

2

Formulação Matemática e Método Numérico

Neste capítulo são apresentadas inicialmente as equações governantes e as condições de contorno representativas do problema estudado. Em seguida, o método numérico de resolução e o procedimento de adaptação da malha são brevemente descritos.

2.1

Equações Governantes

Neste trabalho os escoamentos são considerados como invíscidos, isto é, escoamentos nos quais não são considerados os efeitos de transporte molecular. Posto que os escoamentos de interesse são escoamentos de alta velocidade, não são considerados os efeitos devidos às forças de corpo, à transferência de calor devido à condução e aos gradientes da concentração (efeito Dufour). Embora o processo de combustão resulte em aumentos significativos da temperatura dos gases, a contribuição da radiação para a transferência de calor não é considerada. Desta forma, as equações que descrevem o escoamento de uma mistura constituída por H_2 e ar, reagindo quimicamente, são escritas mediante as equações de Euler. Quando escritas na forma conservativa, as equações de Euler bidimensionais em um sistema de coordenadas cartesianas são representadas por:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = \mathbf{Q}, \quad (2-1)$$

ou, em sua forma integral,

$$\iint_V \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} dx dy + \int_S (\mathbf{F} dy - \mathbf{G} dx) = \iint_V \mathbf{Q} dx dy. \quad (2-2)$$

O vetor \mathbf{U} contém as variáveis conservadas; os vetores \mathbf{F} e \mathbf{G} , os fluxos destas; enquanto o vetor \mathbf{Q} contém os termos de produção química. Suas respectivas expressões são

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \\ \rho Y_1 \\ \rho Y_2 \\ \vdots \\ \rho Y_{N-1} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\omega}_1 W_1 \\ \dot{\omega}_2 W_2 \\ \vdots \\ \dot{\omega}_{N-1} W_{N-1} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(\rho E + p) \\ \rho Y_1 u \\ \rho Y_2 u \\ \vdots \\ \rho Y_{N-1} u \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho E + p) \\ \rho Y_1 v \\ \rho Y_2 v \\ \vdots \\ \rho Y_{N-1} v \end{bmatrix}.$$

Neste sistema de equações ρ é a densidade; u e v , os componentes da velocidade nas direções x e y , respectivamente; E é a energia total específica; Y_i , ω_i , W_i são a fração em massa, a taxa de produção molar e a massa molecular da espécie química i , respectivamente; finalmente, p é a pressão estática.

Na solução do sistema de eqs. (2-1), $N - 1$ espécies químicas são necessárias, já que a fração da última espécie química Y_N é calculada usando a restrição: $\sum_{i=1}^N Y_i = 1$, o que leva a

$$Y_N = 1 - \sum_{i=1}^{N-1} Y_i. \quad (2-3)$$

O sistema de eqs. (2-1) é complementado com a equação de estado:

$$p = \rho \mathcal{R} T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{W_i}, \quad (2-4)$$

onde \mathcal{R} é a constante universal dos gases e a temperatura T é calculada utilizando-se a definição da energia total específica.

$$\begin{aligned}
 E &= e + \frac{1}{2} (u^2 + v^2) = \sum_{i=1}^N Y_i e_i + \frac{1}{2} (u^2 + v^2) \\
 &= \sum_{i=1}^N Y_i \left(h_i - \frac{p}{\rho} \right) + \frac{1}{2} (u^2 + v^2) . \tag{2-5}
 \end{aligned}$$

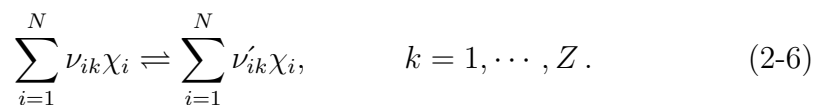
Nesta última equação e é a energia interna por unidade de massa, h_i e e_i são a entalpia e a energia interna específicas associadas à espécie química i , respectivamente.

