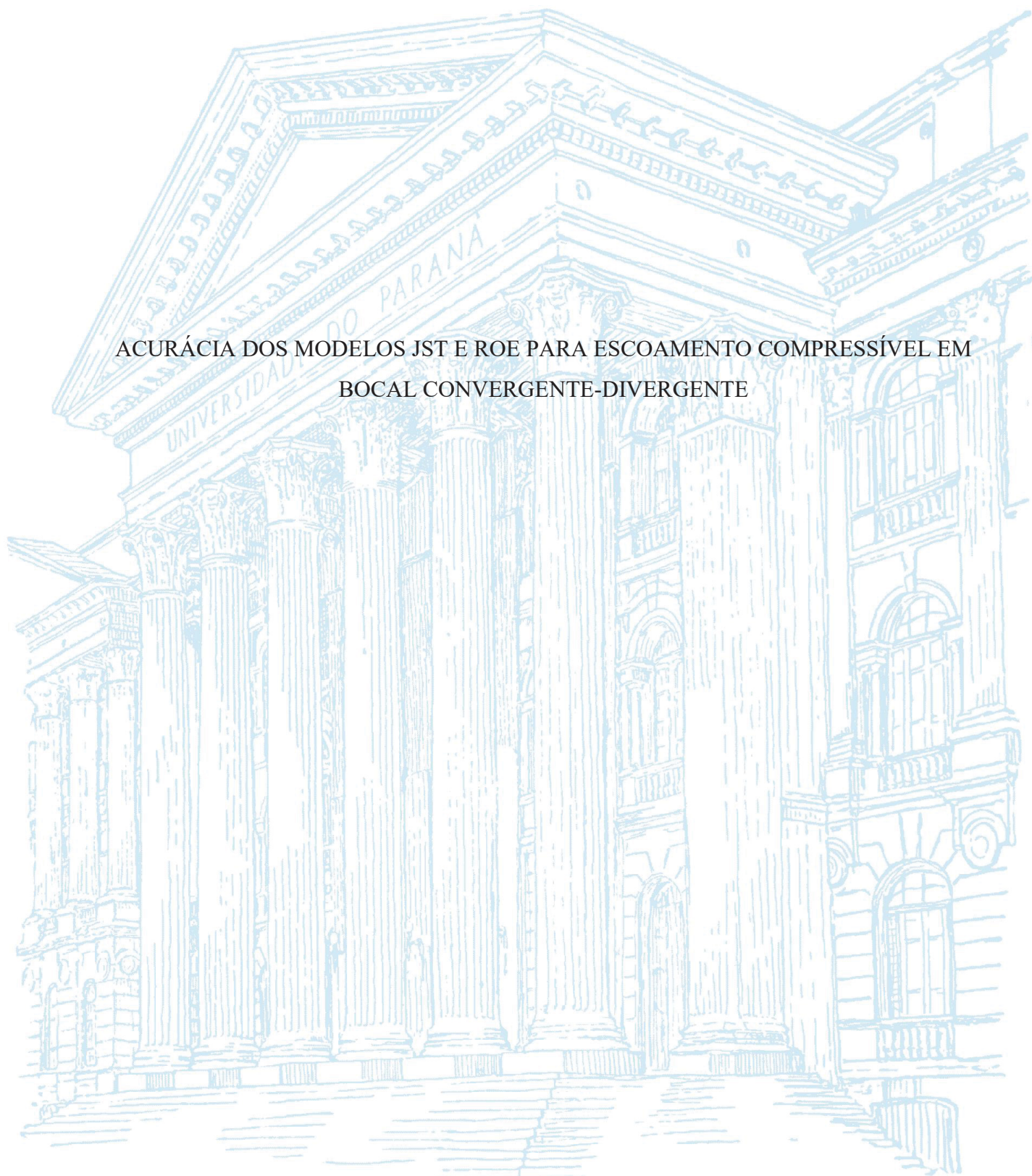


UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

ANDRÉ CHICONI RIALTO

ACURÁCIA DOS MODELOS JST E ROE PARA ESCOAMENTO COMPRESSÍVEL EM
BOCAL CONVERGENTE-DIVERGENTE



CURITIBA

2021

ANDRÉ CHICONI RIALTO

ACURÁCIA DOS MODELOS JST E ROE PARA ESCOAMENTO COMPRESSÍVEL EM
BOCAL CONVERGENTE-DIVERGENTE

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki
Coorientador: Dr. Nicholas Dicati Pereira da Silva

CURITIBA

2021

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

R481a Rialto, André Chiconi
Acurácia dos métodos JST e Roe para escoamento compressível em
bocal convergente-divergente [recurso eletrônico] / André Chiconi
Rialto – Curitiba, 2021.

Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia,
Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki
Coorientador: Dr. Nicholas Dicati Pereira da Silva

1. Mecânica dos fluidos. 2. Escoamento. I. Universidade Federal do
Paraná. II. Araki, Luciano Kiyoshi. III. Silva, Nicholas Dicati Pereira
da. IV. Título.

CDD: 620.1064



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
SETOR DE TECNOLOGIA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO ENGENHARIA
MECÂNICA - 40001016040P5

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação ENGENHARIA MECÂNICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **ANDRÉ CHICONI RIALTO** intitulada: **ACURÁCIA DOS MODELOS JST E ROE PARA ESCOAMENTO COMPRESSÍVEL EM BOCAL CONVERGENTE-DIVERGENTE**, sob orientação do Prof. Dr. LUCIANO KIYOSHI ARAKI, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 09 de Novembro de 2021.

LUCIANO KIYOSHI ARAKI

Presidente da Banca Examinadora

JONAS JOACIR RADTKE

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ - UTFPR)

VIVIANA COCCO MARIANI

Avaliador Externo (PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DO PARANÁ)

AGRADECIMENTOS

Ao meu pai André.

À minha mãe Rosimeiri.

À minha irmã Valéria.

Ao meu primo Michael.

Ao meu orientador Prof. Dr. Luciano K. Araki.

Ao meu coorientador Dr. Nicholas Dicati P. da Silva.

Aos meus amigos Renan e Felipe.

RESUMO

O estudo de bocais convergente-divergente (CD) provou-se essencial na questão de otimização de eficiência e resultados práticos devido às suas diversas aplicações. Para realizar tais estudos, é possível optar pela abordagem numérica. O presente trabalho tem como objetivo principal avaliar a acurácia das aproximações numéricas espaciais Jameson-Schmidt-Turkel (JST) e a de Roe em resolver um problema de um fluido compressível escoando no interior de um bocal CD, através do método computacional de volumes finitos. Visando alcançar tal objetivo, foram geradas cinco malhas não-ortogonais estruturadas através do programa Gmesh, de dimensões iguais e refino constante entre elas. Posteriormente, dez simulações foram realizadas através do *software* livre SU2, com linguagem de programação C++, das quais cinco utilizando a aproximação JST em cada uma das malhas, e cinco a aproximação de Roe em cada uma das malhas. Os resultados da razão entre a pressão na parede do bocal e a pressão de estagnação obtidos para a malha mais refinada em ambas as aproximações foram comparados com resultados experimentais de outros autores. Esse procedimento permitiu concluir que ambas as aproximações apresentaram boa concordância com os resultados experimentais. A análise do comportamento do fluido no interior do bocal mostrou que ambas as aproximações são capazes de reproduzir os fenômenos físicos do escoamento e capturar discontinuidades. Para regiões próximas à discontinuidades, a aproximação de Roe é mais adequada para representar o escoamento real de um fluido. Uma verificação dos resultados foi feita utilizando a incerteza calculada através do estimador de Richardson. No geral, concluiu-se que a aproximação de Roe é a mais adequada e acurada para solucionar o problema proposto.

Palavras-chave: Bocal Convergente-Divergente. DFC. JST. Roe. SU2. Fluido Compressível.

ABSTRACT

The study of convergent-divergent (CD) nozzles is essential for efficiency and practical results optimization due to its wide applications. To do so, it is possible to use the numerical approach. This work has as its main objective to evaluate the accuracy of Jameson-Schmidt-Turkel (JST) and Roe spatial numerical approximation in solving a problem of a compressible fluid flowing inside a CD nozzle, throughout the finite volume method. Seeking to reach this objectives, five non-orthogonal structured meshes were created with the Gmesh program, all with the same dimensions and a constant refine between them. Afterward, ten simulations were done using the free software SU2, which is programed with C++ language. In five of them, were used the JST approximation with each of the meshes, and in the other five, were used Roe approximation with each of the meshes. The results of the ratio between the pressure at the nozzle wall and the stagnation pressure acquired with the finest mesh with both approximations were compared with the experimental data from other authors. This procedure allowed to conclude that both approximations have a good agreement between numerical and experimental results. The analyses of fluid's behavior inside the nozzle showed that both approximations are capable of reproducing physicals phenomena of the flow and capturing discontinuities. For regions close to discontinuities, the Roe approximation is better suited to represent the real fluid's flow. A verification of the results was done utilizing the uncertainty computed by the Richardson estimator. In general, one can concluded the Roe approximation more adequate and accurate to solve the proposed problem.

Keywords: Convergent-Divergent Nozzle. CFD. JST. Roe. SU2. Compressible Fluid.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIGURA 1 – BOCAL CONVERGENTE-DIVERGENTE.....	18
FIGURA 2 – RESULTADOS NUMÉRICOS E EXPERIMENTAIS DO COMPORTAMENTO DO GÁS NA SAÍDA DE UM MOTOR FOGUETE.....	19
FIGURA 3 – DISTRIBUIÇÃO DE ENERGIA CINÉTICA TANGENCIAL DO GÁS NO INTERIOR DO BOCAL.....	19
FIGURA 4 – PROPAGAÇÃO DE ONDAS DE CHOQUE EM UM BOCAL CD.....	23
FIGURA 5 – COMPARAÇÃO ENTRE RESULTADOS EXPERIMENTAIS E NUMÉRICOS DO NÚMERO DE MACH NO INTERIOR DO BOCAL....	24
FIGURA 6 – COMPARAÇÃO ENTRE RESULTADOS EXPERIMENTAIS E NUMÉRICOS NA SEÇÃO DE GARGANTA DO BOCAL.....	25
FIGURA 7 – FRAÇÃO MÁSSICA DE MONÓXIDO DE HIDROGÊNIO E NÚMERO DE MACH NA SEÇÃO DIVERGENTE DO BOCAL.....	26
FIGURA 8 – COMPARAÇÃO ENTRE RESULTADOS EXPERIMENTAIS E NUMÉRICOS NA SAÍDA DO BOCAL ASSIMÉTRICO.....	27
FIGURA 9 – VOLUME DE CONTROLE FIXO EM UM ESCOAMENTO.....	32
FIGURA 10 – VOLUME DE CONTROLE RETANGULAR EM ESCOAMENTO 1D....	45
FIGURA 11 – ALTERAÇÕES NAS CARACTERÍSTICAS DE UM FLUIDO DEVIDO À ONDA DE CHOQUE.....	49
FIGURA 12 – ALTERAÇÕES NAS CARACTERÍSTICAS DE UM FLUIDO DEVIDO À ONDA DE EXPANSÃO.....	49
FIGURA 13 – MALHA NÃO ORTOGONAL ESTRUTURADA PARA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO EM UM TUBO.....	50
FIGURA 14 – MALHA NÃO ORTOGONAL ESTRUTURADA PARA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO EM UM CILINDRO.....	51
FIGURA 15 – DIMENSÕES FÍSICAS DO BOCAL.....	53
FIGURA 16 – MALHA NÃO ORTOGONAL ESTRUTURADA COM 675 VOLUMES.....	55
FIGURA 17 – DIVISÃO DOS CONTORNOS DA MALHA COM 675 VOLUMES.....	56

FIGURA 18 – NÚMERO DE MACH AO LONGO DO BOCAL USANDO A APROXIMAÇÃO NUMÉRICA JST.....	75
FIGURA 19 – NÚMERO DE MACH AO LONGO DO BOCAL USANDO A APROXIMAÇÃO NUMÉRICA DE ROE.....	76
FIGURA 20 – RESULTADOS PARA MACH NA SEÇÃO DE ENCONTRO ENTRE A ONDA DE CHOQUE E A LINHA DE SIMETRIA DO BOCAL, USANDO JST.....	77
FIGURA 21 – RESULTADOS PARA MACH NA SEÇÃO DE ENCONTRO ENTRE A ONDA DE CHOQUE E A LINHA DE SIMETRIA DO BOCAL, USANDO ROE.....	77
FIGURA 22 – RAZÃO ENTRE PRESSÃO NA PAREDE DO BOCAL E PRESSÃO DE ESTAGNAÇÃO AO LONGO DO EIXO AXIAL DO BOCAL.....	79
FIGURA 23 – TEMPERATURA DE ESTAGNAÇÃO AO LONGO DO BOCAL USANDO A APROXIMAÇÃO NUMÉRICA JST.....	82
FIGURA 24 – TEMPERATURA DE ESTAGNAÇÃO AO LONGO DO BOCAL USANDO A APROXIMAÇÃO NUMÉRICA DE ROE.....	83

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – NÚMERO DE DIVISÕES EM CADA DIREÇÃO E NÚMERO DEVOLUMES PARA CADA MALHA.....	56
TABELA 2 – VALOR RESIDUAL, NÚMERO DE ITERAÇÕES E TEMPO COMPUTACIONAL DE CADA SIMULAÇÃO USANDO JST.....	74
TABELA 3 – VALOR RESIDUAL, NÚMERO DE ITERAÇÕES E TEMPO COMPUTACIONAL DE CADA SIMULAÇÃO USANDO ROE.....	74
TABELA 4 – RAZÃO ENTRE PRESSÕES AO LONGO DO EIXO AXIAL DO BOCAL, ERRO E ERRO RELATIVO USANDO JST.....	79
TABELA 5 – RAZÃO ENTRE PRESSÕES AO LONGO DO EIXO AXIAL DO BOCAL, ERRO E ERRO RELATIVO USANDO ROE.....	80
TABELA 6 – ORDEM APARENTE PARA AS APROXIMAÇÕES JST E DE ROE.....	81
TABELA 7 – INCERTEZA ATRAVÉS DO ESTIMADOR DE RICHARDSON E ERRO RELATIVO PARA AS APROXIMAÇÕES JST E DE ROE.....	82
TABELA 8 – NORMA L^1 E ERRO RELATIVO PARA TEMPERATURA DE ESTAGNAÇÃO NA ENTRADA DO BOCAL.....	83

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

- 1D - Unidimensional
- 2D - Bidimensional
- CD - Convergente-Divergente
- DFC - Dinâmica de Fluido Computacional
- JST - Jameson-Schmidt-Turkel

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos	- Descrição	Unidade
a	- Velocidade do som em um fluido	[m/s]
A	- Área do volume de malha	[m ²]
\hat{A}	- Área de controle	
\tilde{A}	- Matriz de mapeamento de \vec{F} em \vec{U}	
b	- Entalpia por unidade de massa	[J/kg]
B	- Matriz de mapeamento de \vec{U} em \vec{W}	
c	- Calor específico	[J/kgK]
C	- Matriz de mapeamento de \vec{F} em \vec{W}	
C_d	- Coeficiente de descarga	
d_1	- Razão entre o segundo e o primeiro valor de \vec{W}	
d_2	- Razão entre o terceiro e o primeiro valor de \vec{W}	
d_3	- Razão entre o quarto e o primeiro valor de \vec{W}	
d_4	- Razão entre o quinto e o primeiro valor de \vec{W}	
D	- Operador dissipativo da aproximação numérica JST	
e	- Energia interna por unidade de massa	[J/kg]
E	- Energia interna total por unidade de massa	[J/kg]
\vec{f}	- Vetor com propriedades do fluido	
\vec{F}	- Vetor com propriedades do fluido	
\vec{g}	- Vetor com propriedades do fluido	
\vec{G}	- Vetor com propriedades do fluido	
h	- Tamanho do elemento de malha	
H	- Entalpia por unidade de massa	[J/kg]
I	- Matriz identidade	
j	- Função escalar no espaço e tempo	
\vec{j}	- Vetor com propriedades do fluido	
J	- Matriz Jacobiana	
k_1	- Constante dependente do gás	[Nm ⁴ /kg ²]
k_2	- Constante dependente do gás	[m ³ /kg]
K	- Matriz genérica para método de Euler Implícito	

\vec{l}	- Função vetorial no espaço e tempo	
L	- Matriz genérica para o método de Euler Implícito	
L^l	- Norma	[K]
m	- Massa	[kg]
\dot{m}	- Fluxo de massa	[kg/s]
M	- Número de Mach	
\vec{M}	- Momento interno total	[Nm]
\vec{M}_S	- Momento total na superfície	[Nm]
\vec{M}_t	- Variação do momento interno total com o tempo	[Nm]
n_1	- Taxa de calor adicionada ao fluido dentro do volume de controle	[J/s]
n_2	- Taxa de trabalho total realizada no fluido dentro do volume de controle	[J/s]
n_3	- Taxa de mudança de energia do fluido conforme ele atravessa o volume de controle	[J/s]
N	- Número de pontos da malha	[pontos]
N_{vol}	- Número de volumes da malha	[volumes]
p	- Pressão	[N/m ²]
p_u	- Ordem aparente	
q	- Razão de refino de malha	
Q	- Calor por unidade de massa	[J/kg]
\dot{Q}	- Taxa de calor por unidade de massa	[J/kgs]
\hat{Q}	- Taxa total de calor adicionada ao volume de controle	[J/kgs]
r	- Contorno da área de controle	
R	- Constante dos gases	[J/kgK]
\tilde{R}	- Matriz constante genérica	
R_y	- Matriz de mapeamento de \vec{G} em \vec{U}	
R_z	- Matriz de mapeamento de \vec{J} em \vec{U}	
s	- Entropia por unidade de massa	[J/kgK]
S	- Superfície de controle	
\hat{S}	- Área perpendicular ao escoamento	[m ²]

\vec{S}	- Vetor resultante da multiplicação entre o vetor normal e o incremento de área	
S_e	- Área de saída do bocal	[m ²]
t	- Tempo	[s]
T	- Temperatura	[K]
\vec{u}	- Vetor com propriedades do fluido	
\vec{U}	- Vetor com propriedades do fluido	
U_{ri}	- Incerteza pelo estimador de Richardson	
v	- Volume específico	[m ³ /kg]
V	- Velocidade	[m/s]
\vec{V}	- Vetor velocidade	[m/s]
\hat{V}	- Volume de controle	
\check{V}	- Volume	[m ³]
\vec{W}	- Vetor paramétrico	
\bar{W}	- Vetor média aritmética entre dois estados do vetor paramétrico	
x, y, z	- Direções cartesianas	
\vec{Y}	- Força de corpo resultante	[N]
\vec{Y}_B	- Força corpo por unidade de massa	[N/kg]
\vec{Y}_S	- Força de superfície resultante	[N]

Símbolos gregos

α	- Função temporal genérica	
$\vec{\beta}_1$	- Autovetor 1	
$\vec{\beta}_2$	- Autovetor 2	
$\vec{\beta}_3$	- Autovetor 3	
$\vec{\beta}_4$	- Autovetor 4	
$\vec{\beta}_5$	- Autovetor 5	
γ	- Razão entre calores específicos	
ε	- Coeficiente adaptado ao fluido	
θ	- Função espacial genérica em x	
λ	- Autovalores	
ν	- Parâmetro para termo dissipativo	
ρ	- Massa específica	[kg/m ³]

σ	- Coeficiente para cálculo da matriz A	
τ	- Compressibilidade	$[m^2/N]$
φ	- Solução numérica	
Ψ	- Constante dissipativa para JST	
Ω	- Operador para a aproximação numérica	

Sobrescritos

(2)	- Segunda Ordem
(4)	- Quarta Ordem
$-I$	- Matriz inversa
—	- Média aritmética
n	- Determinado momento no tempo
$n+1$	- Momento posterior no tempo

Subscritos

0	- Estagnação
∞	- Solução exata
a	- Malha refinada
b	- Malha intermediária
c	- Malha grosseira
f	- Final
i	- Posição do volume na direção x
id	- Ideal
ini	- Inicial
irr	- Irreversível
j	- Posição do volume na direção y
k	- Contorno do volume
L	- Estado anterior
n	- Componente normal
p	- Pressão constante
R	- Estado posterior
r	- Real
s	- Isentrópico
v	- Volume constante
x	- Na direção x

y - Na direção y

z - Na direção z

SUMÁRIO

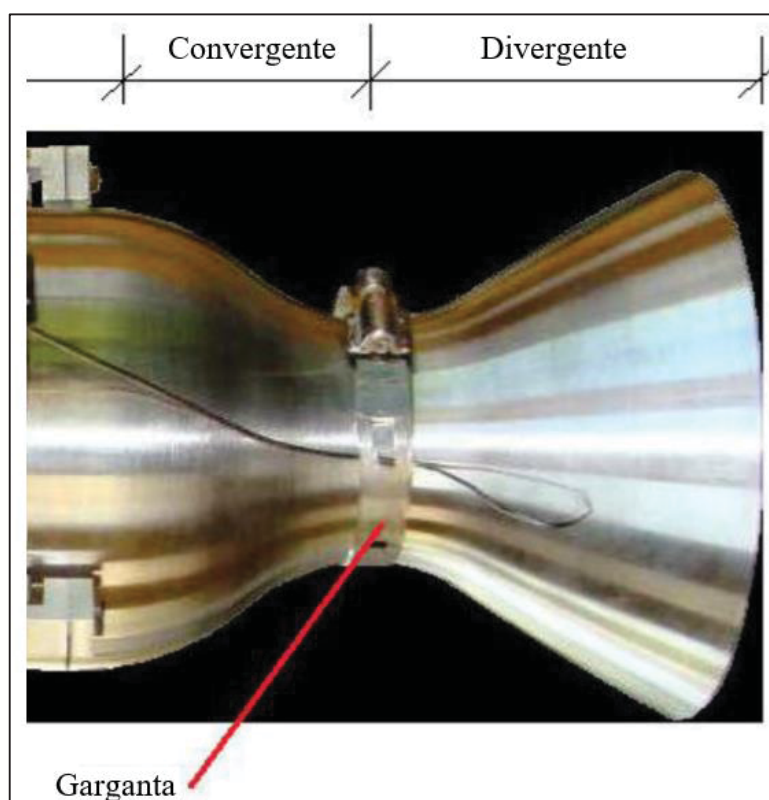
1	INTRODUÇÃO.....	18
1.1.	OBJETIVOS.....	21
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	22
2.1.	ESTUDOS EM BOCAIS CONVERGENTE-DIVERGENTE.....	22
2.2.	APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS ESPACIAIS.....	27
2.3.	VERIFICAÇÃO ATRAVÉS DO ESTIMADOR DE RICHARDSON.....	28
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	29
3.1.	REVISÃO DE TERMODINÂMICA.....	29
3.1.1.	Propriedades de um gás.....	29
3.1.2.	Conceitos de entropia.....	30
3.2.	REVISÃO DE DINÂMICA DE FLUIDOS.....	31
3.2.1.	Lei da conservação de massa.....	31
3.2.2.	Lei da conservação de quantidade de movimento.....	34
3.2.3.	Lei da conservação de energia.....	37
3.2.4.	Velocidade do som em um fluido e número de Mach.....	40
3.2.5.	Características de um escoamento compressível.....	43
3.2.6.	Propriedades totais de um fluido.....	45
3.3.	ONDAS DE CHOQUE E ONDAS DE EXPANSÃO.....	48
3.4.	CONCEITOS SOBRE MALHAS NÃO ORTOGONAIS ESTRUTURADAS.....	50
3.5.	ESTIMADOR DE RICHARDSON.....	51
4	METODOLOGIA.....	53
4.1.	MODELO FÍSICO.....	53
4.2.	EQUAÇÕES GOVERNANTES DO MODELO FÍSICO.....	54
4.3.	MODELO NUMÉRICO.....	55
4.3.1.	Domínio computacional.....	55
4.3.2.	Condições de contorno.....	56
4.3.3.	Aproximação numérica JST.....	57
4.3.4.	Aproximação numérica de Roe.....	61
4.3.5.	Aproximação numérica de Euler Implícito.....	69
4.3.6.	CrITÉrio de convergência.....	70
4.3.7.	Variáveis de interesse.....	71
4.4.	CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO.....	71
4.5.	ANÁLISE DO ERRO NUMÉRICO.....	72

5	SIMULAÇÕES E RESULTADOS.....	74
5.1.	SIMULAÇÕES.....	74
5.2.	COMPORTAMENTO DO FLUIDO NO INTERIOR DO BOCAL.....	75
5.3.	COMPARAÇÃO ENTRE AS APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS JST E DE ROE E DADOS EXPERIMENTAIS.....	78
5.4.	VERIFICAÇÃO DAS APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS JST E DE ROE.....	81
5.5.	ANÁLISES SOBRE O CAMPO DE TEMPERATURA NO BOCAL.....	82
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	85
6.1.	CONCLUSÕES.....	85
6.2.	CONTRIBUIÇÕES.....	85
6.3.	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	86
	REFERÊNCIAS.....	87

1 INTRODUÇÃO

O bocal convergente-divergente (CD) é um equipamento capaz de realizar alterações nas propriedades dos fluidos que escoam em seu interior. Ele é composto por uma região de estrangulamento, onde sua área de seção de entrada é reduzida até uma área mínima, denominada como garganta do bocal, e posteriormente uma seção divergente, na qual essa área aumenta. Um exemplo desse tipo de bocal pode ser visto na FIGURA 1.

