**Simulação computacional de
escoamentos reativos com baixo
número de Mach aplicando técnicas de
refinamento adaptativo de malhas**

Priscila Cardoso Calegari

TESE APRESENTADA
AO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
PARA
OBTENÇÃO DO TÍTULO
DE
DOUTOR EM CIÊNCIAS

Área de Concentração: Matemática Aplicada
Orientador: Prof. Dr. Alexandre Megiorin Roma

Durante o desenvolvimento deste trabalho o autor recebeu
auxílio financeiro do CNPq e da CAPES

São Paulo, agosto de 2012

Simulação computacional de escoamentos reativos com baixo número de Mach aplicando técnicas de refinamento adaptativo de malhas

Priscila Cardoso Calegari

Esta versão da tese contém as correções e alterações sugeridas pela Comissão Julgadora durante a defesa da versão original do trabalho, realizada em 12/06/2012. Uma cópia da versão original está disponível no Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo.

Comissão Julgadora:

- Prof. Dr. Alexandre Megiorin Roma (orientador) - IME-USP
- Prof. Dr. Luis Carlos de Castro Santos - IME-USP
- Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto - UFU
- Prof. Dr. Ricardo Serfaty - PETROBRAS
- Prof. Dr. Antonio Castelo Filho - ICMC-USP

Agradecimentos

Ao professor Alexandre pela paciência e disposição em me orientar, por sua luta diária em melhorar nosso ambiente de trabalho, por todo apoio, confiança e conselhos para o meu crescimento profissional e pessoal. Ao professor Guenther por apresentar o problema e por toda sua disposição e contribuição. Ao professor Luis Carlos por todas as sugestões e envolvimento na realização deste trabalho. Aos membros da banca por todas as sugestões e correções que enriqueceram o trabalho. Aos meus pais, por todo carinho e apoio ao longo destes onze anos que estive distante, amo vocês. À pessoa maravilhosa que acompanhou a realização deste trabalho diariamente: Álvaro, que sempre foi meu maior incentivador, companheiro de todas as horas, por todo o seu amor, envolvimento e compreensão. À toda minha família (em Santa Catarina e em Goiás), principalmente meus sobrinhos, por compreenderem minha ausência em suas comemorações. Aos colegas do LabMap que me acompanharam nesta jornada, Anderson, Daniel, Diane, Luciane, Marcelo, Nelson, Pedro e Tatiane. Em especial aos meus *irmãos* Wellington e Catalina. Ao Rudimar pela disposição em ler a versão preliminar. Ao Nils, ao Newton e ao Fernando, colegas engenheiros. Ao pessoal do MFLab, da Universidade Federal de Uberlândia, pela disposição em responder minhas dúvidas, em especial Millena, Pivello, Rafael, João Marcelo e Leonardo. Aos administradores do LabMap, Oda, Chico e Marcello por manterem nosso laboratório de pé. Aos meus amigos por me apoiarem. À todas as pessoas que de alguma maneira contribuíram com a realização deste trabalho. Agradeço ao IME pelo auxílio financeiro e à CAPES e ao CNPq pelo suporte financeiro durante a realização deste trabalho.

“Embora ninguém possa voltar atrás e fazer um novo começo, qualquer um pode começar agora e
fazer um novo fim.”

Chico Xavier.

Resumo

Calegari, P. C. **Simulação computacional de escoamentos reativos com baixo número de Mach aplicando técnicas de refinamento adaptativo de malhas**. 2012. Tese (Doutorado) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, 2012.

O foco principal do presente trabalho é estender uma metodologia numérica embasada no uso de uma técnica de refinamento adaptativo de malha (AMR - *Adaptive Mesh Refinement*) e no uso de esquemas temporais multipasso implícitos-explícitos (IMEX) a aplicações envolvendo escoamentos reativos com baixo número de Mach. Originalmente desenvolvida para escoamentos incompressíveis, a formulação euleriana daquela metodologia emprega as equações de Navier-Stokes como modelo matemático para descrever a dinâmica do escoamento e o Método da Projeção, baseado no divergente nulo da velocidade do escoamento, para tratar o acoplamento pressão-velocidade presente na formulação com variáveis primitivas. Tal formulação euleriana original é estendida para acomodar novas equações agregadas ao modelo matemático da fase contínua: *conservação de massa, fração de mistura (para representar as concentrações de combustível e oxidante), e energia*. Além disso, uma *equação termodinâmica de estado* é integrada ao modelo matemático estendido e é empregada juntamente com a equação de conservação de massa para produzir uma nova restrição (não nula desta vez) ao divergente do campo de velocidade. Assume-se que o escoamento ocorre a baixo número de Mach (hipótese principal). O Método de Diferença Finita é empregado na discretização espacial das variáveis eulerianas de estado, empregando-se uma malha AMR. As vantagens e dificuldades desta extensão são cuidadosamente investigadas e reportadas. Pela importância, do ponto de vista de aplicações práticas, alguns estudos numéricos preliminares envolvendo escoamentos incompressíveis turbulentos com *sprays* são realizados (as gotículas compõem a *fase dispersa*). Num primeiro momento, apenas *sprays* com gotículas *inertes* são considerados. Embora ainda apenas iniciais, tais estudos já se mostram importantes pois identificam com clareza, em primeira instância, algumas das dificuldades inerentes a serem enfrentadas ao se tratar dentro desta nova metodologia um conjunto “relativamente grande” de gotículas lagrangianas. No caso de escoamentos incompressíveis turbulentos com *sprays*, a integração temporal se dá com métodos IMEX para a fase contínua e com o Método de Euler Modificado para a fase dispersa. A turbulência, em todos os casos que a envolvem, é tratada pelo modelo de Simulação das Grandes Escalas (LES - *Large Eddy Simulation*). As simulações computacionais se dão em um domínio tridimensional, um paralelepípedo, e empregam uma extensão (resultante do presente trabalho) do código “AMR3D”, um programa de computador sequencial implementado em Fortran90, oriundo de uma colaboração de longa data entre o IME-USP e o MFLab/FEMEC-UFU (Laboratório de Dinâmica de Fluidos da Universidade Federal de Uberlândia). O processamento foi efetuado no LabMAP (Laboratório da Matemática Aplicada do IME-USP).

Palavras-chave: AMR, IMEX, Método da Projeção, Escoamentos Reativos, Baixo Número de Mach, *Sprays*, Métodos Multinível-*Multigrid*.

Abstract

Calegari, P. C. **Computational simulation of low Mach number reacting flows applying adaptative mesh refinement techniques**. 2012. Thesis (Ph.D.) - Institute of Mathematics and Statistics, University of São Paulo, 2012.

It is the main goal of the present work to extend a numerical methodology based on both the use of an adaptive mesh refinement technique (AMR) and the use of a multistep, implicit-explicit time-step strategy (IMEX) to applications involving low Mach number reactive flows. Originally developed for incompressible flows, the Eulerian formulation of that methodology employs the Navier-Stokes equations to model the flow dynamics and the Projection Method, based on the vanishing divergence of the velocity field, to tackle the pressure-velocity coupling present when using primitive variables. That Eulerian formulation is extended by adding a new set of equations to the original mathematical model, describing the various properties of the continuous phase: *mass conservation*, *mixture fraction (to represent concentrations of fuel and oxidizer)* and *energy*. Also, a *thermodynamic equation of state* is included into the extended mathematical model which is employed, along with the equation for the conservation of mass, to derive a new restriction (this time, different from zero) to the divergence of the velocity field. It is assumed that one is dealing with a low Mach number flow (the main hypothesis). The discretization in space employs the Finite Difference Method for the Eulerian variables on a AMR mesh. Advantages and difficulties of such an extension of the previous methodology are carefully investigated and reported. For its importance in the real-world applications, few preliminary numerical studies involving incompressible turbulent flows with sprays are performed (the droplets form what it is called *the dispersed phase*). Only sprays formed by *inert* droplets are considered. Even though initial yet, such studies are most important because they clearly identify, first hand, certain difficulties in handling relatively “large” sets of Lagrangian droplets in the context of this new AMR methodology. In the context of turbulent incompressible flows with sprays, the overall time-step scheme is given by IMEX methods for the continuous phase and by the Improved Euler Method for the dispersed phase. In all the cases in which it is considered, turbulence is modeled by the Large Eddy Simulation (LES) model. The computational simulations are held in a tridimensional domain given by a parallelepiped and all of them employ the extension (resulting of the present work) of the “AMR3D” code, a sequential computer program implemented in Fortran90, whose origin is the collaborative work between IME-USP and MFLab/FEMEC-UFU (Fluid Dynamics Laboratory, Federal University of Uberlândia). Computations were performed at LabMAP (Applied Mathematics Laboratory at IME-USP).