2.1.1

Mecanismo de Cinética Química

Os termos de produção das espécies químicas $\dot{\omega}_i W_i$, do vetor \mathbf{Q} , na eq. (2-1), são modelados usando o mecanismo de cinética química de Balakrishnan e Williams para misturas formadas por hidrogênio e ar [23]. Este mecanismo detalhado, que é mostrado na tab. 2.1, envolve 9 espécies químicas (H_2 , O_2 , H , O , OH , HO_2 , H_2O_2 , H_2O , N_2) e 21 reações elementares. Uma vez que não faz parte dos objetivos deste trabalho o estudo da formação de poluentes, este mecanismo não inclui reações específicas para dissociação do nitrogênio. Devido a grande energia de ativação destas reações, sua influência sobre o processo de liberação do calor pela reação química seria muito pequena.

Um sistema que evolui segundo Z reações químicas elementares envolvendo N espécies químicas pode ser representado pela seguinte equação:



Onde:

χ_i : Símbolo químico da espécie química i ,

ν_{ik}, ν'_{ik} : Coeficientes estequiométricos.

A taxa de produção molar $\dot{\omega}_i$, associada à espécie química χ_i , é calculada como a soma das contribuições das reações direta e inversa:

$$\dot{\omega}_i = \sum_{k=1}^M (\nu'_{ik} - \nu_{ik}) \left(k_k^f \prod_{j=1}^N [\chi_j]^{\nu_{jk}} - k_k^b \prod_{j=1}^N [\chi_j]^{\nu'_{jk}} \right), \quad i = 1, \dots, N, \tag{2-7}$$

Reações	A (cm, mol, s)	β	E_a (cal/mol)
(1) $H+O_2 \rightleftharpoons OH+O$	$3,52 \times 10^{16}$	-0,70	17070
(2) $H_2+O \rightleftharpoons OH+H$	$5,06 \times 10^4$	2,67	6290
(3) $OH+OH \rightleftharpoons H_2O+O$	$1,51 \times 10^9$	1,14	99
(4) $H_2+OH \rightleftharpoons H_2O+H$	$1,17 \times 10^9$	1,30	3626
(5) $H+O_2+M \rightleftharpoons HO_2+M$	$6,76 \times 10^{19}$ (a)	-1,42	0
(6) $H+HO_2 \rightleftharpoons OH+OH$	$1,70 \times 10^{14}$	0,00	874
(7) $H+HO_2 \rightleftharpoons H_2+O_2$	$4,28 \times 10^{13}$	0,00	1411
(8) $OH+HO_2 \rightleftharpoons H_2O+O_2$	$2,89 \times 10^{13}$	0,00	-497
(9) $H+H+M \rightleftharpoons H_2+M$	$1,80 \times 10^{18}$ (b)	-1,00	0
(10) $H+OH+M \rightleftharpoons H_2O+M$	$2,20 \times 10^{22}$ (a)	-2,00	0
(11) $HO_2+HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2+O_2$	$3,02 \times 10^{12}$	0,00	1390
(12) $H_2O_2+M \rightleftharpoons OH+OH+M$	$1,20 \times 10^{17}$ (c)	0,00	45500
(13) $H_2O_2+OH \rightleftharpoons H_2O+HO_2$	$7,08 \times 10^{12}$	0,00	1430
(14) $O+HO_2 \rightleftharpoons OH+O_2$	$2,00 \times 10^{13}$	0,00	0
(15) $H+HO_2 \rightleftharpoons O+H_2O$	$3,10 \times 10^{13}$	0,00	1720
(16) $H+O+M \rightleftharpoons OH+M$	$6,20 \times 10^{16}$ (a)	-0,60	0
(17) $O+O+M \rightleftharpoons O_2+M$	$6,17 \times 10^{15}$ (a)	-0,50	0
(18) $H_2O_2+H \rightleftharpoons H_2O+OH$	$1,00 \times 10^{13}$	0,00	3590
(19) $H_2O_2+H \rightleftharpoons HO_2+H_2$	$4,79 \times 10^{13}$	0,00	7950
(20) $O+OH+M \rightleftharpoons HO_2+M$	$1,00 \times 10^{16}$	0,00	0
(21) $H_2+O_2 \rightleftharpoons OH+OH$	$1,70 \times 10^{13}$	0,00	47780

Eficiência do terceiro corpo:

- a) $f_{H_2O} = 12$; $f_{H_2} = 2,5$; $f_{N_2} = f_{O_2} = 1,0$.
- b) $f_{H_2O} = 6,5$; $f_{H_2} = 1,0$; $f_{N_2} = f_{O_2} = 0,4$.
- c) $f_{H_2O} = 15$; $f_{H_2} = 2,5$; $f_{N_2} = f_{O_2} = 1,0$.