FIGURA 1 – BOCAL CONVERGENTE-DIVERGENTE.

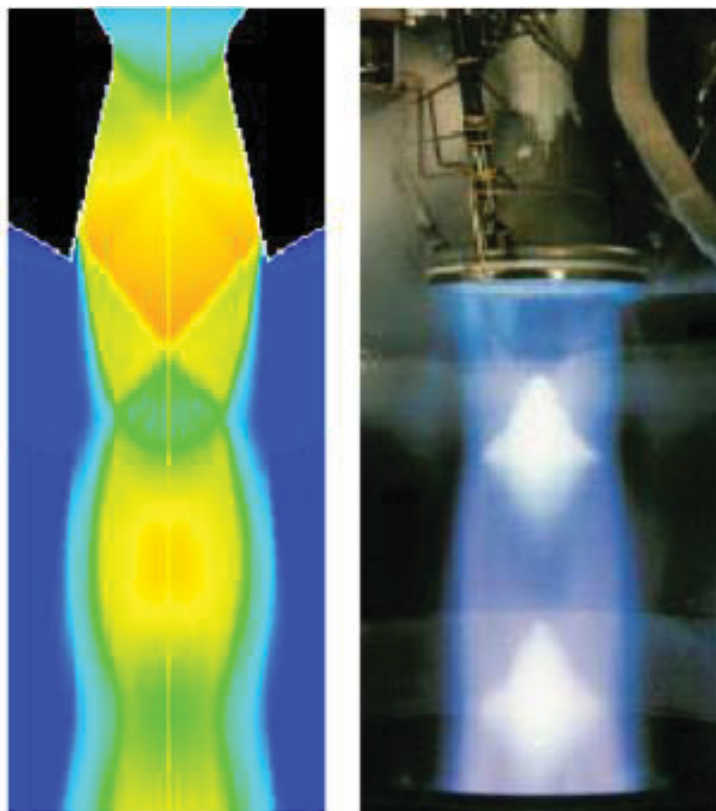


FONTE: Adaptado de Germer (2014).

Esse tipo de equipamento possui diversas aplicações práticas. Como exemplo dessa questão cito os autores a seguir. Balabel et al. (2011), que fizeram previsões precisas do comportamento do gás na saída de bocais CD utilizados em motores foguetes, vistas na FIGURA 2. Tan et al. (2012), os quais melhoraram a eficiência de processos de injeção de polímero ao utilizar um bocal durante o processo. Bian et al. (2018), que fizeram o uso desses equipamentos para aprimorar o processo de liquefação de gases. Vanmore e Dabade (2018), responsáveis por desenvolverem esse tipo de bocal para uso em processos de micro abrasão com resultados mais eficientes. Por fim, Chen, Jiang e Liu (2020), que estudaram o uso desse

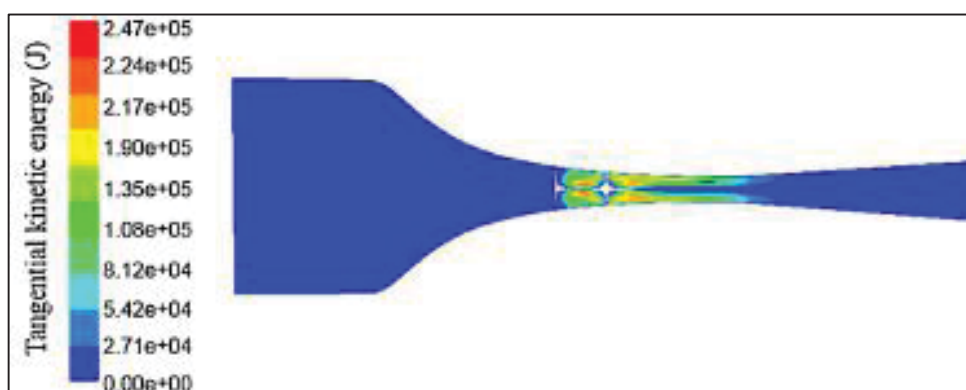
equipamento na área química, verificando a distribuição de energia em aparelhos de desidratação e separação de hidrocarbonetos em gás natural, vistos na FIGURA 3.

FIGURA 2 – RESULTADOS NUMÉRICOS E EXPERIMENTAIS DO COMPORTAMENTO DO GÁS NA SAÍDA DE UM MOTOR FOGUETE.



FONTE: Balabel et al. (2011).

FIGURA 3 – DISTRIBUIÇÃO DE ENERGIA CINÉTICA TANGENCIAL DO GÁS NO INTERIOR DO BOCAL.



FONTE: Chen, Jiang e Liu (2020).

Devido a essa diversidade de uso para o bocal CD, na maioria das vezes os parâmetros utilizados em um caso não são os mais adequados para outros casos. Portanto, é necessário encontrar aqueles que sejam ideais e permitam alcançar a máxima eficiência do equipamento em cada situação. A análise do comportamento do fluido no interior do bocal é considerada como um desses parâmetros. Sendo assim, conhecer as características do fluido e do escoamento no interior do bocal possibilitam a otimização dos resultados práticos obtidos.

Para adquirir esses dados, pode-se realizar o estudo desses bocais através da abordagem experimental, que consiste em montar um protótipo em escala (geralmente reduzida) e submetê-lo às condições mais próximas possíveis das de operação do modelo real para obter resultados. Também há a abordagem de dinâmica de fluidos computacional (DFC), que usa métodos numéricos para adquirir dados de interesse, ou a combinação das duas anteriores.

Ao optar pela metodologia de DFC, é necessário o uso de um programa de computador capaz de solucionar o problema proposto. O SU2 é um código de programação escrito em linguagem C++ que atende tal necessidade. Ele é capaz de resolver análises de equações diferenciais parciais de fluidos compressíveis em regimes turbulentos ou laminares. Além disso, fornece informações que podem ser usadas para aprimoramento de estruturas, refino de malha localizado, e análises de sistemas físicos mais complexos (ECONOMON et al., 2016). Apresenta ainda como vantagens os fatos de ser um programa computacional que pode ser adquirido sem custo, e ser um *software* livre, permitindo acesso ao código fonte para qualquer usuário.

Ao trabalhar com o código SU2 para resolver problemas em bocais, deve-se escolher alguns parâmetros para garantir que o modelo numérico esteja de acordo com a realidade e reproduza resultados confiáveis. Dentre essas escolhas destaco o método a ser utilizado para solução das equações. Para o presente trabalho, foi adotado o método de volumes finitos. Destaco ainda a escolha das aproximações numéricas espaciais.

Uma dessas aproximações é a Jameson-Schmidt-Turkel (JST), que discretiza os termos espaciais das equações de Euler para fluido através de volumes finito (JAMESON; SCHMIDT; TURKEL, 1981). Além da JST há a aproximação de Roe, que é um solver aproximado para problemas de Riemann baseado no esquema de Godunov (Roe. P.L., 1981). Essa aproximação também trata dos termos espaciais de equações, e pode ser utilizada para solucionar as equações de Euler para fluido. Ambas as aproximações mencionadas são opções de uso dentro do código SU2, e serão parte do foco deste trabalho.

Uma forma de assegurar a confiabilidade da solução obtida através do programa SU2, é realizar um processo de verificação, o qual visa conferir se o código numérico é capaz de

solucionar de forma eficaz as equações discretizadas, garantindo que o mesmo esteja livre de erros de implementação e de usuário (Petri et al., 2015). Dentre as possíveis maneiras de se realizar tal ação, apresento o estimador de Richardson, que utiliza da ordem aparente para obter a incerteza de uma solução numérica.

A organização do presente trabalho se dá da seguinte forma: O Capítulo 2 apresenta a revisão bibliográfica. O Capítulo 3 trata de revisões sobre conceitos teóricos, tendo uma seção destinada à termodinâmica, uma destinada à dinâmica de fluidos, duas destinadas a fenômenos que ocorrem em fluidos, e a última destinada ao estimador de Richardson. O Capítulo 4 explica toda a metodologia utilizada para realizar as simulações e cálculos deste trabalho. O Capítulo 5 demonstra as simulações feitas e os resultados obtidos. Por fim, o Capítulo 6 encerra o trabalho com as considerações finais e conclusões.

1.1. OBJETIVOS

O objetivo do presente trabalho é verificar as aproximações numéricas espaciais JST e de Roe, implementadas no programa SU2, quanto à acurácia na resolução do problema de escoamento no interior de um bocal convergente-divergente. Para atingir o objetivo, destacam-se os seguintes objetivos específicos.

- Resolver através do programa SU2 o escoamento de ar no interior do bocal com perfil de Back et al. (1965), usando o método de volumes finitos e as aproximações numéricas JST e de Roe;
- Comparar os resultados obtidos computacionalmente de cada uma das aproximações numéricas com os obtidos por Back et al. (1965); e
- Realizar uma verificação das soluções para o problema do bocal usando do estimador de Richardson e da ordem aparente.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. ESTUDOS EM BOCAIS CONVERGENTE-DIVERGENTE

Back et al. (1965) verificaram experimentalmente a razão entre a pressão do fluido na parede do bocal e a pressão de estagnação, usando bocais com dimensões diferentes. Observaram também o fenômeno da aparição de ondas de choques. Em cada estudo, os autores comparam os resultados dos testes obtidos com os resultados previstos analiticamente. Em alguns casos, os resultados eram compatíveis, porém, em outros, provou-se que o previsto analiticamente não ocorria de fato experimentalmente. Para esses últimos casos, os autores apresentam possíveis motivos da diferença nos resultados.

Em 1979, o comportamento do escoamento de uma mistura de ar e água no interior de um bocal CD foi estudado experimentalmente por Sandhu e Jameson. Controlando a pressão de entrada, os autores provocaram um escoamento bloqueado na garganta do bocal e compararam seus estudos com dados analíticos, mostrando uma boa concordância entre os resultados (SANDHU; JAMESON, 1979).

O motivo da presença de ruídos no bocal de um jato supersônico foi o foco do trabalho de Tam e Tanna (1982). Ao analisar o número de Mach no interior de bocais subexpandidos e sobre-expandidos os autores verificaram experimentalmente que o ruído estava associado com seu valor, e com interações com o choque periódico formado na saída do bocal. A comparação com resultados analíticas reafirmaram suas conclusões.

Arminjon e Rousseau (1985) desenvolveram computacionalmente uma solução usando elementos finitos para problemas governados pela equações de Euler para fluidos. Resolveram através de seu programa um caso unidimensional de onda do choque com reflexão e um caso tridimensional com ondas de choque em bocais CD. Ao comparar com resultados já obtidos, notaram que o programa resolvia com sucesso o caso unidimensional, porém não era tão eficiente para o tridimensional.

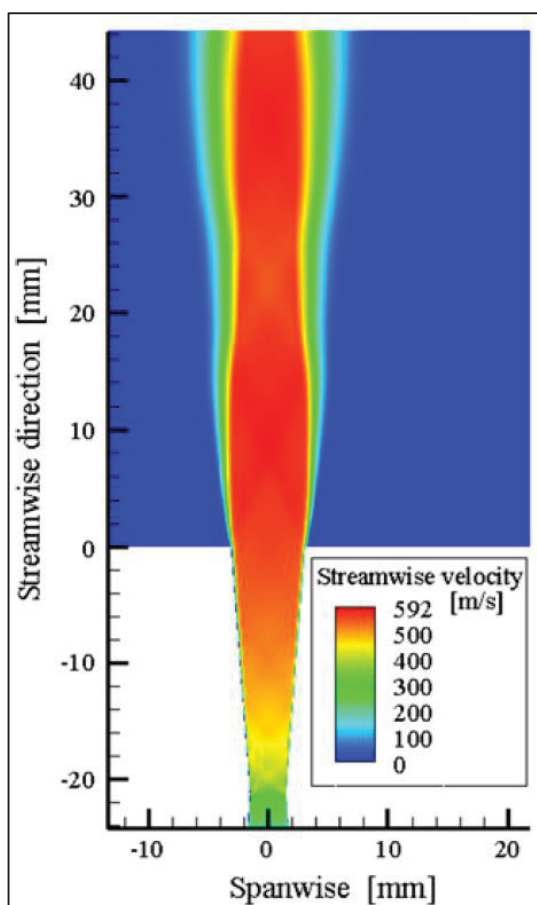
Rincón e Elder (1997) também desenvolveram seu próprio código computacional, com o objetivo de mapear todos os possíveis valores de Mach em um escoamento, baseado na pressão do fluido. Em um de seus testes, analisam as isolinhas do número de Mach no interior de um bocal CD e comparam com resultados de outras literaturas, provando que o método é acurado.

Em 2007, o estudo computacional de ondas de choque em um bocal convergente-divergente foi realizado por Xu e Zhao. Realizando simulações numéricas para as equações bidimensionais de Navier-Stokes, os autores verificaram a presença de ondas de choque no

interior e na saída do bocal, dependendo das condições do fluido. Também perceberam que a viscosidade influencia a característica das ondas de choque (XU; ZHAO, 2007).

A influência de propriedades do fluido no interior do bocal em relação ao processo de revestimento por partículas foi verificada numericamente por Park et al. (2010). Esses pesquisadores estudaram, dentre outros parâmetros, efeitos de ondas de choque sobre o processo, e concluíram que tais ondas devem ser minimizadas com o propósito de diminuir a flutuação por descontinuidades nas propriedades do fluido. A FIGURA 4 demonstra o resultado computacional obtido para a propagação das ondas de choque. O bocal CD está disposto verticalmente, com sua entrada em -24 e sua saída em 0, e o fluxo se move de baixo para cima.

FIGURA 4 – PROPAGAÇÃO DE ONDAS DE CHOQUE EM UM BOCAL CD.



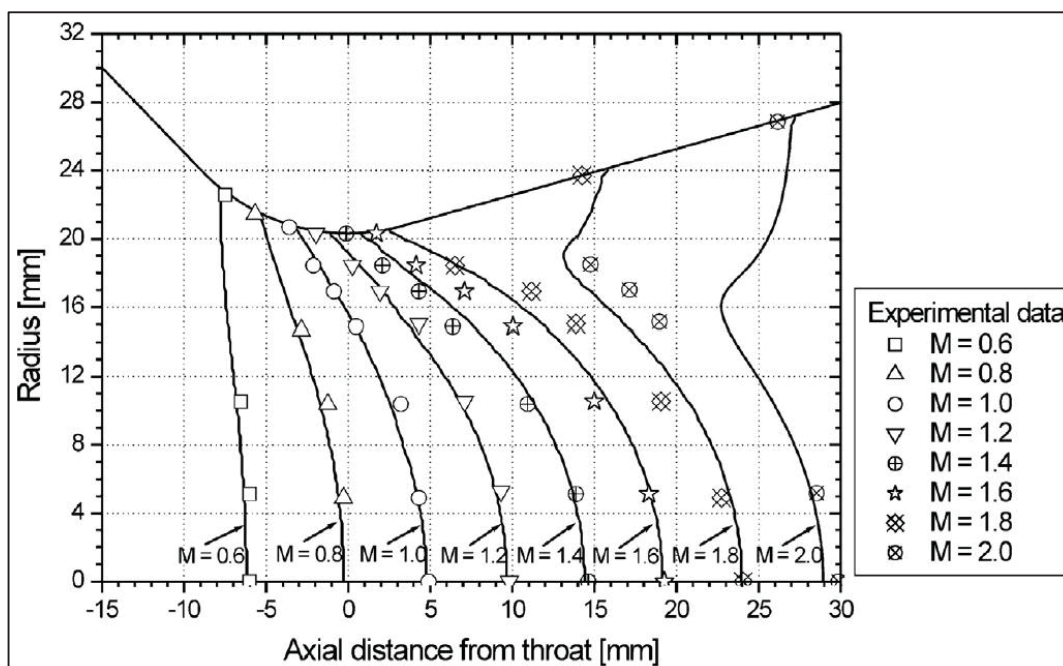
FONTE: Park et al. (2010).

Da Silva (2015) estuda computacionalmente o comportamento de um bocal CD. Em um de seus testes, o autor avalia o número de Mach no interior de um bocal CD e verifica que o método *upwind difference scheme* apresenta vantagens sobre o *total variation diminishing* na captura de ondas de choque para o problema. Ele também realiza a validação de seu código,

comparando a razão entre a pressão na parede do bocal e a pressão de estagnação de entrada com resultados experimentais de outros autores.

Os autores Araki e Marchi (2017) também optaram por comparar resultados computacionais e numéricos. Após desenvolverem seu algoritmo computacional para o estudo de um bocal convergente-divergente usado em motores de foguete, compararam os resultados das simulações numéricas com dados experimentais adquiridos por outros pesquisadores. Com a análise de variáveis de interesse, como pressão e número de Mach no interior do bocal, puderam assegurar a confiabilidade do código na reprodução de resultados satisfatórios. A FIGURA 5 representa um dos gráficos de comparação fornecidos pelos autores.

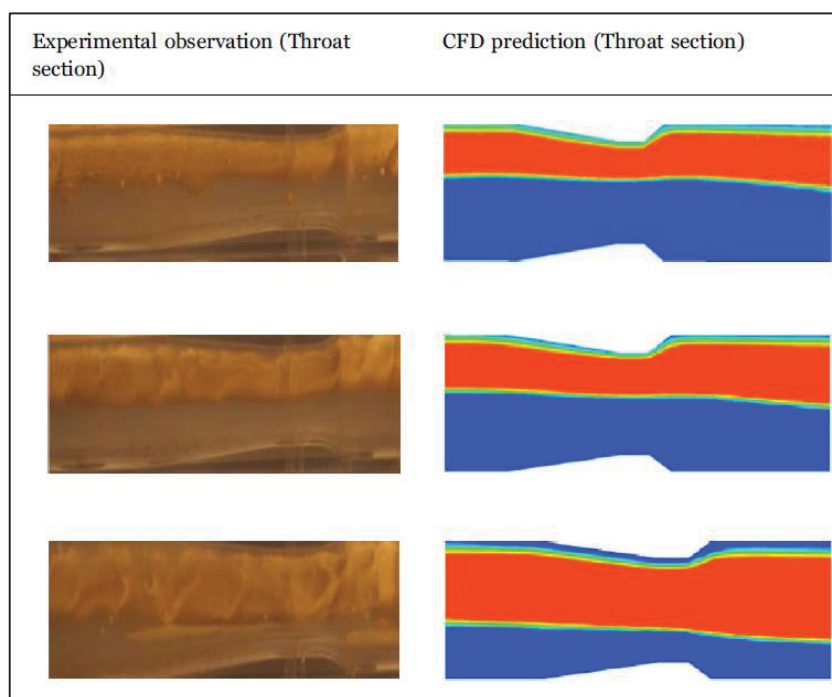
FIGURA 5 – COMPARAÇÃO ENTRE RESULTADOS EXPERIMENTAIS E NUMÉRICOS DO NÚMERO DE MACH NO INTERIOR DO BOCAL CD.



FONTE: Adaptado de Araki e Marchi (2017).

Dehkordi et al. (2017) realizaram estudos computacionais do escoamento viscoso através de um bocal CD da mistura água-óleo, e compararam os resultados numéricos com dados experimentais, a fim de validar a acurácia do código programado. Dez diferentes casos foram estudados pelos autores. Os resultados da comparação apontaram como confiável o uso do método computacional para abordar essa situação. A FIGURA 6 apresenta uma das comparações feita pelos autores.

FIGURA 6 – COMPARAÇÃO ENTRE RESULTADOS EXPERIMENTAIS E NUMÉRICOS NA SEÇÃO DE GARGANTA DO BOCAL.



FONTE: Adaptado Dehkordi et al. (2017).

