

4

Método Numérico de Resolução

Neste capítulo será descrito o método numérico utilizado no presente trabalho, o qual é baseado em um sistema de discretização utilizando-se uma técnica de volumes finitos centrados na célula de cálculo e em malhas computacionais não estruturadas. Esta técnica, especificamente adaptada a escoamentos compressíveis de mistura de gases, utiliza um método de separação de vetores de fluxo que leva em conta as velocidades características de propagação do escoamento na interface de cada elemento. Além disto, uma técnica monotônica de extrapolação de variáveis é utilizada para aumentar a precisão do esquema de discretização espacial, quando da construção dos fluxos nas interfaces dos elementos. O avanço da solução no tempo é realizado por um método clássico do tipo Runge – Kutta (Figueira da Silva *et al.*, 2000).

Além disto, a técnica de resolução adotada necessitou a implementação de:

- ❖ Um esquema de movimento de malha, que permite acompanhar o processo de descamação,
- ❖ Um modelo para descrever os fenômenos turbulentos,
- ❖ Um modelo capaz de descrever a influência da rugosidade nas paredes sobre o desenvolvimento da camada limite e a taxa de transferência de calor e, conseqüentemente, a taxa de perfuração da rocha,
- ❖ Um modelo de descamação da rocha, necessário para descrever o processo de transferência de calor entre o gás e a rocha, já que esta modifica sua forma.

4.1. Método de Discretização Espacial

A base da técnica utilizada de discretização espacial utilizada é o esquema *Upwind* de primeira ordem, no qual os fluxos de massa, quantidade de movimento e energia são formulados usando o método *AUSM⁺* (*Advection Upwind Splitting Method*) desenvolvido por Liou (1996). O operador convectivo $C(Q_i)$ no volume “*i*”, é calculado como a soma das contribuições dos fluxos nas faces deste volume

$$C(Q_i) = \sum_{k=1}^{n_f} (E_{ik} \Delta y_{ik} - F_{ik} \Delta x_{ik}), \quad (4.1)$$

onde n_f é o número das faces de um elemento e $\Delta x_{ik} = x_{k2} - x_{k1}$ e $\Delta y_{ik} = y_{k2} - y_{k1}$. Na Figura 4.1 mostra-se a disposição do volume “*i*” com seus vizinhos, e em particular, com o vizinho “*k*” com o qual compartilha a face “*ik*” definida pelos nós *n* e *m*.

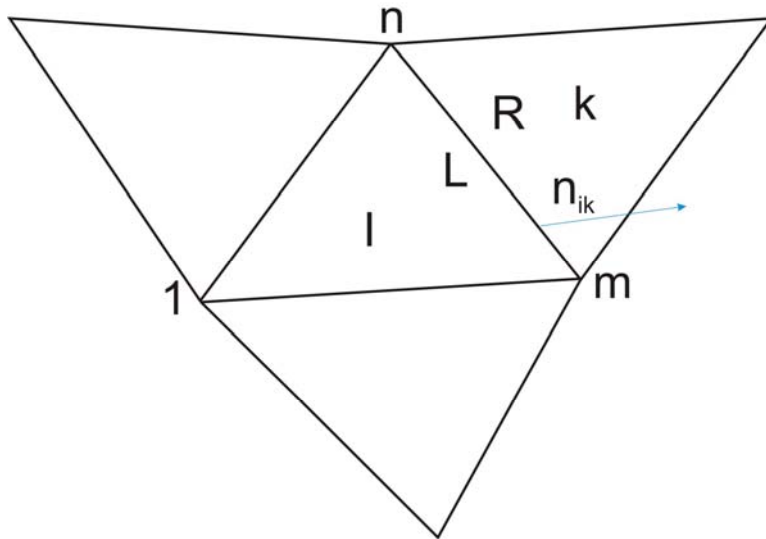


Figura 4.1: Esquema representativo da disposição do volume “*i*”