Tabela 2.1: Mecanismo de Balakrishnan e Williams [23] para combustão de H_2 -ar.

onde:

- k_k^f : Constante de avanço direta para a reação k ,
- k_k^b : Constante de avanço inversa para a reação k ,
- $[\chi_j]$: Concentração da espécie química j ,
- ν_{ik}, ν'_{ik} : Coeficientes estequiométricos.
- ν_{jk}, ν'_{jk}

A constante de avanço k_k^f , é expressa mediante a lei de Arrhenius

$$k_k^f = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{E_{a_k}}{RT}\right). \quad (2-8)$$

Os valores do fator pre-exponencial, A_k , do expoente da temperatura, β_k , e da energia de ativação E_{a_k} na eq. (2-8) são fornecidos pelo mecanismo de cinética química dado na tab. 2.1. A taxa de retorno de cada reação

elementar é obtida utilizando-se a constante de equilíbrio

$$k_k^{eq} = \frac{k_k^f}{k_k^b}, \quad (2-9)$$

$$k_k^{eq} = \left(\frac{p_{atm}}{RT} \right)^{\sum_{i=1}^N (\nu_{ik} - \nu_{ik}')} .exp \left[\sum_{i=1}^N (\nu_{ik}' - \nu_{ik}) \left(\frac{S_i^o}{R} - \frac{H_i^o}{RT} \right) \right], \quad (2-10)$$

onde p_{atm} denota a pressão de uma atmosfera, S_i^o e H_i^o são a entropia e a entalpia por mol para o estado padrão a 1 atm da espécie química i . Estes e o calor específico a pressão constante por mol, C_{pi} , da espécie química i são funções polinomiais da temperatura e são obtidas da base de dados termodinâmicos JANNAF [22].

2.2

Condições de Contorno

A fig. 2.1 mostra uma representação do domínio computacional usado. Nesta configuração, a direção do escoamento não perturbado coincide com a orientação do eixo x . O estudo numérico envolve a simulação do escoamento de uma mistura reativa estequiométrica de H_2 e ar em torno de uma configuração como a mostrada nesta figura.

Nos contornos denominados de “Entrada”, na fig.2.1, são fixados os valores das propriedades do escoamento livre M_∞ , T_∞ , p_∞ e Y_{k_∞} . Nos contornos denominados de “Superfície”, condições de escorregamento são impostas, além disto considera-se que os gradientes das demais propriedades são nulos na direção normal à superfície n . Condições de simetria são impostas no contorno denominado de “Centro”. Finalmente, no contorno chamado de “Saída”, condições não reflexivas [24] são impostas. Estas condições fazem uso das velocidades características do escoamento (u , $u + a$, $u - a$, onde a é a velocidade do som) para calcular o valor das invariantes de Riemann, isto é, das variáveis características, na fronteira do domínio. Desta forma são respeitadas tanto a direção quanto a sinal da propagação da informação no escoamento. Em particular, estas condições garantem a não reflexão de ondas que deixam o domínio de cálculo. A tab. 2.2 resume as condições impostas nas fronteiras do domínio computacional.

Contorno	Condição Imposta
Entrada :	$p_\infty, T_\infty, M_\infty, Y_{k\infty}$
Superfície :	$V_n = 0, \quad \frac{\partial V_t}{\partial n} = 0$ $\frac{\partial p}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial Y_k}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial n} = 0$
Centro :	Condições de simetria
Saída :	Condições não reflexivas [24]

Tabela 2.2: Condições do contorno.

