
Modelagem Computacional de Escoamentos Reativos Compressíveis

Vinícius Hagemeyer Chiumento



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Vinícius Hagemeyer Chiumento

**Modelagem Computacional de Escoamentos
Reativos Compressíveis**

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação da Faculdade de Engenharia Mecânica na Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Área de concentração: Engenharia Mecânica

Orientador: João Marcelo Vedovotto

Uberlândia
2024

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

C543m Chiumento, Vinícius Hagemeyer, 1992-
2024 Modelagem computacional de escoamentos reativos compressíveis
[recurso eletrônico] / Vinícius Hagemeyer Chiumento. - 2024.

Orientador: João Marcelo Vedovotto.
Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia, Programa de
Pós-graduação em Engenharia Mecânica.
Modo de acesso: Internet.
Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.te.2025.5008>
Inclui bibliografia.
Inclui ilustrações.

1. Engenharia Mecânica. I. Vedovotto, João Marcelo (Orient.). II.
Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-graduação em
Engenharia Mecânica. III. Título.

CDU: 621.01

André Carlos Francisco
Bibliotecário-Documentalista - CRB-6/3408

Agradecimentos

Gostaria de agradecer a minha mãe por todo apoio e incentivo, não apenas ao longo do doutorado mas também ao longo de toda a minha vida. E também a toda a minha família, em especial ao meu tio Laertes Hagemeyer que me incentivou a seguir a carreira de engenheiro.

Aos meus amigos Alejandro Morales, Ricardo Catta, Daniel Florez e Rodrigo Cavalcanti por todas as discussões sobre o tema, ideias, apoio, momentos de descontração, amizade e companhia para o café.

Ao meu orientador João Marcelo Vedovotto, por propor este tema incrível e desafiador, assim como pela paciência e suporte.

Agradeço aos colegas do MFLab, Pedro Mota, Alex Elias, Ophir Neto, Valdson Gonçalves, Lucas Meira, Sammy Cristopher, Jamille Kessia, João Emmanuel e outros pesquisadores incríveis que passaram pelo MFLab. Um agradecimento especial para o Sammy e Alejandro que ligaram o meu computador várias vezes quando eu estava longe do laboratório, sem isto eu não teria concluído esta tese.

Ao Rafael Romão e Alessandra por responderem as minhas dúvidas de forma atenciosa.

Ao professor Aristeu da Silveira Neto, Ricardo Serfaty, Millena e Johnatas Teixeira.

Aos meus colegas o IEAv pelo apoio e incentivo nessa etapa final do doutorado.

Gostaria de agradecer aos meus antigos orientadores Professor Vinicius Malatesta e Professor Leandro Franco.

Gostaria de agradecer e enviar um grande abraço para Joseana Soares, pela amizade e incentivo.

Gostaria de agradecer a Universidade Federal de Uberlândia.

Gostaria de agradecer a CAPES, CNPq, FAPMIG e Petrobrás.

"Em algum lugar, algo incrível está esperando para ser descoberto." (Carl Sagan)

Resumo

A necessidade de simular com precisão uma ampla gama de fenômenos físicos em engenharia impulsiona o desenvolvimento de códigos de Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) capazes de lidar com diferentes regimes de compressibilidade. Em aplicações como turbomáquinas e queimadores industriais, regiões de baixa velocidade coexistem com áreas de escoamento transônico exige algoritmos capazes de lidar com todos os regimes de compressibilidade. Além disso, é comum ocorreres outros fenômenos físicos como o transporte de espécies químicas, combustão e turbulência. Este trabalho apresenta o desenvolvimento, verificação e validação de um algoritmo PISO compressível acoplado a um método de fronteira imersa e refinamento de malha adaptativo, utilizando o método dos volumes finitos para resolver as equações de Navier-Stokes, balanço de energia, continuidade e balanço de espécies químicas. O acoplamento PISO foi modificado para considerar os efeitos da compressibilidade e implementado no MFSim, que já possui modelos de turbulência LES e URANS, além de modelos de combustão turbulenta como o EDC. A validação do código foi realizada através da simulação de diversos casos distintos, incluindo tubo de choque, convecção natural, escoamento em canal com corpo rombudo e escoamento supersônico em degrau. Os resultados demonstram a capacidade do código em lidar com diferentes regimes de compressibilidade, turbulência e combustão, demonstrando a possibilidade de ser utilizado em problemas de engenharia complexos.

Palavras-chave: Escoamentos Reativos. Escoamentos Compressíveis. Mecânica dos Fluidos Computacional.

Abstract

The need to accurately simulate a wide range of physical phenomena in engineering drives the development of Computational Fluid Dynamics (CFD) codes capable of handling different compressibility regimes. In applications such as turbomachinery and industrial burners, low-velocity regions coexist with transonic flow areas, requiring algorithms capable of handling all compressibility regimes. In addition, other physical phenomena such as chemical species transport, combustion, and turbulence are commonly encountered. This work presents the development, verification, and validation of a compressible PISO algorithm coupled with an immersed boundary method and adaptive mesh refinement, using the finite-volume method to solve the Navier-Stokes equations, energy balance, continuity, and chemical species balance. The PISO coupling was modified to consider compressibility effects and implemented in MFSim, which already includes LES and URANS turbulence models, as well as turbulent combustion models such as EDC. The code validation was performed through the simulation of several distinct cases, including shock tube, natural convection, flow in a channel with a bluff body, and supersonic flow over a step. The results demonstrate the ability of the code to handle different compressibility regimes, turbulence, and combustion, showing its potential for use in complex engineering problems.

Keywords: Computational fluid dynamics. Compressible Flow. Reactive Flow .

Lista de ilustrações

Figura 1 – Representação de um experimento realizado com um queimador sônico. Dois testes foram realizados, sendo um com combustão e outro sem combustão. Fonte Anufriev et al. (2019)	22
Figura 2 – Fluxograma do algoritmo PISO/SIMPLE compressível.	41
Figura 3 – Solução analítica do tubo de choque, dividido em 5 regiões	57
Figura 4 – Número de Mach, massa específica, pressão e componente u da velocidade obtidos com diferentes malhas.	60
Figura 5 – Pressão, densidade, Número de Mach e velocidade ao longo do tubo de choque para diferente valores de CFL.	61
Figura 6 – Número de Mach, massa específica, pressão e componente u da velocidade obtidos com utilizando as discretizações Euler, SBDF ou ABCN.	63
Figura 7 – Número de Mach, massa específica, pressão e componente u da velocidade para a formulação divergente e não divergente.	64
Figura 8 – Perfis do Número de Mach, massa específica, pressão e componente u da velocidade para os casos multicomponentes e mono componente.	65
Figura 9 – Pressão, densidade, Número de Mach e velocidade ao longo do tubo de choque para os esquemas advectivos upwind de primeira ordem, upwind de segunda ordem e diferenças centradas.	66
Figura 10 – Pressão, densidade, Número de Mach e velocidade ao longo do tubo de choque obtidos utilizando as discretizações TVD MinMod, Umist e QUICK.	67
Figura 11 – Número de Mach, massa específica, pressão e componente u da velocidade obtidos com diferentes discretizações.	68
Figura 12 – Massa específica, componente u da velocidade, temperatura e razão dos calores específicos obtidos com MFSim comparados com os resultados obtidos por Ferrer et al. (2014).	70

Figura 13 – Pressão, densidade, Mach e velocidade obtidos com MFSim comparados com os resultados analíticos, de acordo com Denner, Xiao e Wachem (2018). Também são apresentadas a distribuição de γ e frações mássicas ao longo do tubo.	71
Figura 14 – Temperatura em função do tempo na posição $x = 0,005\text{m}$	73
Figura 15 – Temperatura, densidade, γ e velocidade obtidos com MFSim comparados com os resultados obtidos por (FERRER et al., 2014).	74
Figura 16 – Iso-valores de temperatura considerando $\epsilon = 0.6$	78
Figura 17 – Iso superfície para diferentes valores de temperatura considerando $\epsilon = 0.6$ e propriedades variáveis.	79
Figura 18 – Esboço da seção de testes utilizada no experimento. Adaptado de (SJUNNESSON; HENRIKSON; LOFSTROM, 1992).	81
Figura 19 – Malha utilizada nas simulações, as linhas vermelhas indicam as posições da sondas.	81
Figura 20 – Velocidade média longitudinal normalizada nas posições $x/a = 0,215$, $x/a = 0,2612$ e $x/a = 0,35$, comparação entre LES, Rk- ϵ e experimento.	82
Figura 21 – Velocidade média transversal normalizada para as posições $x/a = 0,215$, $x/a = 0,2612$ e $x/a = 0,35$, comparação entre LES, Rk- ϵ e experimento.	82
Figura 22 – Velocidade longitudinal RMS normalizada para as posições $x/a = 0,215$, $x/a = 0,2612$ e $x/a = 0,35$, comparação entre LES, Rk- ϵ e experimento.	83
Figura 23 – Velocidade transversal RMS normalizada para as posições $x/a = 0,215$, $x/a = 0,2612$ e $x/a = 0,35$, comparação entre LES, Rk- ϵ e experimento.	83
Figura 24 – Componente $u'v'$ normalizado do Tensor de Reynolds para as posições $x/a = 0,215$, $x/a = 0,2612$ e $x/a = 0,35$, comparação entre LES, Rk- ϵ e experimento.	84
Figura 25 – Velocidade média longitudinal ao longo da linha central, comparação entre LES, Rk- ϵ e experimento.	84
Figura 26 – Contornos para magnitude da velocidade instantânea acima e abaixo contornos para magnitude da vorticidade instantânea para $k-\epsilon$ realizável.	85
Figura 27 – Contornos para magnitude da velocidade instantânea acima e abaixo contornos para magnitude da vorticidade instantânea para LES.	85
Figura 28 – Esboço do domínio computacional utilizado.	86
Figura 29 – Comparação entre o resultado obtido pelo código desenvolvido a esquerda e o resultado apresentado por Woodward e Colella (1984) a direita.	87
Figura 30 – Ilustração da malha no instante $t = 2$, as linhas vermelhas indicam a fronteira imersa. O fundo é colorido pelos contornos da temperatura.	88
Figura 31 – Pressão ao longo do eixo x para $y = 0,4\text{ m}$	88

Lista de tabelas

Tabela 1 – Funções limitadoras de fluxo.	43
Tabela 2 – Constantes do modelo EDC utilizadas.	53
Tabela 3 – Condições iniciais do tubo de choque proposto por Sod (1978).	59
Tabela 4 – Propriedades das simulações	59
Tabela 5 – Tempo computacional para cada malha estudada	59
Tabela 6 – Tempo computacional para diferentes valores de CFL.	61
Tabela 7 – Tempo computacional gasto para cada acoplamento de pressão e velocidade.	62
Tabela 8 – Condições iniciais do tubo de choque supersônico e parâmetros de simulação.	68
Tabela 9 – Condições iniciais do tubo de choque multicomponente.	69
Tabela 10 – Condições iniciais do tubo de choque multicomponente.	72
Tabela 11 – Parâmetros da simulação.	72
Tabela 12 – Condições iniciais do tubo de choque reativo.	73
Tabela 13 – Configuração utilizada para o caso da cavidade térmica.	76
Tabela 14 – Número de Nusselt para a parede aquecida.	77
Tabela 15 – Propriedades da simulação e composição química utilizada no caso do escoamento sobre um corpo rombudo.	80
Tabela 16 – Condição inicial do escoamento sobre um degrau a frente.	86

Lista de abreviaturas

CFD Mecânica dos fluidos computacional

CFL Estabilidade condicional de Courant–Friedrichs–Lewy

CDS Diferenças finitas centrais

DNS Simulação numérica direta

EBU Eddy Break-up

EDC Eddy Dissipation Concept

FOU Upwind de primeira ordem

IBM Método da fronteira imersa

LODI Local One-Dimensional Inviscid Relations

LES Large Eddy Simulation

MPI Message Passing Interface

NSCBC Condições de contorno características para as Equações de Navier-Stokes

NRBC Condição de contorno não reflexiva

PISO Pressure-Implicit with Splitting of Operators

PRS Reator Perfeitamente Misturado

PRIME Pressure Implicit, Momentum Explicit

QUICK Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics

SIMPLE Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations

SIMPLER Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations Revised

SIMPLEC Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations Consistent

SBDF Semi-Implicit Backward Differentiation Formula

SOU Upwind de segunda ordem

TVD Variação total diminuída

URANS Equações de Navier-Stokes transientes filtradas

VOF Volume de Fluido

Lista de símbolos

α	Coeficiente de sub-relaxação implícita
β	Expansividade térmica
Δt	Passo de tempo
$\dot{\omega}_k$	Taxa de reação da espécie química k
ϵ	Potência específica de transformação viscosa de energia cinética turbulenta em energia térmica
γ	Razão dos calores específicos (c_p/c_v)
μ	Viscosidade cinemática
ω_k	Taxa de produção líquida de cada espécie química em um mecanismo de múltiplas reações
$\Psi(r)$	Função delimitadores de fluxo para esquemas TVD
ρ'	Correção da densidade
τ	Pseudo tempo
τ_c	tempo característico das reações químicas
τ_f	tempo característico do escoamento
a	Velocidade do som
c_p	Calor específico a pressão constante
C_s	Constante de Smagorinsky
D_k	Coeficiente de difusividade da espécie k na mistura

Da	Número de Damköhler
E_a	Energia de ativação
g	Aceleração da gravidade
h_k^0	Entalpia de formação da espécie química k
K	Condutividade térmica
k	Energia cinética específica turbulenta
k_f	Coeficiente de taxa de reação bimolecular
M_c	Número de Mach convectivo
Nu	Número de Nusselt
P'	Correção da pressão
P	Pressão
P^*	Estimativa inicial da pressão
R	Constante específica dos gases
Ra	Número de Rayleigh
RHS	Lado direito da equação
S_{ij}	Tensor taxa de deformação
T	Temperatura
t	Tempo
U	Velocidade do escoamento
u'_i	Correção componente i da velocidade
w_i	Energia liberada ou consumida devido as reações químicas
W_k	Massa molar da espécie química k
X_k	Fração molar da espécie k
Y_k	Fração mássica de espécie química k

Sumário

1	INTRODUÇÃO	21
1.1	Objetivos	22
1.2	Metodologia	23
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	25
2.1	Códigos para todos os regimes de velocidades	25
2.2	Escoamentos Reativos Turbulentos	28
2.3	Escoamentos Reativos Compressíveis	29
2.4	Condição de contorno não reflexiva	30
2.5	Malha adaptativa	32
2.6	MFSim: simulador multifísica	32
3	MODELAGEM DE ESCOAMENTOS COMPRESSÍVEIS	35
3.1	Modelo Matamético Diferencial	35
3.2	Método Numérico	37
3.2.1	Acoplamento Pressão Velocidade	37
3.2.2	Esquemas Numéricos Para a Modelagem dos Termos Advectivos	40
3.2.3	Condição de contorno não reflexiva	43
3.2.4	Fronteira Imersa	45
3.2.5	Pseudo transiente	46
3.2.6	Modelagem da Turbulência	47
3.2.7	Escoamentos reativos	49
3.2.8	Combustão turbulenta	51
4	RESULTADOS	55
4.1	Tubo de Choque	55
4.1.1	Solução Analítica	56
4.1.2	Tubo de Choque SOD	58

4.1.3	Tubo de Choque Supersônico	67
4.1.4	Tubo de Choque Multicomponente	69
4.1.5	Tubo de Choque Contendo Dois Gases	70
4.1.6	Tubo de Choque Reativo	72
4.2	Convecção Natural Em Cavidade Fechada	75
4.3	Escoamento Em Canal Sobre Um Corpo Rombudo	80
4.4	Escoamento Supersônico Sobre um Degrau a Frente	86
5	CONCLUSÃO	89
	REFERÊNCIAS	91

Introdução

Escoamentos reativos estão presentes em várias aplicações industriais. A combustão fornece a maior parte da energia necessária para diversas aplicações, como meios de transporte, fornos industriais e também na geração de energia elétrica. Diferentes regimes de compressibilidade podem ser encontrados em escoamentos reativos, do subsônico ao supersônico e em alguns casos mais de um regime pode ser encontrado em regiões próximas. Exemplos tradicionais de casos nos quais ocorrem escoamentos compressíveis reativos são os observados nas câmeras de combustão de *ramjets* e *scramjets*, do inglês *supersonic combustion ramjet*, sendo que nos *scramjets* a combustão ocorre em regime supersônico. Em muitos casos o combustível utilizado se encontra na fase líquida, que ao ser injetado passa pelo processo de breakup e evaporação que influenciam no desempenho das câmeras de combustão.

Tradicionalmente os códigos de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) são desenvolvidos para resolver escoamentos somente compressíveis ou incompressíveis, o que funciona bem para a grande maioria dos casos. No entanto, alguns casos, como escoamentos em turbomáquinas e queimadores industriais, podem ocorrer regiões em que o escoamento apresenta tanto regiões com baixas velocidades quanto regiões com velocidade transônica sendo vantajoso o uso de algoritmos que permitem resolver todos os regimes de compressibilidade. Outro exemplo ocorre no processo de breakup de gotas em atomizadores supersônicos, onde ocorre a presença de gotículas incompressíveis na fase líquida com ar em velocidade sônica escoando ao redor das gotículas. Neste caso, além da diferença dos regimes de compressibilidade o escoamento é multifásico e ocorre a evaporação das gotas. O uso de códigos para todos os regimes de compressibilidade, tradicionalmente chamados na literatura de *All-Mach*, evita o uso de simplificações ou divisões do domínio estudado e permite a simulação de casos mais complexos.

Os fenômenos apresentados anteriormente são ilustrados na figura 1, onde foi realizado um experimento utilizando um queimador sônico. O queimador produz um escoamento bifásico, onde a fase gasosa apresenta velocidades muito elevadas na região do jato e velocidades muito baixas nas redondezas, enquanto que a fase líquida, composta por

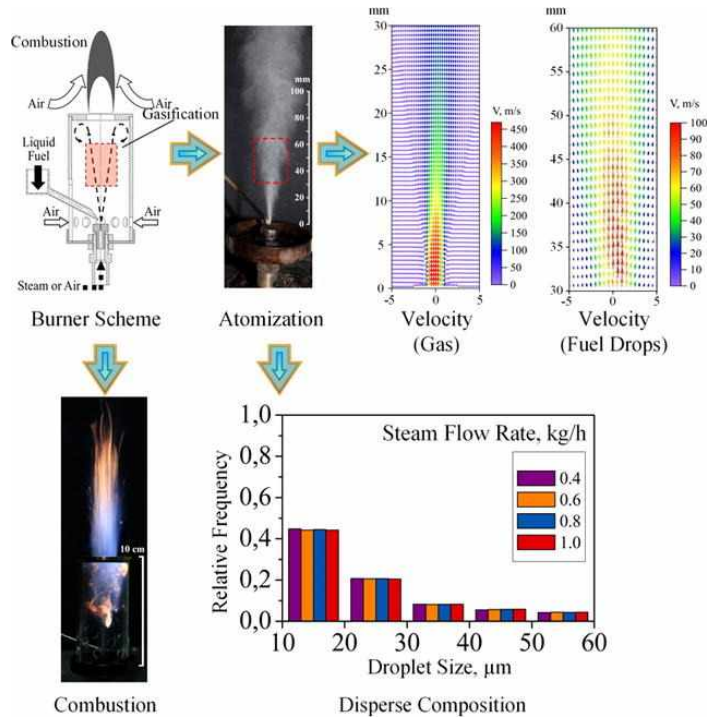


Figura 1 – Representação de um experimento realizado com um queimador sônico. Dois testes foram realizados, sendo um com combustão e outro sem combustão. Fonte Anufriev et al. (2019)

combustível, apresenta velocidades menores que a velocidade da fase gasosa. A eficiência da combustão está diretamente relacionada ao processo de breakup e evaporação das gotas de combustível. Ao simular este experimento e outros experimentos similares, o código utilizado deve ser capaz de lidar com as grandes variações de velocidade, assim como modelar o escoamento bifásico, o processo de evaporação e combustão.

A proposta desta tese é apresentar um código utilizando o acoplamento pressão velocidade Pressure-Implicit with Splitting of Operators (PISO) compressível com a possibilidade de utilizar modelos de turbulência e combustão, combinados com malha adaptativa e fronteira imersa. Este código poderá resolver problemas práticos de engenharia com modelos físicos complexos, assim como geometrias complexas.

1.1 Objetivos

O presente trabalho apresenta o desenvolvimento de técnicas numéricas para a simulação de escoamentos reativos em diferentes regimes de compressibilidade com o objetivo de obter um código que resolva escoamentos reativos e turbulentos com a possibilidade ser utilizado em aplicações industriais. Para isso será utilizado a combinação de diversos métodos já presentes no MFSim, como a malha adaptativa, fronteira imersa e modelos de turbulência e combustão foram combinados com o piso compressível.

Os objetivos específicos são descritos abaixo:

1. Dedução e implementação do acoplamento pressão-velocidade PISO no MFSim;
2. Verificação dos modelos de turbulência presentes para o uso com PISO compressível;
3. Verificação do transporte de espécies químicas com propriedades variáveis e de modelos de combustão em escoamentos compressíveis;
4. Conferir a eficácia da malha adaptativa e da fronteira imersa para o código com os modelos propostos;
5. Validação do código para diversas condições de escoamentos.

1.2 Metodologia

Foi utilizado o método dos volumes finitos para resolver as equações Navier-Stokes, assim como a equação do balanço de energia, continuidade e balanço das espécies químicas. O acoplamento da pressão com a velocidade utilizado é o PISO modificado para levar em consideração os efeitos da compressibilidade. As modificações foram feitas no MFSim, que já possui as metodologias Large Eddy Simulation (LES) e Equações de Navier-Stokes transientes filtradas (URANS) e também modelos de combustão turbulenta, como o Eddy Dissipation Concept (EDC). A paralelização foi realizada utilizando Message Passing Interface (MPI).

Ao todo foram utilizados 4 casos para validação e verificação. O primeiro caso estudado investigou diversas configurações de tubo de choque anualizando o comportamento dos esquemas advectivos na presença de ondas de choque e também o modelo de combustão e o balanço de espécies químicas. Em seguida é realizado um estudo envolvendo convecção natural, sendo um caso subsônico e com a presença de um gradiente de densidade. Os modelos de turbulência foram validados simulando o escoamento em um canal com corpo rombudo. No ultimo caso é verificada a solução transiente de um escoamento supersônico em um degrau a frente.

Esta tese é dividida em 6 capítulos. No capítulo 2 é apresentada a revisão bibliográfica abordando trabalho relacionados ao acoplamento pressão velocidade para escoamentos compressíveis, assim como para escoamentos turbulentos e reativos, entre outros tópicos relacionados a tese.

O modelo numérico é apresentado no capítulo 3. Nesse capítulo são apresentadas as equações utilizadas para resolução dos casos proposto, assim como a dedução dos principais métodos utilizados. A seguir, no capítulo 4 os resultados da verificação e validação são apresentados para os casos estudados. Por fim, o capítulo 5 contém as conclusões do trabalho realizado, assim como as perspectivas.

Revisão Bibliográfica

Diversos processos de combustão estão presentes no dia a dia como, por exemplo, em processos industriais e em meios de transporte. A combustão é responsável por uma grande parcela da energia consumida pela sociedade (TURNS, 2013). Muitos veículos são movidos a combustão, especialmente na aviação, onde existe uma dificuldade em utilizar energias renováveis. Além da preocupação com a eficiência energética e emissão de poluentes nos motores a jato, tem crescido o interesse em desenvolver motores mais silenciosos (IHME, 2017). Além dos motores a jato, processos de combustão em alta velocidade estão presentes em turbomáquinas e queimadores industriais.

A Mecânica dos Fluidos Computacional (CFD) é uma ferramenta que auxilia na compreensão de diversos fenômenos físicos e no desenvolvimento de projetos de engenharia. Na indústria é importante que a ferramenta CFD utilizada obtenha bons resultados em pouco tempo. O uso de malha adaptativa e a resolução dos sistemas lineares utilizando multigrid proporcionam um custo computacional reduzido, incentivando uso de métodos como o acoplamento pressão-velocidade para todos os regimes de compressibilidade, combinado com métodos de combustão detalhada. Tal abordagem permite resolver casos com modelos físicos complexos.

No presente capítulo, é apresentada uma revisão bibliográfica sobre os temas abordados durante a pesquisa, com o foco em trabalhos relevantes para o tema. Na primeira parte, são abordadas as metodologias utilizadas em códigos para todos os regimes de compressibilidade. Em seguida, são discutidas diferentes abordagens e as dificuldades para modelar escoamentos reativos turbulentos e também escoamentos reativos compressíveis. Por fim, é apresentada uma breve descrição sobre condições de contornos não reflexivas, assim como para o uso de malhas adaptativas.

2.1 Códigos para todos os regimes de velocidades

Muitos códigos são desenvolvidos para resolver apenas escoamentos incompressíveis ou compressíveis. A partir da década de 90, houve o crescimento no desenvolvimento

de códigos para resolver tanto escoamentos incompressíveis, como compressíveis, sendo denominada esta categoria como *All-Mach*. Tradicionalmente os métodos de CFD para escoamentos compressíveis são classificados em duas famílias, *density-based* e *pressure-based*. A diferença entre os dois grupos consiste na escolha das variáveis dependentes primitivas, sendo que os métodos baseados na pressão utilizam a pressão como variável dependente primitiva enquanto os métodos baseados na densidade utilizam a densidade como variável dependente primitiva.

Usualmente métodos baseados na densidade são utilizados em escoamentos transônicos e supersônicos, onde o número de Mach é elevado e os efeitos da compressibilidade resultam em gradiente de densidade nítido. Em escoamentos com baixos números de Mach os códigos costumam ser instáveis devido ao pequeno gradiente de densidade, dificultando a convergências destes códigos. No entanto é possível introduzir uma compressibilidade artificial, aumentando a estabilidade dos códigos baseado na densidade em casos subsônicos (CHORIN, 1997), (RIZZI; ERIKSSON, 1985). Métodos baseados na pressão como o Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations (SIMPLE) normalmente consideram que o escoamento é incompressível em sua dedução, levando a formulações incapazes de modelar escoamentos compressíveis. Porém é possível deduzir estes métodos sem considerar o escoamento incompressível.

Conforme as técnicas de CFD foram sendo desenvolvidas, o interesse em resolver diversos regimes de compressibilidade utilizando o mesmo código foi crescendo. Os primeiros a simularem escoamentos para todos os regimes de compressibilidade foram Harlow e Amsden (1971) no qual foi desenvolvida a técnica ICE (*Implicit Continuous-fluid Eulerian*) com o objetivo de simular escoamentos subsônicos e supersônicos. Posteriormente Patankar (1971) modificou este modelo alterando suas variáveis primitivas dependentes melhorando a estabilidade do algoritmo.

Karki e Patankar (1989) realizaram uma modificação na equação da pressão para incluir as variações da densidade e da velocidade no algoritmo Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations Revised (SIMPLER), permitindo simular escoamentos invíscidos compressíveis além dos escoamentos incompressíveis. Outros pesquisadores realizaram modificações para utilizar o SIMPLE em diferentes regimes de compressibilidade, dentre os quais podemos citar Issa e Lockwood (1977), Hah (1984), Doormaal, Raithby e McDonald (1987) e Marchi e Maliska (1994).

Códigos baseados na pressão são comumente utilizados para escoamentos a baixos números de Mach e muitas vezes são deduzidos utilizando a hipótese de que o escoamento seja incompressível. Apesar de inicialmente ser desenvolvido para a solução de problemas com escoamentos incompressíveis, códigos baseados na pressão se mostraram mais eficientes para a simulação com diferentes números de Mach (MANGANI; DARWISH; MOUKALLED, 2016). Diversos pesquisadores desenvolveram algoritmos baseados na pressão para simular casos em regimes supersônicos e transônicos (LIEN; LESCHZINER,

1994), (POLITIS; GIANNAKOGLU, 1997).

Nos códigos para todos os regimes de compressibilidade utilizando SIMPLE a pressão exerce duas funções distintas. Em baixos Números de Mach o gradiente de pressão estabiliza o campo de velocidade através da conservação de movimento linear, não afetando significativamente a densidade, podendo considerar o escoamento incompressível. No entanto em velocidades supersônicas as variações na velocidade são relativamente menores comparado com a magnitude da velocidade, indicando que a pressão exerce uma maior influência na densidade. A possibilidade da pressão exercer estas duas funções resulta em aplicações com sucesso tanto para escoamentos incompressíveis como compressíveis (MOUKALLED et al., 2016).

Muitos pesquisadores seguiram desenvolvendo e aperfeiçoando as técnicas existentes para a simulação de escoamentos em todos os regimes de compressibilidade. Moukalled e Darwish (1999) estendeu o método para resolver escoamentos bifásicos. Em seu trabalho seguinte, Moukalled e Darwish (2001) utilizou um esquema de discretização de alta ordem em seu código para todos os regimes de compressibilidade.