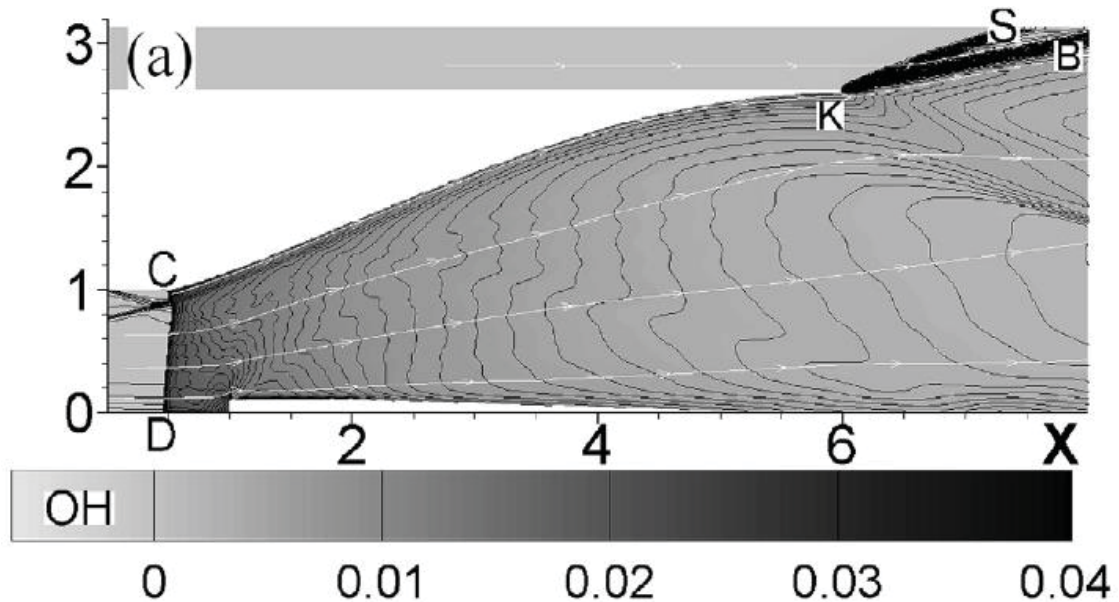
Testes computacionais foram feitos por Tunik (2018) em bocais CD para verificar parâmetros de controle de detonação na combustão de misturas rarefeitas de hidrogênio-ar em propulsores. Esses testes foram realizados a altitudes entre 20 km e 24 km, variando-se a velocidade de entrada no bocal. Como conclusão, verificaram que é possível alcançar um estado de regime contínuo de combustão do hidrogênio no interior do propulsor, melhorando a eficiência do equipamento. A FIGURA 7 apresenta o resultado numérico obtido pelos autores para a fração mássica de monóxido de hidrogênio e valores de linhas do número de Mach constante na seção divergente do bocal.

Li et al. (2019) obtiveram resultados computacionais sobre as alterações que o material de construção do bocal pode acarretar no processo de atomização. Em suas pesquisas, observaram o efeito do coeficiente de resistência do material sobre o tamanho das partículas e a distribuição do spray em cada material. Concluíram que quanto maior o coeficiente, maior será o tamanho das partículas.

A influência do uso de bocais em processos de condensação de dióxido de carbono através de resultados experimentais foi demonstrada em Chen et al. (2020). Seus estudos indicaram que a pressão de entrada e temperatura de entrada no bocal possuem influência significativa sobre o

processo, enquanto a alteração na quantidade de dióxido de carbono representa mudanças insignificantes nos resultados finais.

FIGURA 7 – FRAÇÃO MÁSSICA DE MONÓXIDO DE HIDROGÊNIO E NÚMERO DE MACH NA SEÇÃO DIVERGENTE DO BOCAL.

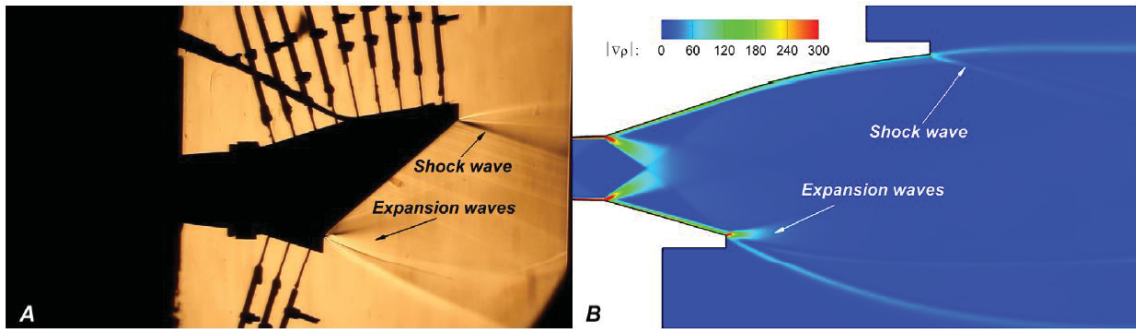


FONTE: Tunik (2018).

O uso de dois tipos diferentes de bocais em motores híbridos de foguete foi o objeto de estudo computacional dos autores Tian et al. (2020). Após obterem os resultados de algumas simulações numéricas, puderam observar que é possível melhorar o impulso, a eficiência de combustão, e o coeficiente de propulsão do motor ao se utilizar o bocal do tipo “*aerospike*” ao invés de um bocal CD.

Lv et al. (2020) utilizaram o método de comparação de resultados no estudo de um propulsor de foguete, composto por um bocal convergente-divergente, acoplado a um bocal assimétrico. O bocal CD é usado para controle da velocidade de entrada do fluido no bocal assimétrico, e este último, foi construído assim para tentar maximizar o efeito de propulsão. A FIGURA 8 demonstra uma das comparações feitas pelos pesquisadores, onde pode-se observar a formação de ondas de choque e ondas de expansão na saída do bocal assimétrico. Sua conclusão foi que o método computacional consegue reproduzir dados condizentes com fenômenos reais.

FIGURA 8 – COMPARAÇÃO ENTRE RESULTADOS EXPERIMENTAIS E NUMÉRICOS NA SAÍDA DO BOCAL ASSIMÉTRICO.



FONTE: Adaptado de Lv et al. (2020).

2.2. APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS ESPACIAIS

Em 2008, uma adaptação da aproximação numérica espacial JST foi proposta por Esfahanian e Akbarzadeh. Solucionando um problema bidimensional de Navier-Stokes através de compressibilidade artificial e método pré-condicionado, os autores encontraram resultados satisfatórios e afirmaram que o uso desse método acelera a convergência do código.

Aguirre et al. (2014) desenvolveram um código de programação capaz de resolver problemas que envolvam grandes deformações em objetos sólidos. Nesse programa, foi feito o uso da aproximação numérica JST, com algumas modificações, para solução das equações espaciais discretizadas do problema. Com algumas simulações, conseguiram comprovar a eficiência desse códigos para casos de baixa ordem.

Alakashi e Basuno (2014) utilizam tanto a aproximação numérica de Roe quanto a aproximação numérica de células-centradas para realizar seus estudos. Para tal, realizaram simulações numéricas de um fluxo em regime transônico passando por uma seção de pás de turbina. Ao comparar ambos os resultados, concluíram que as duas aproximações numéricas são satisfatórias na solução do problema proposto.

Em 2015, Jameson, um dos autores responsáveis pelo desenvolvimento da aproximação JST, propôs melhorias para ela, apontando algumas alterações e implementações que poderiam ser feitas em alguns casos específicos de problemas numéricos (JAMESON, 2015).

Com o objetivo de desenvolver um novo método computacional para solução de problemas que apresentam alto nível de tensão em sólidos, Lee et al. (2016) adaptaram a aproximação numérica JST original, a fim de resolver um problema discretizado originado de um conjunto de leis conservativas da área de dinâmica de sólidos.

Um extensão simples da aproximação numérica de Roe é vista em Arabi, Trépanier e Camarero (2019). Os pesquisadores desenvolveram um algoritmo para solucionar o problema de um gás misto em equilíbrio termodinâmico local, regidos pelas Equações de Euler. Com os resultados de suas simulações, verificaram que a aproximação de Roe no algoritmo é acurada e de fácil implementação.

2.3. VERIFICAÇÃO ATRAVÉS DO ESTIMADOR DE RICHARDSON

Técnicas de verificação de códigos computacionais são comumente empregadas junto a simulações numéricas. O uso do método do estimador de Richardson como ferramenta de verificação pode ser visto em Marchi (2001). Em sua tese o autor explica e exemplifica a utilização desse método para estimar incertezas da solução numérica de programas computacionais. Ele utiliza de uma variável de interesse genérica, e a discretiza utilizando os métodos de elementos finitos.

Em 2014, Martins et al. utilizam o estimador de Richardson, juntamente ao método da extrapolação de Richardson, para verificar o erro de programação em casos de dinâmica de fluido computacional. Utilizando três problemas modelos diferentes, com solução exata conhecidas, os autores desenvolveram um código computacional e verificaram com esse estimador a incerteza nas soluções (Martins et al., 2014).

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A fundamentação teórica deste trabalho está dividida em cinco seções. As duas primeiras são revisões teóricas sobre termodinâmica e dinâmica de fluidos. Posteriormente, é tratado sobre os fenômenos de ondas de choque e de expansão. Alguns conceitos sobre malhas ortogonais não-estruturadas são apresentados na seção seguinte. Por fim, é demonstrado a metodologia aplicada para cálculo de incertezas numéricas através do estimador de Richardson.

3.1. REVISÃO DE TERMODINÂMICA

3.1.1. Propriedades de um gás

Considerando um gás qualquer em um determinado espaço e adotando que esse é um gás ideal, ou seja, desconsiderando efeitos de forças intermoleculares presentes nele, é possível obter sua equação de estado, apresentada na Equação (1), a partir da teoria da estática ou da cinemática na área de engenharia mecânica (ANDERSON, 2003)

$$p\check{V} = mRT, \quad (1)$$

onde p é a pressão, \check{V} é o volume do sistema, m é a massa, R é a constante do gás, e T é a temperatura.

Variações dessa equação de estado podem ser escritas para fins de conveniência em cada situação. Como exemplo, é possível dividir toda a Equação (1) pela massa, resultando em

$$pv = RT, \quad (2)$$

onde v é o volume específico.

Como o volume específico é o inverso da massa específica (ρ), a Equação (2) pode ser reescrita como

$$p = \rho RT. \quad (3)$$

Para casos em que não é possível fazer a consideração de um gás ideal, deve-se utilizar a equação de estado para um gás real,

$$\left(p + \frac{k1}{v^2}\right)(v - k2) = RT , \quad (4)$$

onde $k1$ e $k2$ são constantes diferentes que dependem do tipo de gás usado.

Além da pressão, temperatura, e massa específica de um gás, outras duas propriedades importantes são a energia interna e a entalpia. A energia interna corresponde ao somatório de todas as energias presentes nas partículas de um gás, e pode ser escrita como uma função da temperatura, e do volume específico, como demonstrado na Equação (5). A entalpia por sua vez, é obtida através da energia interna de acordo com a Equação (6).

$$e = e(T, v) , \quad (5)$$

$$b = e + pv , \quad (6)$$

onde e é a energia interna por unidade de massa, e b é a entalpia por unidade de massa.

Por fim, para um sistema termicamente perfeito (forças intermoleculares dos gases desconsideradas), é possível obter o calor específico a volume constante (c_v) e o calor específico a pressão constante (c_p) como apresentado nas Equações (7) e (8), respectivamente.

$$c_v = \left(\frac{de}{dT}\right)_v , \quad (7)$$

$$c_p = \left(\frac{db}{dT}\right)_p . \quad (8)$$

3.1.2. Conceitos de entropia

Assim como apresentado por Anderson (2003), a entropia é uma forma de energia em um sistema que indica “a direção” em que os fenômenos ocorrerão. Em um sistema térmico, o valor incremental da entropia por unidade de massa (ds) pode ser obtido pela divisão entre o incremento de calor por unidade de massa adicionado ao sistema (dQ) e a temperatura atual do sistema, adicionado de uma parcela de energia por unidade de massa gerada por forças dissipativas (ds_{irr}),

$$ds = \frac{dQ}{T} + ds_{irr} . \quad (9)$$

Quando presentes, os efeitos dissipativos sempre causam aumento na entropia do sistema, portanto tem-se que ($ds_{irr} \geq 0$), sendo que o sinal de igual indica casos de ausência desses efeitos. Utilizando esse fato em conjunto com a Equação (9), é possível obter

$$ds \geq \frac{dQ}{T} . \quad (10)$$

A Equação (10) permite concluir que o conjunto de processos que ocorrem em um sistema tendem a aumentar o valor de sua entropia. Caso a entropia permaneça a mesma do começo ao final do processo, esse é considerado como sendo isentrópico.

3.2. REVISÃO DE DINÂMICA DE FLUIDOS

Essa seção demonstra a obtenção das principais leis de dinâmica de fluidos, tanto em sua forma integral, quanto em sua forma diferencial. Também apresenta a obtenção da velocidade de som, número de Mach em um escoamento, a classificação do escoamento quanto à compressibilidade do fluido, e propriedades totais de um fluido.

3.2.1. Lei da conservação de massa

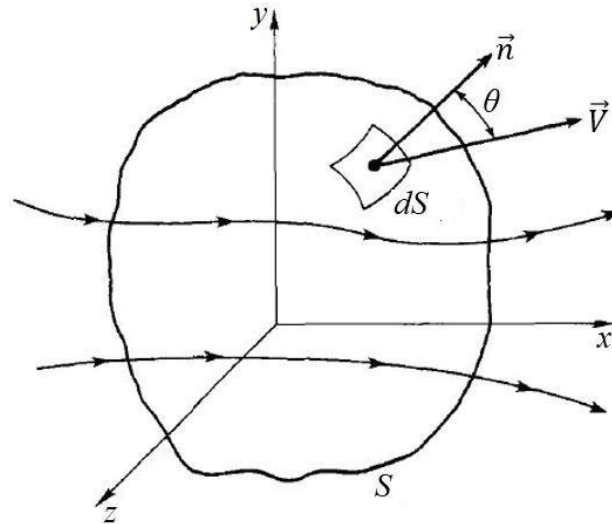
Seja um volume de controle fixo em um escoamento, denotado por (\hat{V}), e uma área de superfície fechada nesse mesmo fluxo, denotada por (S), mostrado na FIGURA 9. Considere um elemento na superfície de controle e uma área infinitesimal (dS) ao seu redor.

O fluxo de massa (\dot{m}) através de qualquer elemento de superfície em um fluido em movimento pode ser obtido, conforme proposto por Anderson (2003), pelo produto da massa específica, da componente da velocidade normal à superfície, e da área, ou seja

$$\dot{m} = \rho V_n dS = \rho \vec{V} \cdot d\vec{S} , \quad (11)$$

onde V_n é a componente normal da velocidade, \vec{V} é o vetor velocidade da partícula, e \vec{S} é o vetor resultante da multiplicação entre o vetor normal e o incremento de área.

FIGURA 9 – VOLUME DE CONTROLE FIXO EM UM ESCOAMENTO.



FONTE: Adaptado de Anderson (2003).

Portanto o fluxo de massa que entra no volume de controle pela superfície é o somatório do fluxo de massa através de todos os elementos de superfície, podendo ser escrito como

$$-\iint_S \rho \vec{V} \cdot d\vec{S}. \quad (12)$$

Considere agora um volume de controle infinitesimal, dado por $(d\hat{V})$. A massa desse volume infinitesimal pode ser obtida pela multiplicação dele mesmo com a massa específica. Sendo assim, a massa total do volume de controle é obtida a partir da Equação (13).

$$\iiint_{\hat{V}} \rho d\hat{V}. \quad (13)$$

A variação de massa do volume de controle com o tempo pode então ser calculada por

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\hat{V}} \rho d\hat{V}, \quad (14)$$

onde t é o tempo.

De acordo com o princípio físico da conservação de massa, não é possível criar ou destruir massa em um sistema. Portanto o fluxo de massa que entra no volume de controle deve ser equivalente à variação de massa com o tempo do próprio volume de controle. Juntando-se as Equações (13) e (14), obtém-se

$$-\oint_S \rho \vec{V} \cdot d\vec{S} = \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\hat{V}} \rho d\hat{V}, \quad (15)$$

Esse resultado, visto na Equação (15), é chamado de equação da continuidade, e está apresentada na forma integral.

Agora, seja a identidade vetorial dada por

$$\oint_S \vec{l} \cdot d\vec{S} = \iiint_{\hat{V}} (\nabla \cdot \vec{l}) d\hat{V}, \quad (16)$$

onde \vec{l} é uma função vetorial no espaço e tempo.

Aplicando a identidade da Equação (16) na Equação (12), tem-se

$$\oint_S \rho \vec{V} \cdot d\vec{S} = \iiint_{\hat{V}} \nabla \cdot (\rho \vec{V}) d\hat{V}. \quad (17)$$

Substituindo a Equação (17) na Equação (15) e arranjando os termos

$$\iiint_{\hat{V}} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) \right] d\hat{V} = 0. \quad (18)$$

Para que a condição imposta na Equação (18) seja sempre válida, é necessário que o valor do integrando seja sempre nulo. Sendo assim, conclui-se que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0. \quad (19)$$

A Equação (19) representa a equação da continuidade na forma de equação diferencial.

3.2.2. Lei da conservação de quantidade de movimento

Considere o volume de controle da FIGURA 9. Ao analisar as forças que atuam sobre esse volume, é possível agrupá-las em forças de corpo (as que atuam no fluido que está dentro do volume de controle), e forças de superfície (aquelas que atuam na superfície do volume de controle).

Para um elemento infinitesimal de volume, a força de corpo que atua sobre este pode ser calculada através da multiplicação da massa específica, da força por unidade mássica de fluido (\vec{Y}_B), e do elemento infinitesimal volume. Portanto, a força de corpo total no volume de controle (\vec{Y}) é a soma da força de corpo em cada elemento infinitesimal de volume (ANDERSON, 2003)

$$\vec{Y} = \iiint_{\hat{V}} \rho \vec{Y}_B d\hat{V}. \quad (20)$$

Considerando agora um elemento infinitesimal de superfície no contorno do volume de controle, e tratando-se de um fluido invíscido, tem-se que a única fonte de força de superfície atuante é proveniente da pressão, e pode ser obtida pela multiplicação da pressão com o próprio elemento de superfície. Sendo assim, a força de superfície total no volume de controle (\vec{Y}_S) é dada pela soma das forças de superfície em cada elemento infinitesimal de superfície,

$$\vec{Y}_S = - \iint_S p d\vec{S}. \quad (21)$$

A soma das parcelas de força de corpo e força de superfície representam a força resultante que atua sobre o volume de controle.

Para um elemento infinitesimal de superfície, tem-se que seu fluxo mássico pode ser obtido pela Equação (11). Multiplicar esse fluxo pela velocidade do fluido permite a obtenção do momento ocasionado nessa superfície. Com isso, tem-se que o momento total gerado na superfície do volume de controle (\vec{M}_S), é o somatório do momento em cada elemento infinitesimal de superfície,

$$\vec{M}_S = \iint_S (\rho \vec{v} \cdot d\vec{S}) \vec{v}. \quad (22)$$

Sendo um elemento infinitesimal de massa no interior do volume de controle e multiplicando-o pela velocidade do fluido, obtém-se o valor do momento interno ocasionado pelo elemento de massa. Somar todos os momentos internos de cada elemento de massa resulta no momento interno total do volume de controle (\vec{M}),

$$\vec{M} = \iiint_{\hat{V}} \rho \vec{V} d\hat{V}. \quad (23)$$

Portanto a variação do momento interno total no decorrer do tempo é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\hat{V}} \rho \vec{V} d\hat{V}. \quad (24)$$

Aplicando-se o princípio físico que a taxa temporal de variação de momento de um fluido em movimento passando por um volume de controle em um determinado instante é igual ao somatório de forças exercidas sobre o fluido nesse volume, é possível escrever as Equações (20), (21), (22), e (24) da seguinte forma

$$\iint_S (\rho \vec{V} \cdot d\vec{S}) \vec{V} + \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\hat{V}} \rho \vec{V} d\hat{V} = \iiint_{\hat{V}} \rho \vec{Y}_B d\hat{V} - \iint_S p d\vec{S}. \quad (25)$$

A Equação (25) é chamada de equação da conservação de quantidade de movimento, e está representada em sua forma integral.

Adote agora a identidade vetorial

$$\iint_S j d\vec{S} = \iiint_{\hat{V}} (\nabla j) d\hat{V}, \quad (26)$$

onde j é uma função escalar no espaço e tempo.

Utilizando a identidade da Equação (26) para o último termo da Equação (25), tem-se

$$\oint_S (\rho \vec{V} \cdot d\vec{S}) \vec{V} + \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\hat{V}} \rho \vec{V} d\hat{V} = \iiint_{\hat{V}} \rho \vec{Y}_B d\hat{V} - \iiint_{\hat{V}} \nabla p d\hat{V}. \quad (27)$$

Considerando um sistema de coordenadas cartesianas com direções x , y e z , a Equação (27) pode ser reescrita para cada uma dessas componentes. Para o caso da direção x , o resultado seria

$$\oint_S (\rho \vec{V} \cdot d\vec{S}) V_x + \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\hat{V}} \rho V_x d\hat{V} = \iiint_{\hat{V}} \rho Y_{B_x} d\hat{V} - \iiint_{\hat{V}} \frac{\partial p}{\partial x} d\hat{V}. \quad (28)$$

onde V_x é componente da velocidade na direção x , e Y_{B_x} é componente da força de corpo na direção x .

Usando a identidade vetorial da Equação (16) no primeiro termo da Equação (28) tem-se

$$\iiint_{\hat{V}} \nabla \cdot (\rho V_x \vec{V}) d\hat{V} + \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\hat{V}} \rho V_x d\hat{V} = \iiint_{\hat{V}} \rho Y_{B_x} d\hat{V} - \iiint_{\hat{V}} \frac{\partial p}{\partial x} d\hat{V}. \quad (29)$$

Rearranjando os termos

$$\iiint_{\hat{V}} \left[\rho Y_{B_x} - \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial(\rho V_x)}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho V_x \vec{V}) \right] d\hat{V} = 0. \quad (30)$$

Para que a condição imposta na Equação (30) seja sempre válida, é necessário que o valor do integrando seja sempre nulo. Sendo assim, conclui-se que

$$\rho Y_{B_x} - \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial(\rho V_x)}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho V_x \vec{V}) = 0. \quad (31)$$

Realizando o processo análogo para as direções y e z , obtém-se

$$\rho Y_{B_y} - \frac{\partial p}{\partial y} - \frac{\partial(\rho V_y)}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho V_y \vec{V}) = 0, \quad (32)$$

$$\rho Y_{B_z} - \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\partial(\rho V_z)}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho V_z \vec{V}) = 0. \quad (33)$$

onde V_y e Y_{B_y} são as componentes da velocidade e força de corpo, respectivamente, na direção y , e V_z e Y_{B_z} são as componentes da velocidade e força de corpo, respectivamente, na direção z .

