3 Formulação Matemática

Neste capítulo é apresentada a formulação matemática utilizada para descrever o escoamento turbulento e compressível, bem como as condições de contorno empregadas para caracterizar a interação entre o jato supersônico quente e a superfície da rocha.

Também faz parte deste capítulo a apresentação do modelo de turbulência e do modelo selecionado para o desenvolvimento do processo, já que deve-se levar em conta a natureza do fenômeno

3.1. Equações Governantes

Para a modelagem dos fenômenos físicos descritos no capítulo precedente, são utilizadas as equações de transporte de massa, quantidade de movimento e de energia para uma mistura de gases perfeitos em escoamento turbulento e compressível, num sistema de coordenadas cartesiano, considerando-se simetria de revolução em torno do eixo x, sob a forma vetorial estas equações escrevem-se como:

$$\iint_{V} \frac{\partial B}{\partial t} y dx dy + \int_{S} \left(Fy dy - Gy dx \right) = \iint_{V} Ky dx dy, \qquad (3.1)$$

os vetores B F e G contém respectivamente, as propriedades conservadas, e os vetores de fluxo; nas direções longitudinal x e radial y, respectivamente, enquanto que o vetor K contém os termos de produção.

$$B = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \\ \rho Y_1 \\ \rho Y_2 \\ \vdots \\ \rho Y_{N-1} \end{bmatrix}, \quad K = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ p/y \\ 0 \\ \dot{w}_1 W_1 \\ \dot{w}_2 W_2 \\ \vdots \\ \dot{w}_{N-1} W_{N-1} \end{bmatrix},$$

(3.2)

$$F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^{2} + p - \tau_{xx} \\ \rho uv - \tau_{xy} \\ u(\rho E + p) - \Omega_{x} \\ \rho Y_{1}(u + V_{x_{1}}) \\ \rho Y_{2}(u + V_{x_{2}}) \\ \vdots \\ \rho Y_{N-1}(u + V_{x_{N-1}}) \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv - \tau_{xy} \\ \rho v^{2} + p - \tau_{yy} \\ v(\rho E + p) - \Omega_{y} \\ \rho Y_{1}(v + V_{y_{1}}) \\ \rho Y_{2}(v + V_{y_{2}}) \\ \vdots \\ \rho Y_{N-1}(v + V_{y_{N-1}}) \end{bmatrix}$$

A nomenclatura usada neste sistema de equações é aquela usualmente adotada, isto é, ρ é a densidade, $u \in v$ são os componentes da velocidade nas direções $x \in y$, respectivamente; E é a energia total específica, Y_i , \dot{w}_i , W_i são a fração de massa, a taxa de produção molar e a massa molecular da espécie química *i*, respectivamente e, finalmente, p é a pressão estática. Os componentes do tensor das tensões viscosas τ_{xx} , τ_{xy} , τ_{yy} e do vetor de fluxo de calor \dot{Q}_x , \dot{Q}_y são dados por:

$$\tau_{xx} = 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right),$$
(3.3)

$$\tau_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \tag{3.4}$$

$$\tau_{yy} = 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right), \qquad (3.5)$$

$$\dot{Q}_{x} = u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + \lambda \frac{\partial T}{\partial x} - \rho \sum_{K=1}^{N} h_{k} Y_{k} U_{xk} , \qquad (3.6)$$

$$\dot{Q}_{y} = u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + \lambda \frac{\partial T}{\partial y} - \rho \sum_{K=1}^{N} h_{k} Y_{k} U_{yk} , \qquad (3.7)$$

onde μ e λ são a viscosidade da mistura e a condutividade térmica, e U_{xk} e U_{yk} são as velocidades da difusão da espécie *k* nas direções (*x*) e (*y*) respectivamente, dado pela lei de Fick (Williams, 1985)