Mangani (2008) desenvolveu um código utilizando SIMPLE para escoamentos reativos em todos os regimes de compressibilidade, focado em aplicações de turbomáquinas. Posteriormente Mangani, Darwish e Moukalled (2016) desenvolveram uma implementação para OpenFOAM utilizando SIMPLE com sistema de eixos rotativos.

Moukalled e Darwish (2008) simularam a dispersão turbulenta e evaporação de gotas, obtendo informações sobre a penetração do spray assim como a temperatura das gotas. O código utilizado modelava escoamentos multifásicos e com múltiplas espécies em diferentes regimes de compressibilidade. Miller et al. (2013) utilizou um código para todos os regimes de compressibilidade para a resolução de problemas multifásicos com o objetivo de estudar explosões submersas, onde utilizou o algoritmo PISO implementado no OpenFoam, demonstrando ser capaz de lidar com ondas de choque, descontinuidades entre as fases e efeitos de rarefação.

Frederix et al. (2015) modelou a formação e o transporte de aerossol com o OpenFOAM, para isto foi utilizado o algoritmo PISO compressível. Fuster e Popinet (2018) desenvolveram um código utilizando a pressão como variável primitiva para resolver escoamentos bifásicos compressíveis. O código utiliza uma malha octree. Fuster e Popinet (2018) simularam a dinâmica de bolhas utilizando um código para todos os regimes de compressibilidade baseado no método da projeção e utilizando o conceito de Volume de Fluido (VOF), do inglês *Volume Of Fluid*.

Natarajan et al. (2019) realizaram a integração do código All-Mach multifásico desenvolvido no AMReX utilizando VOF. O AMReX é uma interface altamente paralelizada para a utilização de malhas bloco-estruturadas com refinamento adaptativo. O acoplamento da pressão e da velocidade utilizado foi uma adaptação dos métodos dos passos fracionados, para que variações de temperatura e frações mássicas fossem levadas

em consideração nas flutuações de pressão. Outros pesquisadores propuseram versões do algoritmo passos fracionados para todos os regimes de compressibilidade (CODINA; VÁZQUEZ; ZIENKIEWICZ, 1998), (LIU; PLETCHER, 2007), (REICHLING; NOLL; AIGNER, 2013).

O PISO é muito utilizado em escoamentos reativos (FREDERIX et al., 2015) (ISSA et al., 1991). e costuma apresentar bons resultados em regimes transientes (BRESSLOFF, 2001). Apesar ter uma ou mais etapas de correção, o que eleva o custo computacional de cada iteração, o PISO de uma quantidade menor de iterações em comparação com SIMPLE e SIMPLEC. Portanto o PISO apresenta vantagens em casos onde muitas equações extras são resolvidas em cada iteração, por exemplo, o transporte das espécies químicas.

2.2 Escoamentos Reativos Turbulentos

Escoamentos reativos turbulentos estão presentes em muitas aplicações industriais, como turbinas a gás e caldeiras industriais. Também são encontrados em sistemas propulsivos, como jatos, ramjets e scramjets e assim como motores a combustão interna (POPE, 1991). Sendo uma importante área de estudo para contribuir com o desenvolvimento de equipamentos mais eficientes e reduzir a emissão de poluentes. A turbulência provavelmente é o fenômeno mais complexo em escoamento não reativos, enquanto que a combustão apresenta dificuldades relacionada ao tempo característico das reações e a complexidade de modelos detalhados de cinética química. Também ocorre a interação combustão e turbulência e fenômenos devido presença de ondas de choque e instabilidades termo-acústicas (GONZALEZ-JUEZ et al., 2017).

Em um processo de combustão turbulenta ocorre tanto a interação das reações químicas com os efeitos da turbulência, assim como a interação do escoamento turbulento com a reação química. O escoamento turbulento altera a estrutura da chama podendo aumentar a taxa de reação química ou inibir as reações extinguindo a chama. Enquanto as reações químicas liberam energia térmica, alterando a densidade e viscosidade do fluido acelerando o fluido devida a expansão ocasionada pela liberação de energia térmica. Estes fenômenos físicos podem tanto aumentar a intensidade da turbulência como amortecer seus efeitos (POINSOT; VEYNANTE, 2005) .

Do ponto de vista numérico, escoamentos reativos apresentam um grau de complexidade elevado quando comparados com escoamentos inertes. Desta forma, a Simulação numérica direta (DNS) do inglês *Direct numerical simulation* e cinética química detalhada são inviáveis para muitos casos devido ao elevado custo computacional. O tempo característico das reação químicas quase sempre é muito inferior ao tempo característico das menores estruturas turbilhonares. Outra possível dificuldade é a utilização de modelos detalhados para a cinética química, o que pode resultar em milhares de reações

químicas no transporte de centenas de espécies químicas, elevando drasticamente o custo computacional.

É possível adotar algumas simplificações e métodos numéricos com o objetivo de facilitar a simulação de escoamentos reativos turbulentos. Entre as possíveis simplificações está a adoção de um modelo de cinética química reduzido e modelos de combustão turbulenta. A modelagem da combustão turbulenta pode ser feita utilizando o Eddy Break-up (EBU) proposto por (SPALDING, 1971), que considera que as taxas de reação química dependem apenas da fluidodinâmica. Esta hipótese é válida para números de Dankohler elevados.

Outro modelo comum é o Eddy Dissipation Concept proposto por (MAGNUSSEN; HJERTAGER, 1977) baseado no EBU. Este modelo mescla os efeitos da turbulência na reação química com os efeitos da cinética química permitindo o uso de mecanismos detalhados ou reduzidos. O modelo EDC parte do princípio que as reações ocorrem nas menores estruturas turbilhonares e propõe correlações entre os efeitos da turbulência e as reações químicas. Tanto o modelo EBU como o EDC estão presentes em diversos códigos comerciais, possibilitando a solução de vários problemas práticos.

Com o passar do tempo várias modificações foram propostas para o modelo EDC, como a versão apresentada por Magnussen (1981) que permite o uso de mecanismos detalhados de cinética química. A versão seguinte, desenvolvida por Gran e Magnussen (1996) inclui os efeitos da mistura dos gases frios com as menores estruturas. Posteriormente, o modelo foi estendido considerando a reação química fora das menores estruturas turbilhonares (MAGNUSSEN, 2005). As versões mais recentes propostas por Parente et al. (2016) e Bao (2017) modificaram as constantes do modelo com o objetivo de simular combustão com pouca ou moderada diluição de oxigênio.

Em escoamentos compressíveis e principalmente em escoamentos reativos ocorrem uma grande variação da temperatura, resultando em variações das propriedades termodinâmicas dos fluidos, como o calor específico e a viscosidade. Para obter valores precisos a biblioteca Cantera é utilizada para calcular as propriedades termodinâmicas de acordo com a temperatura e concentração das espécies químicas ao longo do domínio estudado.

2.3 Escoamentos Reativos Compressíveis

As aplicações mais comuns envolvendo escoamentos reativos em velocidade elevadas é o desenvolvimento de motores ramjet e scramjets. Estes motores não possuem partes móveis e o ar é comprimido após passar por uma onda de choque. A queima do combustível ocorre na câmara de combustão, que no caso dos ramjets ocorre em regime subsônico e nos scramjets a combustão ocorre em regimes supersônicos. Por fim os gases queimados passam por um bocal convergente e divergente gerando o empuxo necessário para mover o veículo. Para projetos mais eficientes e com performance mais elevadas as ferramentas computacionais se tornam muito importantes. Para isto é preciso que o código simule

escoamentos turbulentos, compressíveis e reativos. Caso o interesse seja estudar motores com combustível líquido, pode ser preciso modelar um escoamento bifásico com o transporte e evaporação das gotas de combustível (REN et al., 2019).

Escoamentos supersônicos são caracterizados pela forte compressibilidade do escoamento, o que dificulta a formação de estruturas turbilhonares grandes e reduz a intensidade turbulenta. Ao estudar escoamentos canônicos compressíveis como camada de mistura ou jatos, é muito utilizado o Número de Mach convectivo (M_c) para caracterizar o escoamento, sendo definido na eq. 1. Onde U_1 representa a velocidade do jato ou de uma das camadas da mistura, e U_2 representa a velocidade do escoamento complementar ou da outra camada. a_1 e a_2 representam a velocidade do som para o jato ou camada de mistura. Vreman, Sandham e Luo (1996) considerou estudos realizados para camada de mistura utilizando DNS e com o Número de Mach convectivo entre 0,2 e 1,2. Foi possível constatar que conforme o Número de Mach convectivo cresce a taxa de crescimentos das perturbações na pressão é reduzida. Em escoamentos reativos é preferível ter uma taxa de mistura elevada, o que ocorre em escoamentos com intensidade turbulenta mais elevada. Por outro lado, enquanto a compressibilidade do escoamento reduz a intensidade da turbulência desfavorecendo as reações químicas, a compressibilidade pode proporcionar temperatura e pressão mais elevada, que favorecem a reação química, (FREUND; LELE; MOIN, 2000), (O'BRIEN et al., 2014).

$$M_c = \frac{U_1 - U_2}{a_1 + a_2} \quad (1)$$

O efeito da liberação de calor devido as reações químicas em escoamentos supersônicos é similar ao efeito da compressibilidade, o que pode inibir a turbulência. Estudos utilizando DNS mostram que a taxa de crescimento da camada de mistura é menor para os casos reativos (CALHOON, 2003) (MAHLE et al., 2007). Ferrer, Lehnasch e Mura (2017) realizaram simulações tridimensionais utilizando DNS para 3 diferentes Números de Mach convectivos, indicando que para os menores valores do Número de Mach convectivo a temperatura na região de auto-ignição é mais elevada.

No caso dos scramjets, a presença da onda de choque na câmara de combustão pode acelerar a mistura entre os componentes químicos e promover a combustão (YANG; KUBOTA; ZUKOSKI, 1993) (RUBINS; BAUER, 1994). Isto ocorre devido a rápida compressão causada pela onda de choque, elevando a temperatura do gás após a onda de choque. No estudo da combustão induzida por ondas de choque predomina o foco em características como zonas de recirculação e eficiência da combustão (REN et al., 2019).

2.4 Condição de contorno não reflexiva

Em muitos casos, principalmente em escoamentos compressíveis, impor valores constantes ou a derivada nula para a velocidade e pressão nas fronteiras do escoamento resulta

em resultados não físicos. A condição de saída tradicional em escoamentos subsônicos, onde é utilizado a condição de contorno do tipo Dirichlet para pressão e Neumann para a velocidade resulta na reflexão de ondas acústicas na fronteira para escoamentos compressíveis. Para evitar estes fenômenos puramente numéricos é preciso utilizar Condição de contorno não reflexiva (NRBC) do inglês *Non-reflecting boundary conditions*. As NRBC devem antecipar o comportamento do escoamento nas fronteiras. As propriedades devem ser derivadas das informações no interior do domínio computacional e acopladas com aproximações de condições do escoamento fora do domínio (LODATO; DOMINGO; VERVISCH, 2008).

É comum encontrar códigos compressíveis utilizando regiões com estiramento de malha combinado com filtro de alta frequência para eliminar as perturbações de origem numéricas (COLONIUS; LELE; MOIN, 1993). Esta abordagem tem a desvantagem de precisar estender o domínio muito além da região de interesse, dificultando a simulação de escoamentos internos.

A necessidade de utilizar condições de contorno mais precisas e próximas da região de interesse motivou vários estudos e propostas para condições de contornos. Entre os trabalhos desenvolvidos, Hu (1996) adaptou a condição de contorno Perfect Matched Layer (PML), originalmente desenvolvida para as Equações de Maxwell, para as Equações de Euler. Neste método, as ondas acústicas são absorvidas em uma região próxima ao contorno do domínio, não refletindo para o interior do escoamento. Manco e Mendonça (2019) compararam 3 diferentes abordagens para condições de contorno não reflexivas, indicando que a condição de contorno NRBC apresenta uma boa robustez e um baixo custo computacional, enquanto que a PML apesar de muito efetiva tem um custo computacional elevado.

Outra abordagem muito utilizada em volumes finitos consiste em derivar condições de contorno com base nas Local One-Dimensional Inviscid Relations (LODI), resultando nas Condições de contorno características para as Equações de Navier-Stokes (NSCBC). Este método foi originalmente desenvolvido para as Equações de Euler e estendido para escoamentos viscosos. Esta abordagem decompõe o escoamento em ondas características que viajam na direção normal à fronteira, as condições de contorno são obtidas impondo valores para as ondas características, anulando as ondas que estão entrando no domínio (THOMPSON, 1990). Poinot e Lele (1992) propôs uma extensão do método considerando os termos viscosos na formulação das condições de contorno. O método foi aplicado para escoamentos subsônicos e supersônicos, indicando uma melhora significativa nos resultados obtidos.

Posteriormente o método foi estendido para escoamentos reativos incluindo o termo fonte referente às reações químicas (BAUM; POINSOT; THÉVENIN, 1995), (OKONG'O; BELLAN, 2002), (SUTHERLAND; KENNEDY, 2003). A inclusão deste termo preveniu oscilações não físicas no campo de pressão e velocidade, assim como evitou escoamento

reverso na saída do escoamento. As NSCBC geralmente assumem que a velocidade é normal à fronteira. Lodato, Domingo e Vervisch (2008) estenderam as condições de contorno incorporando os efeitos da convecção e do gradiente de pressão nas fronteiras. Testes realizados utilizando DNS e LES indicaram uma menor distorção do escoamento simulado quando comparado com o NRBC sem as modificações.

2.5 Malha adaptativa

O método da malha adaptativa reside na otimização do uso de recursos computacionais em simulações, aumentando a resolução da malha automaticamente em regiões de interesse e reduzindo-a em outras regiões. Por exemplo, é possível utilizar uma malha mais fina ao redor de uma chama obtendo mais detalhes de sua estrutura ou então em regiões com intensidade turbulenta elevada (BELL; DAY, 2011). Outra possibilidade é utilizar uma malha mais fina acompanhando uma onda de choque em escoamentos compressíveis, enquanto que nas demais regiões pode utilizar uma malha mais grossa. Diversos critérios de remalhagem podem ser utilizados, como por exemplo a presença de fronteiras imersas, o gradiente de vorticidade, temperatura, densidade ou concentração das espécies químicas. Deste modo a malha terá uma resolução maior nas regiões com maiores gradientes.

Em diversos estudos utilizaram-se malhas adaptativas para reduzir o custo computacional de simulações complexas. Becker, Braack e Rannacher (1999) adaptou um modelo de malha adaptativa para resolver escoamentos laminares reativos. Bell (2005) apresentou um algoritmo para escoamentos reativos utilizando uma abordagem para baixos Números de Mach e malha adaptativa. O acoplamento pressão velocidade foi realizado utilizando passos fracionados. Calegari et al. (2023) realizou simulações de chamas difusivas para casos laminares e turbulentos. As simulação foram realizadas utilizando malha adaptativa, modelando o código como baixo Número de Mach e modelo de fração de mistura.

Villar et al. (2007) propôs em sua tese um código utilizando malha adaptativa e multigrid para a simulação de escoamentos bifásicos. Este código foi aprimorado por (LIMA et al., 2012) para realizar processamento paralelo utilizando a biblioteca *Message Passing Interface* (MPI). Posteriormente o código foi renomeado para MFSim.

2.6 MFSim: simulador multifísica

O MFSim é um código desenvolvido no MFLab em parceria com a Petrobrás. O código é escrito predominantemente em FORTRAN e C. A paralelização é realizada utilizando o MPI, enquanto o balanço de carga é feito com Zoltan (BOMAN et al., 2012). Atualmente o MFSim permite a simulação de escoamentos turbulentos, (DAMASCENO; VEDOVOTO; SILVEIRA-NETO, 2015) (ELIAS et al., 2018), (PRETA et al., 2023), assim como escoamentos multifásicos (SOUZA et al., 2022), (PIVELLO et al., 2014), (BARBI et al., 2018).

O MFSim também foi utilizado para análise da corrosão em tubulações (MOTA et al., 2023).

Vedovoto (2011) implementou métodos para realizar simulações reativas utilizando uma abordagem para baixos Números de Mach. Neto et al. (2016) realizou simulações para uma tubulação submarina, onde foi implementada uma metodologia para iterações fluido estrutura no MFSim. Melo et al. (2017) desenvolveu condições de contorno térmicas para a fronteira imersa. Pinheiro et al. (2022) estudou aquecimento e a evaporação do querosene, assim como o processo de breack-up. Morales et al. (2023) utilizou o Método da fronteira imersa (IBM) com iteração fluido estrutura e o acoplamento pressão velocidade PISO compressível recém desenvolvido para resolver o escoamento em uma tubulação industrial.

Modelagem de Escoamentos Compressíveis

Neste capítulo são apresentadas as equações utilizadas para descrever o modelo físico a ser resolvido, com uma breve descrição das equações utilizadas. Também são apresentados os métodos numéricos utilizados para resolver as equações descritas.

3.1 Modelo Matemático Diferencial

A equação 2 representa o balanço de massa, onde ρ é a massa específica do fluido, t é o tempo e u é a velocidade. O índice i varia de 1 até 3 e denota as direções nas coordenadas cartesianas. O primeiro termo representa a variação da massa contida na partícula de fluido enquanto o segundo termo representa o fluxo líquido advectivo específico de massa. Para escoamentos incompressíveis e monocomponentes, a variação da densidade é nula.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2)$$

A equação do balanço da quantidade de movimento linear para fluido Newtoniano é utilizada conforme a equação 3, onde P é a pressão, μ é a viscosidade dinâmica e g_i é campo gravitacional.

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] + \rho g_i \quad (3)$$

A equação 4 modela o balanço da energia térmica. O primeiro termo representa a variação da energia térmica contida na partícula de fluido, o termo seguinte é referente ao fluxo líquido advectivo da energia térmica. O primeiro termo do lado direito da equação modela a difusão da energia térmica, o termo seguinte modela a transformação de energia cinética em energia térmica devido aos efeitos viscosos, este termo é detalhado na equação 5. Os termos seguintes modelam o aquecimento ou resfriamento do fluido devido à compressão ou expansão das partículas de fluido (SILVEIRA-NETO, 2020). Por fim, o

termo w_i representa a quantidade de energia química transformada em energia térmica pelo processo de combustão. Nestas equações K é a condutividade termica do fluido, C_p é a condutividade termica a pressão constante e D_k é a difusividade da espécie química k no fluido.

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} + \frac{\partial u_i \rho c_p T}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \Phi + \frac{\partial P}{\partial t} + u_i \frac{\partial P}{\partial x_i} - w_i \quad (4)$$

$$\Phi = \mu \left[\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 \right] \quad (5)$$

As frações mássicas são obtidas resolvendo as equações para a balanço das espécies químicas (equação 6). Ao todo é necessário resolver $n - 1$ equações, onde n é o número de espécies químicas presentes enquanto a concentração da espécie química (Y_n) que não será resolvida é obtida pela equação 7.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right] + \dot{\omega}_k \quad (6)$$

$$Y_n = 1 - \sum_{k=1}^{n-1} Y_k \quad (7)$$

O termo ω_i , definido na equação 8, representa a conversão de energia potencial química em energia térmica devida as reações químicas. Nesta equação, h_k^0 é a entalpia de formação da espécie química k .

$$w_i = \sum_{k=1}^{ns} \dot{\omega}_k h_k^0 \quad (8)$$

Além das equações apresentadas anteriormente é utilizada a equação 9 que é a equação do estado do gás ideal. Esta equação é utilizada para obter a massa específica em função da pressão, temperatura, constante específica dos gases e composição química da mistura, onde W_k representa a massa molar da espécie química k .

$$P = \rho R T \sum_{k=1}^n \frac{Y_k}{W_k} \quad (9)$$

Em escoamentos compressíveis ou reativos, podem ocorrer grandes gradientes de temperatura, que por sua vez alteram as propriedades termodinâmicas do fluido como o calor específico, a condutividade térmica e a viscosidade do fluido. Além disto, no caso de escoamentos multicomponentes, ocorre a variação das propriedades termodinâmicas conforme a mistura das espécies químicas. As variação destas propriedades termodinâmicas ao longo do domínio de interesse são consideradas e a pressão, temperatura e composição do fluido são utilizadas para calcular as propriedades utilizando a biblioteca *Cantera* (GOODWIN et al., 2023).

3.2 Método Numérico

No código utiliza-se o método dos volumes finitos sendo a pressão uma das variáveis primitivas. São utilizadas malhas bloco estruturadas descentralizadas com refinamento adaptativo. Diferentes esquemas de discretização espacial e temporais foram testados e seus resultados apresentados no capítulo 4. O modelo numérico é obtido sem desconsiderar os efeitos da compressibilidade no escoamento.

3.2.1 Acoplamento Pressão Velocidade

O acoplamento pressão velocidade é feito através de algoritmos baseados na família SIMPLE. A seguir é apresentada a dedução do SIMPLE para escoamentos compressíveis. A pressão, velocidade e densidade podem ser decompostas em duas parcelas de acordo com a linearização proposta por (PATANKAR, 1971) e (HARLOW; AMSDEN, 1971), apresentadas nas equações 10, 11 e 12. As variáveis u'_i , P' e ρ' são as correções da velocidade, pressão e massa específica respectivamente. O superscrito $*$ representa a estimativa inicial da variável e ΔX_i é o comprimento do volume na direção i .

$$P = P^* + P' \quad (10)$$

$$u_i = u_i^* + u'_i = u_i^* - \frac{1}{Ap_i} \left(\frac{\Delta P'}{\Delta X_i} \right) \quad (11)$$

$$\rho = \rho^* + \rho' = \rho^* + \frac{P'}{RT} \quad (12)$$

Na equação 11, Ap_i é um coeficiente resultante da discretização da equação 3. Substituindo as equações 11 e 12 na equação 2 é possível obter a equação semi-discretizada abaixo:

$$\frac{(\rho^* + \rho' - \rho^0)}{\Delta t} + \frac{\partial(u_i^* + u'_i)(\rho^* + \rho')}{\partial x_i} = 0. \quad (13)$$

O termo que contém $u'\rho'$ pode ser desprezado por ser resultado da multiplicação de duas correções, resultando em um valor muito inferior em relação ao restante dos termos. ρ^0 é a densidade calculada no passo de tempo anterior. A equação do estado 9 é utilizada para reescrever a equação anterior em função da correção da pressão. A correção da velocidade também é substituída pela definição anterior resultando na equação 14.

$$\frac{\partial(\rho^* + \frac{P'}{RT} - \rho^0)}{\Delta t} + \frac{\partial u_i^* (\rho^* + \frac{P'}{RT})}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-\frac{\rho^*}{Ap_i} \frac{\partial P'}{\partial x_i} \right) = 0 \quad (14)$$

Reorganizando os termos obtemos a equação 15.

$$\frac{\partial \frac{P'}{RT}}{\Delta t} + \frac{\partial u_i^* \frac{P'}{RT}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-\frac{\rho^*}{Ap_i} \frac{\partial P'}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial(\rho^0 - \rho^*)}{\Delta t} - \frac{\partial u_i^* (\rho^*)}{\partial x_i} \quad (15)$$

Note que os termos presentes do lado direito da equação 15 são equivalentes ao fluxo mássico na célula computacional. As variáveis primitivas são as componentes da velocidade, a correção da pressão (P'), a temperatura e as concentrações de cada espécie química. A massa específica é obtida utilizando a equação 9 para os casos monocomponente ou através da biblioteca Cantera nos casos com múltiplas espécies químicas.

O algoritmo SIMPLE compressível para escoamentos reativos é apresentado a seguir.

1. Defina as condições iniciais para os campos de P , u_i , ρ , T e Y_k ;
2. Resolva a equação 4, obtendo o campo de temperatura;
3. ρ é atualizado utilizando o Cantera, assim como k , μ , γ entre outras propriedades do escoamento;
4. A equação 3 é resolvida obtendo u_i^* ;
5. A correção da pressão é obtida pela equação 15;
6. O campo de velocidade, pressão e densidade atualizados utilizando as equações 11, 10 e 12;
7. A solução é definida como condição inicial e as etapas 2 até 8 são repetidas até a convergência ou atingir o número máximo de iterações definido para o loop do SIMPLE;
8. O campo de concentrações é calculado com a equação 6;
9. É avançado um passo no tempo retornando para a etapa 2 até alcançar o tempo final da simulação.

Outros algoritmos da família SIMPLE podem ser utilizados para o acoplamento pressão velocidade, como o algoritmo SIMPLEC, PISO ou PRIME (QIN et al., 2021), (MOKALLED; DARWISH, 2001). O Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations Consistent (SIMPLEC) é muito semelhante ao SIMPLE, porém com uma modificação na correção da pressão evitando variações bruscas no campo de velocidade, permitindo coeficientes de sub-relaxação maiores para a pressão. Outra possibilidade consiste em resolver as Equações de Navier-Stokes de forma explícita, resultando em um algoritmo chamado Pressure Implicit, Momentum Explicit (PRIME) .

O algoritmo PISO é bastante utilizado em códigos voltados para escoamentos reativos. Este algoritmo consiste em utilizar um loop SIMPLE e uma ou mais etapas de correção explícita. A equação utilizada para a segunda correção da pressão (P^{**}) presente no PISO pode ser obtida a partir da equação do balanço de massa substituindo as equações 16, 17

e 18 obtendo a equação 19, onde c_p representa o calor específica a pressão constante do fluido. As variáveis referentes a segunda correção são descritas com o superscrito **.

$$\rho^{**} = \rho^* + \rho' = \rho^* + \frac{P'}{RT} = \rho^* + C_P P' \quad (16)$$

$$u_i^{**} = u_i^* + u'_i = u_i^* + \frac{(P')}{Ap_i} \quad (17)$$

$$P^{**} = P^* + P' \quad (18)$$

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} ((\rho^* + \rho')(u_i^* + u'_i)) = 0 \quad (19)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho^* u_i^* + \rho^* u'_i + \rho' u_i^* + \rho' u'_i) = 0 \quad (20)$$

Analogamente ao que foi assumido para obter a equação 15, a multiplicação da correção da densidade com a correção da velocidade ($\rho' u'_i$) resulta em um valor muito menor que os termos restantes da equação 20, portanto pode ser desprezado. Reescrevendo a equação 20 e substituindo $p' = C_p P'$ obtemos a equação abaixo,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho^* u_i^* + \rho^* D(P') + C_P P' u_i^*) = 0. \quad (21)$$

Segunda correção da velocidade pode ser feita de forma explicita pela equação:

$$u_i^{***} = u_i^{**} + \sum A(u_i^{**} - u_i^*)/A + D(P'') \quad (22)$$

$$\frac{\partial \rho^{***}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} ((\rho^{**} + \rho'')(u_i^{**} + \sum A(u_i^{**} - u_i^*)/A + u_i'')) = 0. \quad (23)$$

$$\frac{\partial \rho^{***}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho^{**} u_i^{**} + \rho^{**} \sum \frac{A_n(u_i^{**} - u_i^*)}{A_p} + \rho^{**} u_i'' + \rho'' u_i^{**} + \rho'' \sum \frac{A_n(u_i^{**} - u_i^*)}{A_p} \right) = 0 \quad (24)$$

Os termos $\rho'' u_i''$ e $\rho'' \sum A(u_i^{**} - u_i^*)/A$ são desprezados, resultando na segunda equação da correção da pressão para o algoritmo PISO, apresentada na equação 25:

$$\frac{\partial \rho^{***}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho^{**} u_i^{**} + \rho^{**} \sum A(u_i^{**} - u_i^*)/A + \rho^{**} D(P'') + C_P P'' u_i^{**}) = 0 \quad (25)$$

P'' pode ser obtido pela seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (+\rho^{**} D(P'') + C_P P'' u_i^{**}) = -\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho^{**} u_i^{**} + \rho^{**} \sum A(u_i^{**} - u_i^*)/A) - \frac{\partial \rho^{***}}{\partial t} \quad (26)$$

Outras correções podem ser realizadas utilizando as equações deduzidas acima. Devido as correções adicionais para pressão, velocidade e densidade o PISO apresenta um custo computacional por iteração maior que o SIMPLE e SIMPLEC. No entanto em casos complexos, como em escoamentos reativos, o PISO pode resultar em um tempo computacional menor em comparação ao SIMPLE pois necessita de uma quantidade menor de iterações para convergir.

A Figura 2 apresenta o fluxograma do código utilizado. Este mesmo algoritmo apresentado é utilizado para os acoplamentos de pressão e velocidade SIMPLE, SIMPLEC e PISO, sendo que o PISO apresenta um segundo loop interno referente ao número de correções utilizadas.