O esquema *AUSM⁺* define os fluxos E e F como a soma dos termos de convecção e de pressão, isto é,

$$E = u\Phi + P_x = M_x a\Phi + P_x, \quad (4.2)$$

$$F = v\Phi + P_y = M_y a\Phi + P_y, \quad (4.3)$$

onde a é a velocidade de som, $M_x = u/a$ e $M_y = v/a$ são os números de Mach calculados com base nos componentes da velocidade na direção x e y , Φ , P_x , e P_y são definidos como,

$$\Phi = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho H \\ \rho Y_1 \\ \vdots \\ \rho Y_{J-1} \end{Bmatrix}, \quad P_x = \begin{Bmatrix} 0 \\ p \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad P_y = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ p \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad (4.4)$$

onde H é a entalpia total específica,

$$H = h + \frac{1}{2}(u^2 + v^2). \quad (4.5)$$

Substituindo as expressões das equações (4.2) e (4.3) na contribuição dos fluxos através da face ik , Cb_{ik} , tem-se que,

$$Cb_{ik} = E_{ik}\Delta y_{ik} - F_{ik}\Delta x_{ik}, \quad (4.6)$$

a qual pode ser escrita como,

$$Cb_{ik} = \left[(M_x n_x + M_y n_y) a\Phi + P_x n_x + P_y n_y \right]_{ik} \ell_{ik}, \quad (4.7)$$

onde n_x e n_y são os componentes do vetor unitário normal à face ik , e ℓ_{ik} é o comprimento desta face. Definindo-se o vetor normal à face como

$$\vec{n}_{ik} = n_{x_{ik}} \hat{i} + n_{y_{ik}} \hat{j} = \frac{\Delta y_{ik}}{\ell_{ik}} \hat{i} - \frac{\Delta x_{ik}}{\ell_{ik}} \hat{j}, \quad (4.8)$$

Os vetores de fluxo advectivo e da pressão tornam-se

$$F_{ik}^{(c)} = (un_x \Phi + vn_y \Phi)_{ik}, \quad (4.9)$$

$$P_{ik} = (P_x n_x + P_y n_y)_{ik} = p_{ik} \begin{Bmatrix} 0 \\ n_{x_{ik}} \\ n_{y_{ik}} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad (4.10)$$

e a contribuição na face Cb_{ik} pode ser escrita como

$$Cb_{ik} = [F_{ik}^{(c)} + P_{ik}] \ell_{ik}. \quad (4.11)$$

Note-se que na equação (4.11), o termo entre os colchetes é uma extensão do fluxo do esquema AUSM+ (Liou, 1996) no caso bidimensional, baseando-se na direção normal à face.

Para a construção do esquema de primeira ordem, devem-se identificar os estados à esquerda (L) e à direita (R) com as propriedades dos volumes i e k , como se mostra na figura 4.1. Assim, seguindo as definições do método $AUSM^+$, os termos contidos nas equações (4.9) e (4.10) são descritos a seguir.

- ❖ O termo Φ_{ik} é definido de acordo com as considerações habituais do esquema *Upwind*, Hirsch (1990).

$$\Phi_{ik} = \begin{cases} \Phi_L, & \text{se } M_{ik}^n \geq 0 \\ \Phi_R, & \text{caso contrário} \end{cases}, \quad (4.12)$$

onde os índices L e R fazem referência às direções à esquerda e à direita da face ik , respectivamente

- ❖ O esquema AUSM+ define a separação do número de Mach e da pressão na interface M_{ik}^n e P_{ik} como

(a) M_{ik}^n :

$$M_{ik}^n = M^+(M_L) + M^-(M_R), \quad (4.13)$$

onde a separação do número de Mach é definida por:

$$M^\pm(M) = \begin{cases} \frac{1}{2}(M \pm |M|), & \text{se } |M| \geq 1 \\ M_\beta^\pm(M), & \text{caso contrário} \end{cases}, \quad (4.14)$$

$$M_\beta^\pm(M) = \pm \frac{1}{4}(M \pm 1)^2 \pm \beta(M^2 - 1)^2. \quad (4.15)$$

(b) P_{ik} :

$$P_{ik} = P^+(M_L)P_L + P^-(M_R)P_R, \quad (4.16)$$

onde a separação da pressão é dada por:

$$P^\pm(M) = \begin{cases} \frac{1}{2}(1 \pm \text{sign}(M)), & \text{se } |M| \geq 1 \\ P_\alpha^\pm(M), & \text{caso contrário} \end{cases}, \quad (4.17)$$

$$P_\alpha^\pm(M) = \pm \frac{1}{4}(M \pm 1)^2(2 \mp M) \pm \alpha M(M^2 - 1)^2. \quad (4.18)$$

Conforme o sugerido por Liou (1996), são utilizados valores de $\beta = 1/8$ e $\alpha = 3/16$.