Na solução do sistema de equações (3.2), N - 1 espécies químicas são transportadas, já que a fração da N – ézima espécie química, Y_N , é calculada usando a conservação de massa

$$\sum_{i=1}^{N} Y_i = 1, (3.8)$$

o que leva a

$$Y_N = 1 - \sum_{i=1}^{N-1} Y_i . ag{3.9}$$

O sistema de equações de (3.1) é fechado com a equação de estado para uma mistura de gases perfeitos,

$$p = \rho \Re T \sum_{i=1}^{N} \frac{Y_i}{W_i}, \qquad (3.10)$$

onde *T* é a temperatura, \Re é constante universal dos gases que é igual a 8314 $J/kmol_K$. Esta equação é usada para determinar a pressão, *p*. A energia total específica, *E*, é a soma da energia interna, *e*, e da energia cinética.

$$E = e + \frac{1}{2} \left(u^2 + v^2 \right) = \sum_{i=1}^{N} Y_i e_i + \frac{1}{2} \left(u^2 + v^2 \right) = \sum_{i=1}^{N} Y_i h_i - \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} \left(u^2 + v^2 \right).$$
(3.11)

A energia interna de cada espécie química, e_i , e sua entalpia, h_i , são funções da temperatura

$$h_i = h_i^{\circ} + \int_0^T Cp_i dT$$
, (3.12)

$$e_i = e_i^{\circ} + \int_0^T Cv_i dT$$
, (3.13)

onde h_i° e e_i° são a energia interna e a entalpia de formação da i-ézima espécie química, Cp_i e Cv_i são os calores específicos a pressão e a temperatura constantes, respectivamente, os quais são funções da temperatura.

Assim, a temperatura é determinada uma vez conhecida a composição Y_i , e a energia interna da mistura. (Figueira da Silva et al., 2000; Pimentel et al., 2002). Por conveniência, as equações governantes são adimensionalizadas, o expoente ^{*} indica quantidades adimensionais.

A velocidade é adimensionalizada pela velocidade do som,

$$u = u^* a_0, (3.14)$$

$$v = v^* a_0$$

enquanto que um comprimento característico, l_0 , é utilizado para adimensionalizar as distâncias ao longo dos eixos de coordenadas e o tempo. Usando a densidade, ρ_0 , e, lembrando que

$$a_0^2 = \gamma \frac{p_0}{\rho_0},$$

$$a_0^2 = C p_0 (\gamma - 1) T_0,$$
(3.15)

é possível adimensionalizar as seguintes propriedade;

$$x = x^{*} l_{0}$$

$$y = y^{*} l_{0},$$

$$t = t^{*} \frac{l_{0}}{a_{0}}$$
(3.16)

$$\rho = \rho^* \rho_0, \qquad (3.17)$$

$$p = p^* p_0 \gamma = p^* \rho_0 a_0^2,$$

$$T = T^* (\gamma - 1) T_0 = T^* \frac{a_0^2}{C p_0},$$
(3.18)

onde γ é a razão de calores específicos. De posse destes valores, é possível definir o número de Reynolds acústico,

$$Re = \frac{\rho_0 a_0 l_0}{\mu_0},$$
 (3.19)

e o número de Prandtl

$$\Pr = \frac{\mu_0 C_{p_0}}{\lambda_0},$$
 (3.20)

onde,

$$\mu = \mu^{*} \mu_{0},$$

$$\lambda = \lambda^{*} \lambda_{0},$$

$$Cp = Cp^{*} Cp_{0},$$
(3.21)

São adimensionalizações utilizadas para a viscosidade, a condutividade térmica e o calor específico a pressão constante, respectivamente.

3.2. Modelo de Turbulência

Existem diversos modelos de turbulência disponíveis na literatura. Porém, devido a natureza do fenômeno turbulento, modelos de turbulência são muito particulares, e não raro, representam com certa dificuldade escoamentos complexos. Um bom modelo de turbulência deve ser o mais simples possível, de modo a minimizar o custo computacional envolvido. Deve também conter um número reduzido de constantes ou funções empíricas inseridas nas suas equações diferenciais, sendo, entretanto capaz de escrever a maior variedade de escoamentos. Em outras palavras, o desafio dos modelos de turbulência é, descrever o tensor de Reynolds para a maior gama possível de situações de escoamentos.