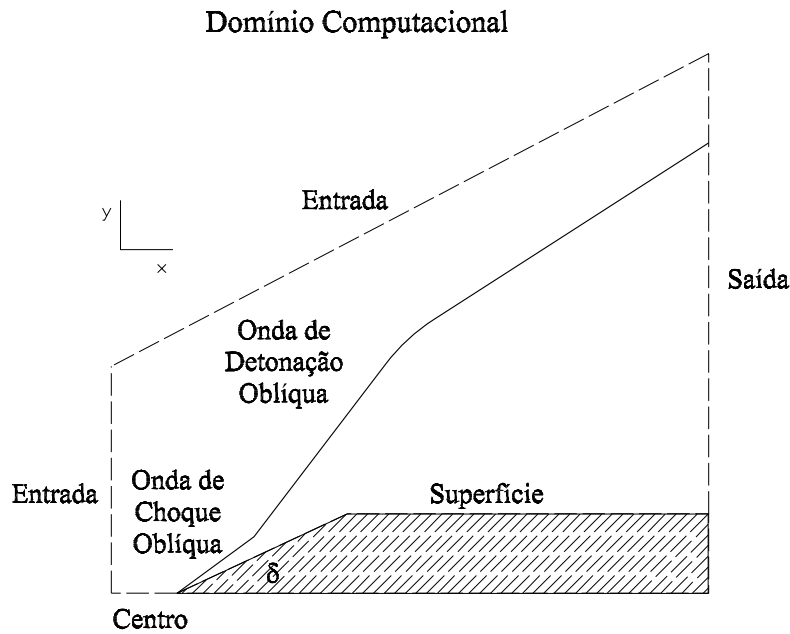


Figura 2.1: Condições do contorno e domínio computacional.

2.3 Método Numérico

O método numérico é baseado em um procedimento tipo volumes finitos centrados na célula de cálculo. Para discretização temporal do sistema de equações diferenciais (2-1) utiliza-se o método de separação do passo de tempo de Strang [25]. Mediante este método as evoluções da dinâmica dos fluidos e da reação química são integradas separadamente.

Desta forma, integradores específicos são usados para cada uma das partes. Na discretização espacial utiliza-se um esquema *upwind*. Para formular os fluxos utiliza-se o método de separação de vetores de fluxo *AUSM⁺* [28].

O código numérico que utiliza os procedimentos aqui descritos foi validado, no caso da estabilização de OCO e ODO fortes por rampas, pela comparação dos resultados obtidos como os valores fornecidos pelas polares de choque e de detonação [2, 43].

2.3.1 Método de Discretização Temporal

Utiliza-se o método de separação do passo de tempo de Strang [25]. Esta aproximação na solução da eq. (2-1) equivale a resolver o sistema de equações da mecânica dos fluidos, e o sistema de equações ordinárias contendo o termo de produção química, de forma separada. Assim, a solução no passo do tempo $n + 1$ é escrita como

$$\mathbf{U}^{n+1} = S_f \left(\frac{\Delta t}{2} \right) S_Q(\Delta t) S_f \left(\frac{\Delta t}{2} \right) \mathbf{U}^n, \quad (2-11)$$

onde \mathbf{U}^n é a solução no passo de tempo n , o termo S_f é o operador para o sistema de equações

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = 0, \quad (2-12)$$

e S_Q é o operador do sistema de equações

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{Q}. \quad (2-13)$$

Para o avanço no tempo da parte da mecânica dos fluidos, eq. (2-12), usa-se um método de Runge-Kutta de cinco estágios. Este método de segunda ordem é expresso pelas seguintes relações

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_i^{(0)} &= \mathbf{U}_i^n, \\ \mathbf{U}_i^{(l)} &= \mathbf{U}_i^{(0)} - \alpha_l \frac{\Delta t}{V_i} \left[\mathcal{C}(\mathbf{U}_i^{(l-1)}) \right], \quad l = 1, 2, \dots, 5 \\ \mathbf{U}_i^{n+1} &= \mathbf{U}_i^{(5)}, \end{aligned} \quad (2-14)$$

onde $\mathcal{C}(\mathbf{U})$ é o operador convectivo definido na eq. (2-15) e V_i é o volume da célula de cálculo. Os valores de α_l usados são aqueles por Mavriplis [26], $\alpha_1 = 1/4$, $\alpha_2 = 1/6$, $\alpha_3 = 3/8$, $\alpha_4 = 1/2$, $\alpha_5 = 1$.