O MFSim contem os esquemas implícitos de Euler, e Semi-Implicit Backward Differentiation Formula (SBDF) para integração temporal. O passo de tempo (Δt) é calculado a cada iteração de acordo com o critério de Estabilidade condicional de Courant–Friedrichs–Lewy (CFL):

$$\Delta t = CFL \min \left(\sum \frac{\Delta x_i}{u_i}, \Delta x_i \right) \quad (27)$$

Em casos transônicos ou supersônicos é interessante adicionar a velocidade do som (c) na velocidade do escoamento, resultando na equação 28. Desta forma é possível garantir a estabilidade em escoamentos compressíveis.

$$\Delta t = CFL \min \left(\sum \frac{\Delta x_i}{|u_i| + c}, \Delta x_i \right) \quad (28)$$

3.2.2 Esquemas Numéricos Para a Modelagem dos Termos Advectivos

Alguns esquemas tradicionais como Diferenças finitas centrais (CDS), do inglês *Central Difference Scheme* e Upwind de primeira ordem (FOU), do inglês *First Order Upwind*, costumam apresentar uma difusão numérica elevada, apesar de serem estáveis. Esquemas de ordem superiores podem apresentar oscilações numéricas, especialmente próximos a grandes gradientes. Diferentes esquemas para modelar os termos advectivos são apresentados a seguir. As equações a seguir utilizam a nomenclatura I para indicar propriedades referentes ao volume vizinho e P para indicar as propriedades referentes ao centro do volume de controle.

O FOU considera a velocidade na face igual a velocidade na direção do escoamento, podendo esta ser a mesma velocidade do volume vizinho (I) ou do volumes central (P). Desta forma a interpolação da propriedade ϕ na face i é realizada pela equação

$$\phi_i = \max(\rho u_i, 0) \phi_P + \min(\rho u_i, 0) \phi_I. \quad (29)$$

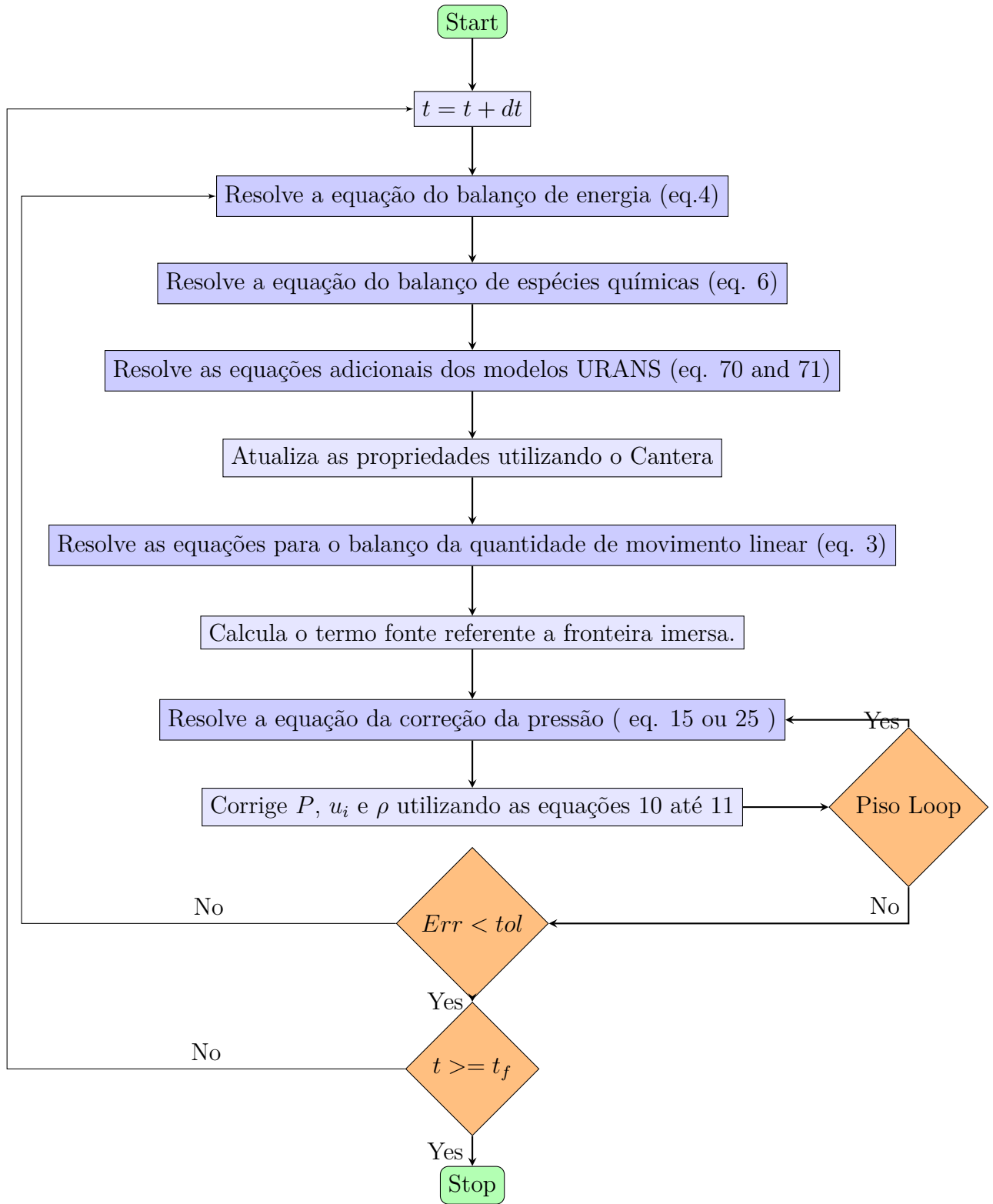


Figura 2 – Fluxograma do algoritmo PISO/SIMPLE compressível.

Este esquema de discretização é dito delimitado pois apresenta todos os coeficientes positivos quando o escoamento satisfaz a equação da continuidade (DAMASCENO et al., 2018). Este esquema, apesar de muito estável apresenta uma grande difusão numérica.

O CDS define a velocidade na face como uma média das velocidades nos volumes P e I, conforme a equação 30. Apesar de apresentar pouca difusão numérica este esquema costuma apresentar grandes oscilações na presença de gradientes elevados.

$$\phi_f = \frac{\phi_I + \phi_P}{2} \quad (30)$$

A precisão numérica do FOU pode ser melhorada resultando no Upwind de segunda ordem (SOU). O SOU também apresenta difusão numérica, apesar de ser menor que o FOU. A discretização do termo advectivo pelo SOU é dada por:

$$\phi_f = \frac{3}{2}\phi_P - \frac{1}{2}\phi_F. \quad (31)$$

Variação total diminuída (TVD) é uma propriedade de esquemas advectivos, onde o fluxo entre os volumes é limitado. Os esquemas TVD são muito utilizados em escoamentos com a presença de ondas de choque pois costumam apresentar uma baixa oscilação na presença de grandes gradientes, permitindo o uso de malhas mais grossas reduzindo o custo computacional.

Os esquemas apresentados anteriormente podem ser implementados por meio da equação 32, onde ϕ_f é a variável a ser calculada na face f , enquanto ϕ_P representa o valor no centro do volume e ϕ_F no volume vizinho. $\Psi(r)$ é a função delimitadora de fluxo. Cada esquema de discretização utiliza uma função delimitadora diferente. O primeiro termo do lado direito da equação 32 pode ser interpretado como um esquema upwind enquanto o termo seguinte $(\frac{1}{2}\Psi(r)(\phi_F - \phi_P))$ a um fluxo anti-difusivo. Este termo preserva a precisão de segunda ordem sem criar oscilações não físicas (MOUKALLED et al., 2016).

$$\phi_f = \phi_P + \frac{1}{2}\Psi(r)(\phi_F - \phi_P) \quad (32)$$

Para o upwind de primeira ordem $\Psi(r) = 0$, enquanto que para o upwind de segunda ordem $\Psi(r) = r$. A discretização CDS pode ser obtida utilizando $\Psi(r) = 1$ e a Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics (QUICK) com $\Psi(r) = \frac{3+r}{4}$. Os esquemas TVD utilizam uma função limitadora de fluxo, resultando em esquemas delimitados. Esquemas baseados no TVD costumam apresentar um bom comportamento próximos a grandes gradientes. Para um esquema ser considerado TVD $\Psi(r)$ deve atender os seguintes critérios (SWEBY, 1984):

□ Para $0 < r < 1$, $\Psi(r) \leq 2r$;

□ Para $r \geq 1$, $\Psi(r) \leq 2$.

Esquema	$\Psi(r)$
MinMod	$r = \Psi(r) = \max[0, \min(1, r)]$
QUICK	$\Psi(r) = \max[0, \min(2r, (3+r)/4, 2)]$
SUPERBEE	$\Psi(r) = \max[0, \min(2r, 1), \min(r, 2)]$
UMIST	$\Psi(r) = \max[0, \min(2r, (1+3r)/4, (3+r)/4, 2)]$

Tabela 1 – Funções limitadoras de fluxo.

Dos esquemas apresentados anteriormente apenas o upwind de primeira ordem atende aos critérios para ser considerado TVD. Ao aplicar diferentes funções limitadoras ($\Psi(r)$) que satisfaçam as condições anteriores na equação 32 é possível obter diferentes esquemas TVD. Os esquemas TVD mais comuns são apresentados na tabela 1. No caso do QUICK, eu posso obter um esquema TVD QUICK utilizando a função limitadora apresentada na tabela.

3.2.3 Condição de contorno não reflexiva

Em muitos casos, especialmente nos casos com a presença de ondas de choque próximas a saída do domínio, pode ocorrer a reflexão de ondas acústicas para o interior do domínio. Essas ondas refletidas afetam o escoamento no interior do domínio e são de origem numérica devido as condições de contorno impostas, não tendo relação física com o problema estudado. Para inibir a reflexão das ondas é possível utilizar a Condição de contorno não reflexiva (NRBC), baseada na condição de contorno advectiva conhecida como *wave transmissive*. A condição de contorno NRBC é uma condição de contorno artificial que costuma ser simples e eficaz, inclusive quando ocorre a presença de ondas de choque próximo a saída do domínio (COLONIUS, 2004).

A Condição de contorno não reflexiva (NRBC) é formulada a partir das Local One-Dimensional Inviscid Relations. As equações LODI permitem encontrar um conjunto de ondas saindo do domínio e uma única onda entrando no domínio. As amplitudes das ondas são denotadas por $\mathcal{L}$. Para que não haja reflexão para o interior do domínio, a amplitude da onda que está entrando no domínio deve ser nula. As relações resultantes são apresentadas nas equações abaixo em função das variáveis primitivas.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{a^2} \left[\mathcal{L}_2 + \frac{1}{2}(\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) \right] = 0 \quad (33)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{1}{2}(\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) = 0 \quad (34)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2\rho a}(\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}_1) = 0 \quad (35)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \mathcal{L}_3 = 0 \quad (36)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \mathcal{L}_4 = 0 \quad (37)$$

As equações podem ser escritas em termos dos gradientes normais à fronteira do domínio conforme as equações a seguir:

$$\frac{\partial \rho}{\partial x} = \frac{1}{a^2} \left[\frac{\mathcal{L}_2}{u} + \frac{1}{2} \left(\frac{\mathcal{L}_5}{u+a} + \frac{\mathcal{L}_1}{u-a} \right) \right] \quad (38)$$

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{1}{2} \left[\frac{\mathcal{L}_5}{u+a} + \frac{\mathcal{L}_1}{u-a} \right] \quad (39)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{2\rho a} \left[\frac{\mathcal{L}_5}{u+a} - \frac{\mathcal{L}_1}{u-a} \right] \quad (40)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T}{\rho a^2} \left[-\frac{\mathcal{L}_2}{u} + \frac{1}{2}(\gamma - 1) \left(\frac{\mathcal{L}_5}{u+a} + \frac{\mathcal{L}_1}{u-a} \right) \right] \quad (41)$$

Nas equações anteriores, a velocidade do som é representada por a . As condições de contorno podem ser obtidas calculando os valores de $\mathcal{L}$, utilizando as informações no interior do domínio ou estimando valores para $\mathcal{L}$. No caso da condição de contorno não reflexiva temos que $\mathcal{L}_1 = 0$. Substituindo $\mathcal{L}_1$ nas equações 34 e 35 obtemos as equações 42 e 43.

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{1}{2}(L_5) = 0 \quad (42)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2\rho a}(L_5) = 0 \quad (43)$$

Combinando as equações 42 e 43 com as equações 39 e 40 obtemos as seguintes condições de contorno para a pressão e velocidade:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + (u_1 + a) \frac{\partial P}{\partial x} = 0 \quad (44)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (u_1 + a) \frac{\partial u_1}{\partial x} = 0 \quad (45)$$

Usar condições de contorno perfeitamente reflexivas podem levar a problemas mal postos podendo levar a variações não físicas na pressão ao longo da fronteira do domínio. (RUDY; STRIKWERDA, 1980) e (POINSOT; LELE, 1992). Como exemplo um fluxo mássico é imposto na entrada e na saída uma condição de contorno perfeitamente não reflexiva. Desta forma não existem maneiras de determinar a pressão e como resultado, a pressão se afastará do valor previamente estipulado. Uma possibilidade para evitar este problema é adicionar a informação da pressão estática na condição de contorno parcialmente não-reflexiva, definida nas equações 46 e 47 (RUDY; STRIKWERDA, 1981). Isto é equivalente a imaginar uma saída a uma certa distância de uma região com pressão

P_∞ , resultando nas equações abaixo. Para a condição de contorno parcialmente não-reflexiva, K é um coeficiente entre 0 e 1, normalmente definido como 0,25. Resultando em uma condição de contorno parcialmente não reflexiva sem grandes variações na pressão imposta.

$$L_1 = K(p - p_\infty) \quad (46)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} + (u_1 + a) \frac{\partial P}{\partial x} + K(P - P_\infty) = 0 \quad (47)$$

3.2.4 Fronteira Imersa

O método da fronteira imersa, do inglês, *Immersed Boundary Method* IBM possibilita realizar simulações com escoamentos externos ou internos em diversas geometrias. O método IBM utiliza duas ou mais malhas em conjunto, sendo uma malha cartesiana utilizada para representar o fluido, denominado de lagrangiana e uma ou mais malhas para representar estruturas sólidas no interior do domínio computacional definido pela malha euleriana. As estruturas representadas no interior do domínio pelas malhas eulerianas podem se mover ou deformar ao longo da simulação. Desta forma é possível realizar a simulação de escoamentos com geometrias complexas utilizando uma malha cartesiana. Outra vantagem da Fronteira imersa é a possibilidade de mover a geometria sem a necessidade de refazer a malha lagrangeana.

A metodologia utilizada é a forçagem direta, do inglês *Direct-forcing*, onde são impostas forças no domínio lagrangeano de acordo com a presença da fronteira imersa, definindo a sua interface (WANG; FAN; LUO, 2008). Uma descrição mais detalhada do método pode ser encontrada em Vedovoto, Serfaty e Neto (2015) e Melo et al. (2017). O termo de força F_i da balanço da quantidade de movimento linear é apresentado na equação 48.

$$F_i(\vec{X}, t) = \frac{\alpha_2 U_i^{t+\Delta t} - \alpha_1 U_i^t + \alpha_0 U_i^{t-\Delta t}}{\Delta t} + RHS, \quad (48)$$

onde

$$RHS = \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (49)$$

e α_0 , α_1 e α_2 são os coeficientes da discretização temporal.

A equação 48 é resolvida em duas partes, equação 50 e 51, onde $U_i^{t-\Delta t}$ é a velocidade desejada na fronteira, As equações são resolvidas de forma iterativa, sendo necessário algumas iterações para atingir a tolerância desejada.

$$\frac{U_i^* - \alpha_1 U_i^t + \alpha_0 U_i^{t-\Delta t}}{\Delta t} + RHS = 0 \quad (50)$$

$$F_i(\vec{X}, t) = \frac{\alpha_2 U_i^{t+\Delta t} - U_i^*}{\Delta t} \quad (51)$$

A velocidade Lagrangeana (U^*) é obtida interpolando as componentes da velocidade u_i^* nas células eulerianas próximas de cada ponto lagrangiano utilizando a equação 52, onde D_h é uma função de interpolação, u^* é a velocidade na face do volume euleriano e h^3 é o volume lagrangiano.

$$U_i^* = \sum_{\omega} u_i^* D_h(x_i - x_k) h^3 \quad (52)$$

A fronteira imersa para a equação da energia foi estudada por Melo et al. (2017), no qual foram implementadas as condições de contorno Dirichlet, Neumann e Robin no MFSim para energia e demais escalares. Neste trabalho são utilizadas as duas primeiras condições de contorno.

Para a condição de contorno de Dirichlet na fronteira imersa para energia adota-se uma abordagem similar a apresentada para a equação da quantidade de movimento linear. Primeiro é calculado a temperatura na célula lagrangiana (T_L^*) através da equação 53. Em seguida a força no ponto lagrangiano (F_t) é calculada pela equação 54.

$$T_L^* = \sum_{\omega} T^* D_h(x_I - x_k) h^3 \quad (53)$$

$$F_t(\vec{X}, t) = \rho C_p \frac{\alpha_2 T^{t+\Delta t} - T_L^*}{\Delta t} \quad (54)$$

Para a condição de contorno de Neumann, F_T é calculado utilizando a equação 55, onde q_n é fluxo imposto na fronteira e $-k \frac{\partial T^*}{\partial n}$ é o fluxo normal a fronteira.

$$F_t(\vec{X}, t) = \left(q_n - \left(-k \frac{\partial T^*}{\partial n} \right) \right) \quad (55)$$

Os demais escalares transportados, como por exemplo as frações mássicas das espécies químicas, são modelados de forma análoga a energia.

3.2.5 Pseudo transiente

Em algumas situações, o regime transiente não é de interesse, sendo necessário obter apenas o regime estacionário. Sendo assim é possível utilizar um método pseudo transiente para avançar no tempo de forma mais rápida do que resolvendo todo o regime transiente. Desta forma informações obtidas durante o regime transiente são perdidas.

Uma possível abordagem é substituir o tempo físico por um pseudo tempo, conforme a equação 56, onde τ é o pseudo tempo e θ_τ é um coeficiente que não está relacionado com os fenômenos físicos a serem resolvidos. Neste trabalho foi adotado $\theta_\tau = \theta/\alpha$, onde α é um coeficiente de sub-relaxação. A equação 56, é uma equação de balanço genérica, onde ϕ é alguma propriedade transportada, D é o coeficiente de difusão e S é o termo fonte.

$$\frac{\partial \theta_\tau}{\partial \tau} = \frac{\partial \theta}{\partial \alpha t} = -\frac{\partial \rho u_i \phi}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} D \frac{\partial \rho \phi}{\partial x_i} + S \quad (56)$$

Outra abordagem consiste em utilizar subrelaxação implícita nas equações a serem resolvidas. Neste método as equações para o regime transiente são discretizadas e a diagonal principal do sistema de equações resultante (A_p), assim como o RHS são modificados garantindo que a diagonal principal do sistema linear a ser resolvido se mantenha com valores mais elevados, consequentemente resultando em um sistema mais estável.

Seja a equação 57 um sistema linear a ser resolvido, onde x pode ser qualquer propriedade transportada, como velocidade, energia ou concentração das espécies químicas. É possível aumentar os valores da diagonal principal, mantendo a igualdade do sistema linear em ambos os lados conforme a equação 58, onde I é a matriz identidade e α é um coeficiente de subrelaxação implícita. Desta forma é possível utilizar passos de tempo mais elevados garantindo a estabilidade do sistema linear reduzindo a precisão no regime transiente.

$$Ax = RHS \quad (57)$$

$$Ax + \alpha I Ax = RHS + \alpha I Ax^{n-1} \quad (58)$$

3.2.6 Modelagem da Turbulência

Em muitos casos, uma simulação direta de escoamentos turbulentos é inviável devido ao elevado custo computacional, pois é preciso uma malha muito fina para modelar bem as pequenas estruturas turbilhonares, assim como passos de tempo pequenos. Uma solução adotada para reduzir significativamente o custo computacional para a realização de simulações mais complexas mantendo a fidelidade com a física envolvida é utilizar as equações de Navier-Stokes filtradas. Desta forma, é preciso modelar as menores frequências as estruturas turbilhonares. Ao aplicar a Filtragem de Frave nas equações 2,3, 4 e 6 são obtidas as equações 59, 60, 61 e 64 (SILVEIRA-NETO, 2020). Nas equações seguintes, o sobrescrito $(\bar{\cdot})$ representa as variáveis filtradas.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (59)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\tilde{\mu} + \mu_t) \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \right] + \rho g + f_i \quad (60)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}_p T}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}_p \tilde{u}_i \tilde{T}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(k + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}_p \tilde{T}}{\partial x_i} \right] + \Phi + \frac{\partial \bar{P}}{\partial t} + u_i \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} \quad (61)$$

$$\Phi = 2\mu \left(S_{ij}S_{ij} - \frac{1}{3}S_{kk}^2 \right) \quad (62)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (63)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k}{\partial x_i} = \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \left[\left(\bar{\rho} D_k + \frac{\mu_t}{St_t} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right] + \dot{\omega}_k \quad (64)$$

Nas equações acima é introduzido o conceito de viscosidade efetiva (μ_e), onde $\mu_e = \mu + \mu_t$, sendo μ_t a viscosidade turbulenta. Desta forma os efeitos das menores estruturas turbilhonares são introduzidos no modelo matemático através da viscosidade turbulenta.

3.2.6.1 LES Utilizando o Modelo Sub-malha de Smagorinsky

No modelo sub-malha de Smagorinsky, a viscosidade turbulenta é obtida com a equação 65 (SMAGORINSKY, 1963), onde C_s é a Constante de Smagorinsky, Δ_m é o comprimento característico do volume da malha computacional. A Constante de Smagorinsky possui valores típicos entre 0,1 < C_s < 0,2 e S_{ij} é o tensor taxa de deformação.

$$\mu_t = C_s \Delta_m^2 \sqrt{2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}} \quad (65)$$

3.2.6.2 LES Utilizando o Modelo Sub-malha de Vreman

O modelo sub-malha de Vreman é formulado com o objetivo de ter uma baixa dissipação da quantidade de movimento linear (VREMAN, 2004). Este modelo costuma apresentar bons resultados em escoamentos rotativos e boa predição da viscosidade turbulenta em regiões próximas a parede. No modelo sub-malha de Vreman, a viscosidade turbulenta é obtida com a equação 66, onde α corresponde as derivadas da velocidade filtrada.

$$\mu_t = \rho C_v \sqrt{\frac{B_{\bar{\beta}}}{\bar{\alpha}_{ij} \bar{\alpha}_{ij}}} \quad (66)$$

O coeficiente C_v é derivado a partir da Constante de Smagorinsky pela relação $C_v = 2.5 C_s^2$. $\bar{\alpha}_{ij}$ e $B_{\bar{\beta}}$ são definidos pelas equações 67 e 68 respectivamente, onde $\bar{\beta}_{ij}$ é obtido pela equação 69.

$$\bar{\alpha}_{ij} = \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \quad (67)$$

$$B_{\bar{\beta}} = \bar{\beta}_{11} \bar{\beta}_{22} + \bar{\beta}_{22} \bar{\beta}_{33} + \bar{\beta}_{33} \bar{\beta}_{11} - \bar{\beta}_{12}^2 - \bar{\beta}_{23}^2 - \bar{\beta}_{31}^2 \quad (68)$$

$$\bar{\beta}_{ij} = \Delta_m^2 \bar{\alpha}_{ki} \bar{\alpha}_{kj} \quad (69)$$

3.2.6.3 k-epsilon Realizável

O k- ϵ realizável é um modelo URANS de duas equações, o que significa que é necessário resolver duas equações de balanço extras, sendo uma para energia cinética turbulenta específica (k) e outra para a potência específica de transformação viscosa (ϵ). A equação do balanço da energia cinética turbulenta é apresentado na equação 70, enquanto a equação 71 representa de ϵ (SHIH et al., 1995).

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho k u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + 2S_{ij}S_{ij}\mu_t - \rho\epsilon \quad (70)$$

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial \rho \epsilon u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{1,2} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right] + \rho \epsilon C_1 \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} - \rho C_2 \frac{\epsilon^2}{k + \sqrt{\nu \epsilon}} \quad (71)$$

Diferente do LES, a viscosidade turbulenta para os modelos URANS não é avaliada em função da malha. A viscosidade turbulenta é calculada utilizando a equação 72, sendo que as constantes C_μ , C_1 e C_2 são definidas nas equações 73 até 76.

$$\nu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (72)$$

$$C_\mu = \left(A_0 + A_s \frac{k \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \tilde{\Omega}_{ij}\tilde{\Omega}_{ij}}}{\epsilon} \right)^{-1} \quad (73)$$

$$C_1 = \max \left[0, 43; \frac{\eta}{\eta + 5} \right] \quad (74)$$

$$\eta = \frac{k}{\epsilon} \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (75)$$

$$C_2 = 1,9 \quad (76)$$

3.2.7 Escoamentos reativos

A solução de escoamentos reativos pode ser obtida resolvendo a equação do balanço de espécies químicas (equação 6). O termo fonte ($\dot{\omega}_k$) presente na equação representa a taxa de produção ou consumo da espécie k devido as reações químicas.

Para um reação bimolecular é possível estimar o coeficiente de taxa de reação, K_f , de forma empírica, utilizando a lei de Arrhenius descrita na equação 77. A_f é a constante pré-exponencial da reação química, T é a temperatura e β é o coeficiente exponencial da temperatura. Por fim, R é a constante universal dos gases e E_a representa a energia de ativação (TURNS, 2013).

$$K_f = A_f T^\beta \exp - \frac{E_a}{RT}, \quad (77)$$

Para múltiplas reações químicas é possível descrever conforme a equação 78 as reações químicas para N espécies químicas e M reações. ν'_{kj} e ν''_{kj} representam os coeficientes estequiométricos da espécie k na reação j . A fração molar, $[x_k]$, é descrita na equação 79 onde W_k é a massa molar da espécie química k .

$$\sum_{kj}^N \nu'_{kj} [X_k] \rightleftharpoons \sum_{kj}^N \nu''_{kj} [X_k], \text{ para } j = 1, M \quad (78)$$

$$[X_k] = \frac{\rho Y_k}{W_k} \quad (79)$$

Por fim a $\dot{\omega}_k$ é obtido pela equação 80, onde q_j é descrito na equação 81. Nesta equação ν_{ki} representa os coeficientes estequiométricos da espécie k na reação i .

$$\dot{\omega}_k = \sum_{i=1}^l \nu_{ki} q_i \quad (80)$$

$$q_j = k_{fi} \prod_{k=1}^N [x_k]^{\nu'_{kj}} - k_{ri} \prod_{k=1}^N [x_k]^{\nu''_{kj}} \quad (81)$$

Em mecanismos detalhados, algumas espécies químicas apresentam um tempo característico muito inferior ao tempo fluidodinâmico. Com o objetivos de permitir passos de tempo maiores que o tempo característico das reações químicas é utilizada a segregação de operadores. Desta forma às equações 4 e 6 são divididas em duas parcelas referentes ao transporte e as reações químicas, de acordo com a equação 82. Nesta equação, ϕ é a propriedade calculada (Y_k ou T) e $\mathbf{R}$ representa os termos referentes as reações químicas e $\mathbf{T}$ representa os termos referentes ao transporte, incluindo difusão a advecção (ZHOU; ZHANG; YANG, 2022).

A segregação de operadores de primeira ordem é obtida separando a equação 6 em duas partes, $\mathbf{T}$ e $\mathbf{R}$. Onde $\mathbf{T}$ representa os termos relacionados ao transporte da espécie química k e $\mathbf{R}$ os termos relacionados as reações química, sendo $\mathbf{R} = \dot{\omega}$:

$$\frac{d\phi}{dt} = \mathbf{T} + \mathbf{R}. \quad (82)$$

A equação 82 é resolvida em dois passos. Primeiro é integrado $\mathbf{R}$ de t até $t + \Delta t$.

$$\frac{\phi^n - \phi^*}{\Delta T} = \mathbf{R} \quad (83)$$

Em seguida ϕ^{n+1} é obtido resolvendo a equação 84.

$$\frac{d\phi}{dt} = T + \frac{\phi^* + \phi^n}{\Delta t} \quad (84)$$

Esta segregação de operadores possui uma precisão de primeira ordem. No presente trabalho, a integração das taxas de reações das espécies químicas é realizado utilizando o CVODE (HINDMARSH et al., 2005). O CVODE é um solucionador de equações

diferenciais ordinárias desenvolvido pela Sundials e está presente na biblioteca *Cantera*. Nesta etapa é possível subdividir o intervalo de tempo Δt em vários intervalos menores para realizar a integração, neste caso, $\dot{\omega}$ pode ser estimado pela equação 85.

$$\dot{\omega} = \frac{\phi * + \phi^n}{\Delta t} \quad (85)$$

3.2.8 Combustão turbulenta

A interação entre o processo de combustão e a turbulência eleva significativamente a dificuldade de resolver as equações diretamente. A necessidade de obter resultados precisos e rápidos levou ao desenvolvimento de diversos modelos de combustão turbulenta, como exemplo o EBC, abordado nesta tese.