Uma vez que a maior parte dos modelos de turbulência foi desenvolvida para escoamentos caracterizados por um elevado número de Reynolds, uma das maiores dificuldades envolvidas é descrever o comportamento quando o número de Reynolds local é baixo como, por exemplo, na vizinhança de paredes. Em vários sistemas que envolvem processos térmicos, existem componentes que dependem do conhecimento do movimento de fluido próximo às paredes. A presença de parede garante que em uma região do escoamento, mesmo que pequena, o número de Reynolds turbulento é baixo o suficiente para que a viscosidade molecular influencie diretamente nos processos de produção, destruição e transporte de turbulência.

3.2.1. Modelo de uma Equação Diferencial de Spalart e Allmaras

O modelo de uma equação de Spalart e Allmaras (1994) foi o escolhido para o desenvolvimento deste trabalho por seu reconhecido sucesso em aplicações aeronáuticas, e por ser o modelo mais simples para o desenvolvimento deste estudo. Este modelo tem sido empregado com sucesso para o cálculo de escoamentos compressíveis nos quais descolamentos de camada limite estão presentes. Este tipo de modelo é capaz de levar em consideração a existência de turbulência no escoamento não perturbado, por permitir que, nos locais de gradiente de velocidade zero, a viscosidade turbulenta seja não nula.

Segundo seus autores, este modelo foi derivado utilizando empirismo, argumentos de análise dimensional, invariância Galileana, e dependência seletiva na viscosidade molecular.

O modelo de Spalart - Allmaras envolve a solução de uma equação diferencial para a viscosidade turbulenta modificada \tilde{v} , a qual não requer o cálculo de um comprimento de escala relacionado com a espessura da camada cisalhante local.

Este modelo foi especialmente desenvolvido para aplicações aerodinâmicas envolvendo escoamentos com fronteiras sólidas e tem apresentado bons resultados para escoamentos com gradientes adversos de pressão. Também está se tornando popular em aplicações em turbo-máquinas.

Porém, o modelo de Spalart - Allmaras não apresenta bons resultados na previsão de escoamento homogêneo isotrópico, ou quando existem variações bruscas do comprimento de escala, por exemplo, quando o escoamento varia abruptamente de um escoamento com fronteira sólida para um escoamento cisalhante livre.

Usando-se a hipótese de Boussinesq, o tensor de Reynolds é dado por,

$$-\overline{\rho u_i u_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \rho \delta_{ij}, \qquad (3.22)$$

Entretanto, o modelo de Spalart – Allmaras não permite o cálculo de k, este é um "defeito" do modelo.

Na equação (3.22) μ_t é a viscosidade turbulenta, dada por

$$\mu_t = \overline{\rho} \widetilde{v} f_{v_1}, \qquad (3.23)$$

onde ρ é a densidade local, e f_{v1} é uma função de amortecimento viscoso, definida como,

$$f_{\nu 1} = \frac{X^3}{X^3 + C^3_{\nu 1}},$$
(3.24)

$$X = \frac{\widetilde{\nu}}{\nu}, \qquad (3.25)$$

e C_{v1} é uma constante empírica, igual a 7,1. A equação que descreve o transporte da viscosidade turbulenta modificada, \tilde{v} , é :

$$\frac{\partial \widetilde{v} \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho u}_{j} \widetilde{v}\right)}{\partial x_{j}} = \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\left(\frac{\mu + \rho \widetilde{v}}{\sigma_{\widetilde{v}}} \right) \frac{\partial \widetilde{v}}{\partial x_{j}} \right] + \rho \frac{C_{b2}}{\xi_{\widetilde{v}}} \left(\frac{\partial \widetilde{v}}{\partial x_{j}} \right)^{2} + G_{v} - \psi_{v}, \quad (3.26)$$

onde G_{ν} é a taxa de produção de viscosidade turbulenta e ψ_{ν} é a taxa de destruição da viscosidade turbulenta, que ocorre na região próxima da parede devido a bloqueio pela parede e ao amortecimento viscoso. Nesta equação $\xi_{\nu} = 2/3$ e $C_{b2} = 0,622$ são constantes empíricas.