Keywords: AMR, IMEX, Projection Method, Reacting Flows, Low Mach Number, Sprays, Multilevel-Multigrid Methods.

Sumário

Lista de Figuras	xi
Lista de Tabelas	xv
1 Introdução	1
1.1 Motivação e objetivos	2
1.2 Escoamentos reativos	3
1.3 Método da projeção para escoamentos reativos com baixo número de Mach	4
1.4 Refinamento adaptativo de malhas	4
1.5 Organização do trabalho	6
2 Modelo matemático	7
2.1 Equações para um escoamento reativo na fase contínua	7
2.1.1 Equação da conservação da massa	8
2.1.2 Equação da quantidade de movimento linear	8
2.1.3 Equação da conservação da fração mássica das espécies químicas	9
2.1.4 Equação da conservação da energia	10
2.1.5 Equação do estado termodinâmico	12
2.1.6 Equações adimensionalizadas	12
2.2 Escoamentos reativos com baixo número de Mach	13
2.3 Modelo da reação química	15
2.4 Modelo matemático para a fase dispersa de um escoamento incompressível	18
2.4.1 Equações do movimento das gotículas	19
2.5 Acoplamento entre as fases	20
2.6 Sumário dos modelos matemáticos	21
2.6.1 Modelo matemático para um escoamento incompressível (não-reativo)	21
2.6.2 Modelo matemático para um escoamento incompressível (não-reativo) com gotículas inertes	21
2.6.3 Modelo matemático para um escoamento reativo com baixo número de Mach	22
2.7 Nomenclatura	23
3 Metodologia numérica	25
3.1 Método da Projeção	25
3.1.1 Extensão do método da projeção para escoamentos reativos com baixo número de Mach	27

3.2	Solução das equações que modelam a fase contínua	28
3.2.1	Discretização temporal	28
3.2.2	Estratégia semi-implícita	29
3.2.3	Discretização do domínio computacional	30
3.2.4	Discretização espacial	31
3.2.5	Método <i>Multigrid</i>	34
3.2.6	Sumário da metodologia numérica para a fase contínua	36
3.3	Solução das equações que modelam a fase dispersa	39
3.3.1	Discretização temporal da fase dispersa	40
3.3.2	Operadores de interpolação entre as fases contínua e dispersa	40
3.3.3	Sumário da metodologia numérica para um escoamento incompressível con- tendo gotículas	42
3.4	Nomenclatura	43
4	Malha adaptativa bloco-estruturada	45
4.1	Descrição de uma malha bloco-estruturada	45
4.2	Geração de uma malha bloco-estruturada	48
4.2.1	Malha inicial do domínio computacional	49
4.2.2	Seleção de células computacionais para refinamento	50
4.2.3	Localização das gotículas na malha bloco-estruturada	50
4.3	Células computacionais <i>fantasmas</i>	51
4.4	Método <i>Multigrid</i> -Multinível	52
4.5	Sumário da metodologia numérica na malha bloco-estruturada	53
4.6	Nomenclatura	54
5	Verificação da metodologia numérica	55
5.1	Verificação numérica por meio de soluções manufaturadas	55
5.2	Escoamento incompressível	57
5.3	Advecção-difusão de uma grandeza escalar	59
5.4	Escoamento reativo com baixo número de Mach	60
5.5	Fase dispersa	61
5.6	Nomenclatura	63
6	Resultados numéricos	65
6.1	Simulação de escoamentos incompressíveis (não-reativos)	65
6.1.1	Escoamento incompressível (não-reativo) laminar	66
6.1.2	Escoamento incompressível (não-reativo) turbulento	67
6.2	Simulação de um escoamento (não-reativo) com gotículas inertes	77
6.3	Simulação de escoamentos reativos a baixo Mach	83
6.3.1	Escoamento reativo laminar	84
6.3.2	Escoamento reativo turbulento	86
6.4	Sumário	90
6.5	Nomenclatura	93

7	Considerações finais	95
7.1	Contribuições	97
7.2	Continuidade	98
A	Modelo de turbulência	99
A.1	Modelo de turbulência para a taxa de reação	101
A.2	Modelo da fração de mistura em escoamentos turbulentos	102
B	Sistema de equações rígido	105
C	Dedução das formas da equação da energia	107
D	Adimensionalização das equações	111
D.1	Equação da conservação da massa adimensional	111
D.2	Equação da conservação das espécies químicas adimensional	112
D.3	Equação da quantidade de movimento linear adimensional	112
D.4	Equação da temperatura adimensional	113
D.5	Equação do estado termodinâmico adimensional	114
	Referências Bibliográficas	117
	Índice Remissivo	123

Lista de Figuras

1.1	Entrada do combustível e do oxidante na região de reação. A reação química em (a) resulta em uma chama pré-misturada e em (b) em uma chama não pré-misturada.	3
1.2	Corte central no domínio computacional tridimensional. (a) Componente da velocidade na direção do escoamento junto com a malha bloco-estruturada com refinamento adaptativo gerada pela técnica AMR. (b) Blocos que compõem a malha bloco-estruturada com refinamento adaptativo.	5
3.1	Localização das variáveis escalares e vetoriais discretizadas em uma célula computacional. (a) Variáveis escalares no centro de uma célula computacional. (b) Componente da velocidade na direção x_1 no centro da face x_2x_3 . (c) Componente da velocidade na direção x_2 no centro da face x_1x_3 . (d) Componente da velocidade na direção x_3 no centro da face x_1x_2	31
3.2	Aproximações quadráticas utilizadas pelo esquema QUICK em uma dimensão. . .	33
3.3	Restrição para uma variável escalar calculada no centro de uma célula computacional.	35
3.4	Prolongamento para uma variável calculada no centro da célula computacional. . .	36
3.5	Localização de uma variável escalar ϕ e uma vetorial $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ discretizadas, respectivamente no centro e nas faces de uma célula computacional e as gotículas lagrangianas, representadas pelo símbolo $\bullet$, contidas nesta célula.	40
4.1	Malha bloco-estruturada em um domínio computacional $[0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$ com dois níveis de refinamento: (a) malha tri-dimensional, (b) corte na direção $x_1 = 0.42$, (c) corte na direção $x_3 = 0.45$ e (d) corte na direção $x_2 = 0.3$, Nós (2007).	46
4.2	Elementos de uma malha bloco-estruturada bidimensional: (a) malha base; (b)-(d) regiões cobertas por um nível de refinamento; (c) nível de refinamento com dois blocos discretizados; (e) nível de refinamento com três blocos discretizados e (f) malha bloco-estruturada.	47
4.6	Exemplo de região de segurança bidimensional. A região de segurança está contornada por uma linha tracejada.	50
4.7	Lista encadeada.	50
5.1	Malha composta utilizada na verificação numérica: (a) malha 3D no formato “L”, (b) corte no domínio computacional na direção x_1 , (c)-(d) cortes no domínio computacional na direção x_2 e (e)-(f) cortes no domínio computacional na direção x_3 (Nós (2007)).	56
6.1	Esboço da entrada da componente da velocidade na direção do escoamento.	66