3.2.3. Lei da conservação de energia

Considere o volume de controle mostrado na FIGURA 9. Fazendo com que esse seja um volume de controle infinitesimal, e analisando trocas térmicas, é possível obter o valor da taxa de calor adicionado a esse elemento multiplicando-se a taxa de calor por unidade de massa (\dot{Q}) com a massa específica e o próprio valor do volume infinitesimal, de acordo com Anderson (2003). Sendo assim, para todo o volume de controle, tem-se

$$n_1 = \iiint_{\hat{V}} \dot{Q} \rho d\hat{V}, \quad (34)$$

onde n_1 é a taxa de calor adicionada ao fluido dentro do volume de controle.

Considere um elemento infinitesimal de área na superfície do volume de controle. A força exercida pela pressão nesse elemento de área é dada pela multiplicação da pressão do fluido pelo próprio tamanho do elemento.

A taxa temporal de trabalho realizado em um corpo qualquer em movimento pode ser obtida pela multiplicação da força realizada sobre este corpo pela sua velocidade.

Tem-se então que a taxa de trabalho exercida nesse elemento é

$$-(pd\vec{S}) \cdot \vec{V}. \quad (35)$$

Portanto o trabalho exercido por forças de pressão em todo o volume de controle é

$$- \iint_S (pd\vec{S}) \cdot \vec{V}. \quad (36)$$

Considere agora um elemento infinitesimal de volume no interior do volume de controle. A força realizada por forças de corpo nesse elemento é dada pela multiplicação da massa específica, da força de corpo por unidade de massa, e do próprio valor do volume infinitesimal. Partindo da mesma teoria, multiplicar esses três valores pela velocidade do fluido resulta na taxa de trabalho exercida por forças de corpo nesse elemento infinitesimal. Com isso, a taxa de trabalho exercida em todo o volume de controle é dada por

$$\iiint_{\hat{V}} (\rho \vec{Y}_B d\hat{V}) \cdot \vec{V} . \quad (37)$$

A taxa de trabalho total realizada no fluido dentro do volume de controle (n_2) é obtida então pela soma das Equações (36) e (37). Rearranjando os termos, tem-se

$$n_2 = - \iint_S p \vec{V} \cdot d\vec{S} + \iiint_{\hat{V}} \rho (\vec{Y}_B \cdot \vec{V}) d\hat{V}. \quad (38)$$

Um fluido possui naturalmente uma parcela de energia interna. Quando esse fluido está em movimento, uma segunda parcela devido à energia cinética provocada pela velocidade deve ser considerada. Portanto, tem-se que para um fluido em movimento, sua energia interna por unidade de massa é dada por

$$e + \frac{V^2}{2}. \quad (39)$$

Considere novamente um elemento infinitesimal de área na superfície do volume de controle. Sabendo que a massa de fluido que atravessa esse elemento gera energia, tem-se que o fluxo de energia através desse elemento é dado pela multiplicação das Equações (11) e (39). Portanto a taxa de fluxo de energia para a superfície de controle é obtida por

$$\iint_S (\rho \vec{V} \cdot d\vec{S}) \left(e + \frac{V^2}{2} \right). \quad (40)$$

Analisando agora um elemento infinitesimal de volume no interior do volume de controle, tem-se que a energia interna desse elemento é dada pela multiplicação da Equação (39) com a massa específica e com o próprio valor do elemento de volume. Com isso, a energia interna no interior de todo o volume de controle é dada por

$$\iiint_{\hat{V}} \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) d\hat{V}. \quad (41)$$

Portanto, a taxa temporal de variação de energia interna do volume de controle devido a efeitos transientes das variáveis dos fluidos é

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\hat{V}} \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) d\hat{V}. \quad (42)$$

A taxa de mudança de energia do fluido conforme ele atravessa o volume de controle (n_3) é a soma das Equações (40) e (42), mostrada a seguir

$$n_3 = \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\hat{V}} \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) d\hat{V} + \iint_S (\rho \vec{V} \cdot d\vec{S}) \left(e + \frac{V^2}{2} \right). \quad (43)$$

Aplicando o princípio físico da conservação de energia para um fluido, tem-se que todo o calor adicionado ao fluido, somado a todo o trabalho realizado sobre o fluido é igual à taxa de variação de energia através do volume de controle. Isso indica que

$$n_1 + n_2 = n_3. \quad (44)$$

Substituindo as Equações (34), (38) e (43)

$$\begin{aligned} & \iiint_{\hat{V}} \dot{Q} \rho d\hat{V} - \iint_S p \vec{V} \cdot d\vec{S} + \iiint_{\hat{V}} \rho (\vec{Y}_B \cdot \vec{V}) d\hat{V} \\ & = \iiint_{\hat{V}} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] d\hat{V} + \iint_S \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \cdot d\vec{S}. \end{aligned} \quad (45)$$

A Equação (45) é chamada de equação de energia, e está representada em sua forma integral.

Aplicando a identidade vetorial da Equação (16) no segundo e no último termo da Equação (45), tem-se

$$\oiint_S p\vec{V} \cdot d\vec{S} = \iiint_{\hat{V}} \nabla \cdot (p\vec{V}) d\hat{V} , \quad (46)$$

$$\oiint_S \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \cdot d\vec{S} = \iiint_{\hat{V}} \nabla \cdot \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \right] d\hat{V} . \quad (47)$$

Substituindo as Equações (46) e (47) na Equação (45), e rearranjando os termos

$$\iiint_{\hat{V}} \left\{ \rho\dot{Q} - \nabla \cdot (p\vec{V}) + \rho(\vec{Y}_B \cdot \vec{V}) - \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] - \nabla \cdot \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \right] \right\} d\hat{V} = 0 . \quad (48)$$

Para que a condição imposta na Equação (48) seja sempre válida, é necessário que o valor do integrando seja sempre nulo. Sendo assim, conclui-se que

$$\rho\dot{Q} - \nabla \cdot (p\vec{V}) + \rho(\vec{Y}_B \cdot \vec{V}) - \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] - \nabla \cdot \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \right] = 0 . \quad (49)$$

A Equação (49) representa a equação da energia na forma diferencial.

3.2.4. Velocidade do som em um fluido e número de Mach

Considere uma onda de som se movendo em um fluido com velocidade a . O fluido à frente da onda se desloca em direção a ela também com velocidade a . Como a onda é por definição considerada uma onda fraca, as mudanças causadas por ela no fluido são pequenas. Portanto pode-se considerar que a alteração da velocidade do fluido após a onda de som seja infinitesimal.

Sendo assim, o fluido à frente da onda de som se desloca em direção a ela com velocidade a , pressão p , temperatura T e massa específica ρ . Devido às alterações, o fluido que se encontra

atrás da onda se desloca afastando-se dela com velocidade $(a+da)$, pressão $(p+dp)$, temperatura $(T+dT)$ e massa específica $(\rho+d\rho)$.

Utilizando a Equação (15) para um caso unidimensional, e adotando que o regime é estacionário, obtém-se (ANDERSON, 2003)

$$\rho_{ini}V_{x_{ini}} = \rho_f V_{x_f}, \quad (50)$$

Onde o subíndice *ini* representa as propriedades em um estado anterior, e o subíndice *f* representa as propriedades em um estado posterior.

Como o escoamento através da onda de som é unidimensional, pode-se usar a Equação (50) para obter a relação entre as propriedades do fluido, o que resulta em

$$\rho a = (\rho + d\rho)(a + da). \quad (51)$$

Ou

$$\rho a = \rho a + ad\rho + \rho da + dad\rho. \quad (52)$$

Desconsiderando o produto de infinitesimais, por serem muito menores em relação aos outros termos, tem-se que

$$a = -\rho \frac{da}{d\rho}. \quad (53)$$

Utilizando a Equação (25) para um caso unidimensional, adotando que o regime é estacionário, e sabendo da ausência de forças de corpo, obtém-se

$$p_{ini} + \rho_{ini}V_{x_{ini}}^2 = p_f + \rho_f V_{x_f}^2. \quad (54)$$

Aplicando a Equação (54) para o caso da onda de som, tem-se

$$p + \rho a^2 = (p + dp) + (\rho + d\rho)(a + da)^2. \quad (55)$$

Desconsiderando novamente os termos que multiplicam dois valores infinitesimais, a Equação (55) pode ser reescrita como

$$da = \frac{dp + a^2 d\rho}{-2a\rho}. \quad (56)$$

Substituindo a Equação (56) na Equação (53)

$$a = -\rho \left[\frac{\frac{dp}{d\rho} + a^2}{-2a\rho} \right]. \quad (57)$$

Rearranjando os termos

$$a = \sqrt{\frac{dp}{d\rho}}. \quad (58)$$

Considerando os processos físicos que ocorrem nas mudanças das propriedades do fluido devido à onda de som, nota-se que é possível desprezar efeitos dissipativos de fricção e de condução térmica. Também não há adição de calor durante o processo. Sendo assim, conclui-se que a onda de som gera mudanças no fluido de forma isentrópica. Portanto pode-se escrever a Equação (58) como

$$a = \sqrt{\left(\frac{dp}{d\rho}\right)_s}, \quad (59)$$

onde o subíndice s indica que o processo é isentrópico.

Para um gás caloricamente perfeito, através do uso de relações isentrópicas, a Equação (59) pode ser reescrita como

$$a = \sqrt{\gamma RT}, \quad (60)$$

onde γ é a razão entre o calor específico a pressão constante e o calor específico a volume constante.

A partir da velocidade do som de um fluido, é possível obter o número de Mach (M), como mostra a Equação (61).

$$M = \frac{|\vec{V}|}{a}, \quad (61)$$

O Número de Mach é um valor adimensional usado como parâmetro para classificação de escoamentos, assunto esse que será abordado na seção 3.2.5.

3.2.5. Características de um escoamento compressível

Um escoamento pode ser classificado, como mencionado em Anderson (2003), de duas formas quando considerado a compressibilidade de um fluido, sendo elas compressível e incompressível. Essa compressibilidade é entendida como uma variação na massa específica do fluido decorrente de uma variação na pressão do fluido como mostra a equação a seguir

$$\tau = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dp}, \quad (62)$$

onde τ é a compressibilidade do fluido.

Reescrevendo a Equação (62),

$$d\rho = \tau \rho dp. \quad (63)$$

Para que um escoamento seja completamente incompressível ($\tau = 0$), a variação da massa específica deve ser nula (a massa específica deve ser constante) para qualquer que seja a variação de pressão. Como este fato não ocorre fisicamente, considera-se também como escoamento incompressível casos em que a variação da massa específica é relativamente muito pequena (menor que 5%) a ponto de não ser impactante nos resultados dos cálculos. Escoamentos de líquidos em turbinas e bombas hidráulicas são exemplos deste tipo de escoamento.

Já para ser considerado compressível, o escoamento deve apresentar uma variação considerável de massa específica com variações de pressão. Usualmente, essa característica está ausente em líquidos, devido aos seus baixos valores de compressibilidade. Porém, nota-se sua presença quando tratando-se de gases em determinadas situações.

Uma forma prática para se classificar o fluido de acordo com sua compressibilidade é utilizar a relação entre os efeitos de compressibilidade e inércia do fluido. A Equação (63) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\frac{1}{\tau\rho} = \frac{dp}{d\rho}. \quad (64)$$

Utilizando os conceitos de velocidade de som de um fluido, e substituindo a Equação (64) na Equação (59), tem-se

$$a = \sqrt{\frac{1}{\tau\rho}}, \quad (65)$$

Como a velocidade do som pode ser escrita em função do número de Mach, a compressibilidade de um fluido também pode ser obtida como função do número de Mach.

Sendo assim, foram obtidas faixas de valores para o número de Mach que permitem classificar o escoamento em cinco regimes diferentes. São eles:

- Subsônico, ($M < 0,8$);
- Transônico, ($0,8 \leq M < 1$ ou $1 < M \leq 1,2$);
- Sônico, ($M = 1$)
- Supersônico, ($1,2 < M \leq 5$);
- Hipersônico, ($M > 5$).

Para os regimes transônico, sônico, supersônico e hipersônico, o escoamento de um fluido deve ser classificado como compressível. Dentro do regime subsônico podem ocorrer duas situações. Com valores de Mach menores que 0,3, o escoamento do gás pode ser considerado como um escoamento incompressível sem comprometimento dos resultados de cálculos. Para valores de Mach entre 0,3 e 0,8, o escoamento do gás deve ser considerado como compressível.

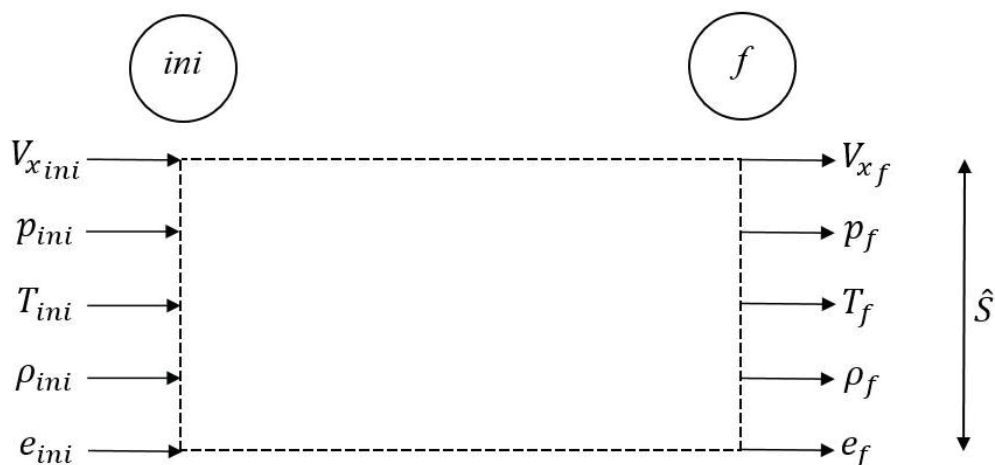
3.2.6. Propriedades totais de um fluido

Considere que, em um escoamento, um elemento de fluido qualquer esteja sendo desacelerado isentropicamente, causando variações em suas propriedades. Quando esse elemento de fluido atingir o ponto de estagnação ($V = 0$), sua temperatura passa a ser definida como temperatura total (T_0), sua pressão passa a ser definida como pressão total (p_0), e sua massa específica passa a ser definida como massa específica total (ρ_0), também denominadas como temperatura de estagnação, pressão de estagnação, e massa específica de estagnação, respectivamente. Essas propriedades estão relacionadas com as propriedades T , p e ρ do fluido, conforme será demonstrado (ANDERSON, 2003).

Considere um estado inicial (ini) e um estado final (f) de um fluido em um escoamento unidimensional, onde as propriedades do fluido nos dois estados sejam diferentes, conforme mostrado na FIGURA 10.

Para calcular a variação nas propriedades, é possível aplicar as leis de conservação para um fluido em sua forma integral no volume de controle retangular, representado pelas linhas tracejadas da FIGURA 10. Como o escoamento é unidimensional, as propriedades são uniformes ao longo do contorno esquerdo e do contorno direito. Considere que ambos os contornos apresentem uma área (\hat{S}) perpendicular ao escoamento, que seja em regime permanente, e que não hajam forças de corpo atuantes.

FIGURA 10 – VOLUME DE CONTROLE RETANGULAR EM ESCOAMENTO 1D.



FONTE: Adaptado de Anderson (2003).

Utilizando essas considerações na Equação (45), tem-se

$$\iiint_{\hat{V}} \dot{Q} \rho d\hat{V} - \iint_{\hat{S}} p \vec{V} \cdot d\vec{S} = \iint_{\hat{S}} \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \cdot d\vec{S}. \quad (66)$$

Para simplificar, a integral de volume para o primeiro termo da Equação (66) será representada por \hat{Q} , indicando a taxa total de calor adicionada ao gás no volume de controle. Avaliando a integral de superfície nos dois contornos tem-se

$$\hat{Q} + p_{ini} V_{x_{ini}} \hat{S} - p_f V_{x_f} \hat{S} = -\rho_{ini} V_{x_{ini}} \hat{S} \left(e_{ini} + \frac{V_{x_{ini}}^2}{2} \right) + \rho_f V_{x_f} \hat{S} \left(e_f + \frac{V_{x_f}^2}{2} \right). \quad (67)$$

Reorganizando os termos

$$\frac{\hat{Q}}{\hat{S}} + p_{ini} V_{x_{ini}} + \rho_{ini} V_{x_{ini}} \left(e_{ini} + \frac{V_{x_{ini}}^2}{2} \right) = p_f V_{x_f} + \rho_f V_{x_f} \left(e_f + \frac{V_{x_f}^2}{2} \right). \quad (68)$$

Dividindo o lado esquerdo por $\rho_{ini} V_{x_{ini}}$, e o lado direito por $p_f V_{x_f}$

$$\frac{\hat{Q}}{\hat{S} \rho_{ini} V_{x_{ini}}} + \frac{p_{ini}}{\rho_{ini}} + e_{ini} + \frac{V_{x_{ini}}^2}{2} = \frac{p_f}{\rho_f} + e_f + \frac{V_{x_f}^2}{2}. \quad (69)$$

Como \hat{Q} é a taxa de calor adicionada, e $\hat{S} \rho_{ini} V_{x_{ini}}$ é o fluxo de massa através do volume de controle, então o primeiro termo da Equação (69) é simplesmente o calor adicionado por unidade de massa. Utilizando a definição de entalpia da Equação (6)

$$Q + b_{ini} + \frac{V_{x_{ini}}^2}{2} = b_f + \frac{V_{x_f}^2}{2}. \quad (70)$$

Considere agora que as variações nas propriedades ocorram de forma adiabáticas, e que o fluido possa ser considerado como caloricamente perfeito. Utilizando a Equação (8), a Equação (70) pode ser reescrita como

$$c_p T_{ini} + \frac{V_{xini}^2}{2} = c_p T_f + \frac{V_{xf}^2}{2}. \quad (71)$$

Retomando o conceito de temperatura total e fazendo o estado *ini* ser o estado real do elemento de um fluido, e o estado *f* ser o estado de estagnação do elemento de fluido, é possível escrever a Equação (71) como

$$c_p T + \frac{V^2}{2} = c_p T_0. \quad (72)$$

A Equação (72) indica que a temperatura total pode ser calculada para condições reais conhecidas em qualquer ponto para qualquer tipo de escoamento. Apesar de inicialmente ter sido definido como um processo isentrópico, nota-se que para o cálculo da temperatura, apenas a condição de adiabático foi aplicado ao escoamento. Portanto, é possível redefinir a temperatura total, ou de estagnação, como sendo a temperatura que existiria se o elemento de fluido fosse desacelerado adiabaticamente até o estado de estagnação. Para as outras propriedades, a condição de irreversibilidade também se faz necessária.

A Equação (72) pode ser reescrita para encontrar uma taxa entre a temperatura real e a temperatura de estagnação

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{V^2}{2c_p T}. \quad (73)$$

Sabendo que

$$c_p = \frac{\gamma R}{\gamma - 1}, \quad (74)$$

então

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{V^2(\gamma - 1)}{2\gamma RT}. \quad (75)$$

Utilizando a Equação (60)

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{(\gamma - 1)}{2} \left(\frac{V}{a}\right)^2. \quad (76)$$

Portanto, usando a Equação (61)

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{(\gamma - 1)}{2} M^2. \quad (77)$$

Para encontrar as relações para a pressão e massa específica do fluido, basta aplicar relações isentrópicas à Equação (77), obtendo as equações

$$\frac{p_0}{p} = \left[1 + \frac{(\gamma - 1)}{2} M^2 \right]^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}}, \quad (78)$$

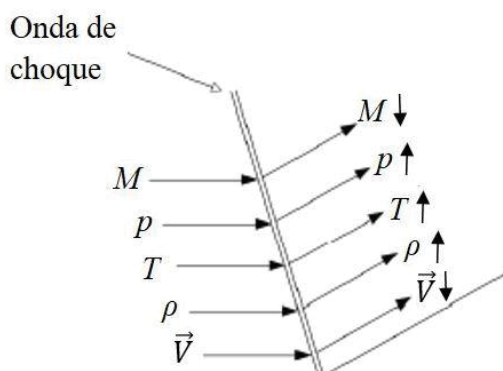
$$\frac{\rho_0}{\rho} = \left[1 + \frac{(\gamma - 1)}{2} M^2 \right]^{\frac{1}{\gamma - 1}}. \quad (79)$$

Vale ressaltar que para um escoamento que seja completamente isentrópico, os valores de pressão total e massa específica total permanecerão constantes. Como já mencionado, a temperatura total depende apenas do processo ocorrer de forma adiabática. Portanto, para um escoamento que, por mais que apresente processos irreversíveis, ainda seja completamente adiabático, a temperatura total permanece constante.

3.3. ONDAS DE CHOQUE E ONDAS DE EXPANSÃO

Conforme demonstrado em Anderson (2003), quando o escoamento de um fluido em regime supersônico encontra uma quina de compressão, ocorre o fenômeno conhecido como onda de choque oblíqua. Esse choque, além de redirecionar as linhas de fluxo, impacta diretamente em suas propriedades, causando alterações de forma não isentrópicas. Considerando o estado antes da onda choque e o estado após a onda, a FIGURA 11 demonstra o que ocorre com cada uma dessas características.

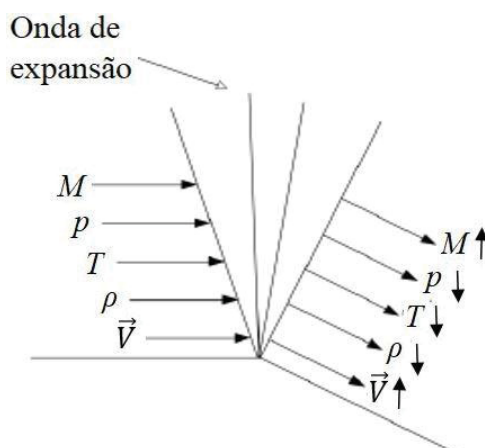
FIGURA 11 – ALTERAÇÕES NAS CARACTERÍSTICAS DE UM FLUIDO DEVIDO À ONDA DE CHOQUE.



FONTE: Adaptado de da Silva (2019).

Já quando o escoamento de um fluido em regime supersônico encontra uma quina de expansão, ocorre o fenômeno conhecido como ondas de expansão ou leque de expansão. Esse fenômeno causa variações isentrópicas de propriedades no fluido, além da mudança de direção das linhas de fluxo. Usando as mesmas considerações feitas para ondas de choques, a FIGURA 12 demonstra as alterações sobre cada uma das características.

FIGURA 12 – ALTERAÇÕES NAS CARACTERÍSTICAS DE UM FLUIDO DEVIDO À ONDA DE EXPANSÃO.



FONTE: Adaptado de da Silva (2019).