A taxa de produção é modelada por:

$$G_{v} = C_{b1} \rho \widetilde{S} \widetilde{v} , \qquad (3.27)$$

onde \widetilde{S} é uma medida escalar do tensor deformação, \widetilde{S} e $f_{_{V^2}}$ são dados por

$$\widetilde{S} = S + \frac{\widetilde{v}}{K^2 d^2} f_{v^2}, \qquad (3.28)$$

$$f_{\nu 2} = 1 - \frac{X}{1 + X f_{\nu 1}}, \qquad (3.29)$$

e $C_{b1} = 0,1335$, e K = 0,4187 é a constante de von Kármán (Schlichting, 2000). Nestas relações *d* é a distância até a parede mais próxima. Neste trabalho, \tilde{S} será modelado utilizando-se o modulo do tensor vorticidade,

$$\widetilde{S} = \sqrt{2\Omega_{ij}\Omega_{ij}} , \qquad (3.30)$$

onde o tensor taxa de rotação média é definido por,

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right).$$
(3.31)

Esta expressão é recomendada quando a turbulência é devida somente à geração de vorticidade nas regiões próximas as paredes. No entanto, os resultados obtidos com esta expressão tendem a superestimar a produção da viscosidade turbulenta e, conseqüentemente, superestimar a viscosidade turbulenta propriamente dita.

O termo da taxa de destruição é modelado como

$$\psi_{v} = C_{w1} \rho f_{w} \left(\frac{\tilde{v}}{d}\right)^{2}, \qquad (3.32)$$

$$C_{w1} = \frac{C_{b1}}{k} + \frac{1 + C_{b2}}{\sigma_{\tilde{v}}},$$
(3.33)

 $C_{\scriptscriptstyle w2}$ = 0,3 e $C_{\scriptscriptstyle w3}$ = 2,0 são constantes empíricas.

Este modelo foi introduzido no programa de cálculo utilizando-se como base a implementação realizada por Strauss e Azevedo (2002), a qual resolve a Eq. (3.26) separadamente das demais equações de transporte mediante a utilização de um esquema de discretização temporal implícito. Este procedimento é necessário para garantir a estabilidade numérica do calculo. A introdução deste modelo de turbulência acarretou diversas modificações na estrutura do código computacional existente (Figueira da Silva *et al.*, 2000), de modo de alterar o número de variáveis e equações resolvidas. Também foi preciso realizar alterações nas equações de quantidade de movimento e de energia, de modo a incluir o transporte turbulento.

3.2.2. Extensões Propostas do Modelo de Turbulência de Spalart – Allmaras para Paredes Rugosas

Para se descrever o escoamento sobre paredes rugosas tal como a superfície de uma rocha no estado bruto, extensões serão utilizadas para adaptar o modelo de uma equação proposto por Spalart e Allmaras (1994) às mudanças no transporte turbulento que ocorrem na vizinhança de uma superfície rochosa (Schlichting, 2000). A este modelo de turbulência foram propostas duas extensões para levar em conta a presença de uma parede com rugosidade, nas quais se supõe que o tamanho dos elementos de rugosidade é pequeno quando comparado com a espessura da camada limite, (Aupoix e Spalart, 2003).