6.3	Zoom da velocidade do escoamento em um corte central e malha bloco-estruturada .	67
6.2	Escoamento incompressível (não-reativo) laminar: componente da velocidade na direção do escoamento em um plano de corte no domínio computacional em $x_3 = 8 \times 10^{-2} m$ em diferentes instantes de tempo.	68
6.4	Decaimento da velocidade na direção do escoamento na linha de centro do domínio computacional.	69
6.5	Razão entre os tempos gastos em uma malha uniforme (TMU) e em uma malha composta bloco-estruturada (TMC).	69
6.6	Malha tridimensional com refinamento adaptativo.	70
6.7	Escoamento incompressível (não-reativo) turbulento: componente da velocidade na direção do escoamento em um plano de corte no centro do domínio computacional em $x_3 = 1.44 \times 10^{-1} m$	71
6.8	Velocidade do jato na direção do escoamento com a malha bloco-estruturada em um plano de corte central.	72
6.9	Escoamento incompressível (não-reativo) turbulento: componente da velocidade na direção do escoamento em um instante de tempo em um plano de corte transversal em 15% (a)-(b).	72
6.10	Escoamento incompressível (não-reativo) turbulento: componente da velocidade na direção do escoamento em um instante de tempo em em planos de corte transversais em 25% (a)-(b), 50% (c)-(d) e 75% (e)-(f).	73
6.12	Decaimento médio da componente da velocidade na direção do escoamento na linha de centro do domínio computacional.	74
6.15	Esboço da entrada das gotículas e da componente da velocidade na direção do escoamento.	78
6.16	Distribuição uniforme sobre um disco.	79
6.17	Distribuição log-normal para o diâmetro das gotículas.	80
6.18	Velocidade na direção do escoamento e malha bloco-estruturada gerada na simulação do escoamento com gotículas em um corte transversal.	80
6.19	Escoamento incompressível (não-reativo) turbulento com gotículas inertes: (a)-(d) velocidade das gotículas na direção do escoamento com um plano de corte central.	81
6.20	Escoamento incompressível (não-reativo) turbulento com gotículas inertes: (a)-(b) velocidade das gotículas na direção do escoamento em um plano de corte central.	82
6.21	Perfil da velocidade das gotículas na linha radial.	82
6.22	Esboço da entrada do combustível e do ar na direção do escoamento reativo.	83
6.23	Escoamento reativo laminar: temperatura do escoamento e malhas adaptativas em um plano de corte em $x_3 = 5 \times 10^{-2} m$	85
6.24	Temperatura do escoamento e malha bloco-estruturada gerada, em corte transversal na metade do domínio computacional.	87
6.25	Escoamento reativo turbulento: Fração de mistura em um plano de corte no centro do domínio computacional em $x_3 = 1.44 \times 10^{-1} m$	88
6.26	Escoamento reativo turbulento: Temperatura do escoamento em um plano de corte no centro do domínio computacional em $x_3 = 1.44 \times 10^{-1} m$	89

6.27	Decaimento na linha de centro da velocidade média na direção do escoamento e dados experimentais.	90
6.28	Decaimento na linha de centro na direção do escoamento da fração demistura média e dados experimentais.	90
6.29	Perfil da temperatura na linha de centro na direção do escoamento e dados experimentais.	91

Lista de Tabelas

2.1	Propriedades de referência do escoamento e suas unidades (SI).	13
5.1	Erro global e ordem de aproximação para o campo de velocidade e pressão na malha composta.	59
5.2	Erro e ordem de aproximação para a equação do transporte (5.18).	59
5.3	Erro e ordem de aproximação do campo de velocidades, da pressão, da densidade e da fração de mistura na malha composta.	61
5.4	Erro e ordem de aproximação das posições das gotículas.	62
5.5	Erro e taxa de convergência da interpolação do campo de velocidade do escoamento para a posição (1.2, 1.335, 0.95).	62
6.1	Número de células computacionais em diferentes malhas.	77
6.2	Temperatura máxima da chama laminar.	86

Lista de Algoritmos

3.1	<i>Multigrid</i> Ciclo V - Malha uniforme:	36
3.2	Um passo de integração - Escoamento reativo com baixo número de Mach:	38
3.3	Um passo de integração - Escoamento incompressível (não-reativo):	39
3.4	Um passo de integração - Escoamento incompressível (não-reativo) com gotículas: .	42
4.1	<i>Multigrid</i> -Multinível Ciclo V - Malha bloco-estruturada:	52
4.2	Um passo de integração na malha bloco-estruturada - Escoamento incompressível (não-reativo) com gotículas:	53

Capítulo 1

Introdução

A combustão é uma importante área de pesquisa da engenharia que envolve diversos fenômenos como turbulência, transferência de calor, reações químicas, radiação, entre outros processos químicos e físicos. Dentre os processos de combustão estão aqueles que, devido a emissão de gases poluentes, são altamente nocivos. Desta maneira, modelos matemáticos são empregados para prever escoamentos, temperaturas, concentrações de espécies químicas (resultantes das reações químicas), com o objetivo de minimizar efeitos nocivos ao meio ambiente. Neste contexto, é crescente o interesse em simulações numéricas de escoamentos reativos com combustíveis renováveis e menos agressivos ao meio ambiente como o etanol.

Uma das intenções do presente trabalho é investigar o desempenho e a aplicabilidade de técnicas de refinamento adaptativo de malhas visando a simulação numérica de escoamentos reativos com baixo número de Mach e escoamentos incompressíveis com gotículas inertes sem evaporação. Um grupo de pesquisadores do Instituto de Matemática e Estatística (IME-USP) e da Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia (MFLab/FEMEC-UFU) vem desenvolvendo um código computacional denominado “AMR3D” (veja Nós (2007) e Cenicerós *et al.* (2010a)). A metodologia empregada no código AMR3D usa técnicas de refinamento adaptativo de malhas e o Método da Projeção de Chorin-Temam para simular escoamentos incompressíveis. Originalmente, o código AMR3D foi desenvolvido por Nós (2007). Atualmente, o código vem sendo ampliado em parceria com o MFLab-UFU. Alguns trabalhos fizeram uso desta metodologia como Roma *et al.* (1999), Cenicerós *et al.* (2010a) e Cenicerós *et al.* (2010b). Observando a eficiência da metodologia numérica em desenvolvimento (quando aplicada a escoamentos incompressíveis), foi decidido estendê-la a escoamentos reativos com baixo número de Mach. A extensão proposta parte de três componentes principais: uma técnica de refinamento adaptativo de malhas para discretizar o domínio computacional (Berger e Olinger (1984) e Berger e Colella (1989)), a utilização de esquemas implícitos-explicitos para a discretização temporal (Ascher *et al.* (1995) e Wang e Ruuth (2008)) e a utilização de um método da projeção para tratar o acoplamento pressão-velocidade (Nós (2007), Cenicerós *et al.* (2010b) e Roma *et al.* (1999)).

Este capítulo apresenta, de uma forma geral, os principais tópicos deste trabalho. A Seção 1.2 apresenta uma breve descrição do problema. A Seção 1.3 introduz a extensão do método da Projeção de Chorin-Temam para escoamentos com baixo número de Mach. A Seção 1.4 apresenta o potencial da técnica AMR na simulação numérica de problemas de combustão. Na Seção 1.1, são descritos os objetivos do presente trabalho e, na Seção 1.5, é descrita a estrutura do trabalho.

