wiley & Sons, Ltd, v. 26, n. 1, p. 1–16, 1998. ISSN 1097-0363. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0363\(19980115\)26:1<1::AID-FLD603>3.0.CO;2-N](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1097-0363(19980115)26:1<1::AID-FLD603>3.0.CO;2-N)>. Citado na página 11.

VEDOVOTO, J. M. et al. Application of the method of manufactured solutions to the verification of a pressure-based finite-volume numerical scheme. *Computers & Fluids*, v. 51, n. 1, p. 85 – 99, 2011. ISSN 0045-7930. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2011.07.014>>. Citado nas páginas 10 e 41.

VEYNANTE, D.; VERVISCH, L. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 28, n. 3, p. 193 – 266, 2002. ISSN 0360-1285. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0360-1285\(01\)00017-X](https://doi.org/10.1016/S0360-1285(01)00017-X)>. Citado nas páginas x, 16 e 18.

VILLAR, M. M. *Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, 2007. Citado nas páginas 16, 41 e 52.

VORST, H. A. van der. Iterative solution methods for certain sparse linear systems with a non-symmetric matrix arising from pde-problems. *Journal of Computational Physics*, v. 44, n. 1, p. 1 – 19, 1981. ISSN 0021-9991. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(81\)90034-6](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(81)90034-6)>. Citado na página 42.

WANG, D.; RUUTH, S. J. Variable step-size implicit-explicit linear multistep methods for time-dependent partial differential equations. *Journal of Computational Mathematics*, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, v. 26, n. 6, p. 838–855, 2008. ISSN 02549409, 19917139. Citado nas páginas 52 e 53.

WEI, G.; GU, Y. Conjugate filter approach for solving burgers' equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 149, n. 2, p. 439 – 456, 2002. ISSN 0377-0427. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/S0377-0427\(02\)00488-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0377-0427(02)00488-0)>. Citado na página 65.

WESTBROOK, C. et al. Computational combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, Elsevier Limited, v. 30, n. 1, p. 125–157, 2005. ISSN 1540-7489. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.275>>. Citado na página 16.

WESTBROOK, C. K.; DRYER, F. L. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combustion Science and Technology*, v. 27, n. 1-2, p. 31–43, 1981. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/00102208108946970>>. Citado nas páginas 78, 81 e 96.

WILLIAMS, F. A. *Combustion theory*. Menlo Park, CA: Benjamin Cummings, 1985. Citado nas páginas 16 e 27.

XDMFWEB. *XDMF Model and Format*. 2013. [Online; acessado em 24 de julho de 2013]. Disponível em: <[http://www.xdmf.org/index.php/Main\\_Page](http://www.xdmf.org/index.php/Main_Page)>. Citado na página 12.

ZHU, J. On the higher-order bounded discretization schemes for finite volume computations of incompressible flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 98, n. 3, p. 345 – 360, 1992. ISSN 0045-7825. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0045-7825\(92\)90003-3](https://doi.org/10.1016/0045-7825(92)90003-3)>. Citado na página 11.