Estas extensões são baseadas em duas hipóteses que modelam a rugosidade da parede sem que seja necessário resolver a equação de Navier – Stokes a redor de cada um dos elementos de rugosidade:

- A aproximação discreta do elemento introduz termos adicionais nas equações de transporte que descrevem o escoamento, os quais modelam (i) o bloqueio do escoamento, (ii) o arrasto e (iii) a distribuição de fluxo de calor devido a presença dos elementos rugosos.
- A aproximação "equivalente grão de areia" relaciona a rugosidade real à uma rugosidade idealizada. Mediante a utilização de correlações empíricas, a altura equivalente do grão de areia é obtida a partir da forma real da rugosidade. Os efeitos de rugosidade são representados por um aumento da viscosidade turbulenta na região da parede, cuja conseqüência é aumentar os níveis de atrito e de fluxo de calor na parede. Há dois tipos de modelos considerados neste caso,

- O modelo no qual a viscosidade turbulenta é nula no limite, o que pode ser interpretado como um modelo no qual a parede virtual corresponde à base das rugosidades. Esta correção de rugosidade age principalmente mediante uma redução do amortecimento turbulento na região da parede.
- O modelo no qual a viscosidade turbulenta é finita no limite, isto pode ser interpretado como um modelo no qual a parede virtual é localizada em parte acima da rugosidade.

A extensão proposta por Spalart (2003) a qual foi escolhida para ser utilizada no presente estudo, procura manter o formalismo do modelo original de S - A. De modo a preservar seu comportamento na região da parede são esperados valores não nulos de \tilde{v} e de v_t na parede, os quais permitem simular os efeitos de rugosidade, uma vez que

$$\widetilde{v} = u_{\tau} K d$$

$$\widetilde{S} = \frac{u_{\tau}}{K d} , \qquad (3.34)$$

onde \tilde{v} é a quantidade transportada no modelo de S – A, K é a constante de von Kármán, d é a distância à parede mais próxima, \tilde{S} é a transformada da vorticidade e u_{τ} é velocidade de atrito baseada na tensão de cisalhamento na parede, τ_{w} , onde a velocidade de atrito é definida como;

$$u_{\tau} = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}, \qquad (3.35)$$

Uma vez que a parede fronteira do domínio de cálculo é situada arbitrariamente na região onde as rugosidades são encontradas, $\tilde{v} \neq 0$. Spalart (2000) propõe substituir a condição de contorno de parede, $\tilde{v} = 0$, por

$$\frac{\partial \tilde{v}}{\partial n} = \frac{\tilde{v}}{d}, \qquad (3.36)$$

onde *n* é a normal ao longo da parede no caso de parede rugosa, a distância *d* tem que ser corrigida de modo a se levar em conta a presença dos elementos rugosos. Para este fim, é feita uma compensação $d = d_{\min} + d_0$, onde o d_{\min} é a distância até a parede e $d_0(h_s)$ é a correção devido a rugosidade equivalente.

A função f_{v1} na equação (3.22) é alterada, modificando-se X como

$$X = \frac{\tilde{v}}{v} + C_{R1} \frac{h_s}{d}, \qquad (3.37)$$

onde $C_{R1} = 0.5$. Esta definição de *X* e o valor de C_{R1} permitem que a variação clássica de Δu^+ com h_s^+ seja corretamente reproduzido (Schlichting, 2000).

O balanço da equação de transporte impõe que todos os termos têm o mesmo comportamento com respeito à d para as superfícies lisas, de modo que a definição de \tilde{S} permanece inalterada, e é dada pela Eq. (3.28).

$$\widetilde{S} = S + \frac{\widetilde{v}}{K^2 d^2} f_{v_2}$$
(3.38)

Com,

$$f_{\nu 2} = 1 - \frac{\tilde{\nu}}{\nu + \tilde{\nu} f_{\nu 1}} = 1 - \frac{X}{1 + X f_{\nu 1}}$$
(3.39)

Uma das extensões propostas no modelo de turbulência por Spalart – Allmaras é a extensão de **ONERA**, na qual seus estudos inéditos se favoreceram de modelos usando valores diferentes de zero da viscosidade turbulenta na parede; especialmente para alturas intermediárias da rugosidade, este valor é impor para que o valor de \tilde{v} simule os efeitos de rugosidade na parede.