- ❖ De acordo com Liou (1996), os números de Mach à esquerda e à direita da face ik considerada são definidos com respeito a uma única velocidade do som, os números de Mach à direita e a esquerda desta face são; respectivamente

$$M_L = \frac{V_L^n}{a_{ik}}, \quad (4.19)$$

$$M_R = \frac{V_R^n}{a_{ik}}, \quad (4.20)$$

onde,

$$V_L^n = (u_L, v_L) \cdot (n_x, n_y)_{ik}, \quad (4.21)$$

$$V_R^n = (u_R, v_R) \cdot (n_x, n_y)_{ik}. \quad (4.22)$$

Neste trabalho a velocidade do som na face é definida como

$$a_{ik} = \sqrt{a_L a_R}. \quad (4.23)$$

Utilizando as relações anteriores, o termo do fluxo na face, F_{ik} , pode ser escrito como,

$$F_{ik} = a_{ik} \left\{ M_{ik}^{n+} \Phi_L + M_{ik}^{n-} \Phi_R \right\} + P_{ik}. \quad (4.24)$$

onde

$$M_{ik}^{n\pm} = \frac{1}{2} \left(M_{ik}^n \pm |M_{ik}^n| \right). \quad (4.25)$$

Por fim, o operador convectivo da equação (4.1) pode ser escrito fazendo uso das relações anteriores;

$$C(Q_i) = \sum \left[F_{ik}^{(c)} + P_{ik} \right] \ell_{ik}. \quad (4.26)$$

O esquema de segunda ordem segue exatamente a formulação acima, exceto pela definição dos estados a esquerda e a direita, os quais são obtidos

por uma extrapolação *MUSCL* das variáveis primitivas (p, u, v, T, Y_j) , (Figueira da Silva *et al.*, 2000). Esta técnica utiliza informação do volume “*l*” e de seus vizinhos para calcular as variáveis do estado à esquerda, *L*, e do volume “*k*” e seus vizinhos para definir o estado à direita, *R*. A fim de evitar oscilações, os estados extrapolados são limitados usando uma extensão multidimensional do limitador *minmod* (Hirsch, 1990).

4.2. Método de Discretização Temporal

Na solução da equação (3.1) o sistema de equações que descreve a “mecânica dos fluidos” e o sistema de equações ordinárias contendo o termo de produção química são resolvidos de forma separada, isto é

$$\frac{dQ_i}{dt} = -\frac{1}{V_i} C(Q_i) + \Omega(Q_i). \quad (4.27)$$

Onde $C(Q_i)$ é dado pela equação (4.1), V_i é o volume da célula de cálculo.

Para a solução no passo do tempo $n+1$ a partir dos valores das propriedades no constante n , é utilizado o método de separação do passo de tempo de Strang (Figueira da Silva *et al.*, 2000),

$$Q_i^{n+1} = S_f \left(\frac{\Delta t}{2} \right) S_Q (\Delta t) S_f \left(\frac{\Delta t}{2} \right) Q_i^n, \quad (4.28)$$

onde Q_i^n é a solução no passo de tempo n , o termo S_f é o operador do termo convectivo, o termo S_Q é o operador correspondente à integração do termo químico.

Para o avanço no tempo da parte “mecânica dos fluidos” utiliza-se o método de segunda ordem de Runge – Kutta de cinco estágios, isto é,

$$Q_i^{(0)} = Q_i^n, \quad (4.29)$$

$$Q_i^{(\ell)} = Q_i^{(0)} - \alpha_\ell \frac{\Delta t}{V_i} C(Q_i^{\ell-1}) \quad \ell = 1, 2, \dots, 5, \quad (4.30)$$

$$Q_i^{n+1} = Q_i^{(5)}, \quad (4.31)$$

onde os expoentes n e $n + 1$ são os valores das propriedades no começo e no fim do n - ézimo passo do tempo, e os valores do coeficiente α são usados àqueles sugeridos por Jamenson e Mavriplis (citados por Marques *et al.*, 2006), $\alpha_1 = 1/4, \alpha_2 = 1/6, \alpha_3 = 3/8, \alpha_4 = 1/2, \alpha_5 = 1$.

O código numérico VODE é usado para a integração do termo fonte S_a que resolve equações diferenciais ordinárias que contenham termos fontes rígidos. O VODE faz uso de (i) um algoritmo de diferenciação de avanço inverso, com ordem de precisão e passo no tempo variável, (ii) um método de Newton modificado, para avaliar a matriz jacobiana por uma técnica de perturbação. A utilização deste método é indispensável quando esquemas de cinética química são usados.

Neste trabalho este integrador não será utilizado, pois apenas são estudados escoamentos de gases de composição química constante.