O Número de Damköhler (Da) é um número adimensional que relaciona o tempo característico do escoamento (τ_f) com o tempo característico das reações químicas (τ_c), equação 86. Para $Da = 1$, o tempo característico das reações químicas é igual o tempo característico do escoamento. Caso $Da \ll 1$, as reações químicas acontecem lentamente quando comparadas ao tempo característico do escoamento, indicando que o fluido pode deixar o domínio de controle sem completar a reação química. Em casos com $Da \gg 1$ as reações químicas são significativamente mais rápidas que o tempo característico do escoamento. Alguns modelos de combustão turbulenta, como o EBU ou EDC, assumem que para valores elevados do Número de Damköhler a taxa de reação química depende apenas da taxa de mistura entre os reagentes.

$$Da = \frac{\tau_f}{\tau_c} \quad (86)$$

O EDC é um modelo de interação entre a turbulência e a combustão proposto por Magnussen e Hjertager (1977) baseado no EBU permitindo a resolução de problemas com chamas não misturadas, assim como pré misturadas. O EDC, diferente do EBU, permite o uso de mecanismos de cinéticas química detalhados e considera tanto os efeitos da turbulência como os da cinética química.

O princípio do EDC consiste em separar o volume do fluido em uma parte reativa e outra não reativa, onde a parte reativa pode ser resolvida utilizando um Reator Perfeitamente Misturado (PRS). Sendo que as reações químicas ocorrem nas menores estruturas turbilhonares, que possuem o Comprimento Característico de Kolmogorov. A fração de volume em que ocorrerá a reação química é proporcional ao volume das menores estruturas turbilhonares.

O tempo de residência nas menores estruturas turbilhonares τ^* é calculado com a equação 87 em função das propriedades fluidodinâmicas, onde C_τ é uma constante do modelo. C_τ pode ser interpretado como a razão do tempo característico da reação (τ^*) e do tempo característico de Kolmogorov. χ^* representa a fração de reagentes que é

consumida no volume, sendo calculado com a equação 88, onde C_χ é uma constante do modelo.

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\nu_t}{\rho \epsilon} \right)^{0.5} \quad (87)$$

$$\chi^* = C_\chi \left(\frac{\nu_t \epsilon}{\rho k^2} \right)^{0.25} \quad (88)$$

A taxa de reação do modelo EDC é definida pela equação 89, onde κ é calculado de acordo com a versão do EDC utilizada e Y_k^* é obtido utilizando um reator PRS.

$$\dot{\omega} = \frac{(\bar{\rho} \chi^{*2})}{\tau^*(1 - \chi^{*3})} (Y_K^* - \bar{Y}_k) \quad (89)$$

A equação 89 pode ser escrita da forma 90. Sendo que k é modelado de acordo com a versão do modelo EDC utilizado, e deve apresentar valores entre 0 e 1. Caso $k = 0$ não ocorrerá reações no volume de controle enquanto para $k = 1$ a reação irá ocorrer em todo o volume. A equação 91 apresenta a formulação proposta em (MAGNUSSEN, 1981).

$$\dot{\omega} = \frac{\bar{\rho} k}{\tau^*} (Y^* - Y_k) \quad (90)$$

$$\kappa = \frac{\chi^{*3}}{1 - \chi^{*3}} \quad (91)$$

Posteriormente Gran e Magnussen (1996) propuseram uma modificação para incluir os efeitos da mistura dos reagentes e produtos nas menores estruturas turbilhonares. Desta forma o transporte de massa das menores estruturas turbilhonares com a redondeza é modificado, resultando na equação 92.

$$\kappa = \frac{\chi^{*2}}{1 - \chi^{*3}} \quad (92)$$

Outra modificação proposta por Magnussen (2005) incorpora o fato que a reação pode ser estendida para fora das menores estruturas turbilhonares, resultando na equação 93.

$$\kappa = \frac{\chi^{*2}}{1 - \chi^{*2}} \quad (93)$$

O tempo de residencia no reator não deve ultrapassar o passo de tempo do modelo numérico, assim como C_χ maior que 1. As eqs. 87 e 88 não apresentam as restrições descritas de forma implícita, sendo necessário implementa-las no código com o objetivos de evitar fenômenos não físicos. Similar ao EBU, o EDC foi proposto originalmente para ser utilizado em conjunto com modelos RANS. No entanto o LES estimando valores da k e ϵ baseados no modelo de submalha. For fim as constantes do modelo são apresentadas na tabela 2.

C_τ	0,4082
C_χ	2,1377
C_μ	0,01

Tabela 2 – Constantes do modelo EDC utilizadas.

Caso $\tau^* = \Delta t$ e $\kappa = 1$ a equação 90 assume a forma da equação 85. Portanto a combustão ocorre em todo o volume de controle, assim como durante todo o passo de tempo, indicando que passo de tempo é inferior ao tempo característico das estruturas turbilhonares, assim como o volume é menor que o comprimento característico das menores estruturas turbilhonares. Neste caso específico o processo de combustão no volume computacional não é influenciado pela turbulência do escoamento, ainda a interação entre a combustão e a turbulência esteja presente em outras regiões do escoamento. Para Números de Reynolds elevados a taxa de combustão é limitada pela taxa de mistura $\tau^* \ll \Delta t$, se aproximando o modelo EBU.

Resultados

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos utilizando o código para escoamentos compressíveis transportando múltiplas espécies químicas para escoamentos inertes e reativos. Os casos foram escolhidos com o objetivo de validar o código em diferentes cenários. Os primeiros resultados apresentados são referentes ao tubo de choque, em que os casos monocomponentes e multicomponentes são comparados com a solução analítica. Também são comparados diversos modelos de discretização utilizando este mesmo caso. Neste caso também é testado o transporte das espécies químicas. Em casos que utilizam ar no experimento as simulações foram realizadas utilizando uma mistura de nitrogênio e oxigênio. Em todos os casos multicomponentes as propriedades dos gases, como ρ , c_p , γ , k e μ , são obtidas através da biblioteca Cantera.

Foi realizada uma simulação de um gás contido em uma cavidade cúbica com paredes a diferentes temperaturas. Neste caso, o movimento do fluido ocorre devido a convecção natural e o escoamento é subsônico. A formulação compressível baseada na pressão apresenta uma alternativa aos métodos tradicionalmente utilizados para modelar convecção natural. Também foi realizada simulação do escoamento sobre um corpo rombudo em um canal. Neste caso foi utilizada a metodologia da fronteira imersa e comparada as abordagens LES e URANS para modelar os efeitos da turbulência. Por fim foi estudado o escoamento supersônico sobre um degrau a frente, onde foi utilizada a malha adaptativa bloco estruturada, sendo que as regiões com a presença de onda de choque foram refinadas automaticamente.

4.1 Tubo de Choque

O tubo de choque é um instrumento amplamente utilizado em diversas áreas da física e engenharia para estudos de escoamentos em velocidades e temperaturas elevadas, como por exemplo escoamentos hipersônicos e o estudo da dinâmica dos gases em altas temperaturas. O tubo de choque consiste em um canal com duas regiões separadas por um diafragma. Cada região contém um gás com condições distintas da outra região, sendo que

em uma região a pressão é mais elevada do que na outra região. Ao romper o diafragma o gás contido na região de alta pressão escoar para a região de baixa pressão, alcançando velocidades supersônicas e resultando em uma onda de choque dentro do tubo. Do ponto de vista matemático, o tubo de choque é um caso particular do Problema de Riemann unidimensional.

O código foi verificado simulando tubos de choque em cinco casos distintos. O primeiro, apresentado por Sod (1978), utiliza propriedades constantes. Este caso foi simulado com uma composição de $Y_{O_2} = 0,21$ e $Y_{N_2} = 0,79$. O segundo caso é um tubo de choque com velocidade mais elevada, alcançando $M = 3$ ao longo do tubo.

O terceiro caso apresentado por Fedkiw, Merriman e Osher (1997) consiste em um tubo de choque com uma mistura composta por $Y_{O_2} = 0,1013$, $Y_{Ar} = 0,886$ e $Y_{H_2} = 0,127$. Apesar de todos os casos terem a concentração de espécies constantes ao longo de todo o domínio, as propriedades do fluido variam em função da temperatura e pressão.

Em seguida foi simulado um tubo de choque com gases distintos em cada lado. Este caso apresenta um gradiente de concentração das espécies químicas muito elevado, sendo possível observar a difusão das espécies químicas. Por fim, foi estudado um tubo de choque reativo utilizando hidrogênio como combustível. Os resultados foram comparados com Ferrer et al. (2014).

4.1.1 Solução Analítica

O Tubo de Choque proposto por Sod (1978) é um teste muito comum para a verificação e validação em CFD para escoamentos compressíveis. A solução do problema pode ser obtida considerando o escoamento invíscido e com propriedades constantes. Os resultados obtidos por volumes finitos podem apresentar algumas diferenças caso sejam considerados fluidos viscosos, de forma que algumas descontinuidades da solução analítica são suavizadas.

O problema pode ser dividido em 5 regiões, conforme apresentado na figura 3. A primeira região, apresenta a condição inicial do lado esquerdo e a quinta região, 5, as condições iniciais do lado direito. Nestas duas regiões os valores para velocidade, pressão, temperatura e densidade são iguais aos valores definidos na condição inicial. Na região 2 ocorre as ondas de rarefação, enquanto a região 3 está localizada após a descontinuidade de contato. A região 4 é localizada logo após a onda de choque, sendo denominada de *shock discontinuity*. Com exceção da região 2, todas as propriedades do escoamento têm um valor constante ao longo da região, podendo apresentar descontinuidades entre uma região e outra. A posição inicial e final de cada região é determinada em função da velocidade da onda de choque.

Através da teoria de escoamentos compressíveis e ondas de choque normais é possível calcular a pressão, densidade, temperatura e velocidade em cada região do tubo de choque. Uma descrição detalhada das soluções analíticas dos problemas de Riemann, incluindo os

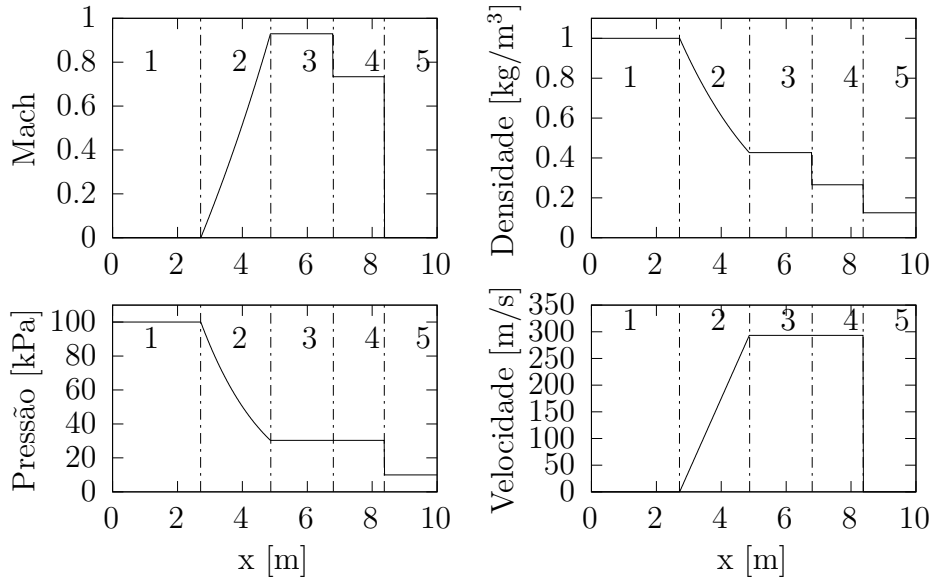


Figura 3 – Solução analítica do tubo de choque, dividido em 5 regiões

tubos de choque, pode ser encontrada em Toro (2013). A velocidade nas regiões 3 e 4 são modeladas de acordo com as equações 94 e 95. Note que as equações apresentadas nesta seção estão corretas para o caso em que a onda de choque se move da esquerda para a direita.

$$u_3 = (P_1^\beta - P_3^\beta) \sqrt{\frac{(1 - \Gamma^2) P_1^{1/\gamma}}{\Gamma^2 \rho_1}} \quad (94)$$

$$u_4 = (P_3 - P_5) \sqrt{\frac{1 - \Gamma}{\rho_5 (P_3 + \Gamma^2 P_5)}} \quad (95)$$

Γ e β são definidos nas equações 96 e 97 respectivamente, com o objetivo de simplificar as equações anteriores.

$$\Gamma = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \quad (96)$$

$$\beta = \frac{\gamma - 1}{2\gamma} \quad (97)$$

Sabendo que $u_3 = u_4$ é possível encontrar a pressão na região 3 utilizando um método iterativo. Assim como a velocidade, $P_3 = P_4$. A densidade na região 4 é obtida por:

$$\rho_4 = \rho_5 \frac{P_4 + \Gamma P_5}{P_5 + \Gamma P_4} \quad (98)$$

Considerando uma expansão adiabática é possível calcular ρ_3 por:

$$\rho_3 = \rho_1 \left(\frac{P_3}{P_1} \right)^{1/\gamma} \quad (99)$$

Na região 2, ρ , P e u_2 estão em função da posição x , assim como do tempo, sendo calculados pelas equações:

$$u_2(x, t) = \frac{2}{\gamma + 1} (a_1 + (x - x_i)/t) \quad (100)$$

$$\rho_2(x, t) = \rho_1 \left(1 - \frac{(\gamma - 1)u_2(x, t)}{2a_1} \right)^{2/(\gamma-1)} \quad (101)$$

$$P_2(x, t) = P_1 \rho_1 \left(1 - \frac{(\gamma - 1)u_2(x, t)}{2a_1} \right)^{2\gamma/(\gamma-1)} \quad (102)$$

A velocidade do som do lado esquerdo do tubo é obtida pela equação 103. A velocidade do som no lado direito (a_5) e na região 3 (a_3) podem ser obtidas de forma análoga.

$$a_1 = \sqrt{\gamma \frac{P_1}{\rho_1}} \quad (103)$$

A posição inicial da descontinuidade é representada por x_i . As posições no tempo final de cada região são obtidas pelas equações 104 a 107, onde x_{sh} indica a posição da onda de choque. x_{hd} e x_{ft} são a posição inicial e final da região da onda de rarefação. x_{cd} é a posição da descontinuidade de contato. A velocidade do som nas regiões 3 e 5 (a_3 e a_5) são obtidas de forma análoga a a_1 .

$$x_{hd} = x_i - a_1 t \quad (104)$$

$$x_{ft} = x_i + u_3 - a_3 * t \quad (105)$$

$$x_{cd} = x_i + u_3 t \quad (106)$$

$$x_{sh} = x_i + \left[a_5 \sqrt{1 + \frac{\gamma + 1}{2\gamma} \left(\frac{P_4}{P_5} - 1 \right)} \right] t \quad (107)$$

4.1.2 Tubo de Choque SOD

As condições iniciais do tubo de choque são apresentadas na tabela 3 para o caso estudado por (SOD, 1978). Neste caso, o tubo de choque possui um comprimento de 10 m e o tempo total da simulação foi de 0,0061 s. As simulações foram realizadas utilizando a condição de contorno de Dirichlet para u , v , w , P , T e também para Y_k .

As demais propriedades como R , C_p , k , μ e γ são obtidas através da biblioteca *Cantera* em função da pressão, temperatura e composição do gás. Conforme citado anteriormente, foi utilizado uma composição de com $Y_{O_2} = 0,21$ e $Y_{N_2} = 0,79$.

Tabela 3 – Condições iniciais do tubo de choque proposto por Sod (1978).

	Esquerda	Direita
Pressão	10^5 Pa	10^4 Pa
Densidade	1 kg/m^3	$0,13 \text{ kg/m}^3$
Temperatura	$348,43\text{K}$	$278,75\text{K}$
Velocidade inicial	0m/s	
Tempo final	$0,0061 \text{ s}$	
Comprimento do tubo	10 m	

Em todos os casos, as simulações foram realizadas com as configurações presentes na tabela 4, exceto quando indicado. As simulações foram realizadas utilizando um processador intel I7 - 7700, com 4 núcleos e 8 threads. Todas as simulações foram realizadas com 8 processos. Nos resultados a seguir são apresentados o tempo total de cada simulação.

Tabela 4 – Propriedades das simulações

Malha:	400x1x1
Discretização temporal	SBDF
Discretização espacial	upwind1O
CFL	0.2
Acoplamento pressão-velocidade	PISO
Formulação	Divergente

A análise de independência da malha foi realizada utilizando 4 malhas com diferentes quantidades de volumes na direção x . A Tabela 5 mostra a quantidade em volumes em cada malha na direção x e o tempo computacional gasto em cada simulação. Por se tratar de um caso viscoso, com propriedades variáveis os resultados não serão idênticos aos analíticos, onde o escoamento foi considerado com propriedades constantes e invíscido.

Tabela 5 – Tempo computacional para cada malha estudada

Malha	tempo
200	107,762s
400	346,179s
800	1385,747s

É esperado um custo computacional 4 vezes maior ao dobrar o número de volumes, pois além do dobro de volumes a serem calculados é calculado o dobro de passos de tempo. O critério de CFL é igual para todos os casos sendo o passo de tempo proporcional ao comprimento do volume. A Figura 4 indica que todas as malhas apresentaram bons resultados, obtendo os valores esperados em cada região do tubo de choque. No entanto a malha com 200 volumes apresentou uma leve oscilação após a onda de choque e também não capturou bem a posição da onda de choque. As malhas mais finas apresentam resultados próximos a solução analítica, capturando com precisão a posição da onda de choque.

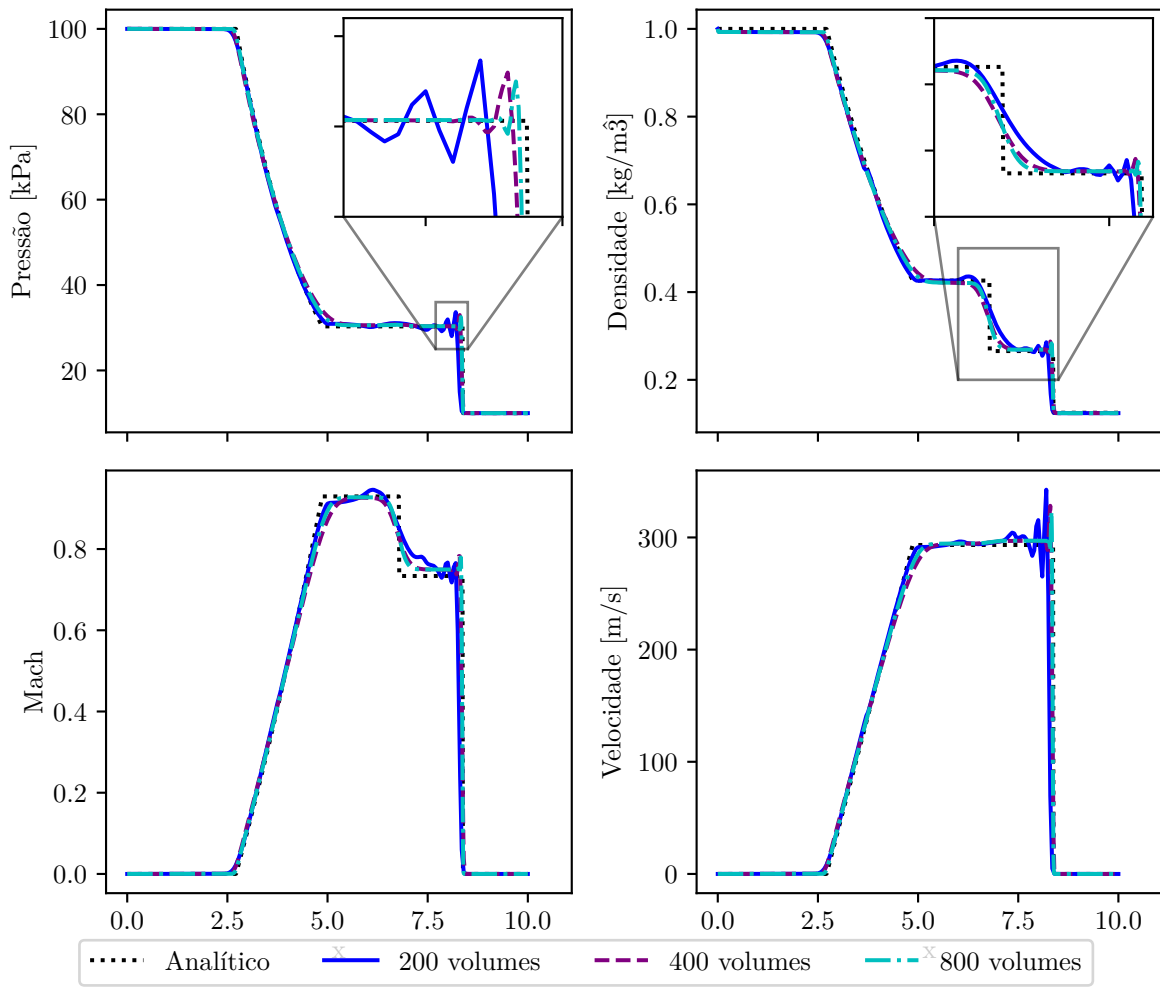


Figura 4 – Número de Mach, massa específica, pressão e componente u da velocidade obtidos com diferentes malhas.

Uma breve análise para diferentes valores do CFL é apresentada na tabela 6. O passo de tempo é proporcional ao CFL utilizado. O caso com $CFL = 0.4$ apresentou algumas oscilações próximo a onda de choque. Ao reduzir o CFL as oscilações também foram reduzidas, de modo que utilizando $CFL = 0.2$ as oscilações são pequenas porém ainda apresenta um desvio na velocidade e densidade na região da onda de choque. Conforme o esperado, o caso com o menor valor para o CFL apresentou o melhor resultado, com poucas oscilações. Todos os casos capturaram bem a posição da onda de choque, assim como os valores ao longo das regiões.

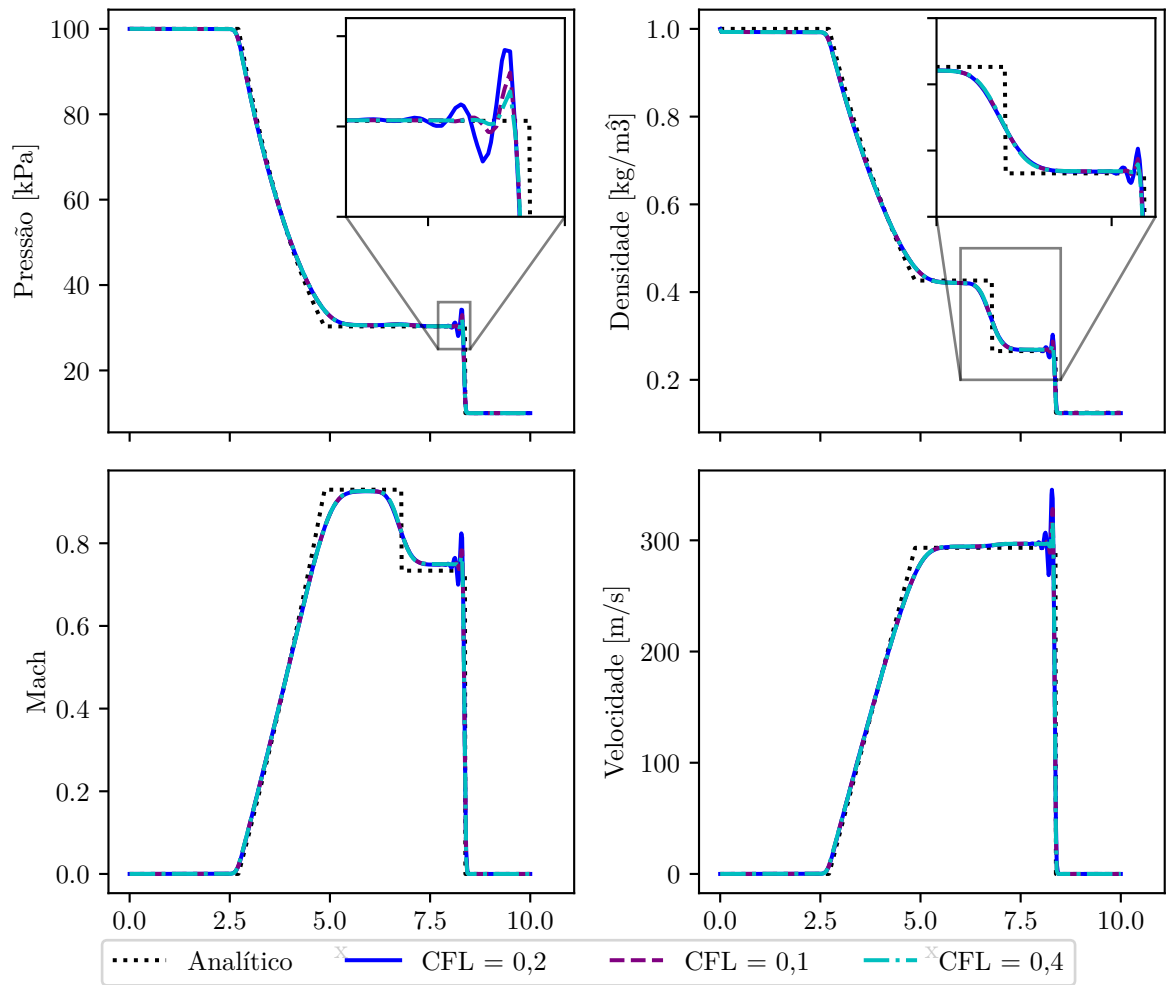


Figura 5 – Pressão, densidade, Número de Mach e velocidade ao longo do tubo de choque para diferentes valores de CFL.

Tabela 6 – Tempo computacional para diferentes valores de CFL.

CFL	tempo
0,1	8m53.171s
0,2	5m46.179s
0,4	3m51.295s

A influência do acoplamento pressão velocidade foi analisada para os algoritmos SIMPLE, SIMPLEC e PISO. Todos os casos utilizaram um limite de 10 iterações por passo de tempo. Os três acoplamentos de pressão e velocidade apresentaram resultados quase idênticos, indicando pouca influência no acoplamento pressão-velocidade. No entanto, os acoplamentos devem apresentar diferentes questões relacionadas a estabilidade do código e também referente ao tempo computacional. Todos os casos foram simulados com os mesmos coeficientes de sub-relaxação para pressão, velocidade e escalares, os algoritmos SIMPLEC e PISO podem se beneficiar de valores maiores para o coeficiente

sub-relaxação da pressão (ω_p). Foi utilizado $\omega_p = 0.3$ em todos os casos, que é o valor recomendado para o SIMPLE.

Tabela 7 – Tempo computacional gasto para cada acoplamento de pressão e velocidade.

Acoplamento	Tempo
SIMPLE	287,516 s
SIMPLEC	305,610 s
PISO	336,449 s

A Figura 6 mostra o resultado obtido com 3 diferentes discretizações temporais, sendo elas Euler, Semi-Implicit Backward Differentiation Formula (SBDF) e Adams Bashforth Crank Nicolson(ABCN). Os resultados foram muito próximos para todas as discretizações utilizadas. No entanto, a Discretização de Euler foi a única das discretizações que não apresentou oscilações próximas a onda de choque. Apesar disto apresentou um comportamento mais suave próximo as regiões com grandes gradientes, se afastando ligeiramente da solução analítica. A discretização SBDF, apesar de apresentar a maior oscilação foi a que mais se aproximou da solução analítica na região próxima de $x = 3$.