Ambas extensões do modelo de turbulência modificam a condição limite na parede, impondo valores da parede ou fornecendo uma condição de contorno misturada. Em ambos os casos a distância *d* à parede é modificada de modo que o modelo não seja local, é dizer que d_0 do sistema tem que ser um dado

conhecido, isto é que cada ponto do campo tem que estar relacionado a um ponto da superfície.

A proposta de Spallart (2000) foi utilizada para realizar uma comparação dos resultados obtidos com uma parede lisa e com aqueles em presença de rugosidade, pois espera-se uma modificação na taxa de transferência de calor entre o jato e a superfície da rocha.

3.3. Modelos do Fluxo de Calor em Presença de Descamação Térmica

Uma vez que a teoria da descamação das rochas por jatos supersônicos quentes está baseada nas tensões térmicas internas geradas por uma fonte de calor, o maior desafio é encontrar uma relação entre as propriedades termodinâmicas e mecânicas da rocha e o fenômeno físico da transferência de calor do jato para a superfície a ser perfurada.

Mecanismos para descrição de falhas em rochas foram propostos por Peng e Johnson (1992), para a ruptura em rochas de formato cilíndrico. Os estudos foram baseados nos trabalhos de Dey (1984) e de Preston (1934) citados por Rauenzahn (1986), que propuseram um mecanismo descritivo de falhas.

Inicialmente, foi constatado que este processo de perfuração era mais adaptado em rochas com grande quantidade de quartzo, isto é, rochas policristalinas, o que levou à suposição que o processo da fratura da rocha se relacionaria com as mudanças de fase α - β do quartzo, a qual ocorre aproximadamente a 573 °C. No entanto, uma possível mudança da fase do material poderia prejudicar a continuidade do processo, uma vez que porções da rocha fundida na superfície da perfuração poderiam aumentar a difusividade térmica, invalidando as demais teorias de falha por tensões térmicas atuantes e contribuindo para a fundição do material superficial da rocha.

Rauenzahn (1986) propôs um modelo onde a superfície de um material rochoso homogêneo e elástico, é aquecida uniformemente, apresentando como conseqüência uma tensão térmica acumulada de intensidade igual a:

$$\sigma = \frac{\beta_r E \Delta T}{1 - \nu}, \qquad (3.40)$$

onde σ é a tensão térmica acumulada, β_r é o coeficiente linear de expansão térmica, E é a modulo de Young, v o coeficiente de Poisson e $\Delta T = T(x) - T_0$ é a diferença de temperatura entre a superfície exposta da rocha, cuja temperatura, T_s , é a priori desconhecida e a temperatura inicial da mesma, T_0 . Nesta análise x = 0 encontra-se na superfície da rocha e $x \ge 0$ em seu interior.

Como a dimensão característica da área aquecida tem muitas ordens de grandeza a mais do que a espessura de uma escama, a hipótese de condução de calor unidimensional na direção da perfuração será utilizada. Deste modo, o processo de transferência de calor será aproximado por um processo de condução transiente unidimensional em um corpo semi-infinito. Supondo ainda que a rocha se comporte como um sólido em sublimação, no qual a superfície avança à velocidade U_r toda vez que a temperatura T_s for atingida a distribuição de temperatura no interior da rocha pode ser expressa por:

$$T(x) = \Delta T_s \exp\left(-\frac{U_r x}{\alpha_r}\right) + T_0, \qquad (3.41)$$

onde U_r é a taxa de penetração, α_r é a difusividade térmica da rocha, e $\Delta T_s = T_s - T_0$ é a diferença entre a temperatura de descamação da rocha, T_s , e a temperatura inicial da rocha, T_0 . Considerando-se ainda a probabilidade cumulativa de falha para certo nível de tensão, Rauenzahn (1986) propôs uma função de distribuição de probabilidade de Weibull para descrever a ruptura de materiais contendo defeitos em sua estrutura:

$$P = 1 - \exp\left[-\int_0^\infty \left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^m dV\right],\tag{3.42}$$