Para o avanço no tempo da parte química, eq. (2-13), se faz uso do

código numérico VODE [27], o qual é um programa específico para resolver equações diferenciais ordinárias que contenham termos fontes rígidos. VODE faz uso de um algoritmo de diferenciação de avanço inverso, com ordem de precisão e passo no tempo variáveis, conjuntamente com um método de Newton modificado, o qual avalia a matriz jacobiana de forma numérica. Esta última característica é importante quando esquemas de cinética química diferentes são usados. A não existência de limite de estabilidade que influencie a escolha do passo no tempo é outra vantagem associada a utilização deste código na solução das ODE's.

2.3.2 Método de Discretização Espacial

Um esquema *upwind* é usado como técnica de discretização espacial. Os fluxos de massa, quantidade de movimento e energia são formulados usando o método $AUSM^+$ (*advection upstream splitting method*), desenvolvido por Liou [28]. O operador convectivo, $\mathcal{C}(\mathbf{U}_i)$, no volume “ i ”, é calculado como a soma das contribuições dos fluxos nas faces deste volume

$$\mathcal{C}(\mathbf{U}_i) = \sum_{k=1}^3 (\mathbf{F}_{ik} \Delta y_{ik} - \mathbf{G}_{ik} \Delta x_{ik}). \quad (2-15)$$

A fig. 2.2 mostra a disposição do volume “ i ” com seus vizinhos, em particular com o vizinho “ k ”, com o qual ele compartilha a face “ ik ” definida pelos nós m e n , $\Delta x_{ik} = x_n - x_m$ e $\Delta y_{ik} = y_n - y_m$. A normal n_{ik} , definida na eq. (2-21), é orientada como saindo do volume “ i ” considerado. Os estados à esquerda e à direita da face “ ik ” são representados por L e R , respectivamente.

Os esquemas $AUSM$ [29] consideram a propagação das ondas convectivas e acústicas como processos fisicamente distintos. Assim, definem-se os fluxos \mathbf{F} e \mathbf{G} como soma dos termos de convecção e de pressão respectivos, ou seja,

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= M_x a \Phi + P \mathbf{x}, \\ \mathbf{G} &= M_y a \Phi + P \mathbf{y}, \end{aligned} \quad (2-16)$$

nesta equação, a é a velocidade do som, $M_x = u/a$, $M_y = v/a$ são os números de Mach calculados com base nas componentes da velocidade nas

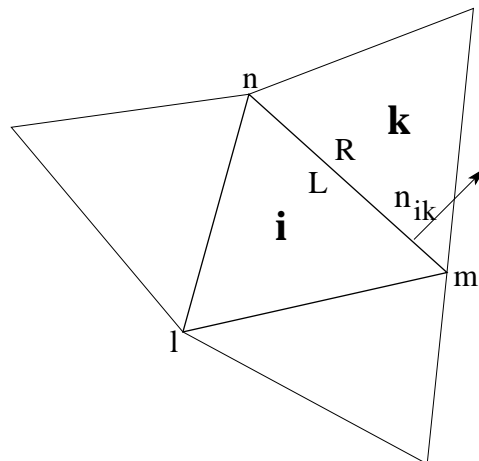


Figura 2.2: Esquema representativo do volume genérico “*i*”

direções x e y ; Φ , $\mathbf{P}x$, $\mathbf{P}y$ são definidos como

$$\Phi = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho H \\ \rho Y_1 \\ \rho Y_2 \\ \vdots \\ \rho Y_{N-1} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P}x = \begin{bmatrix} 0 \\ p \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P}y = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ p \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2-17)$$

substituindo as expressões da eq. (2-16) na contribuição dos fluxos através da face ik , Cb_{ik} , tem-se

$$Cb_{ik} = (\mathbf{F}_{ik} \Delta y_{ik} - \mathbf{G}_{ik} \Delta x_{ik}). \quad (2-18)$$