4.3.

Adaptação da Malha Computacional Procedimento de Refinamento e de Empobrecimento

Técnicas de adaptação de malha são freqüentemente utilizadas para reduzir as dimensões características dos volumes elementares na região do interesse do escoamento melhorando, desta maneira, a resolução dos fenômenos físicos simulados. Nas regiões onde ocorrem os fortes gradientes podem ser necessários vários refinamentos consecutivos para a obtenção de uma boa resolução dos fenômenos, o que leva a um incremento significativo do número de volumes da malha. Em algumas situações ao longo do processo de

convergência, isto pode resultar em uma concentração de volumes onde já não são necessários volumes refinados. Para resolver estes problemas foram desenvolvidas diversas técnicas denominadas técnicas de empobrecimento da malha - *mesh coarsening*. (Walter et al, 2005), na Figura 4.2 mostra-se o esquema representativo da técnica de empobrecimento. Este tipo de implementação existe no código computacional utilizado, porém não é útil para o desenvolvimento deste trabalho.

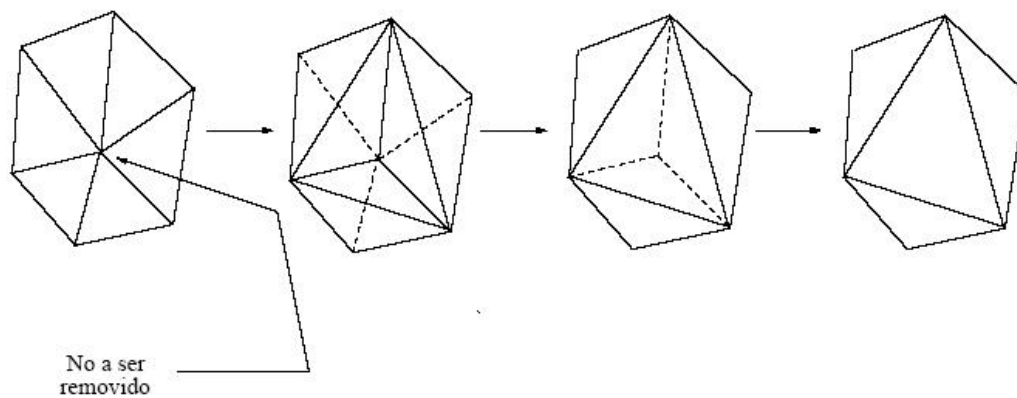


Figura 4.2 Esquema da técnica de empobrecimento de malha (Walter et al, i.e, 2005).

4.4.

Implementação de um esquema de movimentação de malha

Uma vez que a forma da superfície pode ser alterada pelo processo de descamação térmica, é necessário proceder ao ajuste da posição dos nós da malha computacional de modo a evitar distorções excessivas dos volumes elementares e garantir que a fronteira da malha coincida com a superfície da rocha a cada instante. O movimento de cada aresta dos volumes de fronteira da malha é realizado utilizando-se a técnica clássica das molas lineares Simões e Azevedo, (1997). Como é mostrado na Figura 4.3, associa-se a cada aresta ik uma rigidez equivalente, que é tomada como sendo inversamente proporcional ao comprimento da aresta,

$$K_{ik} = \frac{1}{\left[(X_k - X_i)^2 + (y_k - y_i)^2 \right]^{\frac{I}{2}}}, \quad (4.32)$$

onde I é um parâmetro de controle, cujo valor típico é próximo a unidade.

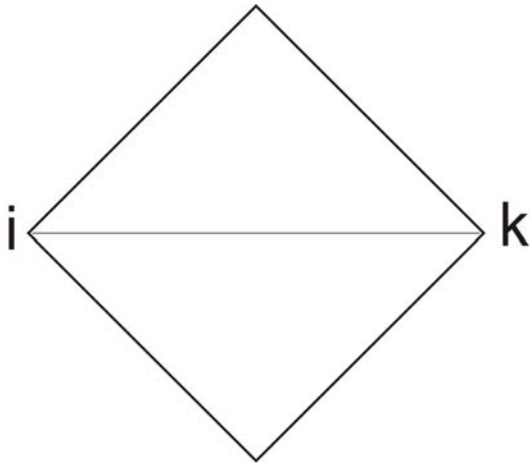


Figura 4.3 Triângulos que determinam o lado ik .