Back et al. (1965) afirmam ser possível prever o aparecimento desses choques no interior de um bocal CD através da análise das linhas de Mach. Porém, deve-se ter em mente que, devido a efeitos inesperados do comportamento do fluido, pode ser que essa previsão não seja concreta.

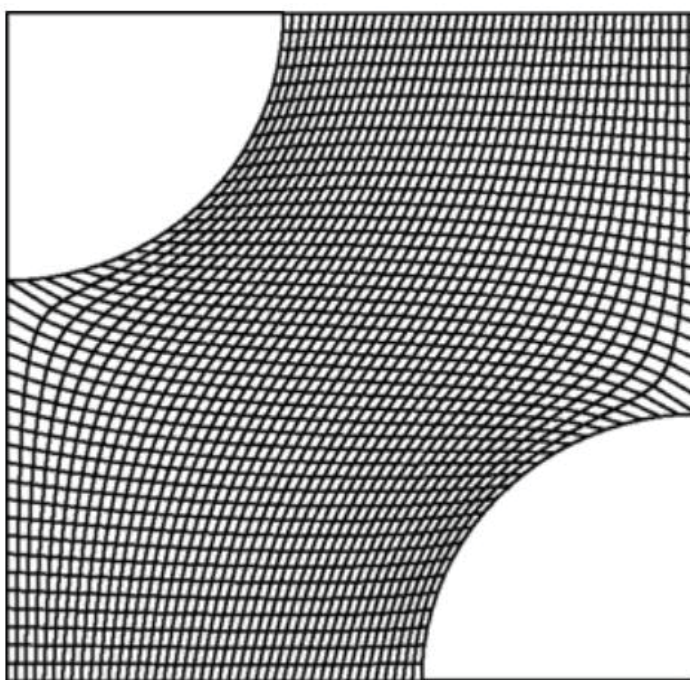
3.4. CONCEITOS SOBRE MALHAS NÃO ORTOGONAIS ESTRUTURADAS

Malhas não ortogonais estruturadas são tipos de malhas comumente utilizadas na solução computacional de problemas de DFC. Possuem como característica principal uma estruturação lógica na criação de seus elementos. Para casos bidimensionais com o uso do métodos de volumes finitos, os volumes de malha são, na maioria das vezes, do tipo quadrilateral (TU; YEOH e LIU, 2013). As FIGURAS 13 e 14 demonstram exemplos de aplicações para essas malhas.

Facilidade no mapeamento dos pontos da malha e conectividade direta entre volumes vizinhos são exemplos de vantagens ao se usar esse tipo de malha. Também possibilitam o fácil gerenciamento de dados, e tornam a escrita do programa computacional mais simples, justamente devido à sua conectividade de volumes ser de forma organizada.

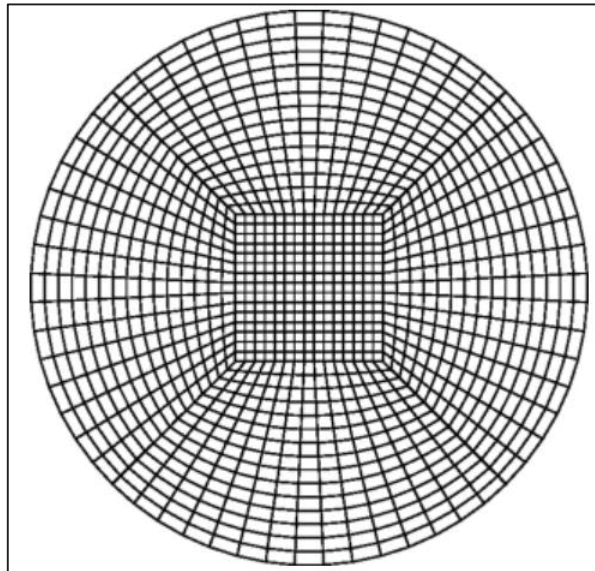
Apesar de apresentarem alta eficiência para geometrias simples, ao se tratar de geometrias mais complexas, esse tipo de malha gera aumento na não ortogonalidade, o que pode causar soluções não condizentes com a realidade devido a transformação das equações governantes. O aumento do número de termos das equações para tratar dessas não ortogonalidades também eleva o custo computacional e pode prejudicar a acurácia e a eficiência do programa.

FIGURA 13 – MALHA NÃO ORTOGONAL ESTRUTURADA PARA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO EM UM TUBO.



FONTE: TU; YEOH e LIU (2013).

FIGURA 14 – MALHA NÃO ORTOGONAL ESTRUTURADA PARA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO EM UM CILINDRO.



FONTE: TU; YEOH e LIU (2013).

3.5. ESTIMADOR DE RICHARDSON

Para malhas unidimensionais com N pontos nodais e espaçamentos iguais entre si, utilizando o método de diferenças finitas, o tamanho do elemento de malha pode ser obtido por (MARCHI, 2001)

$$h = \frac{1}{(N - 1)}, \quad (80)$$

onde h é o tamanho do elemento de malha.

Considere um caso de três malhas unidimensionais, uma mais refinada, uma intermediária, e uma mais grossa, com tamanho de elementos h_a , h_b , e h_c , respectivamente. Para cada uma dessas malhas foi obtida uma solução numérica de uma variável de interesse, representadas por ϕ_a , ϕ_b , e ϕ_c , respectivamente. Sendo q a razão de refino constante entre os pares de malhas conforme mostra a equação

$$q = \frac{h_c}{h_b} = \frac{h_b}{h_a}, \quad (81)$$

é possível obter o valor da ordem aparente (p_U) por

$$p_U = \frac{\log\left(\frac{\phi_b - \phi_c}{\phi_a - \phi_b}\right)}{\log(q)}. \quad (82)$$

A incerteza de uma solução numérica qualquer pode ser calculada através do estimador de Richardson como

$$U_{Ri} = \phi_\infty - \phi, \quad (83)$$

onde ϕ é a solução numérica e ϕ_∞ é uma solução estimada. Esta última pode ser obtida através da solução numérica em duas malhas diferentes e da ordem aparente

$$\phi_\infty = \phi_a + \frac{(\phi_a - \phi_b)}{(q^{p_U} - 1)}. \quad (84)$$

Substituindo a Equação (84) na Equação (83) tem-se que a incerteza da solução numérica é calculada por

$$U_{Ri} = \frac{(\phi_a - \phi_b)}{(q^{p_U} - 1)}. \quad (85)$$

Em casos bidimensionais, para malhas não ortogonais estruturadas, e para o método de volumes finitos, o refino da malha pode ser avaliado na área do volume de malha. Sendo N_{vol} o número de volumes da malha, a razão de refino entre duas malhas consecutivas pode ser obtido por

$$q = \frac{N_{vol_a}}{N_{vol_b}}. \quad (86)$$

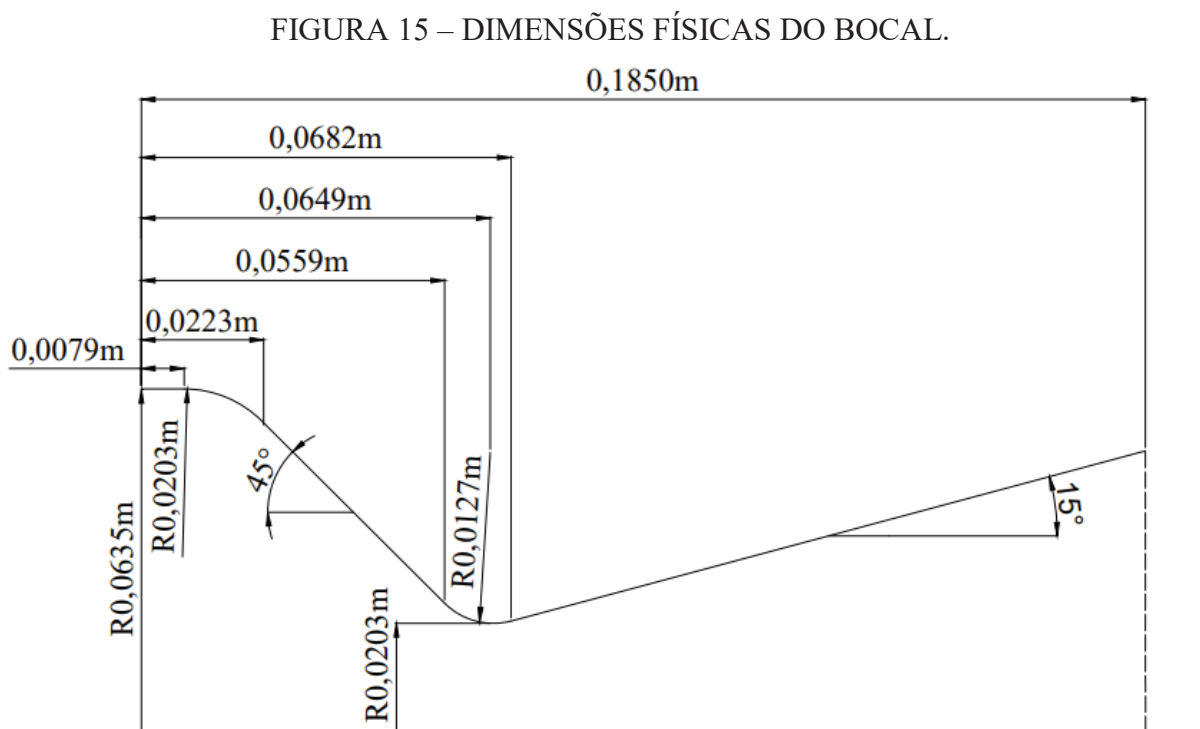
A obtenção da ordem aparente e da incerteza para um caso 2D segue o mesmo procedimento apresentado para o caso 1D, substituindo apenas a forma do cálculo da razão de refino de malha pela Equação (86).

4 METODOLOGIA

Este capítulo apresenta todos os parâmetros necessários que foram utilizados para realizar as simulações. Está subdividido em cinco seções principais, abrangendo nas duas primeiras características a respeito do modelo físico do problema proposto, posteriormente, são explicadas as características do modelo computacional, após, trata-se a respeito do método de comparação para validação dos resultados, por fim, explica-se a utilização da norma L^1 para cálculo de erros numéricos.

4.1. MODELO FÍSICO

O estudo deste trabalho é a solução do escoamento bidimensional de ar no interior de um bocal convergente-divergente. Para tornar possível a comparação dos resultados obtidos, foram utilizadas as mesmas características de um dos experimentos dos autores Back et al. (1965). A FIGURA 15 representa as dimensões para a geometria do bocal. O escoamento ocorre da esquerda para a direita, e considera-se que o fluido entra no bocal paralelamente à linha de simetria.



FONTE: O Autor.

O fluido avaliado no escoamento foi o ar padrão. Nas propriedades referentes ao gás, foram considerados os valores de 287,00J/kgK para a constante de gás, e 1,35 para a relação entre calores específicos. Nas características de estagnação, tem-se a temperatura de 833,33K e a pressão de 1,725MPa.

4.2. EQUAÇÕES GOVERNANTES DO MODELO FÍSICO

Para solucionar o modelo físico proposto, as leis da conservação de massa, conservação da quantidade de movimento, e conservação da quantidade de energia em suas formas diferenciais foram aplicadas. Os casos gerais para cada uma das leis foram demonstrados no Capítulo 3 deste trabalho, portanto, serão feitas algumas adaptações para que elas se enquadrem no problema em questão.

Para um caso bidimensional em x e y , a Equação (33) não é utilizada, e o vetor velocidade passa a ser

$$\vec{V} = \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \end{pmatrix}. \quad (87)$$

Sabendo-se da ausência de qualquer tipo de força de corpo ($\vec{Y}_B = 0$), sabendo-se também que não há trocas térmicas ($\dot{Q} = 0$), e que o ar é considerado como um gás ideal, desconsiderando os efeitos viscosos, e substituindo essas condições nas Equações (3), (19), (31), (32) e (49), tem-se o conjunto

$$\begin{cases} p - \rho RT = 0 \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0, \\ -\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial(\rho V_x)}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho V_x \vec{V}) = 0, \\ -\frac{\partial p}{\partial y} - \frac{\partial(\rho V_y)}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho V_y \vec{V}) = 0, \\ -\nabla \cdot (p \vec{V}) - \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] - \nabla \cdot \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \right] = 0. \end{cases} \quad (88)$$

O conjunto demonstrado na Equação (88) é conhecido como as equações de Euler para fluidos ideais, e são as equações governantes para o caso proposto nesse trabalho.

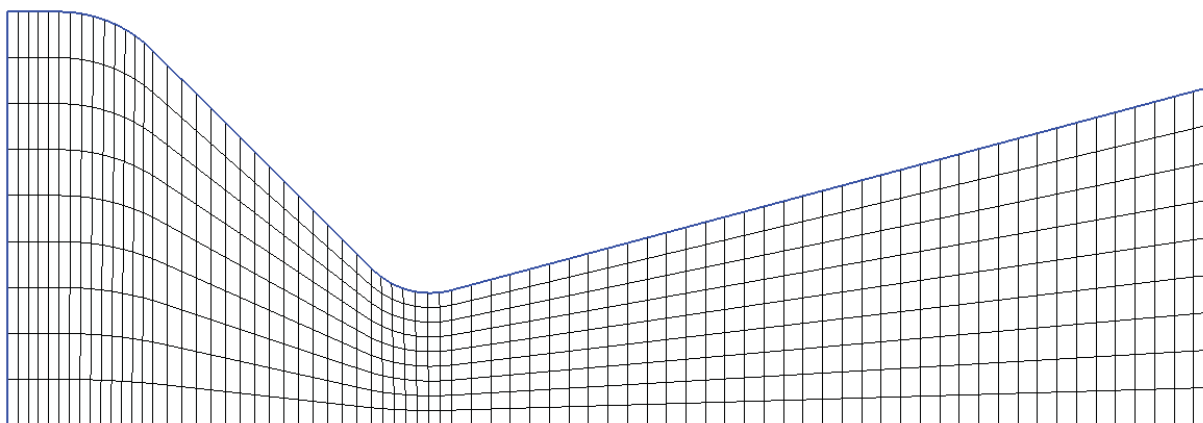
4.3. MODELO NUMÉRICO

Para realizar as simulações presentes neste trabalho foi utilizado o *software* livre SU2, com a aplicação do método de volumes finitos. O computador em que as simulações foram realizadas possui um sistema operacional Windows 10 64 bits, um processador Intel Core i5-7200U 2,5GHz, e 8Gb de memória RAM. Mais informações a respeito de características da modelagem numérica são apresentadas nas subseções que seguem.

4.3.1. Domínio computacional

Através do programa Gmesh, cinco malhas não ortogonais estruturadas foram geradas, todas possuindo as mesmas dimensões, porém com número de volumes diferentes, e refino de área de volume constante igual a 4. A malha mais grossa está representada na FIGURA 16. A TABELA 1 apresenta o número de divisões nas direções x e y e a quantidade de volumes para cada malha, sendo a malha 5 a mais grossa e a malha 1 a mais refinada.

FIGURA 16 – MALHA NÃO ORTOGONAL ESTRUTURADA COM 675 VOLUMES.



FONTE: O Autor.

As dimensões do bocal para o domínio computacional são iguais às dimensões do domínio físico. Devido ao comportamento simétrico apresentado por um fluido no interior de um bocal, apenas a metade superior do bocal foi modelada.

TABELA 1 – NÚMERO DE DIVISÕES EM CADA DIREÇÃO E NÚMERO DE VOLUMES PARA CADA MALHA.

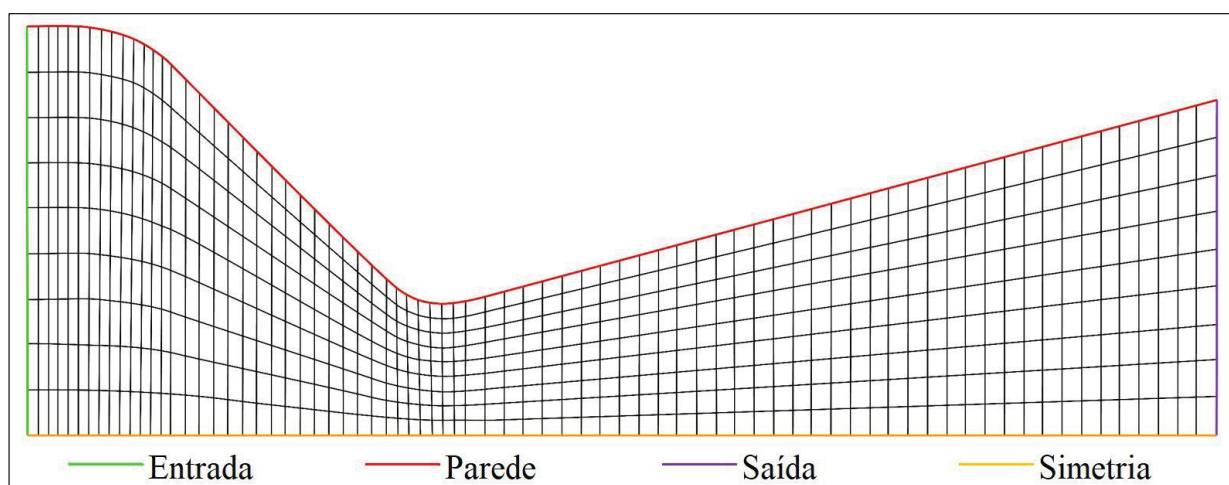
Malha	Divisões na Direção x	Divisões na direção y	Número de volumes
5	76	10	675
4	151	19	2700
3	301	37	10800
2	601	73	43200
1	1201	145	172800

FONTE: O Autor.

4.3.2. Condições de contorno

Para aplicar as condições de contorno nas simulações, as linhas de contorno de cada uma das malhas foram divididas em quatro grupos diferentes, como mostrado na FIGURA 17.

FIGURA 17 – DIVISÃO DOS CONTORNOS DA MALHA COM 675 VOLUMES.



FONTE: O Autor.

Na linha “Entrada”, foi utilizado como condição de contorno os valores conhecidos para pressão e temperatura, sendo eles 1,725Mpa e 833,33K, respectivamente (Back et al. 1965). O SU2 trata essa condições de contorno como condições de Dirichlet, calculando as outras variáveis a partir de variáveis já conhecidas.

Na linha “Parede”, a condição de parede sólida adiabática com deslizamento (desprezando efeitos viscosos) foi aplicada. Nesse caso, o SU2 trata a condição de contorno

como condição de Neumann, e utiliza para o valor nulo para o fluxo de massa de fluido que atravessa o contorno.

Para a linha “Simetria”, usou-se a condição de eixo de simetria existente no SU2. Essa condição anula o fluxo de massa através do contorno e cria uma reflexão dos valores obtidos. Sendo assim, um estado do fluido refletido é computado a partir de um estado atual e uma condição de Neumann é aplicada (RAVISHANARA; ÖZDEMIR; WEIDE, 2020).

Apesar de, para condições supersônicas, não ser necessária nenhuma condição de contorno na saída de um bocal CD, no programa SU2 foi preciso incluir a condição de saída de dados supersônicos na linha “Saída”. Essa condição é tratada como uma condição de Neumann.

4.3.3. Aproximação numérica JST

A aproximação numérica JST foi uma das aproximações utilizadas neste trabalho. Ela consiste na discretização espacial das equações governantes em uma forma de função, acrescida de uma função dissipativa, para permitir convergência e estabilidade.

A seguir, será exemplificado como as equações de Euler são discretizadas através dessa aproximação numérica, tendo como base o trabalho de Jameson, Schimidt e Turkel (1981).

Considere inicialmente as equações das três leis governantes em suas formas integrais. Ao aplicar-se condições iguais às condições do modelo físico, apresentadas na Seção 4.2, as equações governantes, se tornam equações de Euler, e podem ser escritas no formato vetorial como

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_{\hat{A}} \vec{u} dx dy + \oint_r (\vec{f} dy - \vec{g} dx) = 0, \quad (89)$$

onde \hat{A} é a área de controle, r são os contornos da área de controle, e os vetores \vec{u} , \vec{f} , e \vec{g} , são

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho V_x \\ \rho V_y \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad (90)$$

$$\vec{f} = \begin{pmatrix} \rho V_x \\ \rho V_x^2 + p \\ \rho V_x V_y \\ \rho V_x H \end{pmatrix}, \quad (91)$$

$$\vec{g} = \begin{pmatrix} \rho V_y \\ \rho V_x V_y \\ \rho V_y^2 + p \\ \rho V_y H \end{pmatrix}, \quad (92)$$

em que E é a energia interna total do fluido, calculada pela Equação (93), e H é a entalpia total do fluido, calculada pela Equação (94).

$$E = \frac{p}{(\gamma - 1)\rho} + \frac{1}{2}(V_x^2 + V_y^2), \quad (93)$$

$$H = E + \frac{p}{\rho}. \quad (94)$$

Analisando a face de um volume quadrilateral, denotado pelo conjunto de subíndices (i,j) , obtém-se um conjunto de equações diferenciais ordinárias aplicando-se o método de linha no processo de discretização, e desacoplando os termos espaciais e temporais. Portanto, para cada célula da malha, tem-se a equação

$$\frac{d}{dt}(A\vec{u}) + \Omega\vec{u} = 0, \quad (95)$$

onde A é a área do volume de malha, e Ω é um operador que representa a aproximação numérica da integral de contorno da Equação (95). Esse operador pode ser obtido como mostrado a seguir.

Seja h_{x_k} e h_{y_k} o incremento de malha nas direções x e y , respectivamente para o contorno k do volume. Considere os quatro contornos do volume da malha representados pelos índices 1, 2, 3 e 4. Sendo assim, a conservação da quantidade de movimento na direção x , por exemplo, seria

$$\frac{\partial}{\partial t}(A\rho V_x) + \sum_{k=1}^4 \Omega_k \rho V_{x_k} = 0, \quad (96)$$

com

$$\Omega_k = V_{x_k} h_{y_k} - V_{y_k} h_{x_k} + \frac{p}{\rho V_{x_k}} h_{y_k}, \quad (97)$$

e o somatório sendo realizado para as faces do volume. Os valores para as propriedades do fluido nos contornos são calculados como sendo a média entre os valores dos volumes que compartilham o mesmo contorno. Como exemplo

$$(\rho V_x)_1 = \frac{1}{2}(\rho V_x)_{i,j} + \frac{1}{2}(\rho V_x)_{i+1,j}, \quad (98)$$

O procedimento para obter o operador Ω para as outras equações é análogo ao demonstrado para a equação da conservação da quantidade de movimento em x .

Porém, para garantir estabilidade da aproximação numérica para regiões do fluxo que possam conter descontinuidades ou elevados gradientes de pressão, é preciso acrescentar um termo dissipativo artificial. Com isso, a Equação (95) é reescrita como

$$\frac{d}{dt}(A\vec{u}) + \Omega\vec{u} + D\vec{u} = 0, \quad (99)$$

onde D é um operador dissipativo.