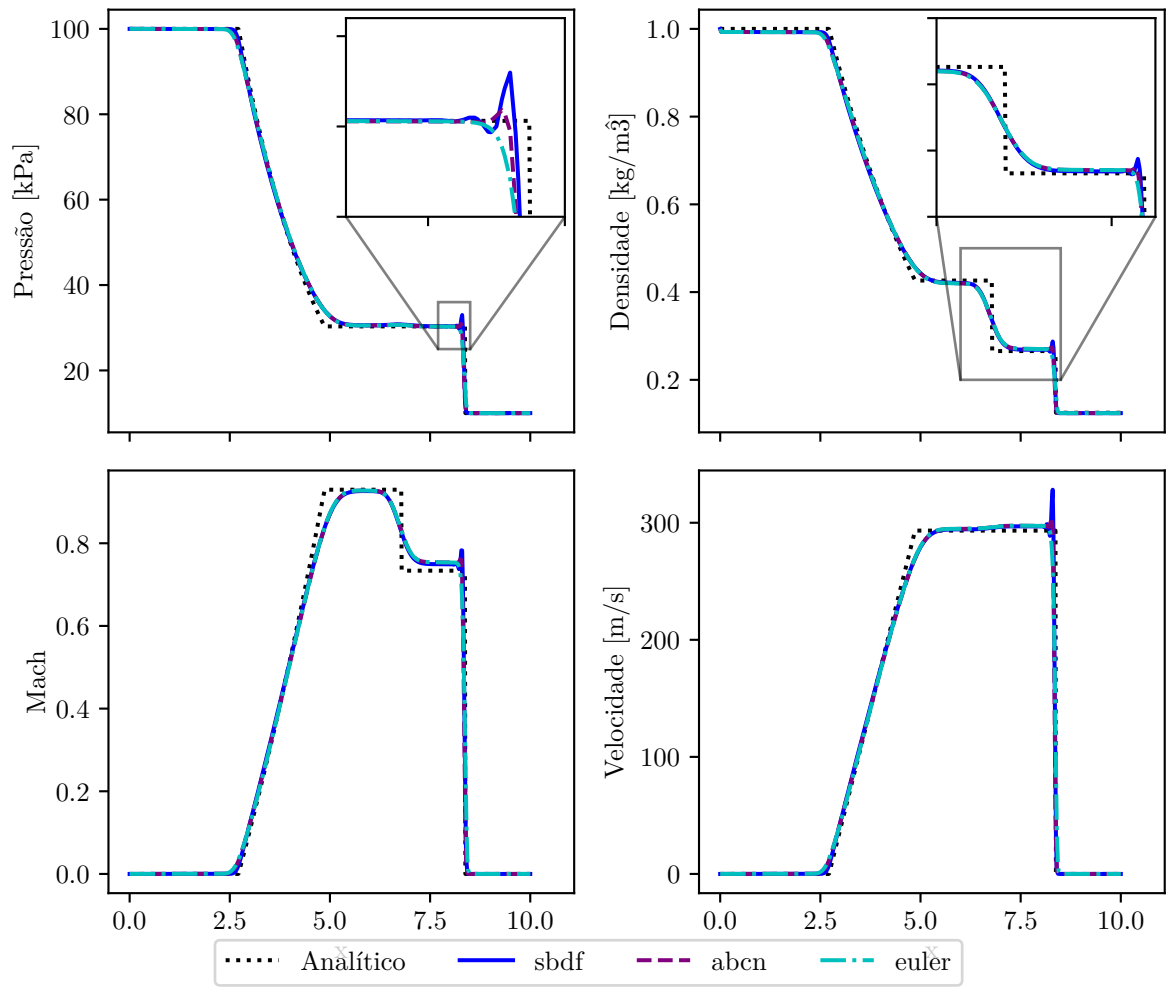


Figura 6 – Número de Mach, massa específica, pressão e componente u da velocidade obtidos com utilizando as discretizações Euler, SBDF ou ABCN.

Também foi verificado a influência das formulações divergente e não divergente, sendo que a formulação divergente apresenta um resultado mais preciso que a formulação não divergente. A figura 7 mostra uma diferença significativa entre as duas formulações, onde a formulação não divergente apresentou diferenças após a onda de choque (região 4), assim como a posição da onda de choque diferente do lugar esperado.

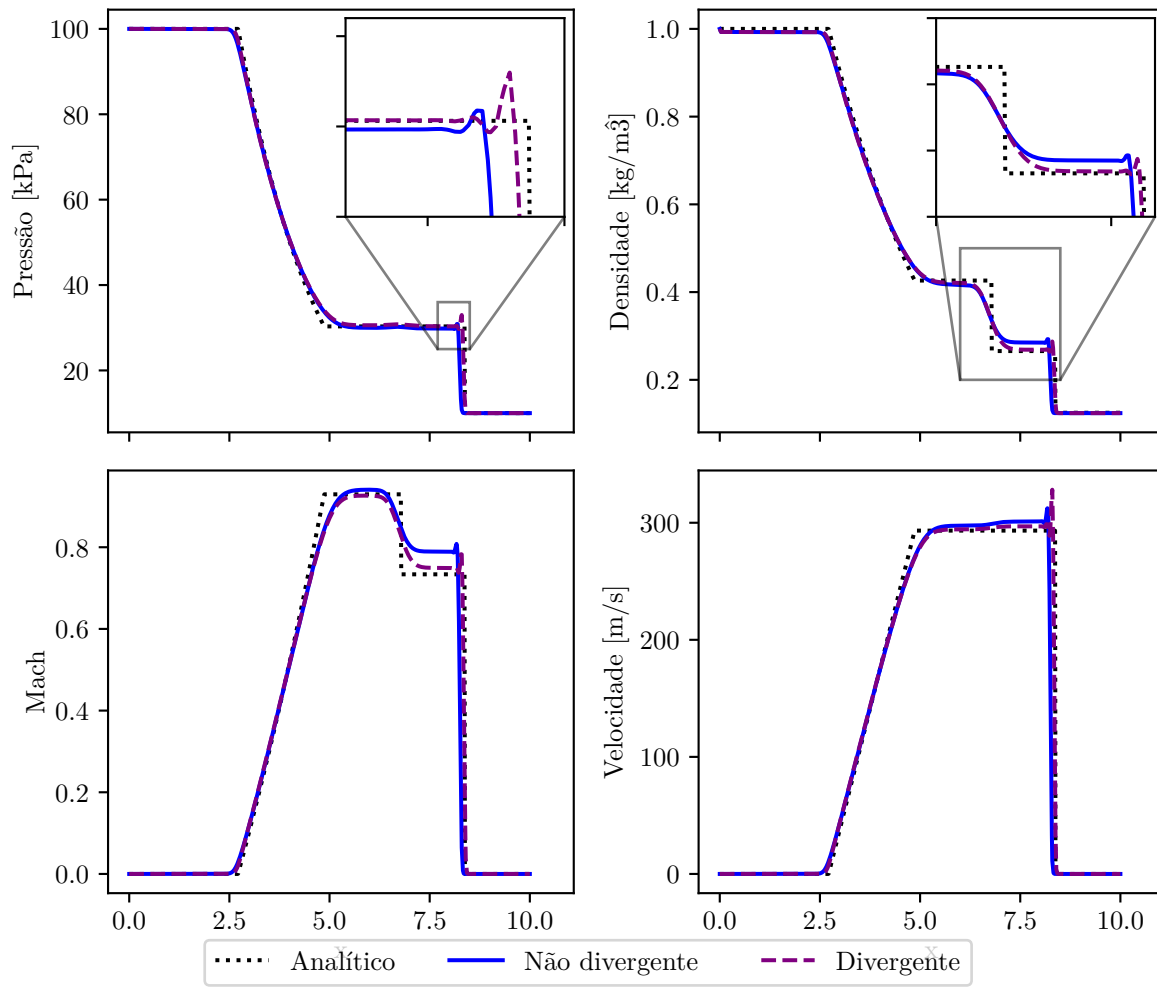


Figura 7 – Número de Mach, massa específica, pressão e componente u da velocidade para a formulação divergente e não divergente.

A seguir é investigado a influência do escoamento com fluido monocomponente e propriedades constantes para um fluido multicomponente com as propriedades variáveis calculadas pelo *Cantera*. Conforme é possível observar na figura 8, ambos os casos apresentam resultados bem próximos capturando bem a posição da onda de choque e das demais regiões. No entanto, o caso com propriedades constantes obteve valores mais próximos da solução analítica para o Número de Mach, assim como densidade e pressão. Esta pequena diferença não indica que o caso com propriedades constantes seja mais preciso que o caso com propriedades variáveis pois a solução analítica foi obtida considerando propriedades constantes.

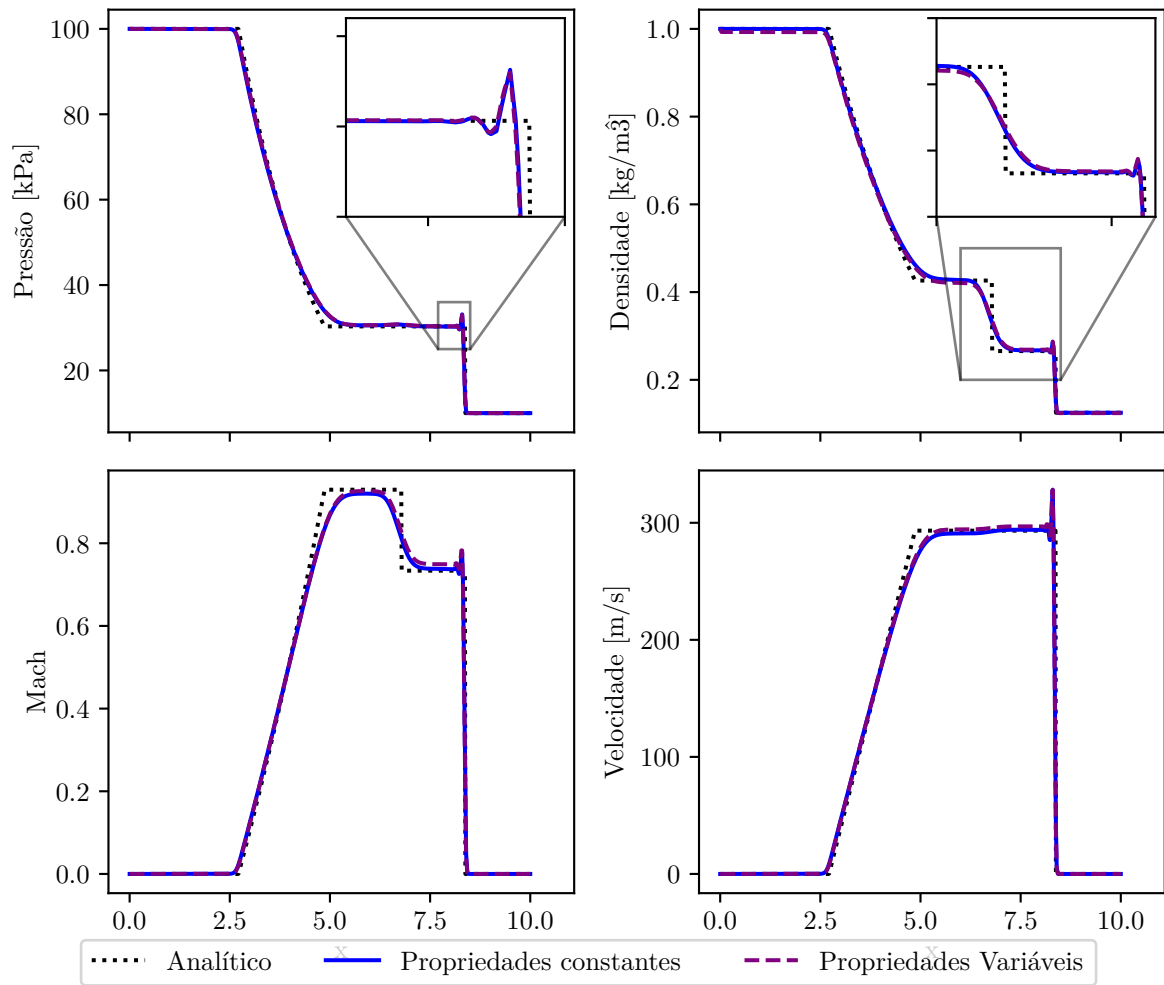


Figura 8 – Perfis do Número de Mach, massa específica, pressão e componente u da velocidade para os casos multicomponentes e mono componente.

Diversos esquemas de discretização dos termos advectivos presentes no MFSim foram testados, entre eles os esquemas upwind de primeira ordem, upwind de segunda ordem, diferenças centradas. Também foram testados esquemas TVD como superbee, quick e Umist.

A Figura 9 apresenta os resultados para os esquemas upwind de primeira e de segunda ordem, e Diferenças finitas centrais (CDS). Enquanto a figura 10 apresenta os resultados obtidos com os esquemas TVD MinMod, Superbee e Umist. A escolha do esquema de discretização dos termos advectivos pode afetar bastante o resultado final. O CDS apresentou uma grande quantidade de oscilações inviabilizando o seu uso nestas simulações. Esquemas como upwind apresentaram bons resultados com poucas oscilações, sendo o upwind de primeira ordem apresentando um solução mais próxima da analítica em relação ao upwind de segunda ordem. Os esquemas TVD investigados apresentaram bom comportamento, capturando bem a posição da onda de choque, assim como as oscilações

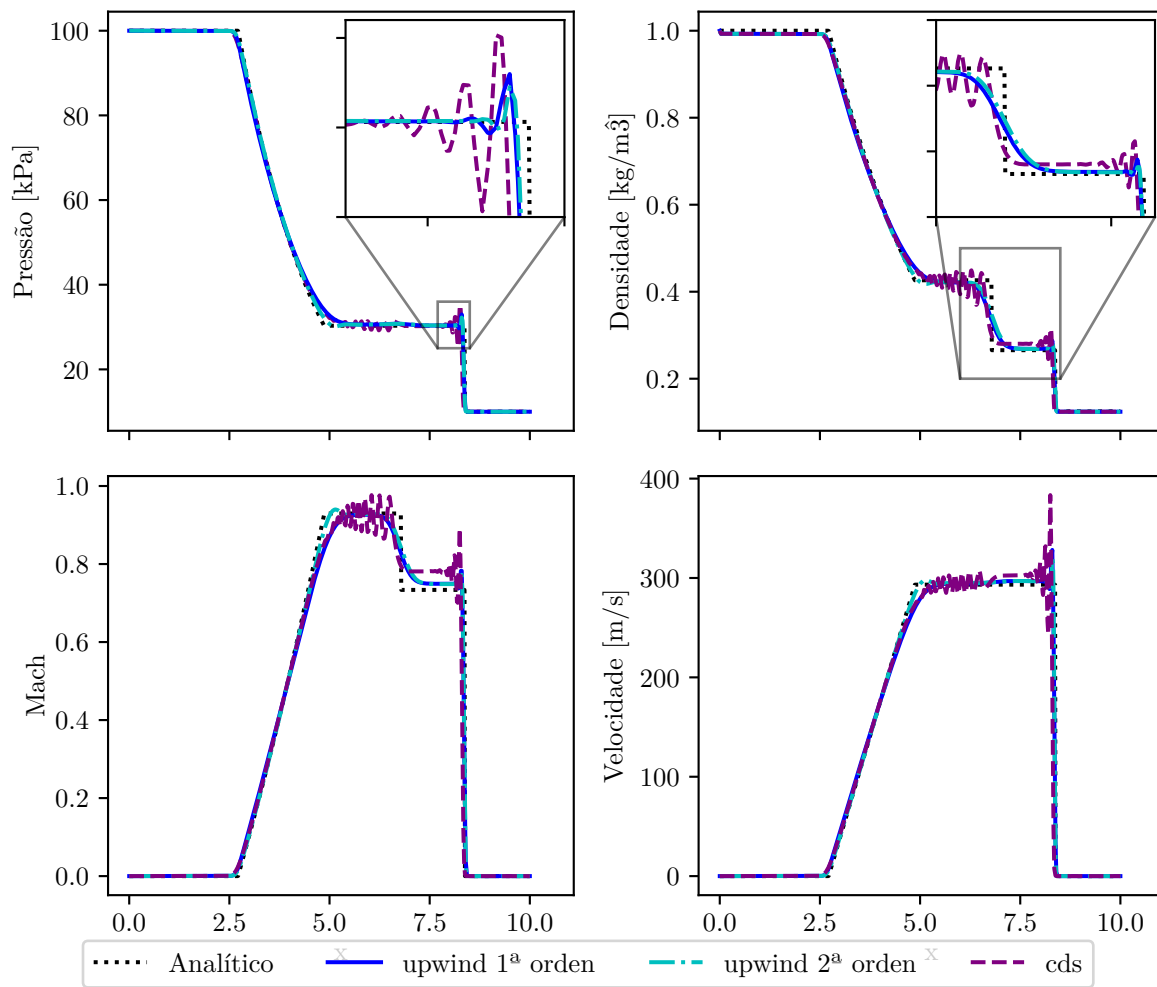


Figura 9 – Pressão, densidade, Número de Mach e velocidade ao longo do tubo de choque para os esquemas advectivos upwind de primeira ordem, upwind de segunda ordem e diferenças centradas.

foram baixas.

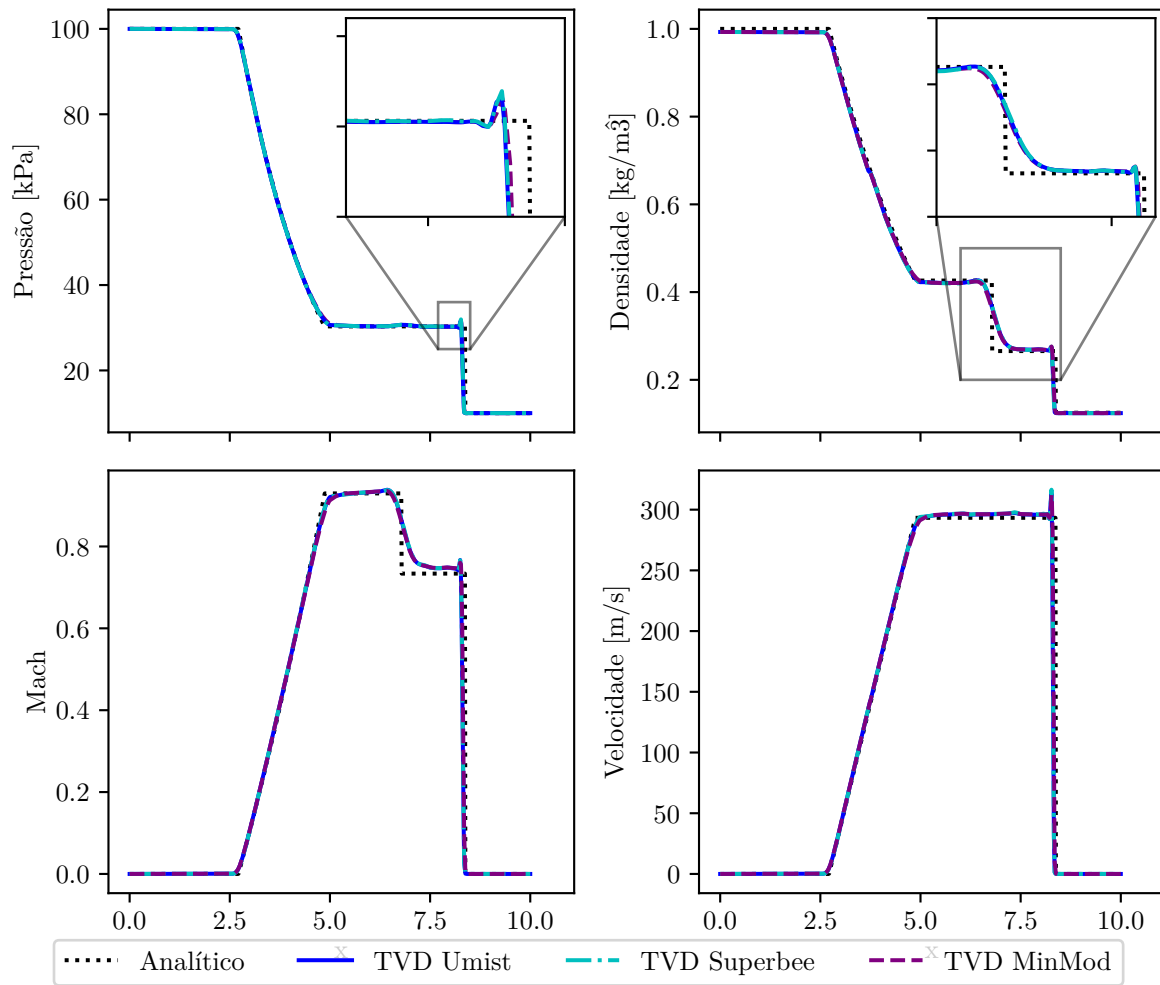


Figura 10 – Pressão, densidade, Número de Mach e velocidade ao longo do tubo de choque obtidos utilizando as discretizações TVD MinMod, Umist e QUICK.

4.1.3 Tubo de Choque Supersônico

No caso anterior, apesar da velocidade elevada, o escoamento não atinge velocidades supersônicas ($M > 1$). O caso a seguir tem como o objetivo verificar o código para escoamentos supersônicos. Diferente do caso anterior, o fluido no interior do tubo não se encontra em repouso e em conjunto com a diferença de pressão em ambos os lados é possível obter velocidades próximas a $M = 3$. As propriedades físicas do fluido, assim como as condições iniciais do escoamento são apresentadas na tabela 8.

A Figura 11 apresenta os resultados para o tubo de choque supersônico, onde a velocidade máxima foi de 1167,145 m/s, resultando em um Número de Mach superior a 3. No entanto a velocidade nas regiões 3 e 4 ficou um pouco acima do valor esperado.

Tabela 8 – Condições iniciais do tubo de choque supersônico e parâmetros de simulação.

	Lado esquerdo	Lado direito
Pressão	1033.3 kPa	100 [kPa]
Velocidade	290,93 m/s	1122,61 m/s
Densidade	3,857 kg/m ³	1 kg/m ³
Temperatura	933,45 K	348,43 K
Tempo final	0,006 s	
Comprimento do tubo	20 m	
Malha	800 volumes	
CFL	0.1	

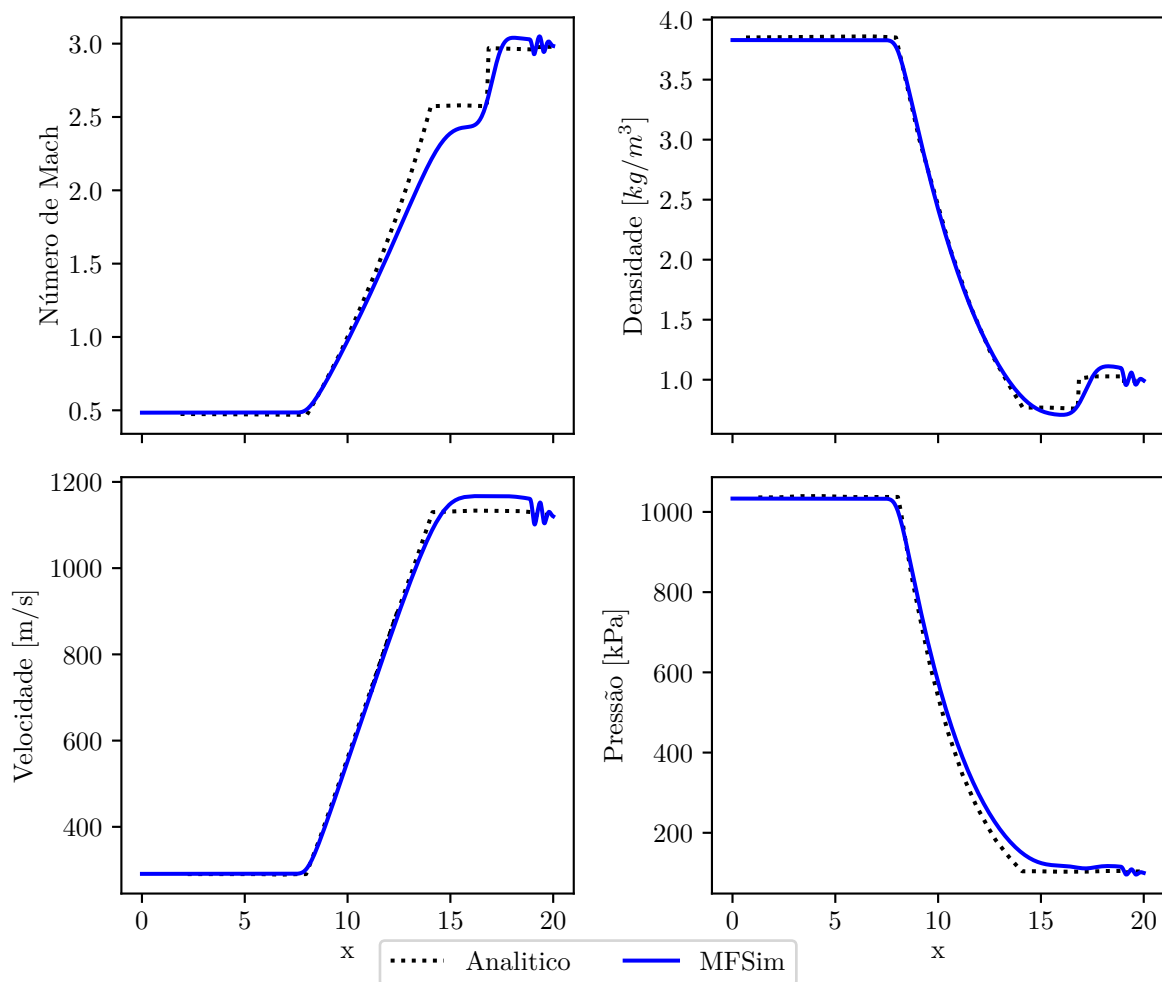


Figura 11 – Número de Mach, massa específica, pressão e componente u da velocidade obtidos com diferentes discretizações.

4.1.4 Tubo de Choque Multicomponente

O próximo teste é realizado com uma quantidade constante de argônio, oxigênio e hidrogênio ao longo do tubo de choque. A condição inicial é uma versão modificada do tubo de choque originalmente apresentado por Sod (1978), que inicialmente foi estudado por Fedkiw, Merriman e Osher (1997) e posteriormente por Ferrer et al. (2014). Devido a composição e a variação de temperatura ao longo do escoamento, a razão de calores específicos (γ) tem valores distintos em cada região do tubo de choque. As condições iniciais do tubo de choque são apresentadas na tabela 9.

Tabela 9 – Condições iniciais do tubo de choque multicomponente.

	Lado esquerdo	Lado direito
Pressão	8000 Pa	80000 Pa
Temperatura	400 K	1200 K
Tempo		40 μ s
Comprimento do tubo		10 cm
Y_{O_2}		0,1013
Y_{Ar}		0,886
Y_{H_2}		0,0127

Neste casos é possível observar a dependência da temperatura na razão dos calores específicos (γ), que fica entre 1,52 e 1,55. Os resultados apresentados na figura 12 ficaram muito próximos dos resultados obtidos pela simulação de Ferrer et al. (2014), indicando que o código está apto a resolver problemas com variações nas propriedades termodinâmicas.

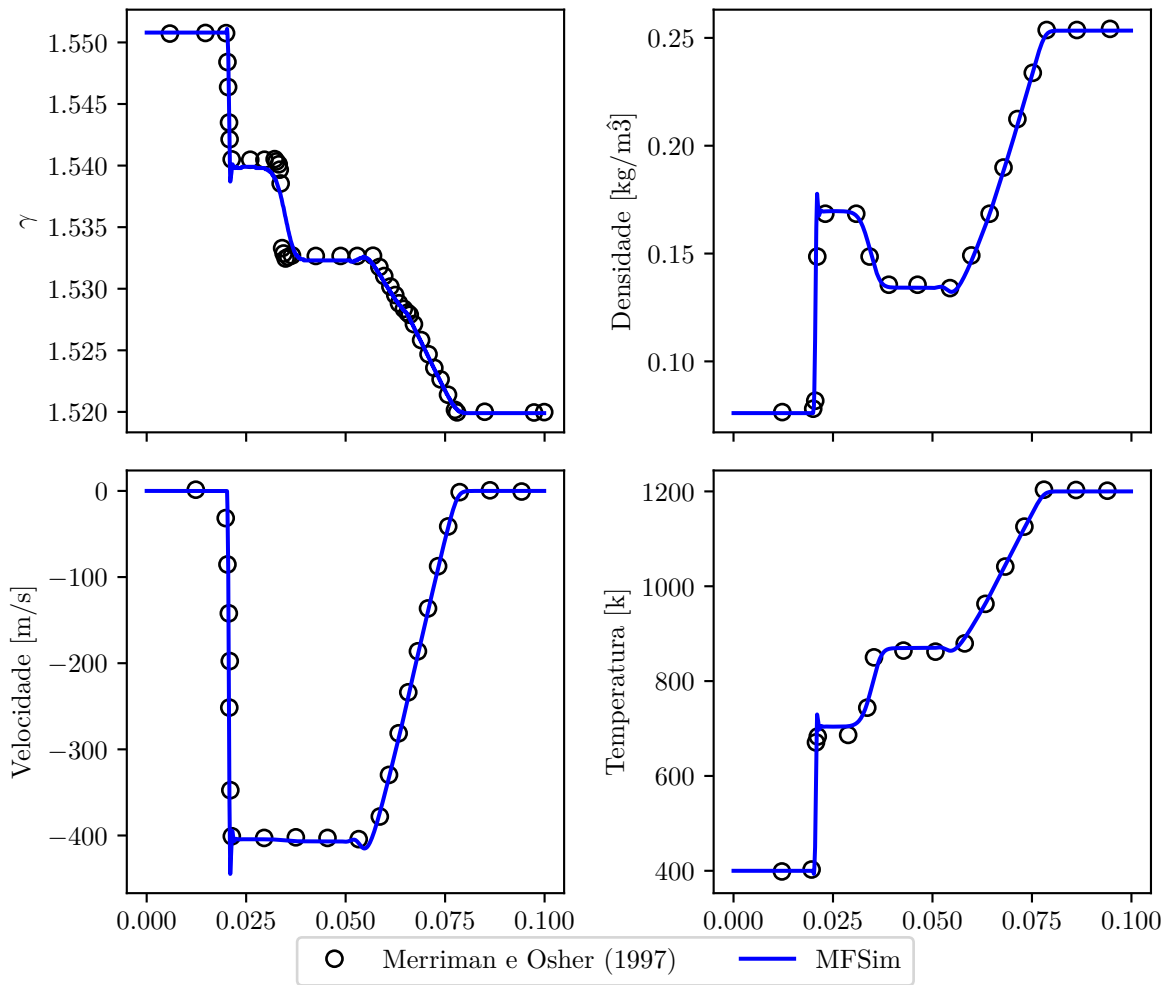


Figura 12 – Massa específica, componente u da velocidade, temperatura e razão dos calores específicos obtidos com MFSim comparados com os resultados obtidos por Ferrer et al. (2014).