1.1 Motivação e objetivos

A simulação numérica de problemas que envolvem reações químicas e escoamentos turbulentos, necessita de boa resolução para capturar grande parte dos fenômenos envolvidos, Pember *et al.* (1998), Pitsch e Steiner (2000), García (2009), Apte *et al.* (2009), Day e Bell (2000), Gao e Groth (2008). O uso de malhas refinadas é um ponto favorável para a resolução de escoamentos reativos. No presente trabalho aplica-se a estratégia AMR, (*Adaptive Mesh Refinement*), proposta por Berger e Oliger (1984), para a geração de malhas bloco-estruturadas com refinamento adaptativo. Além disso, aplica-se uma extensão do Método da Projeção para tratar o acoplamento pressão-velocidade, baseada na proposta de Pember *et al.* (1998), para a solução de um escoamento reativo com baixo número de Mach. A extensão proposta no presente trabalho, parte de três componentes principais: uma técnica de refinamento adaptativo de malhas para discretizar o domínio computacional, a utilização de esquemas implícitos-explícitos (IMEX, veja Ascher *et al.* (1995) e Wang e Ruuth (2008)) para a discretização temporal e do Método da Projeção para tratar o acoplamento pressão-velocidade. Nas próximas seções cada uma destas componentes são descritas brevemente. A partir destas componentes foram desenvolvidas:

- uma extensão do Método da Projeção de Chorin-Temam para escoamentos reativos com baixo número de Mach combinado ao modelo químico baseado na fração de mistura;
- uma implementação da equação do transporte de uma variável escalar; e
- uma análise de critérios de refinamento adaptativos para captar os fenômenos físicos envolvidos no problema estudado.

Visando uma simulação numérica de um escoamento incompressível (não-reativo) com gotículas inertes sem evaporação adotou-se a *formulação lagrangiana*. A partir do código computacional com a metodologia numérica para um escoamento incompressível (não-reativo), foi necessário:

- adicionar estruturas de dados na ferramenta numérica para a descrição das gotículas; e
- incluir métodos numéricos para a solução de um sistema de equações diferenciais ordinárias associado a cada gotícula.
- investigar distribuições de probabilidade para o tamanho, posição e velocidade das gotículas; e
- analisar critérios de refinamento adaptativos para captar os fenômenos físicos envolvidos no problema estudado.

O presente trabalho trouxe informações relevantes associadas à metodologia numérica em uso. Pela primeira vez, o código AMR3D foi aplicado a escoamentos de jatos. Com isso, foi possível identificar dificuldades não encontradas antes como, por exemplo, o uso abusivo de células *fantasmas* que levam a um alto custo computacional. Algumas medidas que evitam um grande número células fantasmas foram tomadas no presente trabalho, mostrando-se eficazes.

Uma grande energia do grupo IME-MFLab vem sendo empregada para a aceleração do tempo computacional gasto pelo código, tanto na paralelização via decomposição de domínios quanto

na montagem da matriz associada ao problema. O intuito da montagem da matriz é resolver os sistemas lineares oriundos, das discretizações espaciais e temporais, utilizando bibliotecas com métodos já paralelizados.

1.2 Escoamentos reativos

As chamas resultantes dos processos de combustão são, em geral, classificadas em *pré-misturadas* e *não pré-misturadas*. Nas chamas pré-misturadas, combustível e oxidante entram na região de reação já misturados. Nas chamas não pré-misturadas combustível e oxidante entram separadamente na região de reação (veja Turns (1996) e Poinso e Veynante (2005)). A Figura 1.1 mostra a entrada do combustível e do oxidante que caracterizam os dois tipos de chama.

Figura 1.1: Entrada do combustível e do oxidante na região de reação. A reação química em (a) resulta em uma chama pré-misturada e em (b) em uma chama não pré-misturada.

Na chama não pré-misturada, as espécies químicas são determinadas pela resolução de um sistema de equações diferenciais. Este sistema pode envolver centenas de espécies e reações químicas (veja Pember *et al.* (1998), Day e Bell (2000), Najm e Knio (2005), Gao e Groth (2008)). Alguns modelos para a reação química contornam a dificuldade de se resolver este sistema, assumindo um modelo simplificado com um número menor de espécies químicas, (veja Kuo (2005), Versteeg e Malalasekera (2007), Turns (1996), Apte *et al.* (2009), Pierce e Moin (2004)). No presente trabalho adotou-se o emprego do modelo químico que assume a reação química infinitamente rápida e estequiométrica. Este modelo considera a natureza global da reação química por meio de uma única equação de conservação para uma variável escalar denominada *fração de mistura* (veja Kuo (2005), Turns (1996) e Poinso e Veynante (2005)). A aplicação da metodologia proposta é baseada na simulação numérica de uma chama de difusão (Chama D). Com isso, espera-se explorar as vantagens da metodologia numérica e possíveis dificuldades a serem encontradas.

O processo da queima do combustível líquido na forma de *spray* é considerado um escoamento bifásico e pode ser modelado de duas maneiras: por intermédio de uma formulação *euleriana-euleriana*, onde cada fase é localizada em uma célula computacional por meio de uma função indicadora, (veja Crowe *et al.* (1998), García (2009) e Sirignano (1999)), ou por intermédio de uma formulação *euleriana-lagrangiana*, a qual possui dois conjuntos de equações acoplados, um para a fase gasosa, também chamada de *fase contínua* e outro para a fase líquida, também chamada de *fase dispersa*, representada por gotículas, (veja e Sirignano (1999), García (2009), Apte *et al.* (2009) e Crowe *et al.* (1998)). No presente trabalho, é empregada uma formulação euleriana-lagrangiana. A fase contínua é modelada por meio das equações da conservação da massa, da conservação da fração de mistura, da conservação da energia e da quantidade de movimento. A

fase dispersa, composta pelas gotículas é modelada por meio de um sistema de equações diferenciais ordinárias que descreve a evolução da posição, da temperatura, da massa e da velocidade de cada gotícula. O presente trabalho investiga a aplicabilidade da metodologia numérica a escoamentos incompressíveis (não-reativos) com gotículas. Serão consideradas gotículas inertes sem evaporação conforme Stårner e Masri (2003) e De *et al.* (2011) visando, futuramente, a simulação de um escoamento reativo com baixo número de Mach e com gotículas.

1.3 Método da projeção para escoamentos reativos com baixo número de Mach

Nas aplicações de escoamentos incompressíveis estudadas pelo grupo IME-MFLab, utiliza-se o método da Projeção de Chorin-Temam para tratar o acoplamento pressão-velocidade nas equações de Navier-Stokes (Roma *et al.* (1999), Nós (2007), Cenicerós *et al.* (2010a), Cenicerós *et al.* (2010b)). O método da projeção para escoamentos reativos com baixo número de Mach, o qual trata o acoplamento pressão-velocidade, é baseado na expansão assintótica das equações de Navier-Stokes em termos do número de Mach. A expansão, proposta por Majda e Sethian (1985) e Rehm e Baum (1978), motivou Pember *et al.* (1998) a estender um método da projeção para escoamentos reativos com baixo número de Mach. Neste caso, uma restrição para o divergente do campo de velocidade (não nula) é obtida a partir da equação do estado termodinâmico e da equação da conservação de massa.

A versão estendida do método da projeção para escoamentos com baixo número de Mach é utilizada por Bell (2005), Day e Bell (2000) e Nicoud (2000), que utilizam um modelo químico detalhado. No presente trabalho uma restrição para o divergente do campo de velocidade é determinada para o modelo químico baseado na fração de mistura, sendo esta abordagem, do nosso conhecimento, inédita no contexto da metodologia numérica adotada.