O termo dissipativo para a variável ρ é

$$D\rho = D_x\rho + D_y\rho, \quad (100)$$

onde D_x e D_y são as contribuições correspondentes em cada direção, escritas como

$$D_x\rho = d_{i+\frac{1}{2},j} - d_{i-\frac{1}{2},j}, \quad (101)$$

$$D_y \rho = d_{i,j+\frac{1}{2}} - d_{i,j-\frac{1}{2}}. \quad (102)$$

Para o termo $d_{i+\frac{1}{2},j}$, tem-se

$$d_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{A_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta t} \left[\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}^{(2)} (\rho_{i+1,j} - \rho_{i,j}) - \varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}^{(4)} (\rho_{i+2,j} - 3\rho_{i+1,j} + 3\rho_{i,j} - \rho_{i-1,j}) \right], \quad (103)$$

onde $\varepsilon^{(2)}$ e $\varepsilon^{(4)}$ são coeficientes de segunda e quarta ordem, respectivamente, que se adaptam com as características do fluido. Seja

$$v_{i,j} = \frac{|p_{i+1,j} - 2p_{i,j} + p_{i-1,j}|}{|p_{i+1,j}| + |2p_{i,j}| + |p_{i-1,j}|}. \quad (104)$$

Então

$$\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}^{(2)} = \Psi^{(2)} \max(v_{i+1,j}; v_{i,j}), \quad (105)$$

$$\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}^{(4)} = \max \left[0; \left(\Psi^{(4)} - \varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}^{(2)} \right) \right], \quad (106)$$

onde $\Psi^{(2)}$ e $\Psi^{(4)}$ são constantes para a formulação dissipativa, que comumente apresenta valores de 1/4 e 1/256, respectivamente.

Todos os termos a direita das Equações (101) e (102) são similares. Portanto suas obtenções são de forma análoga à apresentada.

Os termos dissipativos para as outras equações são obtidos substituindo a variável ρ pelas devidas variáveis (ρV_x , ρV_y , ρE), nas Equações (100), (101), (102) e (103).

Por fim, para solucionar o problema por completo, deve ser usado juntamente à essa aproximação, qualquer tipo de aproximação numérica temporal, uma vez que a aproximação JST trata apenas da parte espacial.

Foi escolhida a aproximação numérica temporal de Euler Implícito, que será explicada na Seção 4.3.5, para ser usada conjuntamente com a aproximação numérica JST.

4.3.4. Aproximação numérica de Roe

Outra aproximação numérica utilizada neste trabalho foi a de Roe. Essa aproximação consiste em substituir a matriz Jacobiana em um problema linear por uma matriz que seja constante, dependente de dois estados diferentes.

A seguir, um caso genérico será apresentado para demonstrar a ideia geral da aproximação numérica de Roe, e posteriormente será exemplificado como as equações de Euler são discretizadas através dessa aproximação numérica, tendo como base principal o trabalho de Roe (1981).

Considere a equação genérica dada por

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial \theta(\alpha)}{\partial x} = 0, \quad (107)$$

onde α é uma função temporal qualquer e θ é uma função espacial qualquer na direção x , dependente da função temporal. Ao introduzir a matriz Jacobiana (\mathbf{J}) dada por

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \theta}{\partial \alpha}, \quad (108)$$

a Equação (107) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathbf{J}(\alpha) \frac{\partial \alpha}{\partial x} = 0. \quad (109)$$

A aproximação de Roe substitui a matriz Jacobiana por uma matriz constante dependente de dois estados diferentes. Portanto, a Equação (109) fica sendo

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \tilde{\mathbf{R}} \frac{\partial \alpha}{\partial x} = 0, \quad (110)$$

onde $\tilde{\mathbf{R}}$ é a matriz constante.

Solucionar numericamente um problema como o proposto na Equação (110) significa obter a solução através da aproximação numérica de Roe.

Considere agora as equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento para fluidos em suas formas diferenciais. Considere também a ausência de viscosidade, trocas térmicas e forças de corpo. O conjunto dessas equações, aplicando tais condições, resultam nas equações de Euler para fluidos em um caso tridimensional, e podem ser expressas vetorialmente por

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{G}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{J}}{\partial z} = 0, \quad (111)$$

onde

$$\vec{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho V_x \\ \rho V_y \\ \rho V_z \\ e \end{pmatrix}, \quad (112)$$

$$\vec{F} = \begin{pmatrix} \rho V_x \\ p + \rho V_x^2 \\ \rho V_x V_y \\ \rho V_x V_z \\ V_x(p + e) \end{pmatrix}, \quad (113)$$

$$\vec{G} = \begin{pmatrix} \rho V_y \\ \rho V_x V_y \\ p + \rho V_y^2 \\ \rho V_y V_z \\ V_y(p + e) \end{pmatrix}, \quad (114)$$

$$\vec{J} = \begin{pmatrix} \rho V_z \\ \rho V_x V_z \\ \rho V_y V_z \\ p + \rho V_z^2 \\ V_z(p + e) \end{pmatrix}. \quad (115)$$

Considere um vetor paramétrico dado por

$$\vec{W} = \rho^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ V_x \\ V_y \\ V_z \\ H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \\ W_3 \\ W_4 \\ W_5 \end{pmatrix}. \quad (116)$$

Nota-se que esse vetor paramétrico é capaz de representar todos os vetores da Equação (111) como função dele próprio e de propriedades constantes do fluido. Para o caso do vetor \vec{U} tem-se que

$$\vec{U} = \begin{pmatrix} W_1^2 \\ W_1 W_2 \\ W_1 W_3 \\ W_1 W_4 \\ \frac{W_1 W_5}{\gamma} + \frac{(\gamma - 1)}{2\gamma} (W_2^2 + W_3^2 + W_4^2) \end{pmatrix}. \quad (117)$$

Assim como é possível representar os vetores \vec{U} , \vec{F} , \vec{G} e \vec{J} através do vetor \vec{W} , também é possível representar qualquer variação de estado para esses quatro vetores como uma função do vetor paramétrico. Como exemplo, considere um estado anterior, representado pelo subíndice L , e um estado posterior, representado pelo subíndice R . Para o vetor \vec{U} , pode-se escrever

$$(\vec{U}_L - \vec{U}_R) = \mathbf{B}(\vec{W}_L - \vec{W}_R), \quad (118)$$

em que \mathbf{B} é a matriz de mapeamento de \vec{U} em \vec{W} , dada por

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 2\bar{W}_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \bar{W}_2 & \bar{W}_1 & 0 & 0 & 0 \\ \bar{W}_3 & 0 & \bar{W}_1 & 0 & 0 \\ \bar{W}_4 & 0 & 0 & \bar{W}_1 & 0 \\ \frac{\bar{W}_5}{\gamma} & \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \bar{W}_2 & \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \bar{W}_3 & \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \bar{W}_4 & \frac{\bar{W}_1}{\gamma} \end{pmatrix}, \quad (119)$$

onde o sobrescrito $\bar{\quad}$ significa a média aritmética entre os dois estados dos valores de \vec{W} . Por conveniência, o vetor com as médias aritméticas do vetor paramétrico é

$$\begin{pmatrix} \bar{W}_1 \\ \bar{W}_2 \\ \bar{W}_3 \\ \bar{W}_4 \\ \bar{W}_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\rho_L^{\frac{1}{2}} + \rho_R^{\frac{1}{2}}}{2} \\ \frac{\rho_L^{\frac{1}{2}} V_{xL} + \rho_R^{\frac{1}{2}} V_{xR}}{2} \\ \frac{\rho_L^{\frac{1}{2}} V_{yL} + \rho_R^{\frac{1}{2}} V_{yR}}{2} \\ \frac{\rho_L^{\frac{1}{2}} V_{zL} + \rho_R^{\frac{1}{2}} V_{zR}}{2} \\ \frac{\rho_L^{\frac{1}{2}} H_L + \rho_R^{\frac{1}{2}} H_R}{2} \end{pmatrix}. \quad (120)$$

Assim como para o vetor \vec{U} , é possível fazer o mesmo procedimento para o vetor \vec{F} . Portanto

$$(\vec{F}_L - \vec{F}_R) = \mathbf{C}(\vec{W}_L - \vec{W}_R), \quad (121)$$

em que \mathbf{C} é a matriz de mapeamento de \vec{F} em \vec{W} , dada por

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \bar{W}_2 & \bar{W}_1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{(\gamma-1)}{\gamma} \bar{W}_5 & \frac{(\gamma-1)}{\gamma} \bar{W}_2 & \frac{(\gamma-1)}{\gamma} \bar{W}_3 & \frac{(\gamma-1)}{\gamma} \bar{W}_4 & \frac{(\gamma-1)}{\gamma} \bar{W}_1 \\ 0 & \bar{W}_3 & \bar{W}_2 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{W}_4 & 0 & \bar{W}_2 & 0 \\ 0 & \bar{W}_5 & 0 & 0 & \bar{W}_2 \end{pmatrix}. \quad (122)$$

Utilizando as Equações (118) e (121) e reorganizando os termos, tem-se

$$(\vec{F}_L - \vec{F}_R) = \mathbf{C}\mathbf{B}^{-1}(\vec{U}_L - \vec{U}_R), \quad (123)$$

em que \mathbf{B}^{-1} é a matriz inversa de \mathbf{B} . Sendo a matriz $\tilde{\mathbf{A}}$

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{C}\mathbf{B}^{-1}, \quad (124)$$

então

$$(\vec{F}_L - \vec{F}_R) = \tilde{\mathbf{A}}(\vec{U}_L - \vec{U}_R) . \quad (125)$$

Isso indica que a matriz $\tilde{\mathbf{A}}$ é a matriz de mapeamento de \vec{F} em \vec{U} , sendo assim, é possível descrever qualquer variação de estado do vetor \vec{F} através do vetor \vec{U} .

Realizando o procedimento análogo para os vetores \vec{G} e \vec{J} , tem-se

$$(\vec{G}_L - \vec{G}_R) = \mathbf{R}_y(\vec{U}_L - \vec{U}_R) . \quad (126)$$

$$(\vec{J}_L - \vec{J}_R) = \mathbf{R}_z(\vec{U}_L - \vec{U}_R) . \quad (127)$$

onde as matrizes \mathbf{R}_y e \mathbf{R}_z são as matrizes de mapeamento de \vec{G} em \vec{U} , e de \vec{J} em \vec{U} , respectivamente.

Será demonstrado a seguir como obter os valores da matriz $\tilde{\mathbf{A}}$. O procedimento para as matrizes \mathbf{R}_y e \mathbf{R}_z são similares.

A matriz $\tilde{\mathbf{A}}$ é obtida resolvendo o problema de autovalores e autovetores

$$(\tilde{\mathbf{A}} - \lambda \mathbf{I})(\vec{U}_L - \vec{U}_R) = 0 . \quad (128)$$

onde λ são os autovalores e \mathbf{I} é a matriz identidade.

Substituindo as Equações (118) e (124) na Equação (128)

$$(\mathbf{CB}^{-1} - \lambda \mathbf{I})\mathbf{B}(\vec{W}_L - \vec{W}_R) = 0 , \quad (129)$$

$$(\mathbf{C} - \lambda \mathbf{B})(\vec{W}_L - \vec{W}_R) = 0 , \quad (130)$$

$$\det(\mathbf{C} - \lambda \mathbf{B}) = 0 . \quad (131)$$

Fazendo

$$d_1 = \frac{\bar{W}_2}{\bar{W}_1} , \quad (132)$$

$$d_2 = \frac{\bar{W}_3}{\bar{W}_1}, \quad (133)$$

$$d_3 = \frac{\bar{W}_4}{\bar{W}_1}, \quad (134)$$

$$d_4 = \frac{\bar{W}_5}{\bar{W}_1}, \quad (135)$$

a Equação (131) pode ser reduzida para

$$(\lambda - d_1)^3 \left\{ (\lambda - d_1)^2 - (\gamma - 1) \left[d_4 - \frac{1}{2} (d_1^2 + d_2^2 + d_3^2) \right] \right\} = 0. \quad (136)$$

As raízes da Equação (136) representam os autovalores, dados por

$$\lambda_1 = d_1 - \sqrt{(\gamma - 1) \left(d_4 - \frac{1}{2} (d_1^2 + d_2^2 + d_3^2) \right)}, \quad (137)$$

$$\lambda_2 = d_1, \quad (138)$$

$$\lambda_3 = d_1, \quad (139)$$

$$\lambda_4 = d_1, \quad (140)$$

$$\lambda_5 = d_1 + \sqrt{(\gamma - 1) \left[d_4 - \frac{1}{2} (d_1^2 + d_2^2 + d_3^2) \right]}. \quad (141)$$

Substituir esses autovalores na Equação (130) permite a obtenção dos seguintes autovetores

$$\vec{\beta}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ d_1 - \sqrt{(\gamma - 1) \left(d_4 - \frac{1}{2} (d_1^2 + d_2^2 + d_3^2) \right)} \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 - d_1 \sqrt{(\gamma - 1) \left(d_4 - \frac{1}{2} (d_1^2 + d_2^2 + d_3^2) \right)} \end{pmatrix}, \quad (142)$$

$$\vec{\beta}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ d_2 \\ 0 \\ d_2^2 \end{pmatrix}, \quad (143)$$

$$\vec{\beta}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ d_3 \\ d_3^2 \end{pmatrix}, \quad (144)$$

$$\vec{\beta}_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \frac{1}{2} (d_1^2 + d_2^2 + d_3^2) \end{pmatrix}, \quad (145)$$

$$\vec{\beta}_5 = \begin{pmatrix} 1 \\ d_1 + \sqrt{(\gamma - 1) \left(d_4 - \frac{1}{2} (d_1^2 + d_2^2 + d_3^2) \right)} \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 + d_1 \sqrt{(\gamma - 1) \left(d_4 - \frac{1}{2} (d_1^2 + d_2^2 + d_3^2) \right)} \end{pmatrix}. \quad (146)$$

Por fim, projeta-se um vetor diferença de estado arbitrário do domínio do vetor \vec{U} nos autovetores encontrados, para servir como base para a matriz \tilde{A} . Isso é feito por

$$\Delta \vec{U} = \sum_{k=1}^5 \sigma_k \vec{\beta}_k, \quad (147)$$

onde os coeficientes σ são obtidos por

$$\left[d_4 - \frac{1}{2}(d_1^2 + d_2^2 + d_3^2) \right] \sigma_4 = [d_4 - (d_1^2 + d_2^2 + d_3^2)] \Delta U_1 + \quad (148)$$

$$+ d_1 \Delta U_2 + d_2 \Delta U_3 + d_3 \Delta U_4 - \Delta U_5,$$

$$d_3 \sigma_3 = \Delta U_4 - d_3 \Delta U_2, \quad (149)$$

$$d_2 \sigma_2 = \Delta U_3 - d_2 \Delta U_1, \quad (150)$$

$$\sigma_1 + \sigma_5 = \Delta U_1 - \sigma_4, \quad (151)$$

$$\sqrt{(\gamma - 1) \left(d_4 - \frac{1}{2}(d_1^2 + d_2^2 + d_3^2) \right)} (\sigma_5 - \sigma_1) = \Delta U_2 - d_1 \Delta U_1. \quad (152)$$

Cada um dos vetores bases encontrados representam um vetor coluna da matriz $\tilde{\mathbf{A}}$.

Utilizar a aproximação de volumes finitos nas derivadas espaciais da Equação (111), faz com que ela fique da seguinte forma

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{(\vec{F}_L - \vec{F}_R)}{h_x} + \frac{(\vec{G}_L - \vec{G}_R)}{h_y} + \frac{(\vec{J}_L - \vec{J}_R)}{h_z} = 0, \quad (153)$$

onde h_x , h_y , e h_z são as distancias entre os centros dos volumes da malha.

Substituir as Equações (125), (126) e (127) na Equação (153) resulta em

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{A}} \frac{(\vec{U}_L - \vec{U}_R)}{h_x} + \mathbf{R}_y \frac{(\vec{U}_L - \vec{U}_R)}{h_y} + \mathbf{R}_z \frac{(\vec{U}_L - \vec{U}_R)}{h_z} = 0. \quad (154)$$

Nota-se que a Equação (154) assume a forma padrão da aproximação numérica de Roe, dada na Equação (110), para um problema de escoamento de fluido, governado pelas equações de Euler em um caso tridimensional.

Sendo assim, para um caso bidimensional, a aproximação numérica de Roe aplicada neste trabalho é como mostrada na Equação (155)

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{A}} \frac{(\vec{U}_L - \vec{U}_R)}{h_x} + \mathbf{R}_y \frac{(\vec{U}_L - \vec{U}_R)}{h_y} = 0. \quad (155)$$

Uma aproximação numérica temporal deve ser usada em conjunto para solucionar o problema, uma vez que a aproximação numérica de Roe trata apenas dos termos espaciais. Foi escolhida a aproximação numérica temporal de Euler Implícito, apresentada a seguir.

4.3.5. Aproximação numérica de Euler Implícito

Para solucionar a parte temporal das equações governantes, foi usada a aproximação numérica de Euler Implícita. Baseado no trabalho de Cavalca et al. (2018), um caso geral de como aplicar tal aproximação será brevemente explanado a seguir, e posteriormente será abordado como esse caso se encaixa no problema proposto nesse trabalho.

Seja uma matriz \mathbf{K} qualquer e seja uma matriz \mathbf{L} dependente da matriz \mathbf{K} , tal que

$$\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial t} = -\mathbf{L}(\mathbf{K}). \quad (156)$$

Considere todo sobrescrito n como sendo um determinado momento no tempo e todo sobrescrito $n+1$ como sendo um momento posterior. Expandindo ambos os lados da Equação (156) para um momento posterior de tempo, tem-se

$$\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial t} = \frac{\mathbf{K}^{n+1} - \mathbf{K}^n}{\partial t}, \quad (157)$$

$$\mathbf{L}(\mathbf{K}^{n+1}) = \mathbf{L}(\mathbf{K}^n) + \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{K}} (\mathbf{K}^{n+1} - \mathbf{K}^n). \quad (158)$$

Substituindo as Equações (157) e (158) na Equação (156)

$$\frac{K^{n+1} - K^n}{\partial t} = -L(K^n) - \frac{\partial L}{\partial K}(K^{n+1} - K^n). \quad (159)$$

Reorganizando os termos

$$L(K^n) = - \left[\frac{I}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial K} \right] \delta K, \quad (160)$$

onde

$$\delta K = (K^{n+1} - K^n). \quad (161)$$

A Equação (160) representa uma forma linearizada implícita de avanço temporal das equações. Por fim, o avanço temporal pode ser obtido por

$$K^{n+1} = K^n + \delta K. \quad (162)$$

4.3.6. Critério de convergência

Foram usados dois critérios de convergência em paralelos para todas as simulações. O critério principal foi estabelecido como sendo um valor muito pequeno para o resíduo calculado em cada iteração. Portanto, caso o valor do resíduo atingisse a grandeza de E-15, a simulação teria atingido a convergência, e seria finalizada.

O segundo critério foi um número máximo de iterações, que finalizaria as simulações nessa iteração, mesmo que o resíduo ainda não tivesse atingido o valor estipulado. Para o presente trabalho, optou-se em utilizar o valor máximo de número de iterações como 22500 para todas as simulações.

4.3.7. Variáveis de interesse

As variáveis de interesse para as simulações desse trabalho englobam a distribuição de pressão do fluido na parede do bocal, para ser possível realizar o processo de comparação com resultados experimentais, e o campo de velocidade em todo o bocal determinado pelo número de Mach, a fim de verificar o comportamento do fluido e a aparição de possíveis descontinuidades no escoamento.

Também foram avaliados o fluxo de massa médio de fluido na saída do bocal, que foi usado para o cálculo do coeficiente de descarga, como será demonstrado na Seção 4.4, e o campo de temperatura na entrada do bocal, para analisar o erro numérico através da norma L^1 , como será demonstrado na Seção 4.5.

4.4. CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO

Para a parte de validação de resultados, o critério de avaliação usado neste trabalho foi a comparação entre os resultados para a pressão na parede do bocal obtidos computacionalmente na malha mais refinada através da aproximação numérica JST, e da aproximação numérica de Roe, com os valores experimentais obtidos no estudo de Back et al. (1965). A aproximação numérica que apresentar o menor erro e melhor representação dos fenômenos físicos, será considerada como sendo a mais adequada.

Na hipótese de ambas as aproximações numéricas apresentarem valores similares, o critério de avaliação será então o custo computacional de cada uma delas. Aquela que apresentar o menor custo, será considerada como a mais adequada.

Para a parte de verificação do código, usou-se como critério a ordem aparente e a incerteza calculada através do estimador de Richardson. Para tal, utilizou-se as Equação (82) e (85) substituindo a variável ϕ pelo valor do coeficiente de descarga (C_d)

$$p_U = \frac{\log\left(\frac{C_{db} - C_{dc}}{C_{da} - C_{db}}\right)}{\log(q)}. \quad (163)$$

$$U_{ri} = \frac{C_{da} - C_{db}}{(q^{p_U} - 1)}. \quad (164)$$

Esse coeficiente de descarga é obtido pela razão entre a vazão mássica real do fluido (\dot{m}_r) pela vazão mássica ideal do fluido (\dot{m}_{id}), como mostrado na Equação (165)

$$C_d = \frac{\dot{m}_r}{\dot{m}_{id}}, \quad (165)$$

onde \dot{m}_r é obtido pelo próprio programa computacional, e \dot{m}_{id} é obtido através da Equação (166), conforme proposto por Alam et al. (2016)

$$\dot{m}_{id} = \frac{S_e p_0}{\sqrt{T_0}} \sqrt{\frac{\gamma}{R}} M \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{-\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}}, \quad (166)$$

com S_e sendo a área de saída do bocal.

4.5. ANÁLISE DO ERRO NUMÉRICO

Além da verificação realizada pela ordem aparente, uma análise do erro numérico foi feita utilizando a média da norma L^1 , que pode ser calculada para uma variável genérica, como proposto por da Silva (2019), através de

$$L^1 = \frac{1}{N_y} \sum_{j=1}^{N_y} |\phi_\infty - \phi_j|. \quad (167)$$

Como as propriedades do fluido são conhecidas na entrada do bocal, foi escolhida a temperatura de estagnação para ser a variável para cálculo da norma. O valor exato da variável é o mesmo utilizado para a condição de contorno, ou seja, $T_0 = 833,33\text{K}$ (BACK et al. 1965). O valor numérico para a temperatura de estagnação na entrada do bocal pode ser obtido aplicando a Equação (77) a todos os pontos da malha na entrada do bocal ($x = 0$). Portanto, a Equação (167) pode ser reescrita como

$$L^1 = \frac{1}{N_y} \sum_{j=1}^{N_y} |833,33 - T_{0j}|, \quad (168)$$

onde

$$T_{0j} = \left[1 + \frac{(\gamma - 1)}{2} M_j^2 \right] T_j. \quad (169)$$

A análise da norma foi realizada para ambas as aproximações numéricas em todas as cinco malhas.