4.1.5 Tubo de Choque Contendo Dois Gases

Neste caso é simulado um tubo de choque supersônico contendo 2 gases apresentado por (DENNER; XIAO; WACHEM, 2018), sendo uma composição química para cada lado do tubo. Ao decorrer do experimento ocorre a difusão dos gases, as propriedades do fluido variam de acordo com as concentrações das espécies químicas em cada volume, assim como a pressão e temperatura. Como nos casos anteriores, as propriedades como γ , k , μ e ρ são obtidas através da biblioteca Cantera.

A Figura 13 apresenta os resultados da simulação, sendo possível observar os efeitos da difusão das espécies químicas. A posição da onda de choque, assim como os valores de pressão e velocidade ao longo do domínio foram obtidos com uma boa precisão pelo modelo proposto. Os resultados apresentam uma leve diferença na densidade para a região 1, sendo que o valor utilizado para a simulação foi obtido pela equação de estado

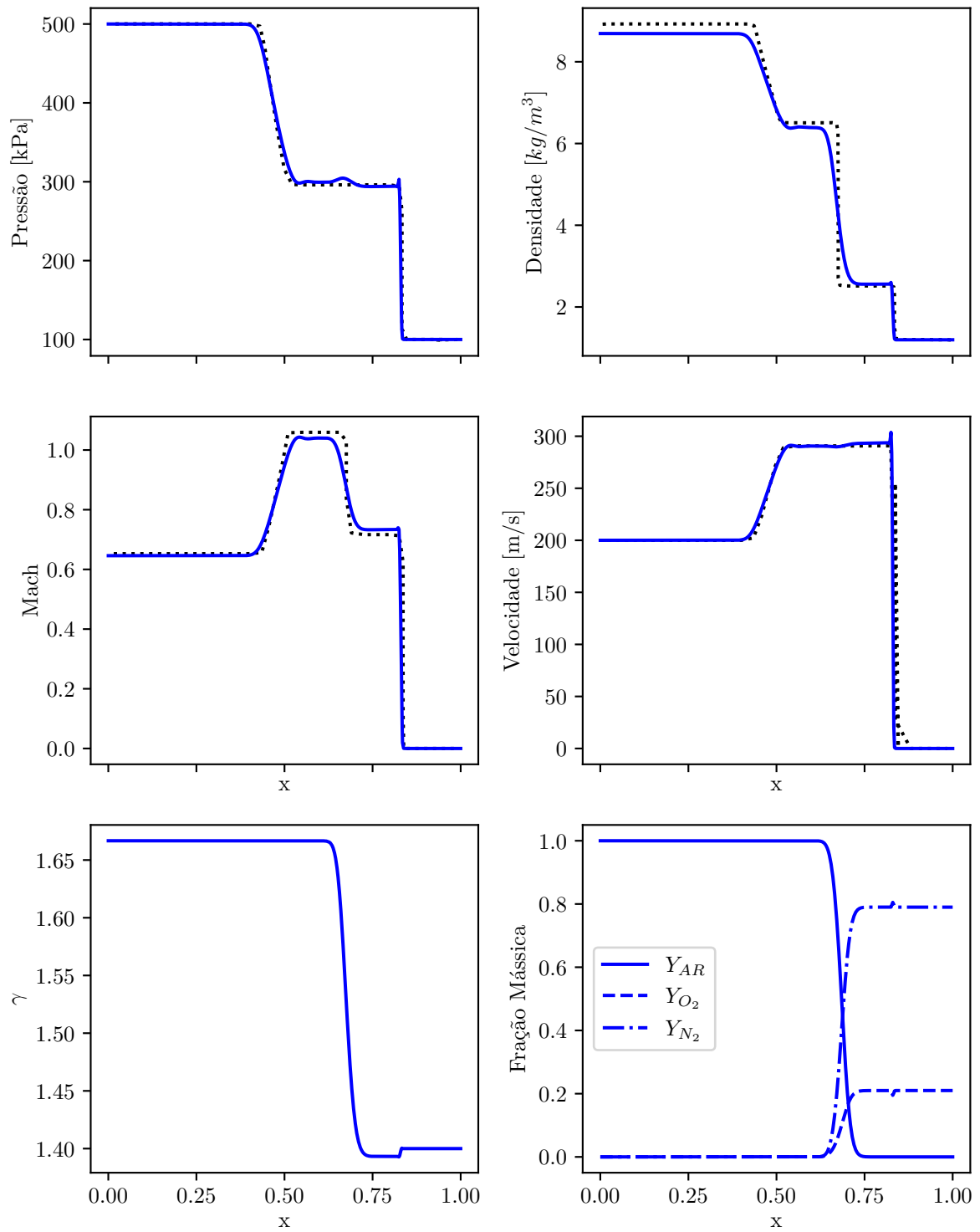


Figura 13 – Pressão, densidade, Mach e velocidade obtidos com MFSim comparados com os resultados analíticos, de acordo com Denner, Xiao e Wachem (2018). Também são apresentadas a distribuição de γ e frações mássicas ao longo do tubo.

Tabela 10 – Condições iniciais do tubo de choque multicomponente.

	Lado esquerdo	Lado direito
Pressão	5×10^5 Pa	1×10^5 Pa
Densidade	$8,92 \text{ kg m}^{-3}$	$1,2 \text{ kg m}^{-3}$
C_p/C_v	1,66	1,4
Tempo	6×10^{-4} s	
Comprimento do tubo	1 m	
Y_{O_2}	0,0	0,21
Y_{N_2}	0,0	0,79
Y_{Ar}	1,0	0,0

Tabela 11 – Parâmetros da simulação.

Malha:	400x1x1
Pressão-velocidade	PISO
Discretização temporal	Euler
Discretização espacial	TVD UMIST
cfl	0,2

em função da pressão e temperatura. Os resultados de Denner, Xiao e Wachem (2018) foram obtidos utilizando o método VOF, onde uma interface é definida separando os dois gases, desconsiderando a difusão das espécies químicas.

4.1.6 Tubo de Choque Reativo

Este caso simula um tubo de choque reativo, onde o combustível é hidrogênio. Diferente dos casos anteriores, a onda de choque colide com a parede sendo refletida. A região entre a parede e a onda de choque permanece com uma temperatura e pressão elevadas e praticamente constante por um curto período de tempo, propiciando um ambiente favorável para experimentos de cinética química.

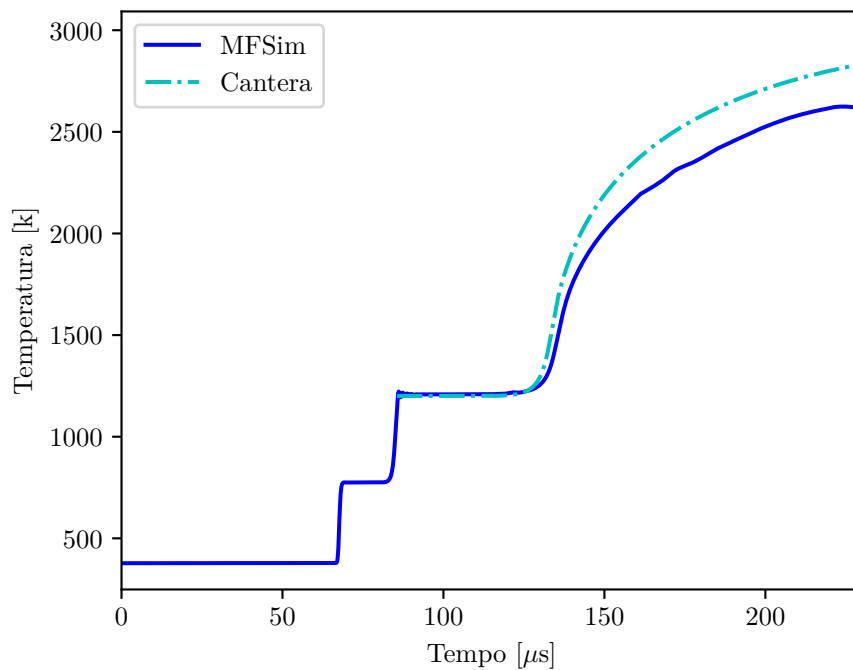
Este caso foi proposto por Oran et al. (1982) e posteriormente estudado por outros pesquisadores com o objetivo de avaliar o desempenho de métodos numéricos para escoamentos compressíveis reativo (FERRER et al., 2014), (FEDKIW; MERRIMAN; OSHER, 1997) e (DEITERDING, 2009). Este caso tem o objetivo de validar a coerência entre os termos advectivos e de reação, assim como a robustez do código com a presença de um grande gradiente de pressão.

O caso é inicializado já com o fluido na região direita em movimento para região esquerda que se encontra estacionária. A composição química é constante ao longo do tubo no início do escoamento. Todas as condições iniciais do caso são apresentadas na tabela 12. O tubo possui um comprimento de 12 cm, discretizado em 400 volumes, com um passo de tempo constante igual a 5×10^{-8} s. Foi utilizado o mecanismo de reação descrito por Kee et al. (1985), contendo 9 espécies químicas e 18 reações.

A Figura 14 apresenta a pressão e temperatura ao longo do tempo para a posição

Tabela 12 – Condições iniciais do tubo de choque reativo.

	Lado esquerdo	Lado direito
Pressão	7173 Pa	35594 Pa
Densidade	$0,072 \text{ kg m}^{-3}$	$0,18075 \text{ kg m}^{-3}$
velocidade	0 m/s	$-487,34 \text{ m/s}$
Passo de tempo	$5 \times 10^{-8} \text{ s}$	
Comprimento do tubo	0,12 m	
Y_{O_2}	0,1012	
Y_{H_2}	0,0127	
Y_{Ar}	0,8861	

Figura 14 – Temperatura em função do tempo na posição $x = 0,005 \text{ m}$.

$x = 0,005 \text{ m}$. A primeira mudança brusca na temperatura é referente a passagem da onda de choque, aproximadamente $70 \mu\text{s}$ após o início da simulação. Em seguida é possível perceber a passagem da onda de choque refletida, resultando em uma temperatura praticamente constante próxima a 1200 K . Com a temperatura elevada o processo de ignição é iniciado, sendo possível medir o atraso na ignição. O resultado é comparado com um código escrito em python utilizando o Cantera, que realiza a integração em um único volume utilizando um reator a volume constante para gases ideais.

A Figura 15 apresenta a temperatura, densidade, Número de Mach e velocidade para os instantes $t = 170 \mu\text{s}$, $t = 190 \mu\text{s}$ e $t = 230 \mu\text{s}$. Os resultados são comparados com os resultados obtidos por Ferrer et al. (2014), utilizando diferenças finitas de sétima ordem. Ambos os resultados apresentam o mesmo comportamento. Apesar de uma pequena diferença nos valores máximos de temperatura, as posições da onda de choque está coerente

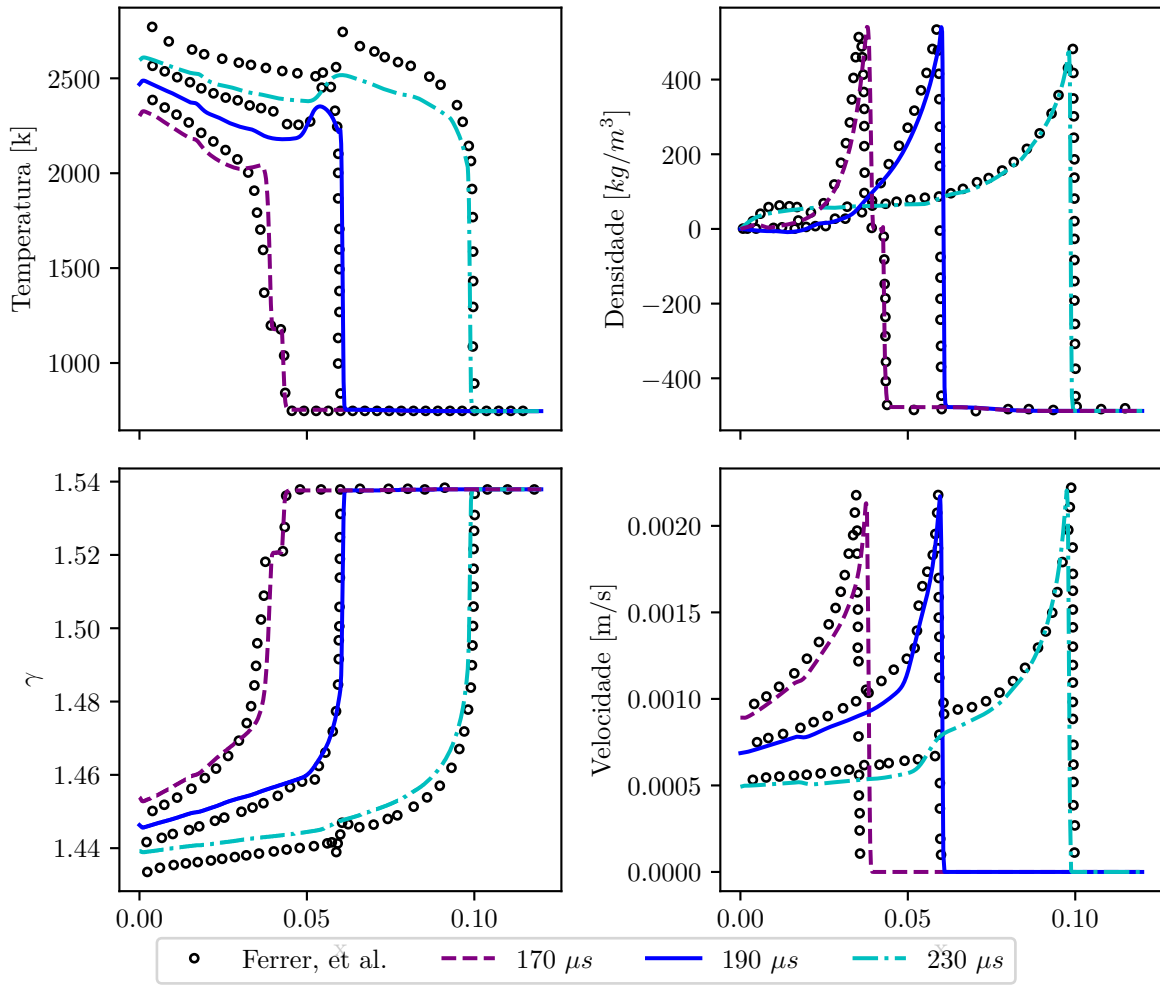


Figura 15 – Temperatura, densidade, γ e velocidade obtidos com MFSim comparados com os resultados obtidos por (FERRER et al., 2014).

com a referência, inclusive apresentando a descontinuidade proveniente da onda de choque refletida e da onda de choque reativa no instante $t = 170\mu\text{s}$, sendo que a onda reativa ainda não alcançou a onda refletida.

4.2 Convecção Natural Em Cavidade Fechada

A convecção natural é um mecanismo de transferência de calor onde o movimento do fluido ocorre exclusivamente devido as forças de empuxo. Os casos envolvendo convecção natural apresentam um gradiente de densidade como consequência da presença de um gradiente de temperatura. Apesar da variação da densidade, o escoamento gerado não apresenta efeitos de compressibilidade ocasionado por velocidades elevadas próximas a velocidade do som, sendo que o Número de Mach é muito baixo, no caso estudado da ordem de 10^{-3} .

A aproximação de Oberbeck-Boussinesq (OB) é muito utilizada em problemas envolvendo convecção natural. Esta aproximação considera o escoamento incompressível, sem variações na densidade ao longo de todo o domínio, considerando o efeito da variação de densidade apenas nos termos referentes as forças de campo (SILVEIRA-NETO, 2020).

Devido as simplificações do modelo, a capacidade da aproximação Oberbeck-Boussinesq de obter resultados precisos é restrita a pequenas variações de temperatura, de modo que outras abordagens são utilizadas para modelar casos com convecção natural (MAYELI; SHEARD, 2021). Uma alternativa à aproximação de Oberbeck-Boussinesq é a utilização de um modelo completamente compressível. Devido ao baixo Número de Mach deste caso, os códigos baseados na densidade costumam apresentar dificuldades para resolver o escoamento, o que não ocorre nos códigos baseados na pressão. Algumas considerações da aproximação de Oberbeck-Boussinesq são:

- ❑ Pequenas diferenças na temperatura;
- ❑ Transformação da energia cinética em energia térmica negligenciável;
- ❑ Propriedades térmicas constantes;
- ❑ Equação de estado linear.

Ao utilizar um código compressível é possível ter grandes variações na temperatura, assim como na densidade e pressão estática. Também é considerada a transformação da energia cinética em energia térmica, mesmo em baixos Números de Mach. Caso o escoamento seja multi-componente, as propriedades térmicas são obtidas em cada volume do domínio.

Três casos foram estudados utilizando o MFSim, sendo o primeiro incompressível utilizando a aproximação Oberbeck-Boussinesq já implementada no MFSim. O segundo e o terceiro caso utilizam a formulação compressível implementada nesta tese, sendo considerado as propriedades térmicas constantes ou multi-componente com propriedades variáveis. O parâmetro ϵ é definido na eq. 108 de acordo com a diferença de temperatura entre a parede quente e fria da cavidade. T_q representa a temperatura na parede aquecida

de T_f representa a temperatura na parede fria. Para valores pequenos de ϵ os efeitos da compressibilidade são baixos e a Aproximação de Oberbeck-Boussinesq é válida.

$$\epsilon = \frac{T_q - T_f}{T_q + T_f} \quad (108)$$

O escoamento pode ser caracterizado pelo número adimensional de Rayleigh, definido na eq. 109, onde β é a expansividade do volume, L é o comprimento da cavidade cúbica, Pr é o Número de Prandtl e ρ_{ref} é densidade na temperatura de referência.

$$Ra = \frac{Pr g(T_q - T_f)L^3\beta}{(\mu/\rho_{ref})^2} \quad (109)$$

O número de Nusselt representa a razão entre a energia térmica transportada por convecção e a energia térmica transportada por condução. O Número de Nusselt local (Nu) é calculado de acordo com a eq. 110 para a face leste, enquanto o número de Nusselt médio é obtido pela equação 111. K representa a condutividade térmica e K_{ref} representa a condutividade térmica na temperatura de referência.

$$Nu = \frac{L}{K_{ref}(T_q - T_f)} K \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_e \quad (110)$$

$$\overline{Nu} = \frac{1}{L^2} \int_{z=0}^{z=L} \int_{y=0}^{y=L} Nu \, dy \, dz \quad (111)$$

Foi simulado uma cavidade térmica, com uma face fria e outra quente, permitindo verificar e validar a capacidade do código de resolver escoamentos com baixo número de Mach e densidade variável. A tabela 13 apresenta as condições iniciais da cavidade, sendo a temperatura de referência $T_{ref} = 600$ K e as temperaturas da parede quente e fria obtidas de acordo com ϵ desejado. Neste caso foi adotado $Ra = 10^5$.

Propriedade	valor
L	0.04 m
Ra	10^5
Pressão	101325 Pa
T_{ref}	600 K
R	287

Tabela 13 – Configuração utilizada para o caso da cavidade térmica.

A Tabela 14 apresenta uma comparação entre os resultados obtidos pelo MFSim e os resultados obtidos por outros pesquisadores. Nos casos com $\epsilon = 0.01$ a diferença de temperatura entre a parede fria e quente é de 12 K, enquanto que para $\epsilon = 0.6$ a diferença é de 720 K. Os valores obtidos por Paillere et al. (2000) modelam o escoamento como baixo Número de Mach, enquanto Mazumder (2007) considera o escoamento completamente

		$\epsilon = 0.01$	$\epsilon = 0.6$	Outros
Oberbeck—Boussinesq (MFSim)	3d	4,38257	4.38258	-
Compressível propriedades constantes (MFSim)	3d	4,38189	4,54624	-
Compressível propriedades variáveis (MFSim)	3d	4,36129	4,54334	-
Paillere et al. (2000)	2d	4,5277	4,5631	-
Mazumder (2007)	2d	-	-	4,57
Padilla, Lourenço e Silveira-Neto (2013)	3d	-	-	4,427

Tabela 14 – Número de Nusselt para a parede aquecida.

compressível, ambos simularam escoamentos bidimensionais. Padilla, Lourenço e Silveira-Neto (2013) obtiveram os resultados utilizando a aproximação Oberbeck-Boussinesq para uma cavidade tridimensional.

Os resultados compressíveis apresentam uma pequena diferença no Número de Nusselt entre o caso com propriedades constantes e com propriedades variáveis. No entanto o caso que utiliza a aproximação Oberbeck—Boussinesq mostrou uma diferença no Número de Nusselt mais significativa em comparação com os casos compressíveis e valores próximos para $\epsilon = 0,6$ e $\epsilon = 0,1$. Nos casos compressíveis houve um aumento do Número de Nusselt nos casos com ϵ mais elevado. A figura 16 mostra contornos de iso-temperatura no plano xy para 4 casos distintos considerando $\epsilon = 0,6$. Todos os casos apresentam comportamentos similares com pequenas diferenças nas paredes superior e inferior.

A Figura 17 mostra iso-superfícies para temperatura no interior do domínio computacional. Devido as condições de contornos, os resultados apresentaram poucas variações na direção z . Nos casos utilizando propriedades variáveis o número de Mach máximo foi 0,000263 com $\epsilon = 0,01$ enquanto para $\epsilon = 0,6$ o maior número de Mach foi 0,000319.

Os resultados obtidos pelos três métodos utilizados apresentaram valores próximos aos valores encontrados na literatura. Conforme o esperado, os modelos compressíveis apresentaram bons resultados para gradientes de temperatura mais elevados. Entre todos os modelos, a formulação compressível com propriedades variáveis é a mais completa, utilizando um número inferior de simplificações em relação aos outros modelos apresentados anteriormente. A aproximação de Oberbeck—Boussinesq não é recomendada para grandes gradientes de temperatura, apesar de apresentar um resultado satisfatório para o caso com um gradiente de temperatura igual a 720 K. Códigos compressíveis baseados na pressão são alternativas viáveis a aproximação de Oberbeck—Boussinesq, podendo ser utilizado para casos mais complicados onde existem limitações para Oberbeck—Boussinesq.

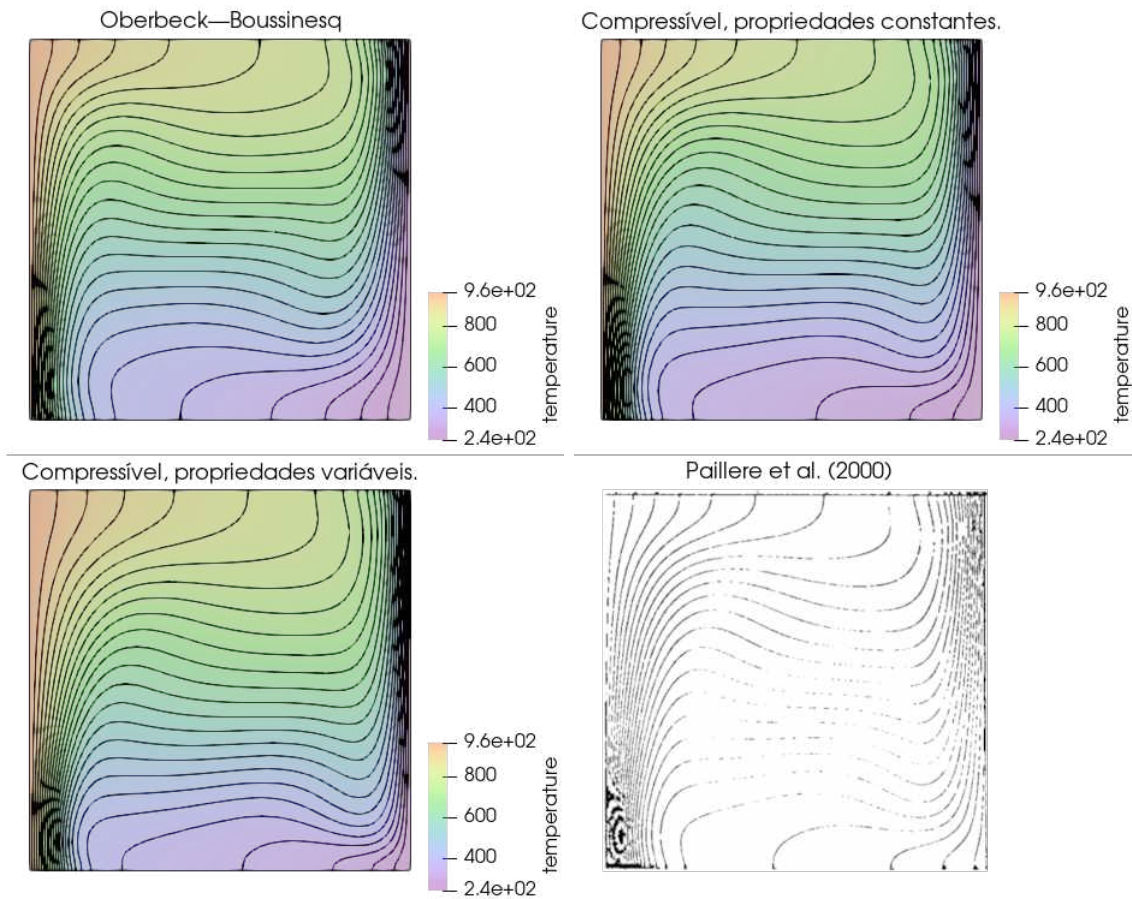


Figura 16 – Iso-valores de temperatura considerando $\epsilon = 0.6$. Da esquerda para a direita e de cima para baixo, os resultados obtidos utilizando aproximação de Oberbeck—Boussinesq, o código compressível e o código compressível com propriedades variáveis e o resultado obtido por Paillere et al. (2000) considerando o código com baixo número de Mach.

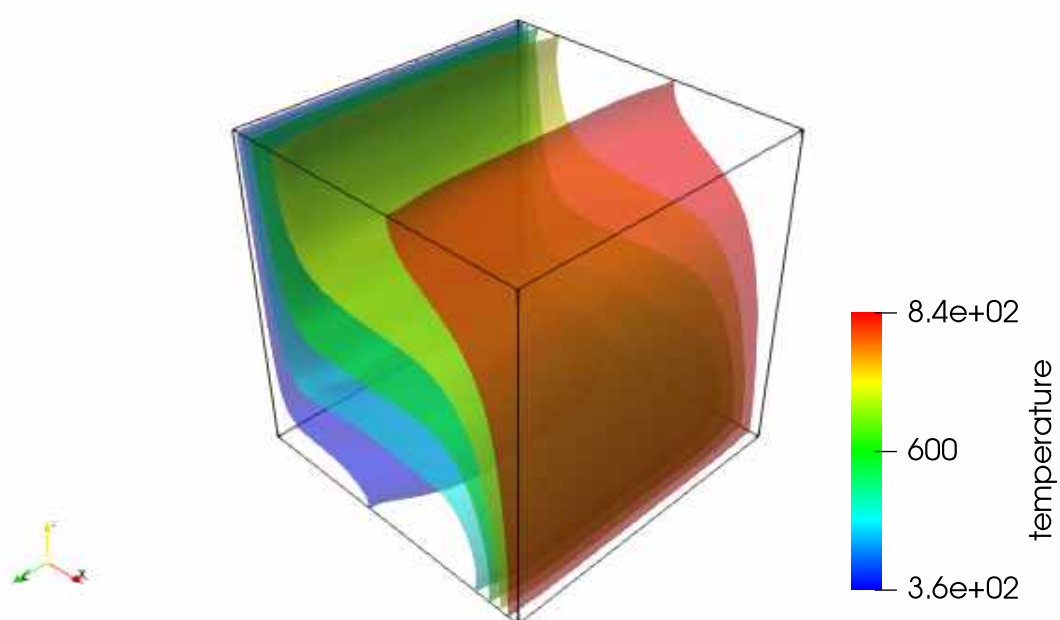


Figura 17 – Iso superfície para diferentes valores de temperatura considerando $\epsilon = 0.6$ e propriedades variáveis.