Esta contribuição pode ser escrita como

$$Cb_{ik} = (M_x a \Phi \Delta y - M_y a \Phi \Delta x + \mathbf{P}x \Delta y - \mathbf{P}y \Delta x)_{ik}, \quad (2-19)$$

ou também, como

$$Cb_{ik} = [(M_x n_x + M_y n_y) a \Phi + \mathbf{P}x n_x + \mathbf{P}y n_y]_{ik} l_{ik}, \quad (2-20)$$

onde n_x e n_y são as componentes do vetor unitário normal à face ik , e l_{ik} é o comprimento desta face. O vetor normal à face é definido a continuação como

$$\vec{n}_{ik} = (n_x, n_y) = \left(\frac{\Delta y_{ik}}{l_{ik}}, -\frac{\Delta x_{ik}}{l_{ik}} \right). \quad (2-21)$$

Definindo-se:

$$\mathbf{F}_{ik}^{(c)} = \{(M_x, M_y)_{ik} \cdot (n_x, n_y)_{ik}\} a_{ik} \Phi_{ik} \quad (2-22)$$

$$= M_{ik}^n a_{ik} \Phi_{ik},$$

$$\mathbf{P}_{ik} = (\mathbf{P}x n_x + \mathbf{P}y n_y)_{ik}, \quad (2-23)$$

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

$$Cb_{ik} = [\mathbf{F}_{ik}^{(c)} + \mathbf{P}_{ik}] l_{ik}. \quad (2-24)$$

Note-se que na eq. (2-22) o produto escalar entre chaves define um número de Mach na interface, M_{ik}^n , com respeito a uma velocidade normal a esta. Assim, na eq. (2-24), o termo entre colchetes é uma extensão do fluxo do esquema $AUSM^+$ [28] para o caso bidimensional, baseando-se em uma direção normal à face.

Na construção de um esquema de primeira ordem, deve-se identificar os estados à esquerda (L) e à direita (R) com as propriedades dos volumes i e k , como mostrado na fig. 2.2. Assim em concordância com as definições do método $AUSM^+$, os termos contidos nas eqs. (2-22) e (2-23) são descritos a seguir.

- O termo Φ_{ik} é definido seguindo as considerações habituais dos esquemas *upwind* [31]

$$\Phi_{ik} = \begin{cases} \Phi_L & , \text{ se } M_{ik}^n \geq 0 \\ \Phi_R & , \text{ caso contrário,} \end{cases} \quad (2-25)$$

onde os índices L e R se referem aos estados à esquerda e à direita da face ik .

- O esquema $AUSM^+$ define a separação do número de Mach e da pressão na interface, M_{ik}^n e \mathbf{P}_{ik} , como

(a) M_{ik}^n :

$$M_{ik}^n = \mathcal{M}^+(M_L) + \mathcal{M}^-(M_R), \quad (2-26)$$

onde a separação do número de Mach é definida como:

$$\mathcal{M}^\pm(M) = \begin{cases} \frac{1}{2}(M \pm |M|) & , \text{ se } |M| \geq 1 \\ \mathcal{M}_\beta^\pm(M) & , \text{ caso contrário,} \end{cases} \quad (2-27)$$

$$\mathcal{M}_\beta^\pm(M) = \pm \frac{1}{4}(M \pm 1)^2 \pm \beta(M^2 - 1)^2. \quad (2-28)$$

(b) \mathbf{P}_{ik} :

$$\mathbf{P}_{ik} = \mathcal{P}^+(M_L) \mathbf{P}_L + \mathcal{P}^-(M_R) \mathbf{P}_R, \quad (2-29)$$

onde a separação da pressão é definida como:

$$\mathcal{P}^\pm(M) = \begin{cases} \frac{1}{2}(1 \pm \text{sign}(M)) & , \text{ se } |M| \geq 1 \\ \mathcal{P}_\alpha^\pm(M) & , \text{ caso contrário,} \end{cases} \quad (2-30)$$

$$\mathcal{P}_\alpha^\pm(M) = \pm \frac{1}{4}(M \pm 1)^2(2 \mp M) \pm \alpha M(M^2 - 1)^2, \quad (2-31)$$

e, conforme sugerido por Liou [28], são utilizados valores de $\beta = 1/8$ e $\alpha = 3/16$, pois estes apresentam melhores resultados quando comparado como o método de base AUSM [29].