5 SIMULAÇÕES E RESULTADOS

Este capítulo demonstra os resultados obtidos nas simulações. Está dividido em cinco seções, sendo a primeira, a quarta e a última dedicadas às análises de caráter computacional, e a segunda e a terceira relatando os fenômenos físicos do fluido no bocal CD.

5.1. SIMULAÇÕES

Para realizar as análises propostas, foram feitas dez simulações diferentes. A TABELA 2 demonstra a malha utilizada, o valor residual atingido, o número de iterações e o tempo decorrido em cada simulação para a aproximação numérica JST. A TABELA 3 apresenta esses mesmos dados para a aproximação de Roe.

TABELA 2 – VALOR RESIDUAL, NÚMERO DE ITERAÇÕES E TEMPO COMPUTACIONAL DE CADA SIMULAÇÃO USANDO JST.

Malha	Número de Volumes	Valor Residual (ρ) [kg/m ³]	Número de Iterações	Tempo [h:min:s]
5	675	9,9792729160557E-15	2142	0:00:13
4	2700	9,9713706523379E-15	2887	0:01:12
3	10800	9,8436680518446E-15	4779	0:05:08
2	43200	9,9491805001501E-15	9325	0:36:24
1	172800	2,8209178153679E-13	22500	5:47:26

FONTE: O Autor.

TABELA 3 – VALOR RESIDUAL, NÚMERO DE ITERAÇÕES E TEMPO COMPUTACIONAL DE CADA SIMULAÇÃO USANDO ROE.

Malha	Número de Volumes	Valor Residual (ρ) [kg/m ³]	Número de Iterações	Tempo [h:min:s]
5	675	9,9683156130294E-15	3255	0:00:22
4	2700	9,9617849002971E-15	6033	0:01:55
3	10800	9,9852887932954E-15	10031	0:10:23
2	43200	9,9983270816198E-15	14805	0:55:11
1	172800	1,8285943771632E-14	22500	6:22:12

FONTE: O Autor.

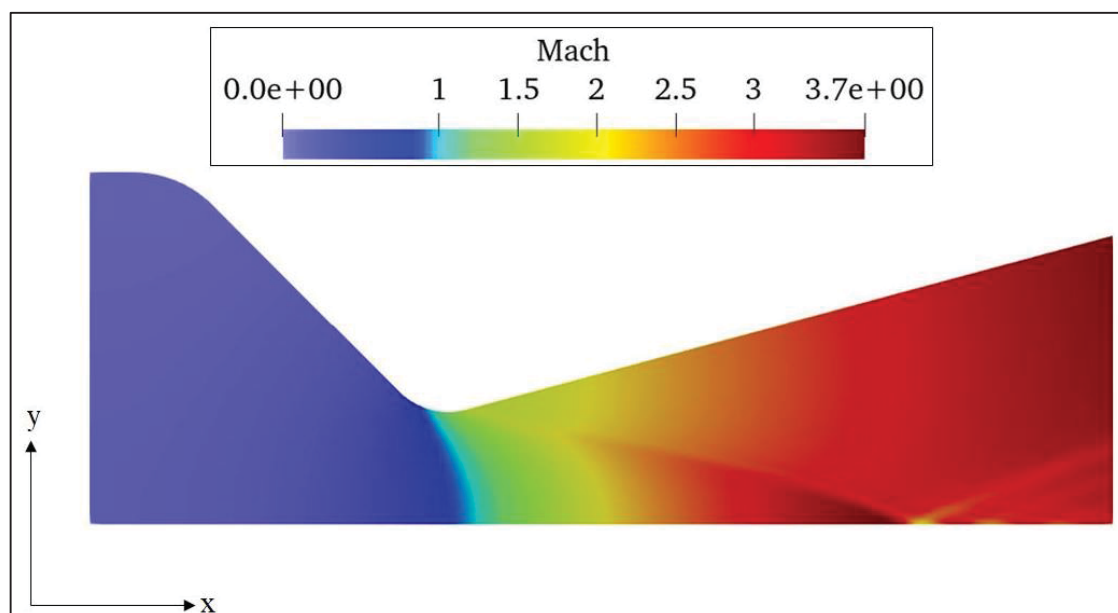
O valor residual fornecido é referente ao cálculo da massa específica do fluido, feito automaticamente pelo SU2. Nota-se que para as 4 primeiras malhas, ambas as aproximações atingiram o critério de convergência de valor residual estabelecido. Apesar de para a malha mais refinada, nenhuma das aproximações ter atingido o valor proposto, ainda sim pode ser considerado como um valor residual aceitável para o problema.

Percebe-se também que, para uma mesma malha, a aproximação numérica de Roe necessitou de mais tempo, quando comparada com a aproximação numérica JST, para completar os cálculos das simulações.

5.2. COMPORTAMENTO DO FLUIDO NO INTERIOR DO BOCAL

Para verificar o comportamento do fluido no interior do bocal, foram utilizadas as duas simulações com a malha mais refinada para ambas as aproximações numéricas. O número de Mach foi avaliado em todo o bocal, e está representado nas FIGURAS 18 (aproximação numérica JST) e 19 (aproximação numérica de Roe), geradas através do programa ParaView.

FIGURA 18 – NÚMERO DE MACH AO LONGO DO BOCAL USANDO A APROXIMAÇÃO NUMÉRICA JST.

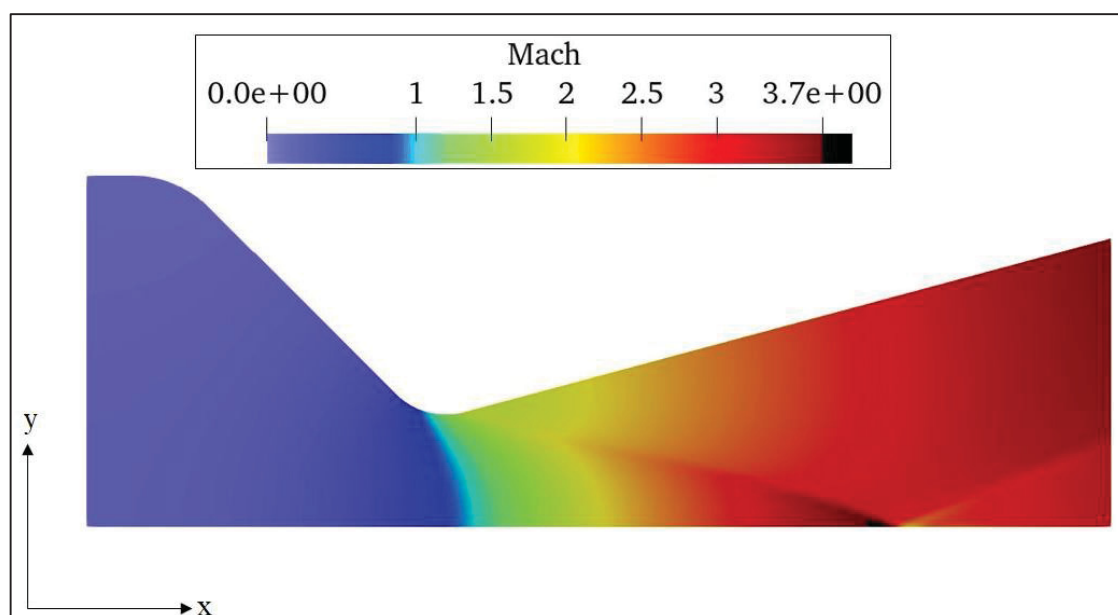


FONTE: O Autor.

Teoricamente, um fluido escoando no interior de um bocal CD deve apresentar um comportamento subsônico na seção convergente, atingir o estado sônico próximo à região da

garganta, e passar para um estado supersônico na região divergente. Portanto, é possível concluir que tanto a aproximação JST quanto a de Roe foram capazes de reproduzir com êxito o comportamento esperado do fluido em aspectos gerais.

FIGURA 19 – NÚMERO DE MACH AO LONGO DO BOCAL USANDO A APROXIMAÇÃO NUMÉRICA DE ROE.



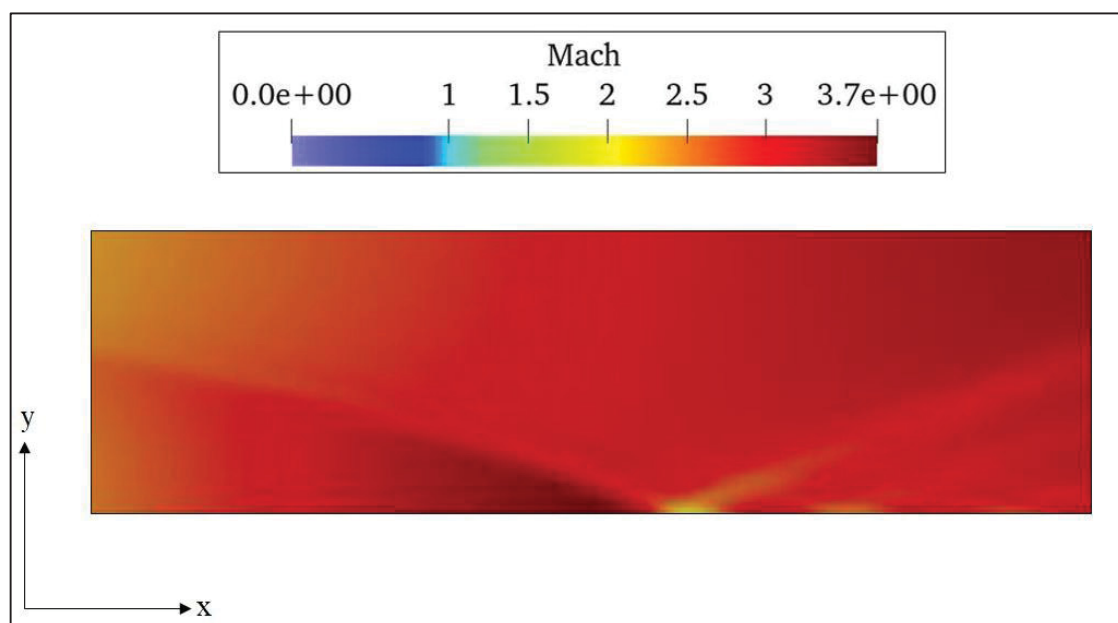
FONTE: O Autor.

Ao analisar a seção divergente do bocal, observa-se que ambas as aproximações numéricas conseguiram capturar o fenômeno de onda de choque oblíqua presente no escoamento do fluido.

No geral, os resultados apresentados pelas duas aproximações são semelhantes ao longo de todo o bocal, porém há uma diferença no valor do número de Mach para a região da onda de choque, próxima à linha de simetria. Para facilitar a visualização, as FIGURAS 20 e 21 representam essa região do bocal ampliada para as aproximações numérica JST e de Roe, respectivamente.

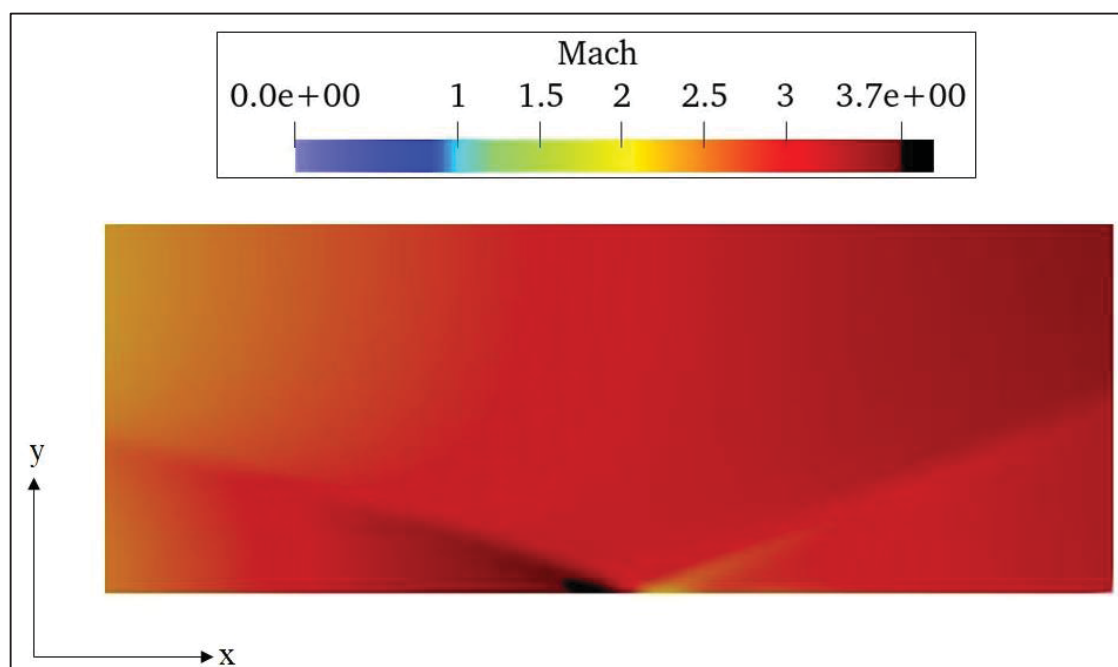
Como pode ser visto, a aproximação JST indica o valor máximo para o número de Mach como 3,7 próximo à onda de choque, já a de Roe aponta o valor de 3,9 (Representado pela cor preta na FIGURA 21). É possível que essa variação ocorra devido a forma como cada aproximação trata descontinuidades próximas a regiões de contorno.

FIGURA 20 – RESULTADOS PARA MACH NA SEÇÃO DE ENCONTRO ENTRE A ONDA DE CHOQUE E A LINHA DE SIMETRIA DO BOCAL, USANDO JST.



FONTE: O Autor.

FIGURA 21 – RESULTADOS PARA MACH NA SEÇÃO DE ENCONTRO ENTRE A ONDA DE CHOQUE E A LINHA DE SIMETRIA DO BOCAL, USANDO ROE.



FONTE: O Autor.

Outra diferença entre as duas aproximações pode ser notada na seção posterior à onda de choque. Utilizando novamente as FIGURAS 20 e 21, pode-se notar que a aproximação JST

indica a presença de outras possíveis ondas de choque após a primeira, o que não é observado para a aproximação de Roe. Essas aparições de linhas adicionais não são fenômenos físicos reais, mas sim oscilações que ocorrem devido à propagação de erros proveniente da própria aproximação numérica (da SILVA, 2015).

Portanto, conclui-se que, ao se tratar de efeitos de descontinuidade, a aproximação de Roe apresenta resultados mais preciso e condizentes com a realidade, enquanto a JST, apesar de ser capaz de capturar o efeito, propaga erros intrínsecos ao seu código de programação após a descontinuidade.

5.3. COMPARAÇÃO ENTRE AS APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS JST E DE ROE E DADOS EXPERIMENTAIS

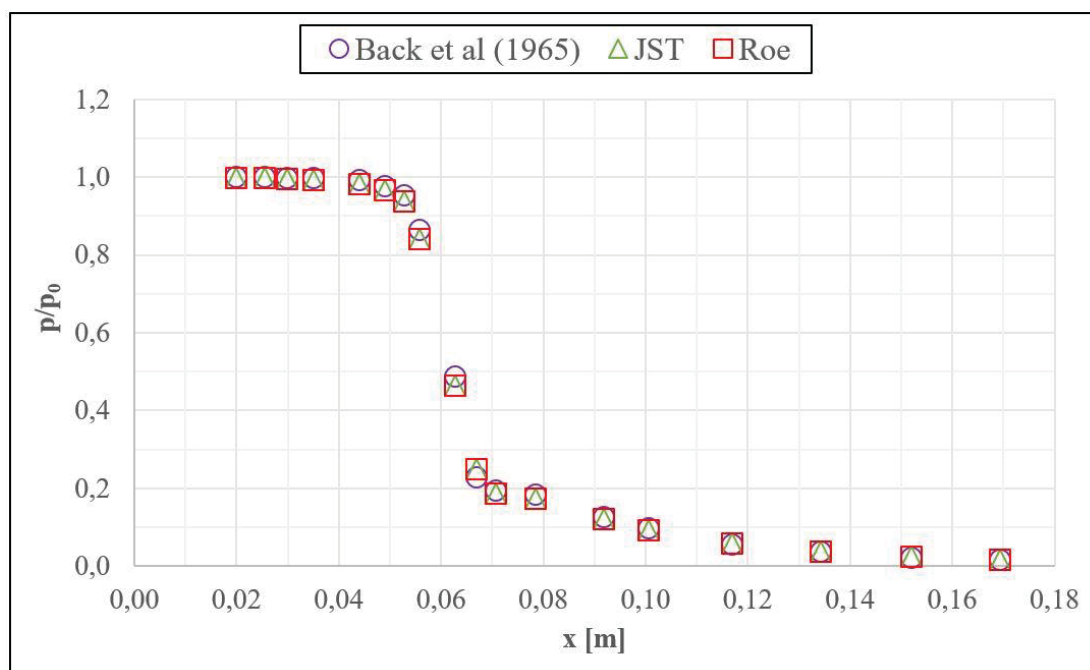
Para realizar a comparação das aproximações numéricas, foi utilizado o erro entre resultados experimentais e numéricos. Os autores Back et al. (1965) mediram experimentalmente o valor da razão entre a pressão na parede do bocal e a pressão de estagnação, em diferentes locais ao longo do comprimento do bocal. Eles utilizaram em seu trabalho uma representação gráfica dos resultados. Portanto, para obter os valores dos resultados, foi usado o programa *WebPlotDigitizer*. Foram feitas três medidas para cada resultado do gráfico e obtido um valor médio e uma incerteza.

Através do campo de pressão resultante das simulações do SU2 para a malha mais refinada com a aproximação numérica JST e de Roe, foi adquirido o valor da pressão para a mesma posição que os dados experimentais, e criada a FIGURA 22.

A FIGURA 22 mostra que tanto a aproximação numérica JST quanto a de Roe atingiram valores semelhantes aos dados experimentais, e também valores muito próximos entre elas mesmas. Conclui-se então que ambas estão apresentando uma tendência esperada da distribuição de pressão na parede do bocal. Porém, para avaliar a acurácia dos valores, uma comparação numérica através do erro e do erro relativo foi feita.

A TABELA 4 apresenta os valores de razão entre pressões para o caso experimental com sua incerteza, a razão entre pressões para a aproximação JST, o erro e erro relativo da aproximação numérica. Esse erro refere-se à diferença entre o valor da razão de pressão experimental com a razão de pressão obtida computacionalmente, já o relativo foi calculado dividindo-se o erro pelo valor experimental. A TABELA 5 demonstra esses mesmo dados para a aproximação de Roe.

FIGURA 22 – RAZÃO ENTRE PRESSÃO NA PAREDE DO BOCAL E PRESSÃO DE ESTAGNAÇÃO AO LONGO DO EIXO AXIAL DO BOCAL.



FONTE: O Autor.

TABELA 4 – RAZÃO ENTRE PRESSÕES AO LONGO DO EIXO AXIAL DO BOCAL, ERRO E ERRO RELATIVO USANDO JST.

x [m]	p/p ₀ (Back et al. 1965)	p/p ₀ (JST)	Erro (JST)	Erro Relativo (JST) [%]
0,01998	1,000 + 0,000	0,999170	-0,000830	0,083046
0,02547	1,000 + 0,000	0,997929	-0,002071	0,207148
0,02996	0,999 + 0,001	0,996438	-0,002562	0,256504
0,03500	0,998 - 0,001	0,993819	-0,004541	0,454876
0,04411	0,994 + 0,002	0,982609	-0,010931	1,100241
0,04901	0,977 + 0,001	0,966330	-0,010700	1,095132
0,05280	0,953 + 0,004	0,936645	-0,016835	1,765672
0,05588	0,864 - 0,004	0,840656	-0,023454	2,714269
0,06285	0,488 + 0,002	0,463627	-0,024383	4,996430
0,06687	0,229 - 0,003	0,250197	0,020767	9,051683
0,07077	0,194 - 0,003	0,186013	-0,008117	4,181423
0,07845	0,185 + 0,002	0,172362	-0,012258	6,639760
0,09175	0,126 - 0,002	0,121708	-0,003992	3,175793
0,10055	0,097 + 0,004	0,093045	-0,004334	4,451066
0,11704	0,055 + 0,001	0,056994	0,002119	3,861577
0,13427	0,036 + 0,003	0,035770	-0,000060	0,168236
0,15207	0,023 - 0,003	0,023486	0,000396	1,715073
0,16930	0,017 + 0,002	0,016431	-0,000133	0,804113

FONTE: O Autor.

TABELA 5 – RAZÃO ENTRE PRESSÕES AO LONGO DO EIXO AXIAL DO BOCAL, ERRO E ERRO RELATIVO USANDO ROE.

x [m]	p/p₀ (Back et al. 1965)	p/p₀ (Roe)	Erro (Roe)	Erro Relativo (Roe) [%]
0,01998	1,000 + 0,000	0,999174	-0,000826	0,082580
0,02547	1,000 + 0,000	0,997928	-0,002072	0,207188
0,02996	0,999 + 0,001	0,996438	-0,002562	0,256504
0,03500	0,998 - 0,001	0,993819	-0,004541	0,454857
0,04411	0,994 + 0,002	0,982609	-0,010931	1,100217
0,04901	0,977 + 0,001	0,966330	-0,010700	1,095159
0,05280	0,953 + 0,004	0,936642	-0,016838	1,765922
0,05588	0,864 - 0,004	0,840510	-0,023600	2,731112
0,06285	0,488 + 0,002	0,463563	-0,024447	5,009448
0,06687	0,229 - 0,003	0,250105	0,020675	9,011348
0,07077	0,194 - 0,003	0,185964	-0,008166	4,206630
0,07845	0,185 + 0,002	0,172515	-0,012105	6,556873
0,09175	0,126 - 0,002	0,121709	-0,003991	3,175246
0,10055	0,097 + 0,004	0,093046	-0,004333	4,449957
0,11704	0,055 + 0,001	0,056994	0,002119	3,861449
0,13427	0,036 + 0,003	0,035769	-0,000061	0,171516
0,15207	0,023 - 0,003	0,023484	0,000394	1,708146
0,16930	0,017 + 0,002	0,016429	-0,000135	0,814081

FONTE: O Autor.