onde dV é o elemento de volume, P é a probabilidade. Nessa distribuição m e σ_0 são, respectivamente, o parâmetro de homogeneidade e a tensão de ruptura sob compressão própria da rocha. Ambos necessitam ser determinados experimentalmente. Quanto mais homogênea é a rocha, maior é o valor de m e, por conseguinte, a tensão de ruptura tende ao valor σ_0 . Valores usuais do parâmetro de homogeneidade para granitos encontram-se entre 10 e 20. Notese que m e σ_0 não devem ser tomados como parâmetros intrínsecos de um dado tipo de rocha, mas de uma ocorrência desta rocha. Por esta razão, a literatura fornece valores destes parâmetros para um número limitado de amostras de granitos (Militký *et. al*, 2002), generalizações da dependência em $(\sigma_{\sigma_0})^m$ da distribuição de Weibull são propostas.

Substituindo a equação (3.40) nas equações (3.41) e (3.42), pode-se relacionar a probabilidade de falha como função da diferença de temperaturas entre a superfície e o interior da rocha. Considerando-se ainda a probabilidade média para a formação de uma escama (P = 0.5), chega-se a:

$$\Delta T_s = \frac{(1-\nu)\sigma_0}{\beta_r E} \left(\frac{1.386}{\pi C_L^2}\right)^{\frac{1}{m}} \left(\frac{mu_r}{\alpha_r}\right)^{\frac{3}{m}}.$$
(3.43)

Nesta expressão C_L é o fator de forma das escamas liberadas pelo processo, uma relação entre o diâmetro e a espessura dos mesmos, podendo assumir valores típicos para o granito compreendidos entre 10 e 15 (Geller 1970, Rauenzahn 1986). Derivando-se a equação (3.41) obtém-se uma relação direta entre a taxa de penetração e o fluxo de calor, \dot{Q}_r :

$$\dot{Q}_r = (\rho C p)_r U_r \Delta T_s, \qquad (3.44)$$

onde ρ_r e C_{pr} são a densidade e o calor especifico da rocha, respectivamente. Substituindo-se esta relação na equação (3.43), pode-se escrever que:

$$\Delta T_s = \left(\frac{\dot{Q}_r}{\rho C p}\right)_r^3 \left[\frac{(1-\nu)\sigma_0}{\beta_r E}\right]^m \left(\frac{1,386}{\pi C_L^2}\right) \left(\frac{m}{\alpha_r}\right)^{3\frac{1}{m+3}}.$$
(3.45)

Assim, de posse dos valores das propriedades térmicas e mecânicas presentes nesta equação, que podem ser medidos ou estimados, da superfície da rocha durante o processo de descamação térmica é diretamente relacionada ao fluxo de calor. Valores típicos das propriedades que figuram nesta equação para um granito foram propostos por Rauenzahn (1986): m = 20, $\beta_r = 8\mu K^{-1}$,

E = 45_*GPa*, σ_0 = 70 MPa $m^{\frac{3}{20}}$, v = 0.25 (adimensional) e $\alpha_r = 1\mu m^2 / s$. Para estes valores, um fluxo de calor de 1 a 10 MW/m² leva aos valores de ΔT_s entre 450 e 550 °C.

A equação (3.45) permite obter, para um fluxo de calor dado, tanto a temperatura da rocha na qual a descamação térmica ocorre quanto à velocidade de regressão da superfície da rocha normal ao jato oriundo do queimador.

3.4. Condições de Contorno

Implementar corretamente as condições de contorno apropriadas às características físicas do escoamento é um aspecto fundamental para a obtenção de soluções compatíveis com a realidade física do escoamento que está sendo simulado.

Foi necessário realizar modificações nas condições de contorno da entrada e da saída que estavam implementadas no código computacional existente, já que as equações governantes destas condições encontravam-se expressa em uma situação particular, válida somente quando os eixos coordenados encontram-se alinhados com a direção normal à face da fronteira. As modificações foram feitas baseando-se nas matrizes de auto – vetores à esquerda à direita das derivadas por Jian (1992). Mais detalhes são apresentados no Apêndice A.