1.4 Refinamento adaptativo de malhas

A adaptatividade é uma técnica importante a ser considerada para a solução eficiente de equações diferenciais parciais. O termo *refinamento adaptativo de malhas* (ou simplesmente AMR) engloba uma coleção de aproximações aplicáveis a uma variedade de problemas, conforme descreve Plewa *et al.* (2005). Entretanto, a ideia ainda é a mesma: concentrar poder computacional onde é mais necessário com o aumento da resolução em regiões de interesse. Esta ideia evita o alto custo computacional necessário para simular um problema em uma malha uniforme tridimensional. Neste trabalho emprega-se a estratégia de refinamento adaptativo de malhas (AMR) proposta por Berger e Oliger (1984), Berger e Colella (1989) e Berger e Rigoutsos (1991).

A Figura 1.2 foi obtida aplicando a técnica AMR na simulação de um jato incompressível não-reativo turbulento. Ela mostra um plano de corte central de uma malha bloco-estruturada com refinamento adaptativo contendo uma malha base e mais três níveis de refinamento. A Figura 1.2(a) mostra a componente da velocidade na direção do escoamento de um jato turbulento não-reativo e a Figura 1.2(b), os blocos discretizados que compõem a malha com refinamento adaptativo. Note que a união dos blocos discretizados com mesmo espaçamento formam um nível de refinamento e a união dos quatro níveis de refinamento (neste caso) compõem a malha bloco-estruturada.

Figura 1.2: Corte central no domínio computacional tridimensional. (a) Componente da velocidade na direção do escoamento junto com a malha bloco-estruturada com refinamento adaptativo gerada pela técnica AMR. (b) Blocos que compõem a malha bloco-estruturada com refinamento adaptativo.

Na malha bloco-estruturada, as variáveis são dispostas em uma malha deslocada (modelo MAC, *marker and cell*): escalares no centro da célula computacional (por exemplo, massa específica, fração de mistura e viscosidade), e as componentes do campo de velocidade nas faces da célula computacional. Esquemas de diferenças finitas de segunda ordem são empregados na discretização dos operadores diferenciais espaciais. Para a discretização temporal são empregados os esquemas IMEX (*Implicit-Explicit*) de segunda ordem, os quais tratam o termo difusivo implicitamente e o termo advectivo explicitamente. O tratamento explícito do termo advectivo evita a resolução de um sistema não linear e o tratamento implícito do termo difusivo evita a escolha de um tamanho de passo de integração Δt muito restritivo.

Na área de combustão a estratégia AMR vem sendo utilizada por Pember *et al.* (1998), Bell (2005), Day e Bell (2000), Northrup e Groth (2009) e Gao e Groth (2008) na simulação de chamas não pré-misturadas, de chamas de hidrogênio pré-misturadas, de chamas nucleares e problemas da área de astrofísica Zingale *et al.* (2009) e Nonaka *et al.* (2012). Além da estratégia AMR a metodologia destes trabalhos envolve aproximações a baixo número de Mach, modelo de química detalhada para as reações químicas, paralelismo e simulação numérica direta (DNS - *Direct numerical simulation*).

Os recentes trabalhos de simulação numérica de escoamento com gotículas (*sprays*) utilizam malhas não estruturadas (veja García (2009), Bini e Jones (2009), De *et al.* (2011) e Chrigui *et al.*

(2012)). A simulação numérica de um escoamento com gotículas em uma malha bloco-estruturada com refinamento adaptativo, além da eficiência e precisão em regiões de interesse, facilita a localização das gotículas na malha. O uso da estratégia AMR para a simulação de escoamentos com uma nuvem de gotículas (*spray*), dentro do nosso conhecimento, possui seu grau de originalidade.

1.5 Organização do trabalho

No presente trabalho, a combinação de uma técnica AMR com um método implícito-explicito e um método da projeção é aplicada para resolver as equações que modelam o escoamento de dois jatos incompressíveis (não-reativos). Além disso, o trabalho apresenta uma metodologia numérica para a simulação de escoamentos incompressíveis (não-reativos) com gotículas inertes (Stårner e Masri (2003) e De *et al.* (2011)) e uma versão estendida do método da projeção visando a simulação de escoamentos reativos com baixo número de Mach.

O presente trabalho está estruturado como segue. O Capítulo 2 apresenta três modelos matemáticos: para um escoamento incompressível (não-reativo), para um escoamento incompressível (não-reativos) com gotículas inertes e para um escoamento reativo com baixo número de Mach. Além disso, é descrito um modelo da reação química baseado na fração de mistura (escalar conservado). No Capítulo 3, é apresentada uma metodologia numérica para a simulação de um escoamento reativo com baixo número de Mach. Isso inclui uma extensão do método da projeção, uma discretização temporal para a fase contínua e uma discretização espacial. À metodologia numérica para escoamentos incompressíveis (não-reativos) é acrescentada à discretização temporal para a *fase dispersa* e os operadores responsáveis pelo acoplamento entre as fases. Com isso, estende-se à metodologia numérica a escoamentos incompressíveis (não reativos) com gotículas inertes sem evaporação. O Capítulo 4 apresenta a estratégia AMR e o método *Multigrid*-Multinível para a solução do sistema linear derivado da discretização da equação da conservação da fração de mistura. No Capítulo 5, são apresentadas as verificações numéricas da metodologia proposta por meio de soluções manufaturadas. No Capítulo 6, são apresentados os resultados numéricos das simulações dos jatos incompressíveis (não-reativos). Além disso, são apresentados resultados preliminares que mostram o potencial da técnica AMR, quando aplicada a um escoamento incompressível (não-reativo) com gotículas inertes sem evaporação e a um escoamento reativo com baixo número de Mach (Chama D). O Capítulo 7 apresenta as considerações finais. A revisão da literatura é feita durante a apresentação de cada capítulo. No final dos Capítulos 2 – 6 é apresentada uma lista de símbolos utilizados nos mesmos. Os Apêndices trazem informações que complementam o trabalho.

Capítulo 2

Modelo matemático

Muitos problemas de combustão são modelados como escoamentos bifásicos onde se tem uma fase líquida (que pode ser modelada como gotículas de combustível) e uma fase gasosa (a qual modela o oxidante). A fase gasosa é denominada *fase contínua* e a fase líquida é denominada *fase dispersa*. No presente trabalho é empregada uma formulação matemática para um escoamento reativo na fase contínua, baseada nas equações de Navier-Stokes para um escoamento reativo (veja Kuo (2005), Versteeg e Malalasekera (2007), Turns (1996) e Poinot e Veynante (2005)). Além disso, o presente trabalho emprega uma formulação matemática para a fase dispersa, a qual modela o movimento das gotículas inertes no escoamento (veja Stårner e Masri (2003), Crowe *et al.* (1998), García (2009) e De *et al.* (2011)). No presente trabalho a evaporação das gotículas na fase dispersa não é tratada.

Na Seção 2.1 são descritas as equações que modelam um escoamento reativo multicomponente da fase contínua. Na Seção 2.2 são descritas as equações que modelam um escoamento reativo com baixo número de Mach conforme descrevem Pember *et al.* (1998), Bell (2005), Day e Bell (2000) e Nicoud (2000). Estas equações são baseadas nas expansões assintóticas das equações de Navier-Stokes em termos do número de Mach apresentadas por Majda e Sethian (1985) e Rehm e Baum (1978). Na Seção 2.3 é descrito um modelo para as reações químicas que ocorrem na fase contínua. Este modelo é baseado na estrutura da chama de Burke-Schumann o qual assume que a reação química é infinitamente rápida e estequiométrica (Kuo (2005), Versteeg e Malalasekera (2007) e Poinot e Veynante (2005)). Esta abordagem considera a natureza global da reação química descrita por uma propriedade escalar conservada e denominada *fração de mistura*. O modelo matemático para a fase dispersa, o qual descreve o movimento das gotículas é descrito na Seção 2.4. Na Seção 2.5 descreve-se o acoplamento entre as fases dispersa e contínua. A Seção 2.6 apresenta os três modelos matemáticos utilizados no presente trabalho: o primeiro para um escoamento incompressível (não-reativo), o segundo para um escoamento incompressível (não-reativo) com uma fase dispersa inerte sem evaporação e o terceiro para um escoamento reativo com baixo número de Mach.