No geral, pode-se observar uma boa concordância dos resultados para ambas as aproximações devido ao baixo valor do erro apresentado, exceto na região próxima à seção da garganta do bocal. Para essa região, o erro relativo das aproximações numéricas deve ser analisado com mais atenção.

Para a aproximação JST o erro relativo máximo calculado foi de 9,05%, e para a de Roe o erro relativo máximo foi de 9,01%. Apesar desses valores parecerem altos para um percentual de erro, da Silva (2015) realizou essa mesma comparação entre os resultados experimentais de Back et al. (1965) e outras duas abordagens computacionais. Em seu trabalho, obteve um erro máximo de 9,20% para a modelagem computacional, e afirma que este valor é um valor aceitável para o problema em questão.

Como ambas as aproximações apresentaram um erro relativo máximo menor que o de da Silva (2015), é possível assumir que são acuradas na obtenção de resultados computacionais capazes de representar o fenômeno físico real.

5.4. VERIFICAÇÃO DAS APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS JST E DE ROE

A verificação das aproximações numéricas foi feita pela ordem aparente e incerteza calculada pelo estimador de Richardson. Para a aproximação JST, utilizou-se os resultados obtidos nas cinco malhas para calcular o coeficiente de descarga através das Equações (165) e (166). Posteriormente, para cada conjunto de três malhas subsequentes, calculou-se a ordem aparente como indicado na Equação (163). Esse mesmo procedimento foi feito para a aproximação numérica de Roe. Os valores obtidos estão demonstrados na TABELA 6. Os símbolo ** nos campos da tabela indicam que não é possível realizar o cálculo para aquele caso.

TABELA 6 – ORDEM APARENTE PARA AS APROXIMAÇÕES JST E DE ROE.

Malha	Número de Volumes	C_d (JST)	P_u (JST)	C_d (Roe)	P_u (Roe)
5	675	1,10350763854047	**	1,14683276354783	**
4	2700	1,12594657940853	**	1,13735378625489	**
3	10800	1,13111696910752	1,05882982695028	1,13502144568736	1,01147647317341
2	43200	1,13243841363001	0,98407858204696	1,13442908725662	0,98861807939948
1	172800	1,13278195290918	0,97178444583869	1,13427854836651	0,98816708093571

FONTE: O Autor.

As duas aproximações numéricas são programadas no SU2 com ordem 2, portanto esperava-se a princípio que a ordem aparente tendesse a esse valor. Porém, como visto na Seção 5.2, o comportamento do fluido para o caso estudado apresenta onda de choque na região divergente do bocal. Gottlieb, Gottlieb e Shu (2006) afirmam que para casos com presença de descontinuidades a acurácia da aproximação numérica é deteriorada devido ao fenômeno de Gibbs, causando uma convergência oscilatória e não uniforme da ordem da solução.

Portanto, devido à descontinuidade presente no problema solucionado, torna-se difícil verificar a solução numérica obtida apenas analisando a ordem aparente. Sendo assim, foi feita uma análise da incerteza da solução numérica.

Aplicando os valores obtidos na TABELA 6 à Equação (164), foi possível calcular a incerteza numérica através do estimador de Richardson e o erro relativo dessa incerteza para ambas as aproximações. Esse erro relativo foi calculado através da divisão da incerteza pelo valor do coeficiente de descarga. Os resultados estão apresentados na TABELA 7. Os símbolo ** nos campos da tabela indicam que não é possível realizar o cálculo para aquele caso.

TABELA 7 – INCERTEZA ATRAVÉS DO ESTIMADOR DE RICHARDSON E ERRO RELATIVO PARA AS APROXIMAÇÕES JST E DE ROE.

Malha	Número de Volumes	U_{ii} (JST)	Erro Relativo (JST) [%]	U_{ii} (Roe)	Erro Relativo (Roe) [%]
5	675	**	**	**	**
4	2700	**	**	**	**
3	10800	0,00154807021028	0,1368620799	-0,00076117098601	0,0670622559
2	43200	0,00045368680143	0,0400628234	-0,00020166213379	0,0177765306
1	172800	0,00012068575881	0,0106539267	-0,00005129233850	0,0045220231

FONTE: O Autor.

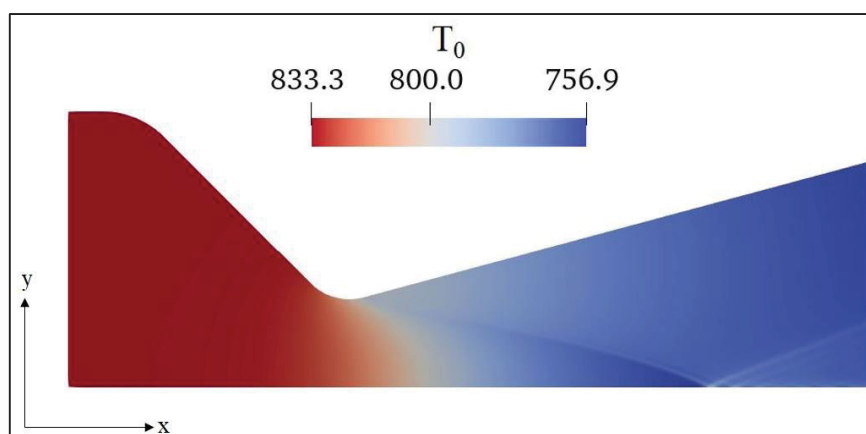
As incertezas apresentadas na TABELA 7 são valores que podem ser considerados pequenos em ambas as aproximações numéricas para o problema estudado. A análise do erro relativo permiti concluir que os resultados numéricos encontrados nas simulações apresentam um percentual baixo de incerteza.

5.5. ANÁLISES SOBRE O CAMPO DE TEMPERATURA NO BOCAL

A princípio, uma análise para o campo de temperatura foi feita em todo o bocal, porém ao invés de utilizar o valor da temperatura estática, optou-se por utilizar a temperatura de estagnação.

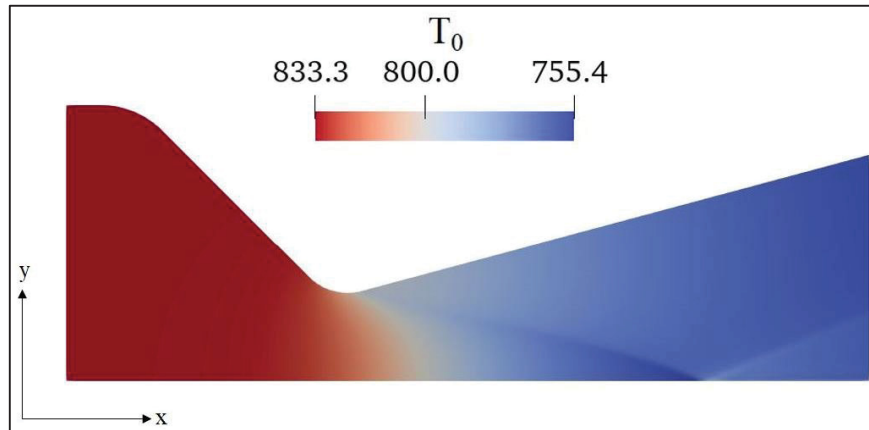
A temperatura de estagnação foi calculada como indicado na Equação (77) para a malha mais refinada em ambas as aproximações numéricas. Os resultados para o campo de temperatura de estagnação estão demonstrados nas FIGURAS 23 e 24.

FIGURA 23 – TEMPERATURA DE ESTAGNAÇÃO AO LONGO DO BOCAL USANDO A APROXIMAÇÃO NUMÉRICA JST.



FONTE: O Autor.

FIGURA 24 – TEMPERATURA DE ESTAGNAÇÃO AO LONGO DO BOCAL USANDO A APROXIMAÇÃO NUMÉRICA DE ROE.



FONTE: O Autor.

Como foi aplicada a condição de escoamento adiabático, esperava-se que a temperatura de estagnação permaneça constante, ou o mais próximo de ser constante o possível, no interior do bocal. Porém esse comportamento não foi observado em nenhuma das aproximações.

Sendo assim, uma análise da temperatura de estagnação foi realizada na linha de entrada de bocal. Através das Equações (168 e 169), foram obtidos os valores da norma L^1 e do erro relativo para todas as cinco malhas, em ambas as aproximações numéricas, como mostra a TABELA 8. O erro relativo foi calculado através da divisão da norma L^1 pela temperatura de estagnação.

TABELA 8 – NORMA L^1 E ERRO RELATIVO PARA TEMPERATURA DE ESTAGNAÇÃO NA ENTRADA DO BOCAL.

Malha	Número de Volumes	L^1 (JST) [K]	Erro Relativo (JST) [%]	L^1 (Roe) [K]	Erro Relativo (Roe) [%]
5	675	0,11753099958459	0,0141037764	0,12563159863782	0,0150758521
4	2700	0,11128351746100	0,0133540755	0,11343591252719	0,0136123640
3	10800	0,10996335285829	0,0131956551	0,11043092329314	0,0132517638
2	43200	0,10963388044960	0,0131561183	0,10972463171699	0,0131670085
1	172800	0,10954159225299	0,0131450437	0,10955904372311	0,0131471378

FONTE: O Autor.

A TABELA 8 mostra que a norma não está apresentando uma tendência esperada de convergir para zero (da SILVA, 2019), e ainda representa um valor alto. Esse fato indica que

há erros numéricos nos pontos de entrada do bocal para ambas as aproximações em todas as cinco malhas utilizadas. O comportamento inesperado da temperatura de estagnação ao longo do bocal se dá devido à propagação desse erro na condição de contorno de entrada para o restante da malha.

Sendo assim, pode-se concluir que, em se tratando de análises numéricas, ambas as aproximações apresentam um pequeno erro numérico. É possível que esse erro possa ser reduzido significativamente ou até mesmo eliminado utilizando algumas das variações da aproximação numérica JST e da de Roe que existem no SU2. Essas variações são melhorias propostas por diversos estudos dessas aproximações, que provaram aumentar a eficácia de seus códigos. Outra opção para solucionar essa questão seria realizar um estudo próprio mais avançado das aproximações numéricas, que resultasse em um maneira diferente de lidar com as condições de contorno, e adicionar essa nova forma ao código fonte do SU2.

É possível também que esse fato ocorra devido à forma como o próprio código de programação SU2 realize os cálculos para as condições de contorno, indicando oportunidades para melhorias no código, ou mesmo mudanças nas escolhas dos outros parâmetros de simulação. Como o foco principal do trabalho não é estudar o código do SU2, mas sim as aproximações numéricas, não serão apresentadas ideias referente a essa questão.

Vale ressaltar que, essa análise é feita sobre parâmetros numéricos, apontando que as aproximações numéricas ainda podem ser melhoradas. Porém, por mais que existam erros numéricos, eles podem ser considerados pequenos o suficiente a ponto de serem desprezados, como pode ser visto nos valores de erro relativo. Portanto, esses erros numéricos não interferem significativamente nos resultados obtidos para as propriedades reais do fluido.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este capítulo destina-se ao encerramento do trabalho, com a primeira seção abordando as conclusões, a segunda apontando as contribuições apresentadas, e a última citando possíveis trabalhos futuros.

6.1. CONCLUSÕES

Durante este trabalho, foi estudado o comportamento de um fluido compressível escoando no interior de um bocal convergente-divergente através de simulações realizadas no programa SU2. Durante as simulações, as aproximações numéricas espaciais JST e de Roe foram testadas. Para avaliar a acurácia das duas aproximações numéricas, optou-se por comparar os resultados numéricos com os resultados experimentais dos autores Back et al. (1965).

Os dados de razão entre a pressão na parede bocal e a pressão de estagnação foram usados para realizar essa comparação. Os resultados permitiram concluir que ambas as aproximações numéricas tiveram êxito para solucionar o problema proposto, pois apresentam um erro relativo aceitável para o caso estudado.

Avaliar o número de Mach ao longo do bocal reafirma que as duas aproximações apresentam uma precisão semelhante para reproduzir o comportamento do fluido no interior do bocal, com exceção de regiões que apresentem descontinuidades. Para essas regiões, a aproximação de Roe captura melhor os fenômenos físicos reais, enquanto a JST propaga erros provenientes do próprio algoritmo da aproximação.

No geral, conclui-se que a aproximação de Roe é a mais adequada para solucionar o problema proposto, devido à presença de ondas de choque na seção divergente do bocal.

6.2. CONTRIBUIÇÕES

Com base no apresentado, destaca-se que:

- a. Foi demonstrado que o *software* livre SU2 é capaz de reproduzir com êxito o comportamento de um fluido compressível no interior de um bocal CD;
- b. Foi provada a acurácia da aproximação numérica JST na resolução do problema proposto, exceto para regiões próximas a descontinuidades;
- c. Foi provada a acurácia da aproximação numérica de Roe na resolução do problema proposto; e

- d. Foi verificado que os resultados numéricos das aproximações JST e de Roe são validos através da incerteza do estimador Richardson.

6.3. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como sugestões para trabalho futuros, indica-se:

- a. Através do SU2, avaliar a influência da viscosidade, forças de corpo, e trocas térmicas para o problema proposto;
- b. Avaliar o escoamento alterando as condições de entrada;
- c. Verificar o comportamento do fluido caso seja feita alguma alteração na geometria do bocal;
- d. Avaliar o comportamento de um outro fluido escoando no interior do bocal;
- e. Estudar outro tipo de malha para modelar o bocal;
- f. Validar através da comparação os resultados obtidos em um outro código de programação; e
- g. Verificar a acurácia de outras aproximações numéricas disponíveis no SU2;

REFERÊNCIAS

AGUIRRE, M. et al. A vertex centred Finite Volume Jameson–Schmidt–Turkel (JST) algorithm for a mixed conservation formulation in solid dynamics. **Journal of Computational Physics**, v. 259, 15 fev. 2014, p. 672-699.

ALAKASHI, A.M.; BASUNO, B. Comparison Between Roe's Scheme and Cell-centered scheme For Transonic Flow Pass Through a Turbine Blades Section. In: IOP CONFERENCE SERIES: EARTH AND ENVIRONMENTAL SCIENCE, .19, Jakarta, Indoesia, 23-24 jan. 2014. **Anais...** Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1755-1315/19/1/012001>>. Acesso em: 10 nov. 2020.

ALAM, M.M.A. et al. Nozzle geometry variations on the discharge coefficient. **Propulsion and Power Research**, v. 5, n. 1, mar. 2016, p. 22-33.

ANDERSON, J.D. **Modern Compressible Flow With Historical Perspective**. 3 ed. Nova York: McGraw-Hill, 2003. p. 12;13;15-19.

ARABI, S.; TRÉPANIER, J.; CAMARERO, R. A simple extension of Roe's scheme for multi-component real gas flows. **Journal of Computational Physics**, v. 388, 1 jul. 2019, p. 178-194.

ARAKI, L.K.; MARCHI, C.H. Verification and validation of numerical solutions of two-dimensional reactive flow in rocket engine nozzles. **Applied Mathematical Modelling**, v. 52, 28 jul. 2017, p. 544-557.

ARMINJON, P.; ROUSSEAU, A. Discontinuous finite elements and Godunov-type methods for the Eulerian equations of gas dynamics. **Computer Methods in Applied Mechanics And Engineering**, v. 49, 1985, p. 17-36.

BACK, L.H.; MASSIER, P.F.; GIER, H.L. Comparison of Measured and Predicted Flows through Conical Supersonic Nozzles, with Emphasis on the Transonic Region. **AIAA**, n. 09, set. 1965, p. 1606-1614.

BALABEL, A. et al. Assessment of turbulence modeling for gas flow in two-dimensional convergent–divergent rocket nozzle. **Applied Mathematical Modelling**, v. 35, 18 jan. 2011, p. 3408-3422.

BIAN, J. et al. Supersonic liquefaction properties of natural gas in the Laval nozzle. **Energy**, v. 159, 28 jun. 2018, p. 706-715.

CAVALCA, D.F. et al. Development and convergence analysis of an effective and robust implicit Euler solver for 3D unstructured grids. **Journal of Computational Physics**, v. 367, 15 ago. 2018, p. 399-415.

CHEN, J.; JIANG, W.; LIU, Y. Study on energy distribution characteristics of cyclone in Laval nozzle. **Chemical Engineering and Processing – Process Intensification**, v. 157, n. 108149, 18 set. 2020.

CHEN, J. et al. Study on supersonic swirling condensation characteristics of CO₂ in Laval nozzle. **Journal of Natural Gas Science and Engineering**, n. 103672, dez. 2020.

da SILVA, N.D.P. **APLICAÇÃO DE ESQUEMAS NUMÉRICOS EM ESCOAMENTOS COM ONDAS DE CHOQUE EM BOCAIS DO TIPO CONVERGENTE-DIVERGENTE**. 2015. 533.2. Tese (Mestrado) - Universidade Federal do Paraná, Curitiba.

da SILVA, N.D.P. **EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON COMPLETA E REPETIDA PARA ESCOAMENTOS COM FLUIDO COMPRESSÍVEL**. 2019. 621.4022. Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Paraná, Curitiba.

DEHKORDI, P.B. et al. CFD simulation with experimental validation of oil-water core-annular flows through Venturi and Nozzle flow meters. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v. 149, 20 jan. 2017, p. 540-552.

ECONOMON, T.D. et al. An Open-Source Suite for Multiphysics Simulation and Design. **AIAA**, v. 54, n. 03, 28 dez. 2015.

ESFAHANIAN, V.; AKBARZADEH, P. The Jameson's numerical method for solving the incompressible viscous and inviscid flows by means of artificial compressibility and preconditioning method. **Applied Mathematics and Computation**, v. 206, 2008, p. 651-661.

GERMER, E.M. **AVALIAÇÃO DO EFEITO DA GEOMETRIA DA SEÇÃO CONVERGENTE EM TUBEIRAS DE MOTOR-FOGUETE**. 2014. 620.1. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba

GOTTLIEB, S.; GOTTLIEB, D.; SHU, C.W. Recovering High-Order Accuracy in WENO Computations of Steady-State Hyperbolic Systems. **Journal of Scientific Computing**, v. 28, 25 ago. 2006, p. 307-318.

JAMESON, A.; SCHMIDT, W.; TURKEL, E. Solution of the Euler Equations by Finite Volume Methods Using Runge-Kutta Time-Stepping Schemes. In: AIAA FLUID AND PLASMA DYNAMIC CONFERENCE, .14, Palo Alto, California, 23-25 jun. 1981. **Anais...** Disponível em: <<https://www.researchgate.net/publication/247576565>>. Acesso em: 11 nov. 2020.

JAMESON, A. **The Origins and Further Development of the Jameson-Schmidt-Turkel (JST) Scheme**. 2015 - Stanford University, Stanford, CA.

LEE, C.H. et al. A new Jameson–Schmidt–Turkel Smooth Particle Hydrodynamics algorithm for large strain explicit fast dynamics. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 311, 1 nov. 2016, p. 71-111.

LI, X. et al. Effects of different nozzle materials on atomization results via CFD simulation. **Chinese Journal of Chemical Engineering**, v. 28, 18 out. 2019, p. 362-368.

LV, Z. et al. Experimental and numerical investigations of a scramjet nozzle at various operations. **Aerospace Science and Technology**, v. 96, n. 105536, jan. 2020.

MARCHI, C.H. **Verificação de Soluções Numéricas Unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos**. 2001. Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis.

MARTINS, M.A. et al. Estimativa para o erro de discretização com o emprego de Multiextrapolação de Richardson em CFD. In: PROCEEDING SERIES OF THE BRAZILIAN SOCIETY OF COMPUTATIONAL AND APPLIED MATHEMATICS, Curitiba, 2014. **Anais...** Disponível em: <<https://proceedings.sbmac.org.br/sbmac/article/view/317>>. Acesso em: 17 nov. 2020.

PARK, J.J. et al. Supersonic Nozzle Flow Simulations for Particle Coating Applications: Effects of Shockwaves, Nozzle Geometry, Ambient Pressure, and Substrate Location upon Flow Characteristics. **J Therm Spray Tech**, n 20, 06 ago. 2011, p. 514–522

PETRI, L.A. et al. Verification and validation of a Direct Numerical Simulation code. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 1 jul. 2015, p. 266-279.

RINCÓN, J.; ELDER, R. A high-resolution pressure-based method for compressible flows. **Computers & Fluids**, v. 26, 1997, p. 217-231.

ROE, P.L. Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes. **Journal of Computational Physics**, v. 43, set. 1981, p. 357-372.

SANDHU, N.; JAMESON, J. An experimental study of choked foam flows in a convergent-divergent nozzle. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 1979, p. 39-58.

TAM, C.K.W.; TANNA, H.K. Shock associated noise of supersonic jets from convergent-divergent nozzles. **Journal of Sound and Vibration**, v. 81, 1982, p. 337-358.

TAN, D.H. et al. Influence of Laval nozzles on the air flow field in melt blowing apparatus. **Chemical Engineering Science**, v. 80, 27 jun. 2012, p. 342-348.

TIAN, H. et al. Numerical and experimental investigation of throttleable hybrid rocket motor with aerospike nozzle. **Aerospace Science and Technology**, v. 106, n. 105983, 23 jun. 2020.

JAMESON, A.; SCHMIDT, W.; TURKEL, E. Numerical Solution of the Euler Equations by Finite Volume Methods Using Runge-Kutta Time-Stepping Schemes. In: AIAA FLUID AND PLASMA DYNAMIC CONFERENCE, .14, Palo Alto, California, 23-25 jun.

1981. **Anais...** Disponível em: <<https://www.researchgate.net/publication/247576565>>. Acesso em: 11 nov. 2020.

RAVISHANARA, A.K.; ÖZDEMIR, H.; WEIDE, E. Implementation of a pressure based incompressible flow solver in SU2 for wind turbine applications. **AIAA**, 06 jan. 2020.

TU, J.; YEOH, G.; LIU, C. Practical Guidelines for CFD Simulation and Analysis: Comments on Mesh Topology. In: **Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach**. 2. ed. Reino Unido: Butterworth Heinemann, 2013. cap. 6.2.4, p. 219-273. ISBN 978-0-08-098243-4. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/topics/engineering/structured-mesh>>. Acesso em: 9 maio 2021.

Computational Fluid Dynamics A Practical Approach. 2 ed. Reino Unido: Butterworth Heinemann, 2013. p. 219

TUNIK, Y.V. Control of detonation combustion of rarefied hydrogen-air mixture in a laval nozzle. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 43, 18 set. 2018, p. 19260-19266.

VANMORE, V.V.; DABADE, U.A. Development of Laval Nozzle for Micro Abrasive Jet Machining [MAJM] Processes. **Procedia Manufacturing**, v. 20, 2018, p. 181-186.

XU, J.; ZHAO, C. Two-dimensional numerical simulations of shock waves in micro convergent–divergent nozzles. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 50, 21 fev. 2007, p. 2434-2438.