A exceção dos pontos situados nas paredes móveis, cujo movimento é prescrito, os nós da fronteira externa são mantidos fixos a cada passo de tempo. As equações de equilíbrio estático nas direções x e y são resolvidas iterativamente em cada nó interior “ i ”, de modo a determinar os deslocamentos δ_{xi} e δ_{yi} .

A solução iterativa é feita utilizando-se um esquema preditor – corretor que inicialmente prediz os deslocamentos segundo a extrapolação linear,

$$\tilde{\delta}_{x_i} = 2\delta_{x_i}^n - 2\delta_{x_i}^{n-1}, \quad (4.33)$$

$$\tilde{\delta}_{y_i} = 2\delta_{y_i}^n - 2\delta_{y_i}^{n-1}. \quad (4.34)$$

Em seguida, os deslocamentos são corrigidos implementando-se algumas iterações tipo Jacobi para as equações de equilíbrio estático,

$$\delta_{x_i}^{n+1} = \frac{\sum_k K_{ik} \tilde{\delta}_{x_{ik}}}{\sum_k K_{ik}}, \quad (4.35)$$

$$\delta_{y_i}^{n+1} = \frac{\sum_k K_{ik} \tilde{\delta}_{y_{ik}}}{\sum_k K_{ik}}, \quad (4.36)$$

Nas quais as somas são realizadas sobre as arestas que ligam cada i-ésimo nó aos seus k vizinhos. A nova localização dos nós internos é determinada por:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \delta_{x_i}^{n+1}, \quad (4.37)$$

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \delta_{y_i}^{n+1}. \quad (4.38)$$

O emprego do procedimento preditor – corretor é mais eficiente do que o uso simples das interações da Jacobi já que um menor número de iterações é necessário para atingir a convergência desejada.

Para a validação foi utilizado um escoamento supersônico sobre uma rampa, Salgado, 2005. No caso desta malha foi imposto um movimento apenas para a rampa, onde suas extremidades são fixas e o restante dela se move de acordo com uma função seno, isto é,

$$n(t, N) = \sin(t\pi) \sin\left(\frac{(N-1)\pi}{J}\right), \quad (4.39)$$

$$x_i = x_0 + 0.5 * n(t, N) * \sin \theta, \quad (4.40)$$

$$y_i = y_0 - 0.5 * n(t, N) * \sin \theta. \quad (4.41)$$

onde N é o número de iterações e J é semi período da oscilação, e θ é o ângulo inicial da rampa.

A malha utilizada é composta de uma camada de quadriláteros sobre a superfície da rampa e triângulos no restante do domínio computacional. A Figura 4.4 mostra os resultados da validação desta implementação (Salgado, 2005). Pode-se observar o deslocamento da rampa, imposto pela função seno, na

Figura 4.4 (b) mostrada acima. A distorção dos quadriláteros acompanha o movimento da rampa, conforme o desejado.

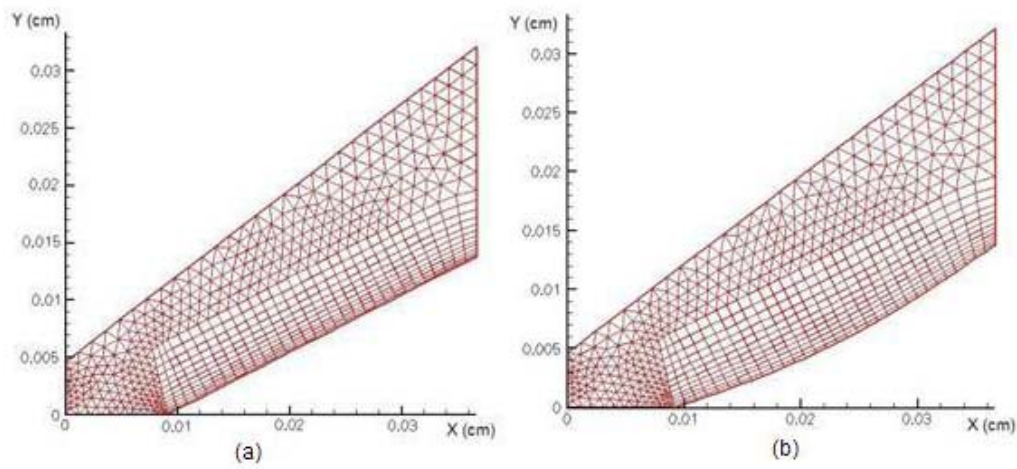


Figura 4.4 Malha utilizada para a validação do deslocamento desta. (a) Malha original, (b) Malha movimentada após de $\frac{1}{4}$ de período.