2.1 Equações para um escoamento reativo na fase contínua

Para modelar um escoamento multicomponente reativo com baixo número de Mach e N espécies químicas, empregam-se as equações da conservação da massa, da conservação da fração mássica de cada espécie química, da quantidade de movimento linear, da conservação da energia e do estado

termodinâmico. Tais equações são apresentadas nas próximas seções na notação indicial. Isso permite escrever de forma compacta algumas expressões tratadas no presente trabalho. Com isso, o somatório, $\sum_{j=1}^3 \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$, é denotado por $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$, onde i é o índice *livre* e j é o índice *repetido*.

2.1.1 Equação da conservação da massa

A equação da conservação da massa de cada espécie química $l = 1, \dots, N$ é dada por

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \frac{\partial \dot{m}_{l,j}}{\partial x_j} = \dot{\omega}_l, \quad (2.1)$$

sendo $\rho_l = \rho Y_l$ a massa específica da espécie química l , ρ a massa específica da mistura. O termo Y_l é a fração mássica da espécie química l dada por

$$Y_l = \frac{m_l}{m}, \quad (2.2)$$

sendo m_l a massa da espécie química l e m a massa da mistura (veja Kuo (2005), Poinso e Veynante (2005), Turns (1996)). A quantidade $\dot{\mathbf{m}}_l = (\dot{m}_{l,1}, \dot{m}_{l,2}, \dot{m}_{l,3})$ é o fluxo de massa da espécie química l dado por

$$\dot{\mathbf{m}}_l = \rho Y_l \mathbf{v}_l, \quad (2.3)$$

onde $\mathbf{v}_l = (v_{l,1}, v_{l,2}, v_{l,3})$ é a velocidade da espécie química l . O lado direito da equação (2.1) ($\dot{\omega}_l$) é a taxa de produção ou de consumo da espécie química l devido às reações químicas. A soma das N equações descritas em (2.1) resulta na equação da conservação da massa da mistura

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j)}{\partial x_j} = 0, \quad (2.4)$$

onde o campo vetorial $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ é a velocidade do escoamento. A equação (2.4) é obtida por meio da relação $\sum_{l=1}^N \dot{\mathbf{m}}_l = \rho \mathbf{u}$, da Lei da Conservação da Massa $\sum_{l=1}^N \rho_l = \rho$, $\sum_{l=1}^N Y_l = 1$ e do somatório nulo $\sum_{l=1}^N \dot{\omega}_l = 0$. Isso implica que enquanto uma espécie é produzida outra é consumida, conforme descrevem Kuo (2005), Poinso e Veynante (2005) e Versteeg e Malalasekera (2007). Para a dedução da equação da conservação da massa veja Melo e Neto (1991), Batchelor (2000) e Chorin e Marsden (1993).

2.1.2 Equação da quantidade de movimento linear

A equação da quantidade de movimento linear é a Segunda Lei de Newton dada por

$$\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} + F_i, \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \quad (2.5)$$

onde p é a pressão, F_i são as forças que agem sobre o sistema, dentre as quais inclui-se a aceleração da gravidade. O tensor de tensões viscosas τ_{ji} é proporcional à taxa de deformação local,

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k}, \quad (2.6)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica (relacionada a deformação linear) e a segunda viscosidade λ está relacionada à deformação volumétrica, com a hipótese que $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$, veja Versteeg e Malalasekera (2007) e Kuo (2005). O delta de Kronecker, δ_{ij} na expressão (2.6), é definido por

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (2.7)$$

Para detalhes da dedução da equação da quantidade de movimento linear veja Chorin e Marsden (1993), Melo e Neto (1991), Batchelor (2000) e Kuo (2005).

Utilizando-se a equação da conservação da massa (2.4), obtém-se a forma *não conservativa* da equação (2.5) dada por

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j}, \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \quad (2.8)$$

onde o operador $\frac{D}{Dt}$ é a derivada material definida

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_j \frac{\partial}{\partial x_j}. \quad (2.9)$$

Para o caso turbulento a viscosidade μ , na expressão (2.6), inclui a viscosidade turbulenta μ_t , dada por

$$\mu_t = (C_S \Delta)^2 |\mathcal{S}|, \quad (2.10)$$

onde C_S é uma constante do modelo, Δ é o tamanho do *filtro* e $\mathcal{S}$ é o tensor taxa de deformação *filtrada*. A viscosidade turbulenta, dada pela expressão (2.10), é obtida por meio do modelo de turbulência da simulação das grandes escalas (LES - *Large Eddy Simulation*) descrito no Apêndice A.

2.1.3 Equação da conservação da fração mássica das espécies químicas

As espécies químicas são representadas por meio da fração mássica Y_l definida pela expressão (2.2). A massa específica, a velocidade e o fluxo de massa de cada espécie química l são dados por $\rho_l = \rho Y_l$, $\mathbf{v}_l$ e $\dot{\mathbf{m}}_l = \rho_l \mathbf{v}_l$. Da equação (2.1) tem-se que

$$\frac{\partial(\rho Y_l)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Y_l v_{l,j})}{\partial x_j} = \dot{\omega}_l, \quad \text{para } 1 \leq l \leq N. \quad (2.11)$$

A diferença entre a velocidade de cada espécie química l e a velocidade do escoamento é definida como a *velocidade de difusão* $\mathbf{v}_l^d = \mathbf{v}_l - \mathbf{u}$, ou seja, a velocidade relativa de uma espécie química em relação a velocidade do escoamento, veja Turns (1996) e Kuo (2005). Desta maneira, obtém-se

$$\frac{\partial(\rho Y_l)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho Y_l (u_j + v_{l,j}^d)] = \dot{\omega}_l, \quad \text{para } 1 \leq l \leq N. \quad (2.12)$$

Da Segunda Lei de Fick da Difusão, descrita em Kuo (2005) e Turns (1996), tem-se

$$\rho Y_l v_{l,i}^d = -\rho D_l \frac{\partial Y_l}{\partial x_i}, \quad \text{para } 1 \leq l \leq N, \quad (2.13)$$

sendo D_l o coeficiente de *difusão binária de massa* da espécie química l . No presente trabalho,

assume-se que todas as espécies químicas possuem o mesmo coeficiente de difusão, isto é, $D_l = D$ para $1 \leq l \leq N$, veja Poinot e Veynante (2005), Kuo (2005) e Turns (1996). Desta forma, a equação da conservação da fração mássica de cada espécie química (2.11) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial(\rho Y_l)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_l)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Y_l}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_l, \quad \text{para } 1 \leq l \leq N. \quad (2.14)$$

O termo da reação química $\dot{\omega}_l$ que representa a taxa de produção ou de consumo da espécie química l , torna o sistema de equações (2.14) *rígido*, conforme salientam Bell (2005) e Pember *et al.* (1998). Para exemplificar o significado deste fato, Butcher (2003) apresenta um exemplo de sistema de equações rígidas originário de um processo químico (veja o Apêndice B).