Na Figura 3.1 mostra-se o domínio computacional implementado para o desenvolvimento do processo, no qual são indicadas as condições de contorno utilizadas para a solução deste problema. A direção do escoamento coincide com a orientação do eixo *x*. Este estudo numérico envolve a simulação do ar como o fluido utilizado no desenvolvimento deste trabalho.



Figura 3.1: Domínio computacional e condições de contorno

Na entrada do domínio de cálculo o escoamento é supersônico e paralelo ao eixo de simetria, sendo prescritos o número de Mach (*M*), a temperatura estática (T_e) a pressão estática (p_e) e a concentração das espécies químicas. Estes valores correspondem àqueles encontrados na saída do combustor. Neste estudo, por simplicidade, optou-se por trabalhar com ar aquecido ao invés de produtos de combustão. No tocante as propriedades do escoamento, foram utilizados valores representativos daqueles utilizados por outros autores, Wilkinson e Tester (1993a)

Na fronteira de simetria, a equação de quantidade de movimento linear foi tratada pela técnica de volume de controle de modo a converter a equação diferencial de conservação em equação algébricas que podem ser resolvidas numericamente. Esta técnica consiste na integração das equações diferenciais sobre cada volume de controle, gerando uma equação de diferenças finitas que conserva cada quantidade com base no volume de controle. O desenvolvimento desta técnica encontra-se explicado no Apêndice A.

Para o desenvolvimento deste trabalho foram utilizados dois tipos de condição de contorno de parede. Inicialmente se considerou as paredes adiabáticas e lisas. Em seguida, foram utilizadas as paredes adiabáticas com rugosidade utilizando, para este fim, a extensão propostas por Aupoix e Spalart (2003) no modelo de turbulência de Spalart – Allmaras (2005). Esta extensão consiste em uma modificação da equação de transporte da viscosidade turbulenta, que tem em conta a rugosidade equivalente da superfície. A partir da equação (3.23) são feitas as modificações para parede rugosa a qual é a que desenvolve o modelo original deste modelo de turbulência.

Na fronteira de saída utiliza-se uma extrapolação das variáveis. Este tipo de condição faz uso das velocidades características do escoamento (u, u + a, u - a, onde a é a velocidade do som) para calcular as propriedades na fronteira do domínio.

Devido à forte sucção provocada pelo jato supersônico, nos instantes iniciais do cálculo é possível encontrar escoamento reverso na fronteira de saída. Os volumes computacionais nos quais isto ocorre são tratados como sendo fronteiras de parede enquanto esta tendência perdurar.

No tocante às condições iniciais, à exceção do orifício da saída dos gases queimados, o escoamento encontra-se inicialmente em repouso, sendo especificado um valor de temperatura estática idêntico ao jato de gases quentes e um valor de pressão estática.

A condição de extrapolação permite que escoamento de gás fresco entre no domínio computacional. Esta condição de entrada destina-se a evitar que ocorra uma redução de pressão no interior do domínio devido à sucção provocada pelo jato supersônico. Observou-se que esta redução de pressão influencia a estrutura do jato supersônico, fazendo com que sua abertura seja muito superior àquela que resultaria de uma manutenção da pressão no seu valor inicial. Entretanto, a entrada de ar por esse tipo de fronteira acarreta um comportamento do escoamento na sua vizinhança que é arbitrário e pode vir a influenciar, ainda, a interação entre o jato e a parede. Durante o desenvolvimento do presente estudo as diferentes soluções investigadas para remover este grau de arbitrariedade não surtiram o efeito desejado. Assim, a solução que foi adotada é aquela que, no estado atual do conhecimento, melhor permite modelar essa interação. Trabalhos futuros poderiam investigar um modo de acoplar o domínio computacional com um comportamento presumido do escoamento a grandes distâncias do jato, cuja solução analítica é conhecida.