4.3 Escoamento Em Canal Sobre Um Corpo Rombudo

Este caso consiste no escoamento interno em um duto com um obstáculo rombudo, conforme apresentado no experimento de Sjunnesson, Henrikson e Lofstrom (1992). Foram realizadas medições para o escoamento inerte, assim como reativo. Com este caso é possível investigar os modelos de turbulência em um escoamento interno assim como testar os modelos de combustão turbulenta presentes no MFSim. Diversos autores investigaram este caso utilizando diversos modelos numéricos (SANKARAN; GALLAGHER, 2017)(POTTURI; PATTON; EDWARDS, 2017)(WEST; GROTH, 2017)(ELIAS et al., 2018)(WU et al., 2017).

As dimensões e características do experimento são apresentadas na figura 18. O combustor é formado por um duto com seção de 0,120 m por 0,24 m e comprimento de 1,0 m, contendo um prisma triangular em seu interior. Este prisma encontra-se a 0,319m da entrada do domínio computacional. O combustível utilizado é propano e a composição do gás na entrada do queimador é apresentada na tabela 15. Nesta tabela também são apresentadas informações referentes a simulação. Neste caso foi utilizado uma malha fixa com 4 níveis, onde as regiões de interesse são refinadas, resultando nos menores volumes com 1,875 mm. As condições de contorno nas faces y são definidas como paredes com condição de não deslizamento, enquanto uma condição de contorno periódica foi adotada nas faces na direção z . Na saída do domínio foi adotada uma condição de contorno advectiva não reflexiva. Na entrada foi utilizado um perfil de velocidade conforme a equação 112, onde $u_{max} = 17,3$ m/s e b é a altura da seção. Foram introduzidas sondas em pontos específicos para armazenar informações a cada passo de tempo. A malha e a posição das sondas são ilustradas na figura 19. Os dados coletados pelas sondas são utilizados para as análises estatísticas.

$$u(y) = u_{max} \left[1 - \left(\frac{y - 0,5b}{0,5b} \right)^6 \right] \quad (112)$$

Tabela 15 – Propriedades da simulação e composição química utilizada no caso do escoamento sobre um corpo rombudo.

Malha base	64 x 8 x 4
Níveis da malha	4
Pressão/velocidade	Piso compressível
Termos advectivos	TVD QUICK
CFL	0,2
Composição do fluido	$Y_{C_3H_8} = 0,04$ $Y_{O_2} = 0,224$ $Y_{N_2} = 0,736$

O experimento realizado por Sjunnesson, Henrikson e Lofstrom (1992) apresenta resultados para velocidade média e as flutuações da velocidade nas posições indicadas pelas

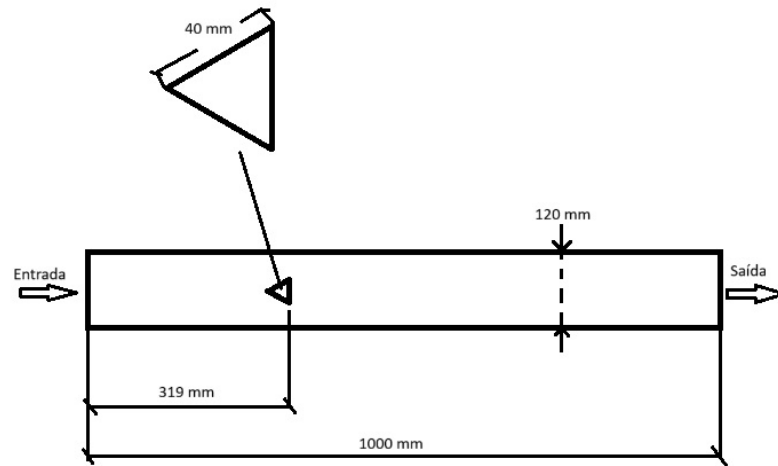


Figura 18 – Esboço da seção de testes utilizada no experimento. Adaptado de (SJUNNESSON; HENRIKSON; LOFSTROM, 1992).

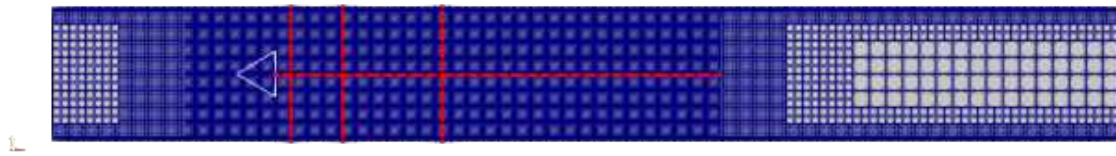


Figura 19 – Malha utilizada nas simulações, as linhas vermelhas indicam as posições das sondas.

linhas vermelhas na figura 19. As linhas verticais correspondem as posições $x/a = 0,215$, $x/a = 0,2612$ e $x/a = 0,35$, enquanto a linha horizontal está posicionada no centro do domínio computacional.

Os valores de velocidade média para o escoamento estatisticamente permanente são apresentados na figura 20 para a componente u da velocidade e na figura 21 para a componente v da velocidade. Ambos os modelos de turbulência apresentaram velocidades médias próximas as medidas no experimento material. No entanto o modelo $k-\epsilon$ realizável apresentou um resultado melhor na região próxima a linha central ($y = 0,06$ m), o que pode ser observado na figura 20 para a posição $x/a = 0,2612$. Ao utilizar LES os valores médios da componente u da velocidade foram ligeiramente superestimados.

Ambos os modelos apresentaram dificuldade em estimar os valores de u_{RMS} e v_{RMS} . Na figura 22 observar que na região central do escoamentos os valores obtidos se distanciam dos valores experimentais. A jusante do escoamento os valores obtidos pela simulação se aproximam do resultado experimental, para $x/a = 0,2612$ a metodologia LES obteve bons resultados próximos a parede. Ao analisar os resultados obtidos para v_{RMS} é possível observar que ambos os métodos se aproximam dos dados obtidos pelo experimento material, enquanto na região após o obstáculo ($x/a = 0,215$) os valores são subestimados.

Tanto o LES quanto $k-\epsilon$ realizável apresentaram comportamentos similares para a

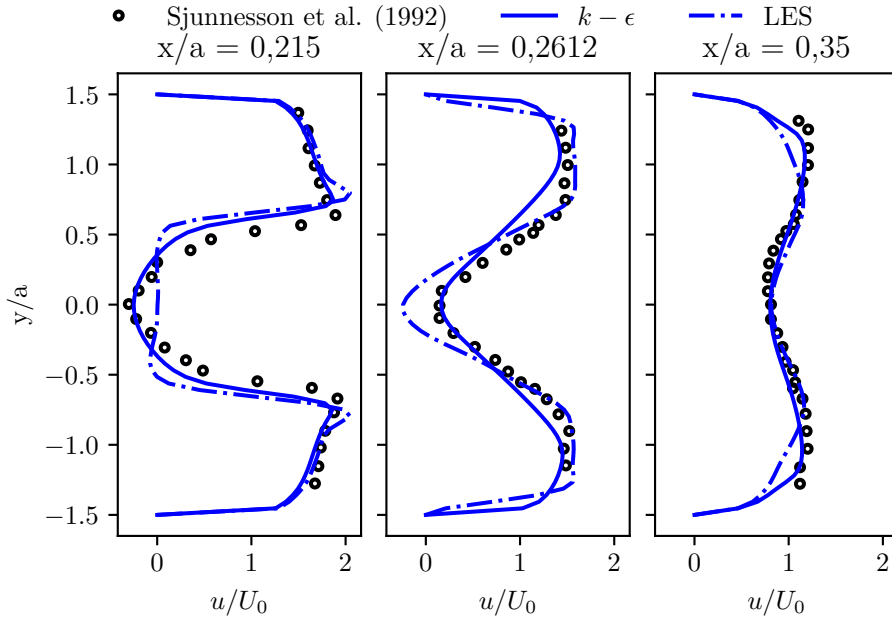


Figura 20 – Velocidade média longitudinal normalizada nas posições $x/a = 0,215$, $x/a = 0,2612$ e $x/a = 0,35$, comparação entre LES, Rk- ϵ e experimento.

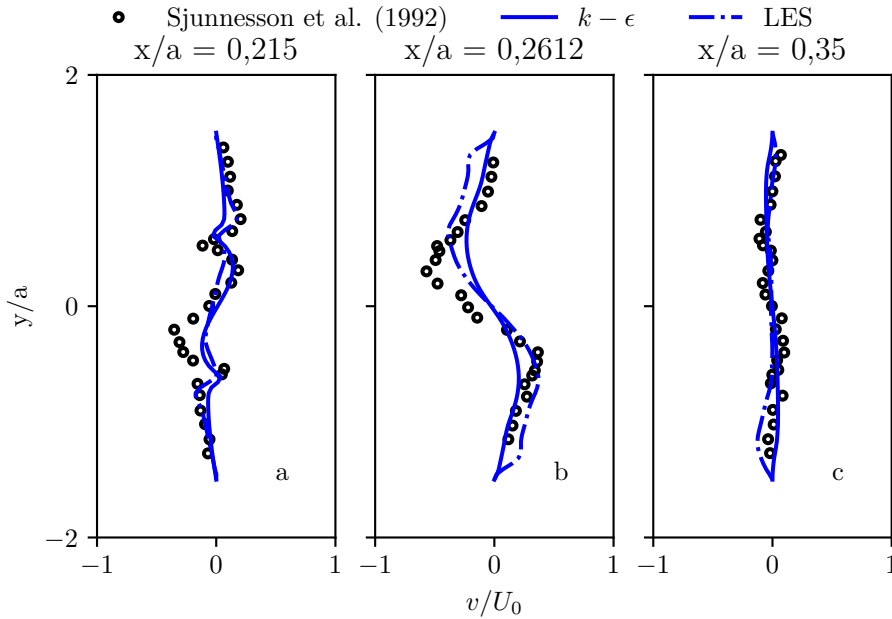


Figura 21 – Velocidade média transversal normalizada para as posições $x/a = 0,215$, $x/a = 0,2612$ e $x/a = 0,35$, comparação entre LES, Rk- ϵ e experimento.

flutuação da componente v da velocidade, sendo que o $k-\epsilon$ realizável apresentou valores maiores que o LES. Conforme pode ser observado na figura 23 os resultados obtidos se aproximam dos resultados experimentais na posição $x/a = 0,2612$ e se afastam próximo ao prisma.

Ambos os modelos apresentaram o mesmo comportamento obtidos pelos experimentos

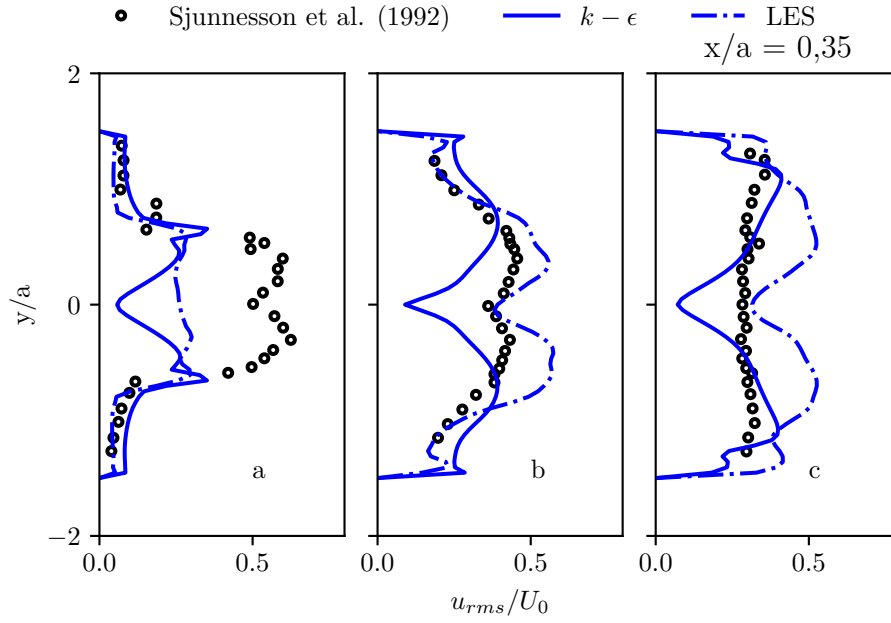


Figura 22 – Velocidade longitudinal RMS normalizada para as posições $x/a = 0,215$, $x/a = 0,2612$ e $x/a = 0,35$, comparação entre LES, Rk- ϵ e experimento.

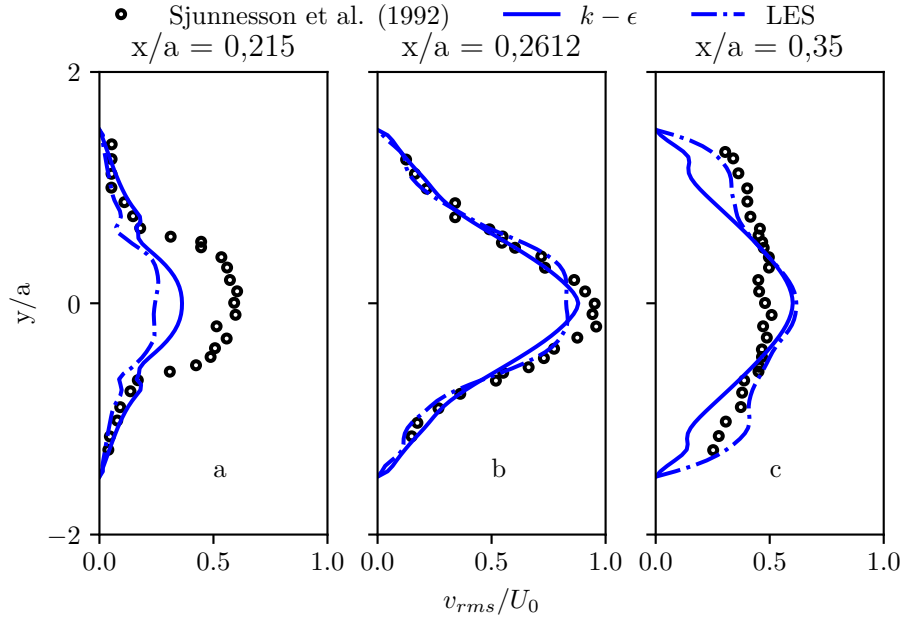


Figura 23 – Velocidade transversal RMS normalizada para as posições $x/a = 0,215$, $x/a = 0,2612$ e $x/a = 0,35$, comparação entre LES, Rk- ϵ e experimento.

materiais para a componente $u'v'$ do Tensor de Reynolds, conforme pode ser visto na figura 24. O $k - \epsilon$ realizável apresentou resultados mais próximos do experimento que o LES. Ao observar a velocidade média na linha central, figura 25 superior, o modelo $k - \epsilon$ realizável apresentou resultados muito próximos aos experimentos. O LES apresentou o mesmo comportamento do experimento, porém com valores ligeiramente diferentes.

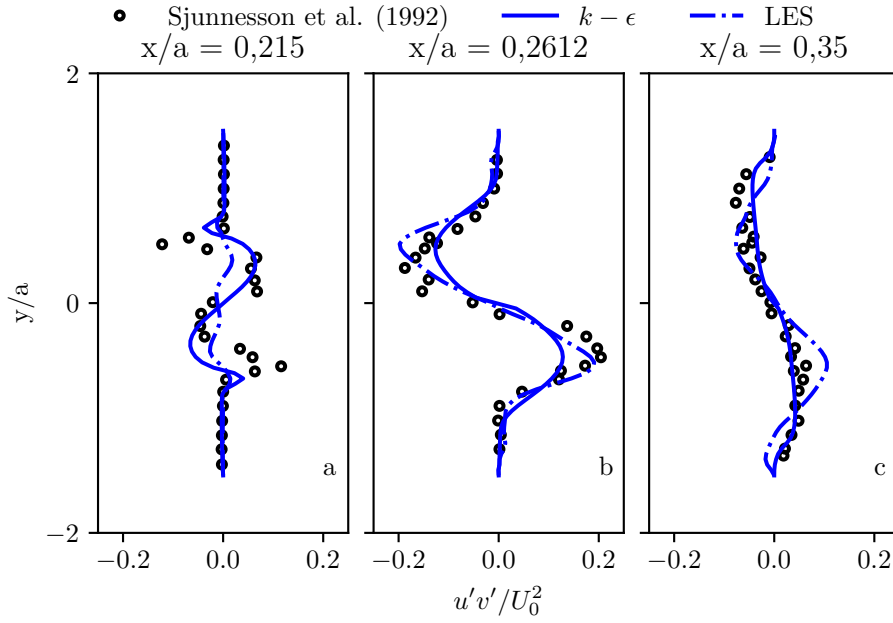


Figura 24 – Componente $u'v'$ normalizado do Tensor de Reynolds para as posições $x/a = 0,215$, $x/a = 0,2612$ e $x/a = 0,35$, comparação entre LES, Rk- ϵ e experimento.

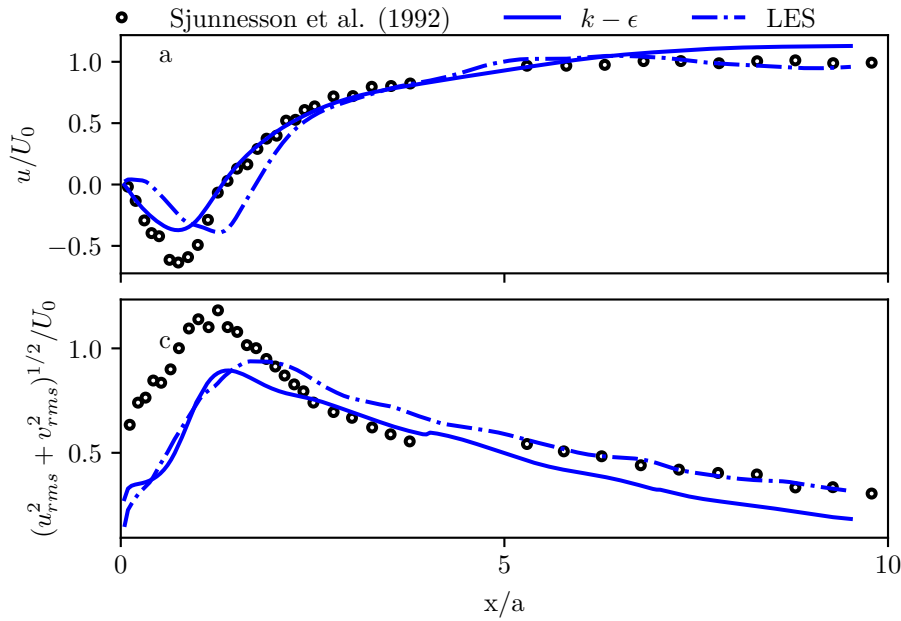


Figura 25 – Velocidade média longitudinal ao longo da linha central, comparação entre LES, Rk- ϵ e experimento.

As Figuras 26 e 27 apresentam contornos instantâneos da magnitude da velocidade e da vorticidade para o $k - \epsilon$ realizável e o LES, respectivamente. Ao utilizar $k - \epsilon$ realizável, observa-se nitidamente que a formação de estruturas turbilhonares após o prisma apresenta um comportamento de instabilidade sinuosa apesar do elevado Número de Reynolds. O mesmo comportamento é observado utilizando LES, porém capturando mais

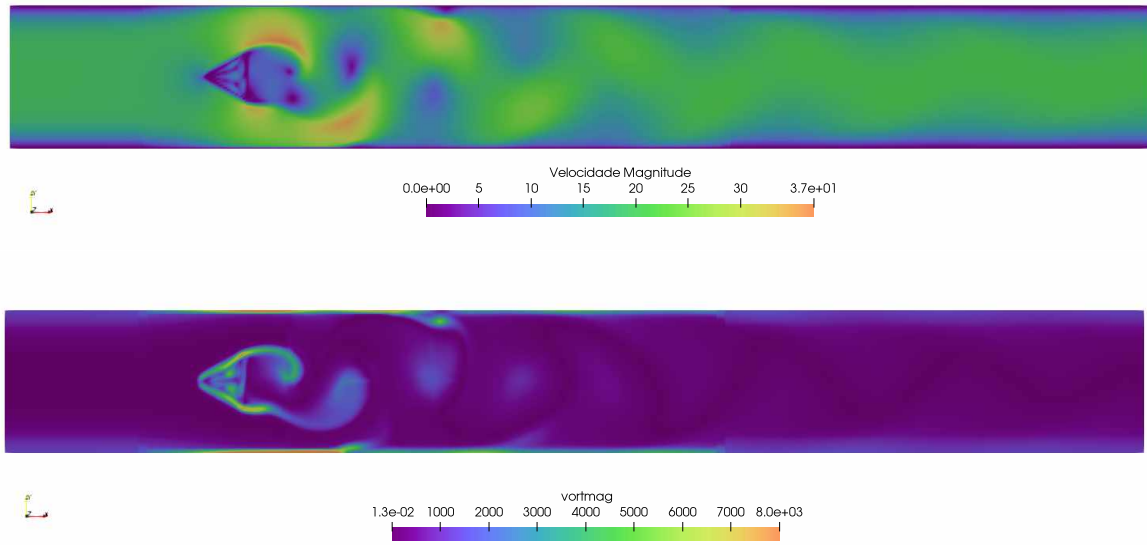


Figura 26 – Contornos para magnitude da velocidade instantânea acima e abaixo contornos para magnitude da vorticidade instantânea para $k - \epsilon$ realizável.

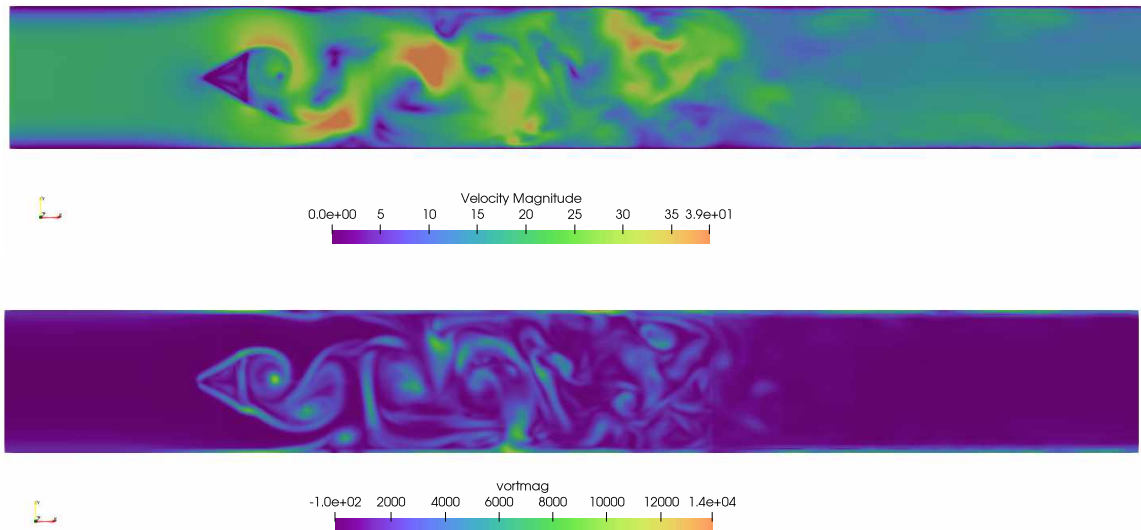


Figura 27 – Contornos para magnitude da velocidade instantânea acima e abaixo contornos para magnitude da vorticidade instantânea para LES.

estruturas turbilhonares menores, que dificulta a visualização das maiores estruturas. As menores estruturas presentes no LES são filtradas pelo $k - \epsilon$ realizável. Em ambas as figuras, o tamanho dos volumes da malha afeta os resultados. Na região próxima à saída do domínio, onde a malha é mais grossa, as estruturas turbilhonares não se formam.

4.4 Escoamento Supersônico Sobre um Degrau a Frente

Neste caso de verificação é simulado o escoamento supersônico sobre um degrau a frente, sendo um caso comum para verificar códigos compressíveis. Este caso foi originalmente proposto por Emery (1968) e adotado por Woodward e Colella (1984) e consiste no escoamento do ar em um canal contendo um degrau a frente. Devido a presença do degrau é formada uma onda de choque oblíqua que é refletida nas paredes do canal. Também é possível observar ondas de expansão. Entre os desafios deste caso está a presença de ondas de choque, grandes gradientes de pressão e regiões com velocidades baixas.

O Número de Mach na entrada é igual a 3, as demais propriedades do escoamento são apresentadas na Tabela 16. O domínio computacional se estende por 3 m de comprimento e 1 m de altura, sendo a profundidade igual ao comprimento do maior volume da malha. O degrau é modelado utilizando o método da fronteira imersa e está localizado 0,6 m após o início do domínio e possui um altura de 0,2 m. Um esboço do domínio computacional é apresentado na Figura 28. Ao longo da face oeste é utilizado condições de contorno Dirichlet para pressão, velocidade e temperatura. Na face leste são aplicadas condições de contorno advectivas para velocidade e Neumann para as demais propriedades. Na face norte é modelado uma parede permitindo o deslizamento da componente x da velocidade, enquanto na superfície do degrau é considerado uma parede sem deslizamento. Por fim a face sul é modelada considerando o escoamento simétrico.

O tempo adimensional, definido na equação 113, é utilizado como parâmetro para comparar com os resultados presentes na literatura. O comprimento de referência utilizado

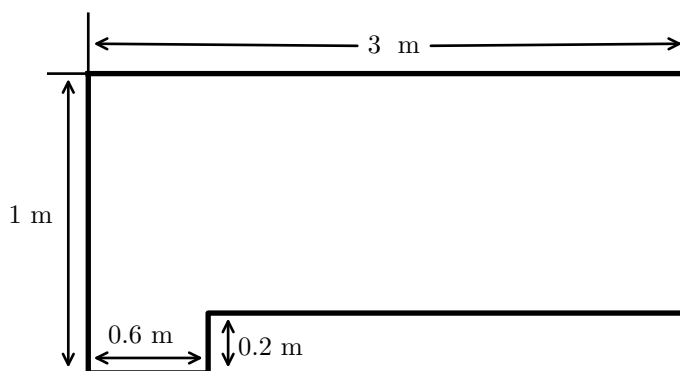
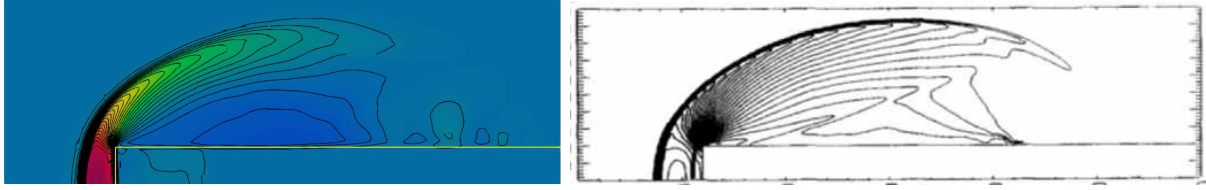


Figura 28 – Esboço do domínio computacional utilizado.

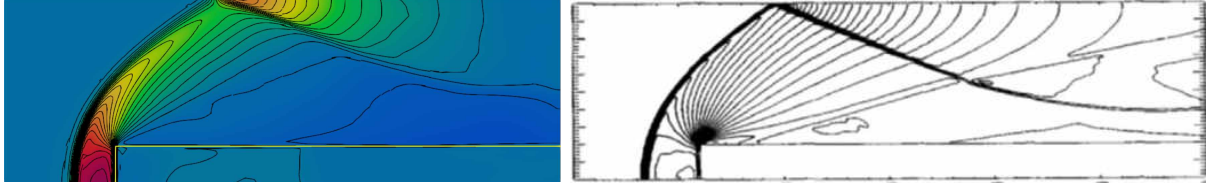
Tabela 16 – Condição inicial do escoamento sobre um degrau a frente.

M_∞	3
T_∞	300 K
P_∞	105325 Pa
Y_{N_2}	0,79
Y_{O_2}	0,21

$\tau = 0.5$, 30 contornos de densidade entre $\rho = 0,2365 \text{ kg/m}^3$ e $\rho = 6,647 \text{ kg/m}^3$.



$\tau = 1$, 30 contornos de densidade entre $\rho = 0,2628 \text{ kg/m}^3$ e $\rho = 7,564 \text{ kg/m}^3$.