Outra dificuldade no tratamento da equação (2.14) é sua modelagem não trivial na presença de turbulência do termo $\dot{\omega}_l$, conforme descrevem Poinot e Veynante (2005) (veja mais detalhes no Apêndice A). Para contornar tais dificuldades, foi adotado um modelo químico simplificado com a hipótese de reação química rápida e estequiométrica, o qual considera a natureza global da reação química por meio de uma equação de transporte de um escalar conservado denominado fração de mistura. Esse modelo evita os termos de reação $\dot{\omega}_l$ e é descrito na Seção 2.3. Desta maneira, a rigidez associada ao sistema de equações diferenciais ordinárias e o modelo de turbulência para o termo $\dot{\omega}_l$, podem ser tratadas com maior facilidade. Em contrapartida, este modelo químico não trata as reações químicas intermediárias e consequentemente, as espécies químicas resultantes destas reações.

2.1.4 Equação da conservação da energia

A equação da conservação da energia é a Primeira Lei da Termodinâmica, ou seja, a taxa de variação da energia do escoamento é igual ao calor adicionado ao escoamento menos o trabalho realizado pelo escoamento (veja Kuo (2005), Chorin e Marsden (1993), Turns (1996) e Versteeg e Malalasekera (2007)). Ela é dada por

$$\frac{De_t}{Dt} = -\frac{\partial(pu_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial(\tau_{ji}u_j)}{\partial x_i} + \rho \sum_{l=1}^N Y_l f_{l,j} v_{l,j} + \dot{Q}, \quad (2.15)$$

onde e_t é a energia total do sistema, os termos $\rho \sum_{l=1}^N Y_l f_{l,j} v_{l,j}$ e $\dot{Q}$ são, respectivamente, a soma do trabalho das forças externas sobre todas as espécies químicas e a taxa de transferência de calor por radiação, e $\dot{\mathbf{q}} = (\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dot{q}_3)$ é o fluxo de calor dado por

$$\dot{q}_j = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} + \rho \sum_{l=1}^N h_l Y_l v_{l,j}^d, \quad \text{para } j = 1, 2, 3. \quad (2.16)$$

No presente trabalho, assumir-se-á que não há transferência de calor por radiação e nem o trabalho das forças externas agindo sobre o sistema. Na expressão (2.16), κ é a condutividade térmica do meio e h_l é a *entalpia absoluta* da espécie química l , esta dada por

$$h_l = h_{sl} + \Delta h_l^*, \quad \text{com } h_{sl} = \int c_{pl}(T) dT, \quad (2.17)$$

sendo h_{sl} a *entalpia sensível* da espécie química l , Δh_l^* a *entalpia de formação* da espécie química l sob a temperatura de referência T^* e c_p o calor específico à pressão constante. A entalpia absoluta da mistura é dada por

$$h = \sum_{l=1}^N h_l Y_l. \quad (2.18)$$

A *entalpia sensível* h_s da mistura, é definida de maneira análoga à expressão (2.18). A entalpia total absoluta é a soma da entalpia absoluta da mistura com a energia cinética, dada por

$$h_t = h + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 u_i^2. \quad (2.19)$$

A energia total do sistema é dada por

$$e_t = h_t - \frac{p}{\rho}. \quad (2.20)$$

A expressão (2.20) também determina a *energia sensível* por meio da *entalpia sensível* e a *energia absoluta* por meio da *entalpia absoluta*. Da expressão (2.20) e utilizando a equação da conservação da massa (2.4) obtém-se

$$\rho \frac{De_t}{Dt} = \rho \frac{Dh_t}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} - p \frac{\partial u_i}{\partial x_i}. \quad (2.21)$$

A partir das expressões (2.19) e (2.21) obtém-se a equação da energia em termos da *entalpia absoluta*, da energia cinética, da energia absoluta e da temperatura. O Apêndice C apresenta a dedução das equações (2.22) e (2.23) a partir da equação (2.15).

Assim sendo, as equações da energia em termos da *entalpia absoluta* e da temperatura conforme descrito em Versteeg e Malalasekera (2007), Poinot e Veynante (2005), Turns (1996) e Kuo (2005) são dadas por

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + \tau_{ji} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}, \quad (2.22)$$

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \tau_{ji} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \dot{\omega}_T, \quad (2.23)$$

sendo $\dot{\omega}_T$ o calor liberado devido às reações químicas, dado por

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{l=1}^N \Delta h_l^* \dot{\omega}_l. \quad (2.24)$$

No presente trabalho, o termo $\tau_{jj} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}$ não será considerado pois assumir-se-á que não há dissipação de energia devido às tensões viscosas. Portanto, as equações (2.22) e (2.23) tornam-se

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j h)}{\partial x_j} = \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x_j} \right), \quad (2.25)$$

$$c_p \left[\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j T)}{\partial x_j} \right] = \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_T. \quad (2.26)$$

2.1.5 Equação do estado termodinâmico

Uma equação do estado fornece uma relação entre a pressão p , a temperatura T e a massa específica ρ da mistura. Para gases ideais, onde são negligenciados as forças intermoleculares e o volume das moléculas, a equação do estado termodinâmico é dada por

$$p = \rho R_M T, \quad (2.27)$$

com R_M definida por

$$R_M = \frac{\mathcal{R}}{W} = \mathcal{R} \sum_{l=1}^N \frac{Y_l}{W_l}, \quad (2.28)$$

sendo W o peso molecular da mistura, $\mathcal{R}$ a constante universal dos gases, Y_l a fração mássica e W_l o peso molecular de cada espécie química l .

Os produtos do processo de combustão, conforme Poinot e Veynante (2005), Turns (1996) e Kuo (2005), podem ser tratados como gases ideais já que as altas temperaturas associadas ao processo de combustão resultam em massas específicas suficientemente baixas.

Assim completa-se o modelo matemático, onde tem-se como incógnitas a massa específica ρ (equação (2.4)), as três componentes da velocidade $\mathbf{u}$ (equação (2.5)), as N espécies químicas Y (equação (2.14)), a temperatura (equação (2.23)) e a pressão (equação (2.27)). A próxima seção apresenta as equações adimensionalizadas para que se possa deduzir o modelo matemático com a hipótese de baixo número de Mach. Além disso, é descrito o modelo de reação química baseada no escalar conservado (denominado fração de mistura) que permite acoplar as equações das espécies químicas e da energia (escrita em termos da temperatura) em uma única equação.

2.1.6 Equações adimensionalizadas

Segundo Hou e Mahesh (2005), as equações adimensionais da conservação da massa (2.4), das espécies químicas (2.14), da quantidade de movimento (2.8), da temperatura (2.23) e do estado termodinâmico (2.27) são dadas por

$$\frac{\partial \rho^a}{\partial t^a} + \frac{\partial(\rho^a u_j^a)}{\partial x_j^a} = 0, \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial(\rho^a Y_l^a)}{\partial t^a} + \frac{\partial(\rho^a u_j^a Y_l^a)}{\partial x_j^a} = \frac{1}{Re} \frac{1}{Sc} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\rho^a D^a \frac{\partial Y_l^a}{\partial x_j^a} \right) + \dot{\omega}_l^a, \quad (2.30)$$

$$\rho^a \frac{Du_i^a}{Dt^a} = -\frac{\partial p^a}{\partial x_i^a} + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{ji}^a}{\partial x_j^a}, \quad (2.31)$$

$$\rho^a c_p^a \frac{DT^a}{Dt^a} = \frac{1}{Pr} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\kappa^a \frac{\partial T^a}{\partial x_j^a} \right) + (\gamma - 1)(Ma)^2 \frac{Dp^a}{Dt^a} + \dot{\omega}_T^a, \quad (2.32)$$

$$\frac{\rho^a T^a}{W^a} = 1 + \gamma(Ma)^2 p^a. \quad (2.33)$$

Nas equações (2.29)-(2.33), o caracter a indica uma quantidade adimensional. Os números

adimensionais que caracterizam o escoamento são o número de Mach (Ma), o número de Reynolds (Re), o número de Schmidt (Sc), e o número de Prandtl (Pr) respectivamente dados por

$$Ma = \frac{u^*}{c_s} = \frac{u^*}{\sqrt{\gamma \frac{p^*}{\rho^*}}}, \quad Re = \frac{\rho^* L u^*}{\mu^*}, \quad Sc = \frac{\mu^*}{\rho^* D^*}, \quad Pr = \frac{\mu^* c_p^*}{\kappa^*}, \quad (2.34)$$

sendo κ a condutividade térmica do escoamento, D o coeficiente de difusão de massa, c_s a velocidade do som. O valor L é o comprimento característico do escoamento, γ é a razão entre c_p (a capacidade de calor à pressão constante) e c_v (a capacidade de calor ao volume constante). O caracter * indica os valores característicos do escoamento. A Tabela 2.1 apresenta as unidades de medidas usualmente utilizadas em cada uma das propriedades do escoamento.