- Em concordância com Liou [28], os números de Mach à esquerda e à direita da face em consideração são definidos com respeito a uma única velocidade do som. Assim, são definidos números de Mach à esquerda e à direita tal que

$$M_L = \frac{V_L^n}{a_{ik}} \quad e \quad M_R = \frac{V_R^n}{a_{ik}}, \quad (2-32)$$

onde:

$$\begin{aligned} V_L^n &= (u_L, v_L) \cdot (n_x, n_y)_{ik}, \\ V_R^n &= (u_R, v_R) \cdot (n_x, n_y)_{ik}, \end{aligned} \quad (2-33)$$

e a velocidade do som na face é definida como

$$a_{ik} = \sqrt{a_L a_R}. \quad (2-34)$$

Esta definição é preferida em relação ao valor exato recomendado por Liou [28], pois se verificou que, em alguns casos de escoamentos bi-dimensionais, ondas de expansão eram formadas [30].

Fazendo uso das relações anteriores, o termo do fluxo na face, F_{ik} ,

pode ser escrito da seguinte forma:

$$\mathbf{F}_{ik} = \mathbf{F}_{ik}^{(c)} + \mathbf{P}_{ik}, \quad (2-35)$$

$$\mathbf{F}_{ik} = a_{ik} \{ M_{ik}^{n+} \Phi_L + M_{ik}^{n-} \Phi_R \} + \mathbf{P}_{ik}, \quad (2-36)$$

onde:

$$M_{ik}^{n\pm} = \frac{1}{2} (M_{ik}^n \pm |M_{ik}^n|). \quad (2-37)$$

Finalmente, fazendo uso das relações anteriores, o operador convectivo, eq.(2-15), é escrito da seguinte forma:

$$\mathcal{C}(\mathbf{U}_i) = \sum_{k=1}^3 \left[\mathbf{F}_{ik}^{(c)} + \mathbf{P}_{ik} \right] l_{ik}. \quad (2-38)$$

Na tentativa de se construir um esquema de segunda ordem, os estados à esquerda e à direita de cada face são obtidos extrapolando-se as variáveis primitivas utilizando-se uma técnica tipo *MUSCL* [31]. Esta técnica usa a informação do volume “*i*” e seus vizinhos para calcular as variáveis do estado à esquerda *L*, e a informação do volume “*k*” e vizinhos para definir o estado à direita *R*. Com a finalidade de evitar oscilações, os estados *L* e *R* são limitados usando uma extensão multidimensional do limitador *minmod* [31]. Maiores detalhes do procedimento utilizado encontram-se no trabalho de Azevedo *et al.* [32].

2.4 Adaptação da Malha Computacional Procedimento de Refinamento

O procedimento de refinamento adaptativo [3] reduz as escalas dos volumes em regiões onde o escoamento apresenta gradientes fortes das propriedades de interesse, com o objetivo de melhorar a resolução dos fenômenos físicos nas simulações numéricas. Para identificar as regiões onde os gradientes fortes ocorrem este procedimento faz uso do sensor numérico definido por Figueira da Silva *et al.*, *i.e.*, [2],

$$\text{sensor}_i = \max_m \left(\frac{|\nabla \zeta_m|_i}{|\zeta_{m_{max}} - \zeta_{m_{min}}|} \right); \quad \zeta_m = (p, u, v, T, Y_j). \quad (2-39)$$

Nesta relação, $|\nabla \zeta_m|_i$ é o módulo do gradiente da propriedade ζ_m no volume “*i*”, $\zeta_{m_{max}}$ e $\zeta_{m_{min}}$ são os valores máximo e mínimo da mesma propriedade no domínio de cálculo.

O procedimento atua sobre a solução de uma malha inicial. O sensor, eq. 2-39, é calculado para cada volume do domínio computacional. Caso o valor deste sensor exceda um valor pré-estabelecido, este volume é marcado para ser refinado. Em seguida, todos os volumes marcados são subdivididos obtendo-se uma nova malha computacional. O procedimento para a subdivisão dos volumes adiciona um nó em cada aresta de um volume marcado, de forma que quatro novos volumes são criados para cada volume marcado. A etapa final deste procedimento consiste em atribuir propriedades do volume original (volume marcado) aos novos volumes gerados.