$\tau = 2$, 30 contornos de densidade entre $\rho = 0,2669 \text{ kg/m}^3$ e $\rho = 6,65 \text{ kg/m}^3$.

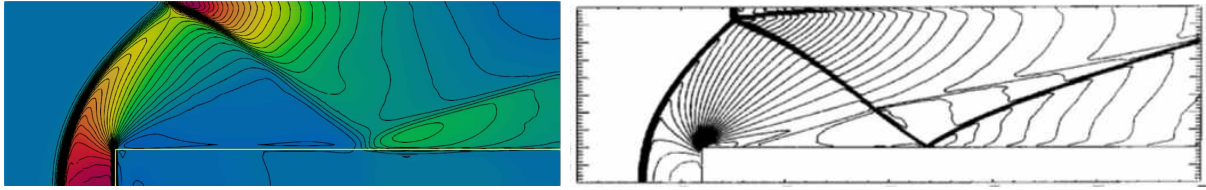


Figura 29 – Comparação entre o resultado obtido pelo código desenvolvido a esquerda e o resultado apresentado por Woodward e Colella (1984) a direita.

é $L = 1 \text{ m}$. A simulação foi realizada utilizando uma malha, que refinada equivale a uma malha com 240×80 volumes, conforme a malha utilizada por Woodward e Colella (1984).

$$\tau = \frac{ut}{L} \quad (113)$$

O resultado na simulação é apresentado na figura 29, os gráficos ao lado esquerdo mostram o resultado obtido pelo no presente trabalho, enquanto os gráficos ao lado direito apresentam os contornos de densidade obtidos por Woodward e Colella (1984). O código desenvolvido conseguiu capturar bem a posição das primeiras ondas de choque, no entanto as ondas de expansão ficaram ligeiramente diferentes do resultado comparado.

A malha foi refinada em função do gradientes de vorticidade e temperatura. A figura 30 apresenta a malha ao final da simulação, indicando que os critérios escolhidos foram os suficientes para refinar a malha nas regiões das ondas de choque.

Foi investigada a influência das propriedades variáveis no escoamentos. A figura 31 mostra a pressão ao longo da linha $y = 0.4 \text{ m}$, onde é possível perceber que a posição da onda de choque refletida ficou ligeiramente diferente para os casos. Apesar das diferenças dos métodos numéricos, os contornos de densidade ficaram similares aos resultados apresentados na literatura, demonstrando que o MFSim é uma boa ferramenta para resolver escoamentos supersônicos transientes.

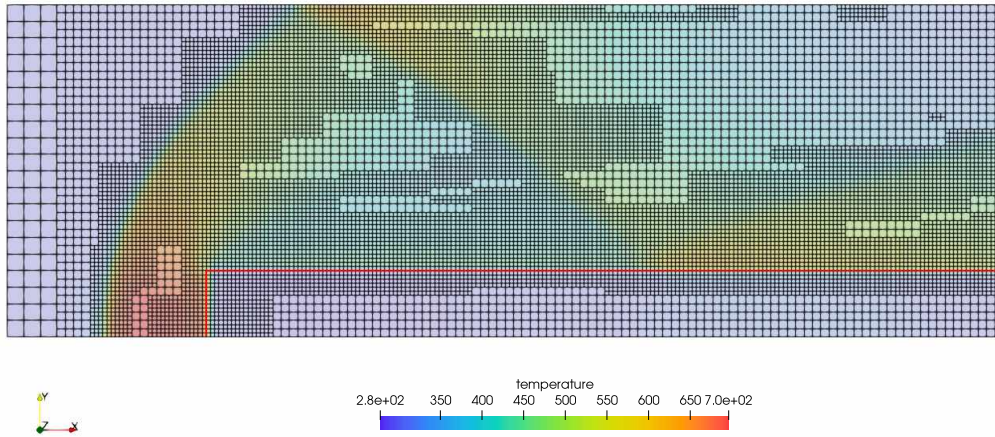


Figura 30 – Ilustração da malha no instante $t = 2$, as linhas vermelhas indicam a fronteira imersa. O fundo é colorido pelos contornos da temperatura.

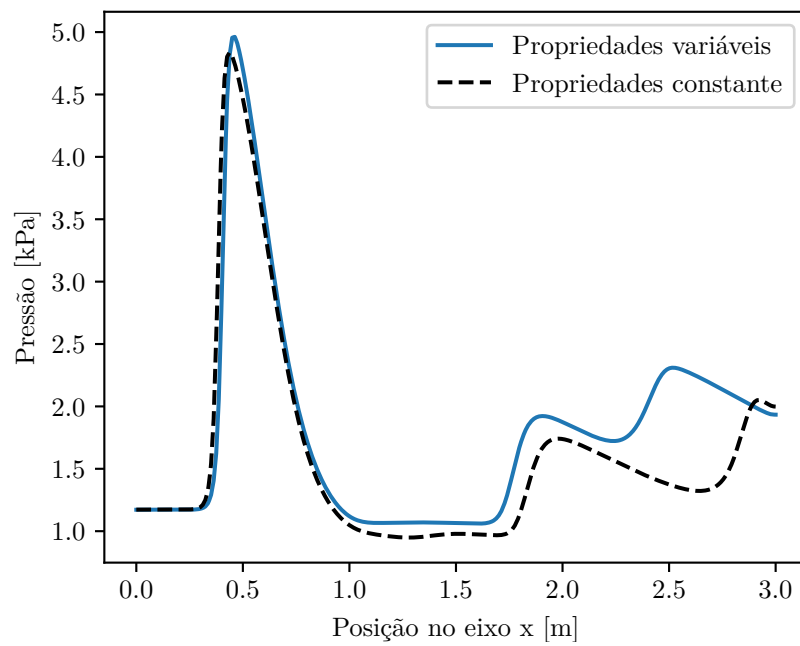


Figura 31 – Pressão ao longo do eixo x para $y = 0,4$ m .

Conclusões

Os acoplamentos pressão-velocidade estudados nesta tese demonstraram uma capacidade de resolver problemas em uma ampla faixa de Números de Mach. Resolvendo escoamentos subsônicos com $\text{Mach} = 3 \times 10^{-4}$ até escoamentos com $\text{Mach} = 3$. O código modela o transporte de espécies químicas com propriedades variáveis em função da concentração das espécies químicas, pressão e temperatura, o que reduz o número de simplificações nos modelos matemáticos. Códigos compressíveis baseados na pressão são uma alternativa a Aproximação de Oberbeck—Boussinesq, indicados para casos com grandes variações de temperatura.

Foi possível resolver diversas configurações de tubo de choque, indicando que o código está resolvendo as equações corretamente. O transporte de espécies químicas em um escoamento compressível foi resolvido corretamente. No caso do tubo de choque reativo, o modelo numérico foi verificado para escoamentos compressíveis com integração direta das taxas de reação química. O método da fronteira imersa, assim como a malha adaptativa demonstraram funcionar bem com o PISO compressível e outros métodos numéricos para os casos estudados. Os modelos de turbulência apresentaram resultados próximos os experimentos.

Ao final dos experimentos numéricos, o código demonstrou muita versatilidade, sendo possível resolver problemas com fenômenos físicos bem distintos. Como por exemplo, convecção natural e escoamentos reativos. Também é um indicativo que é possível resolver problemas mais complexos envolvendo escoamentos transônicos ou supersônicos.

Esta pesquisa pode prosseguir por dois caminhos distintos. A primeira possibilidade é validar o código para escoamentos reativos com integração direta ou EDC para casos 2d e 3d. Nesta mesma linha é possível implementar outros modelos com combustão turbulenta e métodos para acelerar a convergência. Outra possibilidade consiste em expandir o código para modelar escoamentos bifásicos com uma fase compressível. Neste caso será possível investigar o breakup e evaporação de gotas em escoamentos transônicos ou supersônicos.

Referências

ANUFRIEV, I. et al. Study of liquid hydrocarbons atomization by supersonic air or steam jet. **Applied Thermal Engineering**, v. 163, p. 114400, 2019. ISSN 1359-4311. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431119343571>>.

BAO, H. Development and validation of a new eddy dissipation concept (edc) model for mild combustion. 2017.

BARBI, F. et al. Numerical experiments of ascending bubbles for fluid dynamic force calculations. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, Springer, v. 40, p. 1–12, 2018.

BAUM, M.; POINSOT, T.; THÉVENIN, D. Accurate boundary conditions for multicomponent reactive flows. **Journal of Computational Physics**, v. 116, n. 2, p. 247 – 261, 1995. Cited by: 275. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-28144439395&doi=10.1006%2fjcph.1995.1024&partnerID=40&md5=8240f76c152ad07c3d2d9ad8a07825f3>>.

BECKER, R.; BRAACK, M.; RANNACHER, R. Numerical simulation of laminar flames at low mach number by adaptive finite elements. **Combustion Theory and Modelling**, IOP Publishing, v. 3, n. 3, p. 503, 1999.

BELL, J. Amr for low mach number reacting flow. In: SPRINGER. **Adaptive Mesh Refinement-Theory and Applications: Proceedings of the Chicago Workshop on Adaptive Mesh Refinement Methods, Sept. 3–5, 2003**. [S.l.], 2005. p. 203–221.

BELL, J.; DAY, M. Adaptive methods for simulation of turbulent combustion. In: **Turbulent Combustion Modeling: Advances, New Trends and perspectives**. [S.l.]: Springer, 2011. p. 301–329.

BOMAN, E. G. et al. The Zoltan and Isorropia parallel toolkits for combinatorial scientific computing: Partitioning, ordering, and coloring. **Scientific Programming**, v. 20, n. 2, p. 129–150, 2012.

BRESSLOFF, N. A parallel pressure implicit splitting of operators algorithm applied to flows at all speeds. **International journal for numerical methods in fluids**, Wiley Online Library, v. 36, n. 5, p. 497–518, 2001.

- CALEGARI, P. C. et al. An adaptive numerical method for simulating diffusion flame jets. **Mathematics and Computers in Simulation**, Elsevier, v. 207, p. 97–110, 2023.
- CALHOON, W. Heat release and compressibility effects on planar shear layer development. In: **41st Aerospace sciences meeting and exhibit**. [S.l.: s.n.], 2003. p. 1273.
- CHORIN, A. J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 135, n. 2, p. 118–125, 1997.
- CODINA, R.; VÁZQUEZ, M.; ZIENKIEWICZ, O. C. A general algorithm for compressible and incompressible flows. part iii: The semi-implicit form. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, Wiley Online Library, v. 27, n. 1-4, p. 13–32, 1998.
- COLONIUS, T. Modeling artificial boundary conditions for compressible flow. **Annu. Rev. Fluid Mech.**, Annual Reviews, v. 36, p. 315–345, 2004.
- COLONIUS, T.; LELE, S. K.; MOIN, P. Boundary conditions for direct computation of aerodynamic sound generation. **AIAA journal**, v. 31, n. 9, p. 1574–1582, 1993.
- DAMASCENO, M.; VEDOVOTO, J.; SILVEIRA-NETO, A. da. Turbulent inlet conditions modeling using large-eddy simulations. **Computer Modeling in Engineering & Sciences**, v. 104, n. 2, p. 105–132, 2015.
- DAMASCENO, M. M. R. et al. Desenvolvimento de uma modelagem para escoamentos reativos em malhas adaptativas do tipo bloco-estruturada. Universidade Federal de Uberlândia, 2018.
- DEITERDING, R. A parallel adaptive method for simulating shock-induced combustion with detailed chemical kinetics in complex domains. **Computers & Structures**, Elsevier, v. 87, n. 11-12, p. 769–783, 2009.
- DENNER, F.; XIAO, C.-N.; WACHEM, B. G. van. Pressure-based algorithm for compressible interfacial flows with acoustically-conservative interface discretisation. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 367, p. 192–234, 2018.
- DOORMAAL, J. V.; RATHBY, G.; MCDONALD, B. The segregated approach to predicting viscous compressible fluid flows. 1987.
- ELIAS, A. J. et al. Modelagem híbrida urans-les para escoamentos turbulentos. Universidade Federal de Uberlândia, 2018.
- EMERY, A. F. An evaluation of several differencing methods for inviscid fluid flow problems. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 2, n. 3, p. 306–331, 1968.
- FEDKIW, R. P.; MERRIMAN, B.; OSHER, S. High accuracy numerical methods for thermally perfect gas flows with chemistry. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 132, n. 2, p. 175–190, 1997.
- FERRER, P. J. M. et al. A detailed verification procedure for compressible reactive multicomponent navier–stokes solvers. **Computers & Fluids**, Elsevier, v. 89, p. 88–110, 2014.

- FERRER, P. J. M.; LEHNASCH, G.; MURA, A. Compressibility and heat release effects in high-speed reactive mixing layers ii. structure of the stabilization zone and modeling issues relevant to turbulent combustion in supersonic flows. **Combustion and Flame**, Elsevier, v. 180, p. 304–320, 2017.
- FREDERIX, E. et al. Extension of the compressible piso algorithm to single-species aerosol formation and transport. **International journal of multiphase flow**, Elsevier, v. 74, p. 184–194, 2015.
- FREUND, J. B.; LELE, S. K.; MOIN, P. Compressibility effects in a turbulent annular mixing layer. part 1. turbulence and growth rate. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 421, p. 229–267, 2000.
- FUSTER, D.; POPINET, S. An all-mach method for the simulation of bubble dynamics problems in the presence of surface tension. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 374, p. 752–768, 2018.
- GONZALEZ-JUEZ, E. D. et al. Advances and challenges in modeling high-speed turbulent combustion in propulsion systems. **Progress in Energy and Combustion Science**, Elsevier Ltd, v. 60, p. 26–67, 2017. ISSN 03601285. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.pecs.2016.12.003>>.
- GOODWIN, D. G. et al. **Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes**. 2023. <<https://www.cantera.org>>. Version 3.0.0.
- GRAN, I. R.; MAGNUSSEN, B. F. A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. part 2. influence of combustion modeling and finite-rate chemistry. **Combustion Science and Technology**, Taylor & Francis, v. 119, n. 1-6, p. 191–217, 1996.
- HAH, C. A navier-stokes analysis of three-dimensional turbulent flows inside turbine blade rows at design and off-design conditions. 1984.
- HARLOW, F. H.; AMSDEN, A. A. A numerical fluid dynamics calculation method for all flow speeds. **Journal of Computational Physics**, v. 8, n. 2, p. 197–213, 1971. ISSN 10902716.
- HINDMARSH, A. C. et al. SUNDIALS: Suite of nonlinear and differential/algebraic equation solvers. **ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)**, ACM, v. 31, n. 3, p. 363–396, 2005.
- HU, F. Q. On absorbing boundary conditions for linearized euler equations by a perfectly matched layer. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 129, n. 1, p. 201–219, 1996.
- IHME, M. Combustion and engine-core noise. **Annual Review of Fluid Mechanics**, Annual Reviews, v. 49, p. 277–310, 2017.
- ISSA, R. et al. Solution of the implicitly discretised reacting flow equations by operator-splitting. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 93, n. 2, p. 388–410, 1991.
- ISSA, R.; LOCKWOOD, F. On the prediction of two-dimensional supersonic viscous interactions near walls. **AIAA Journal**, v. 15, n. 2, p. 182–188, 1977.

KARKI, K. C.; PATANKAR, S. V. Pressure based calculation procedure for viscous flows at all speeds in arbitrary configurations. **AIAA Journal**, v. 27, n. 9, p. 1167–1174, 1989. ISSN 00011452.

KEE, R. J. et al. Premix: a fortran program for modeling steady laminar one-dimensional premixed flames. **Sandia National Laboratories Report**, n. SAND85-8249, 1985.

LIEN, F.; LESCHZNER, M. A general non-orthogonal collocated finite volume algorithm for turbulent flow at all speeds incorporating second-moment turbulence-transport closure, part 1: Computational implementation. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, Elsevier, v. 114, n. 1-2, p. 123–148, 1994.

LIMA, R. S. d. et al. Desenvolvimento e implementação de malhas adaptativas bloco-estruturadas para computação paralela em mecânica dos fluidos. Universidade Federal de Uberlândia, 2012.

LIU, K.; PLETCHER, R. H. A fractional step method for solving the compressible navier–stokes equations. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 226, n. 2, p. 1930–1951, 2007.

LODATO, G.; DOMINGO, P.; VERVISCH, L. Three-dimensional boundary conditions for direct and large-eddy simulation of compressible viscous flows. **Journal of Computational Physics**, v. 227, n. 10, p. 5105–5143, 2008. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999108000685>>.

MAGNUSSEN, B. On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow. In: **19th aerospace sciences meeting**. [S.l.: s.n.], 1981. p. 42.

MAGNUSSEN, B. F. The eddy dissipation concept: A bridge between science and technology. In: LIBSON, PORTUGAL. **ECCOMAS thematic conference on computational combustion**. [S.l.], 2005. v. 21, p. 24.

MAGNUSSEN, B. F.; HJERTAGER, B. H. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In: **ELSEVIER. Symposium (international) on Combustion**. [S.l.], 1977. v. 16, n. 1, p. 719–729.

MAHLE, I. et al. On the turbulence structure in inert and reacting compressible mixing layers. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 593, p. 171–180, 2007.

MANCO, J. A. A.; MENDONÇA, M. T. de. Comparative study of different non-reflecting boundary conditions for compressible flows. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, Springer, v. 41, p. 1–16, 2019.

MANGANI, L. **Development and Validation of an Object Oriented CFD Solver for Heat Transfer and Combustion Modelling in Turbomachinery Applications**. Tese (Doutorado) — Dipartimento di Energetica, Università degli Studi di Firenze, 2008.

MANGANI, L.; DARWISH, M.; MOUKALLED, F. An openfoam pressure-based coupled cfd solver for turbulent and compressible flows in turbomachinery applications. **Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals**, Taylor & Francis, v. 69, n. 5, p. 413–431, 2016.

- MARCHI, C.; MALISKA, C. A nonorthogonal finite-volume method for the solution of all speed flows using co-located variables. **Numerical Heat Transfer**, Taylor & Francis, v. 26, n. 3, p. 293–311, 1994.
- MAYELI, P.; SHEARD, G. J. Buoyancy-driven flows beyond the boussinesq approximation: A brief review. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 125, p. 105316, 2021.
- MAZUMDER, S. On the use of the fully compressible navier-stokes equations for the steady-state solution of natural convection problems in closed cavities. 2007.
- MELO, R. R. d. S. et al. Modelagem e simulação de escoamentos turbulentos com efeitos térmicos, utilizando a metodologia da fronteira imersa e malha adaptativa. Universidade Federal de Uberlândia, 2017.
- MILLER, S. et al. A pressure-based, compressible, two-phase flow finite volume method for underwater explosions. **Computers & Fluids**, Elsevier, v. 87, p. 132–143, 2013.
- MORALES, F. A. P. et al. Modelagem matemática e computacional de interação fluido-estrutura utilizando elementos sólidos com aplicação na indústria. Universidade Federal de Uberlândia, 2023.
- MOTA, P. H. A. et al. Modelagem numérico-computacional multiníveis de processos de corrosão em sistemas fluidodinâmicos. Universidade Federal de Uberlândia, 2023.
- MOUKALLED, F.; DARWISH, M. A unified formulation of the segregated class of algorithms for multi-fluid flow at all-speeds. Citeseer, 1999.
- MOUKALLED, F.; DARWISH, M. A high-resolution pressure-based algorithm for fluid flow at all speeds. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 168, n. 1, p. 101–130, 2001.
- MOUKALLED, F.; DARWISH, M. Numerical prediction of dispersion and evaporation of liquid sprays in gases flowing at all speeds. **Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals**, Taylor & Francis, v. 54, n. 3, p. 185–212, 2008.
- MOUKALLED, F. et al. **The finite volume method in computational fluid dynamics**. [S.l.]: Springer, 2016. v. 6.
- NATARAJAN, M. et al. An all-mach multiphase flow solver using block-structured amr. 2019.
- NETO, H. R. et al. Modelagem matemática para a interação fluido-estrutura acoplando escoamentos incompressíveis e viga de timoshenko. Universidade Federal de Uberlândia, 2016.
- OKONG'O, N.; BELLAN, J. Consistent boundary conditions for multicomponent real gas mixtures based on characteristic waves. **Journal of Computational Physics**, v. 176, n. 2, p. 330 – 344, 2002. Cited by: 125. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0036501386&doi=10.1006%2fjcp.2002.6990&partnerID=40&md5=f0774945ddc1eb6d9a081b266b4ccd12>>.
- ORAN, E. et al. Weak and strong ignition. i. numerical simulations of shock tube experiments. **Combustion and Flame**, Elsevier, v. 48, p. 135–148, 1982.

- O'BRIEN, J. et al. Subgrid-scale backscatter in reacting and inert supersonic hydrogen–air turbulent mixing layers. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 743, p. 554–584, 2014.
- PADILLA, E. L. M.; LOURENÇO, M. A.; SILVEIRA-NETO, A. Natural convection inside cubical cavities: numerical solutions with two boundary conditions. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, Springer, v. 35, p. 275–283, 2013.
- PAILLERE, H. et al. Comparison of low mach number models for natural convection problems. **Heat and mass transfer**, Springer, v. 36, n. 6, p. 567–573, 2000.
- PARENTE, A. et al. Extension of the eddy dissipation concept for turbulence/chemistry interactions to mild combustion. **Fuel**, Elsevier, v. 163, p. 98–111, 2016.
- PATANKAR, S. Calculation of unsteady compressible flows involving shocks(numerical finite difference method for solution of hyperbolic equations for unsteady compressible flow). 1971.
- PINHEIRO, A. P. et al. Eulerian-lagrangian modelling of aviation kerosene spray breakup and evaporation. Universidade Federal de Uberlândia, 2022.
- PIVELLO, M. R. et al. A fully adaptive front tracking method for the simulation of two phase flows. **International Journal of Multiphase Flow**, Elsevier, v. 58, p. 72–82, 2014.
- POINSOT, T.; VEYNANTE, D. **Theoretical and numerical combustion**. [S.l.]: RT Edwards, Inc., 2005.
- POINSOT, T. J.; LELE, S. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 101, n. 1, p. 104–129, 1992.
- POLITIS, E.; GIANNAKOGLU, K. A pressure-based algorithm for high-speed turbomachinery flows. **International journal for numerical methods in fluids**, Wiley Online Library, v. 25, n. 1, p. 63–80, 1997.
- POPE, S. Computations of turbulent combustion: Progress and challenges. **Symposium (International) on Combustion**, v. 23, n. 1, p. 591–612, 1991. ISSN 0082-0784. Twenty-Third Symposium (International) on Combustion. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0082078406803073>>.
- POTTURI, A. S.; PATTON, C. H.; EDWARDS, J. R. Application of data-driven sgs turbulent combustion models to the volvo experiment. In: _____. **55th AIAA Aerospace Sciences Meeting**. [s.n.], 2017. Disponível em: <<https://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/6.2017-1792>>.
- PRETA, R. T. O. C. et al. Modelagem matemática e computacional de escoamentos turbulentos bifásicos em regime denso. Universidade Federal de Uberlândia, 2023.
- QIN, J. et al. Introducing compressibility with SIMPLE algorithm. **Mathematics and Computers in Simulation**, Elsevier B.V., v. 180, p. 328–353, 2021. ISSN 03784754. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.matcom.2020.09.010>>.

- REICHLING, G.; NOLL, B.; AIGNER, M. Development of a projection-based method for the numerical calculation of compressible reactive flows. In: **51st AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition**. [S.l.: s.n.], 2013. p. 1003.
- REN, Z. et al. Supersonic spray combustion subject to scramjets: Progress and challenges. **Progress in Aerospace Sciences**, Elsevier, v. 105, p. 40–59, 2019.
- RIZZI, A.; ERIKSSON, L.-E. Computation of inviscid incompressible flow with rotation. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 153, p. 275–312, 1985.
- RUBINS, P.; BAUER, R. Review of shock-induced supersonic combustion research and hypersonic applications. **Journal of Propulsion and Power**, v. 10, n. 5, p. 593–601, 1994.
- RUDY, D. H.; STRIKWERDA, J. C. A nonreflecting outflow boundary condition for subsonic navier-stokes calculations. **Journal of Computational physics**, Elsevier, v. 36, n. 1, p. 55–70, 1980.
- RUDY, D. H.; STRIKWERDA, J. C. Boundary conditions for subsonic compressible navier-stokes calculations. **Computers & Fluids**, Elsevier, v. 9, n. 3, p. 327–338, 1981.
- SANKARAN, V.; GALLAGHER, T. Grid convergence in les of bluff body stabilized flames. In: _____. **55th AIAA Aerospace Sciences Meeting**. [s.n.], 2017. Disponível em: <<https://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/6.2017-1791>>.
- SHIH, T.-H. et al. A new k- ϵ eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. **Computers & Fluids**, v. 24, n. 3, p. 227–238, 1995. ISSN 0045-7930. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/004579309400032T>>.
- SILVEIRA-NETO, A. Escoamentos turbulentos: análise física e modelagem teórica. **Universidade Federal de Uberlândia, 1ª edição edition**, 2020.
- SJUNNESSON, A.; HENRIKSON, P.; LOFSTROM, C. Cars measurements and visualization of reacting flows in a bluff body stabilized flame. In: **28th Joint Propulsion Conference and Exhibit**. [S.l.: s.n.], 1992. p. 3650.
- SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations: I. the basic experiment. **Monthly weather review**, American Meteorological Society, v. 91, n. 3, p. 99–164, 1963.
- SOD, G. A. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 27, n. 1, p. 1–31, 1978.
- SOUZA, P. R. C. et al. Multi-phase fluid–structure interaction using adaptive mesh refinement and immersed boundary method. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, Springer, v. 44, n. 4, p. 152, 2022.
- SPALDING, D. Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. In: ELSEVIER. **Symposium (International) on combustion**. [S.l.], 1971. v. 13, n. 1, p. 649–657.

- SUTHERLAND, J. C.; KENNEDY, C. A. Improved boundary conditions for viscous, reacting, compressible flows. **Journal of Computational Physics**, v. 191, n. 2, p. 502 – 524, 2003. Cited by: 167. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0242267634&doi=10.1016%2fS0021-9991%2803%2900328-0&partnerID=40&md5=1e055dea5dc277b7f81efb4f21e9db5d>>.
- SWEBY, P. K. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. **SIAM journal on numerical analysis**, SIAM, v. 21, n. 5, p. 995–1011, 1984.
- THOMPSON, K. W. Time-dependent boundary conditions for hyperbolic systems, ii. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 89, n. 2, p. 439–461, 1990.
- TORO, E. F. **Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013.
- TURNES, S. R. **Introdução à Combustão-: Conceitos e Aplicações**. [S.l.]: AMGH Editora, 2013.
- VEDOVOTO, J. M. **Mathematical and numerical modeling of turbulent reactive flows using a hybrid LES/PDF methodology**. Tese (Doutorado) — Chasseneuil-du-Poitou, Ecole nationale supérieure de mécanique et d . . . , 2011.
- VEDOVOTO, J. M.; SERFATY, R.; NETO, A. D. S. Mathematical and numerical modeling of turbulent flows. **Anais da Academia Brasileira de Ciências**, SciELO Brasil, v. 87, p. 1195–1232, 2015.
- VILLAR, M. M. et al. Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais. Universidade Federal de Uberlândia, 2007.
- VREMAN, A. An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow: Algebraic theory and applications. **Physics of fluids**, American Institute of Physics, v. 16, n. 10, p. 3670–3681, 2004.
- VREMAN, A. W.; SANDHAM, N.; LUO, K. Compressible mixing layer growth rate and turbulence characteristics. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 320, p. 235–258, 1996.
- WANG, Z.; FAN, J.; LUO, K. Combined multi-direct forcing and immersed boundary method for simulating flows with moving particles. **International journal of multiphase flow**, Elsevier, v. 34, n. 3, p. 283–302, 2008.
- WEST, J. P.; GROTH, C. P. Application of detached eddy simulation to a bluff body flame stabilizer in duct flow. In: _____. **55th AIAA Aerospace Sciences Meeting**. [s.n.], 2017. Disponível em: <<https://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/6.2017-1793>>.
- WOODWARD, P.; COLELLA, P. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 54, n. 1, p. 115–173, 1984.
- WU, H. et al. Mvp-workshop contribution: Modeling of volvo bluff body flame experiment. In: **55th AIAA Aerospace Sciences Meeting**. [S.l.: s.n.], 2017. p. 1573.
- YANG, J.; KUBOTA, T.; ZUKOSKI, E. E. Applications of shock-induced mixing to supersonic combustion. **AIAA journal**, v. 31, n. 5, p. 854–862, 1993.

ZHOU, D.; ZHANG, H.; YANG, S. A robust reacting flow solver with computational diagnostics based on openfoam and cantera. **Aerospace**, MDPI, v. 9, n. 2, p. 102, 2022.