Tabela 2.1: Propriedades de referência do escoamento e suas unidades (SI).

Propriedade	Unidade	Propriedade	Unidade	Propriedade	Unidade
ρ^*	kg/m^3	u^*	m/s	L	m
D^*	m^2/s	μ^*	$N \times s/m^2$	c_p^*	$J/kg \ K$
κ^*	$J/s \times m \times K$	T^*	K	$\dot{\omega}_l^*$	$kg/s \times m^3$
p^*	N/m^2	Y_l	—		

As equações (2.29)-(2.33) são obtidas pela substituição das propriedades adimensionais dadas por

$$\rho^a = \frac{\rho}{\rho^*}, \quad u_i^a = \frac{u_i}{u^*}, \quad x_i^a = \frac{x_i}{L}, \quad t^a = u^* \frac{t}{L}, \quad \mu^a = \frac{\mu}{\mu^*}, \quad T^a = \frac{T}{T^*}, \quad p^a = \frac{p - p^*}{\rho^* u^* u^*}, \quad D^a = \frac{D}{D^*}, \quad (2.35)$$

nas equações de conservação (2.4), (2.8), (2.14), (2.23) e (2.27). Note que a escolha da pressão adimensionalizada altera as equações adimensionais para a equação da quantidade de movimento linear e da temperatura. Ao escolher $p^a = p/p^*$, obtêm-se

$$\rho^a \frac{Du_i^a}{Dt^a} = -\frac{1}{\gamma(Ma)^2} \frac{\partial p^a}{\partial x_i^a} + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{ji}^a}{\partial x_j^a}, \quad e \quad (2.36)$$

$$\rho^a c_p^a \frac{DT^a}{Dt^a} = \frac{1}{Pr} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\kappa^a \frac{\partial T^a}{\partial x_j^a} \right) + \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{Dp^a}{Dt} + \dot{\omega}_T^a. \quad (2.37)$$

Assim, obtêm-se as equações adimensionalizadas do modelo matemático. No Apêndice D, encontram-se os detalhes destas deduções.

2.2 Escoamentos reativos com baixo número de Mach

Os escoamentos reativos podem ser modelados por meio da formulações incompressível, baixo número de Mach e completamente compressível (veja Poinot e Veynante (2005)). Na primeira formulação (escoamento incompressível) a massa específica (ρ) é constante. Esta formulação é limitada pela ausência de modificações do escoamento devido a liberação de calor. Na formulação baixo número de Mach a massa específica varia em função da temperatura, mas permanece cons-

tante em relação ao campo de pressão. As *ondas acústicas* são eliminadas de forma que o tamanho do passo de integração temporal não seja tão restritivo, veja o Capítulo 3. Esta é uma formulação aceitável para escoamentos subsônicos (baixa velocidade do escoamento em relação à velocidade do som), não sendo possível estudar instabilidades da combustão, onde escoamento, acústica e reações químicas interagem.

No presente trabalho, serão considerados escoamentos reativos com baixo número de Mach, nos quais a massa específica pode mudar devido às variações da temperatura, mas independe da pressão. A formulação para escoamentos com baixo número de Mach adotada explora a separação das escalas de tempo em duas: a do movimento do escoamento e a das ondas acústicas. Essa formulação foi deduzida a partir da análise das expansões assintóticas das equações de Navier-Stokes, em relação ao número Mach feita por Majda e Sethian (1985) e Rehm e Baum (1978). A ideia é supor que as variáveis são funções do número de Mach. Assim sendo, tomam-se massa específica, campo de velocidade, temperatura e pressão dadas, respectivamente, por

$$\rho = \rho_0 + \rho_1 \sqrt{\gamma}(Ma) + \rho_2 \gamma (Ma)^2 + O((Ma)^3), \quad (2.38)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_1 \sqrt{\gamma}(Ma) + \mathbf{u}_2 \gamma (Ma)^2 + O((Ma)^3), \quad (2.39)$$

$$T = T_0 + T_1 \sqrt{\gamma}Ma + T_2 \gamma (Ma)^2 + O((Ma)^3), \quad (2.40)$$

$$p = p_0 + p_2 \gamma (Ma)^2 + O((Ma)^3), \quad (2.41)$$

e substitui-se nas equações adimensionalizadas (2.36) e (2.37). Na expansão (2.41), a pressão é escrita em função do número de Mach com base na equação do estado termodinâmico adimensional (2.33). Desta forma, obtém-se para a equação da quantidade de movimento linear

$$\begin{aligned} & \left[\rho_0 \left(\frac{\partial u_{i,0}}{\partial t} + u_{j,0} \frac{\partial u_{i,0}}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{\gamma(Ma)^2} \frac{\partial p_0}{\partial x_i} - \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{ji,0}}{\partial x_j} \right] + \\ & \left[\rho_1 \left(\frac{\partial u_{i,1}}{\partial t} + u_{j,1} \frac{\partial u_{i,1}}{\partial x_j} \right) - \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{ji,1}}{\partial x_j} \right] \sqrt{\gamma}Ma + \\ & \left[\rho_2 \left(\frac{\partial u_{i,2}}{\partial t} + u_{j,2} \frac{\partial u_{i,2}}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{\gamma(Ma)^2} \frac{\partial p_2}{\partial x_i} - \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{ji,2}}{\partial x_j} \right] \gamma(Ma)^2 = 0, \end{aligned} \quad (2.42)$$

onde $\tau_{ji,r}$ é dado por

$$\tau_{ji,r} = \mu \left(\frac{\partial u_{i,r}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{j,r}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_{k,r}}{\partial x_k} \right), \quad \text{para } 0 \leq r \leq 2. \quad (2.43)$$

Para a equação da conservação da energia em termos da temperatura tem-se

$$\begin{aligned} & \left[\rho_0 c_p \left(\frac{\partial T_0}{\partial t} + u_{j,0} \frac{\partial T_0}{\partial x_j} \right) - \frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{Dp_0}{Dt} + \frac{1}{PrRe} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\kappa \frac{\partial T_0}{\partial x_j} \right) - \dot{\omega}_T \right] + \\ & \left[\rho_1 c_p \left(\frac{\partial T_1}{\partial t} + u_{j,1} \frac{\partial T_1}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{PrRe} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\kappa \frac{\partial T_1}{\partial x_j} \right) \right] \sqrt{\gamma}Ma + \\ & \left[\rho_2 c_p \left(\frac{\partial T_2}{\partial t} + u_{j,2} \frac{\partial T_2}{\partial x_j} \right) - \frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{Dp_2}{Dt} + \frac{1}{PrRe} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\kappa \frac{\partial T_2}{\partial x_j} \right) \right] \gamma(Ma)^2 = 0. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Comparando, na equação (2.42) os termos Ma de mesma potência obtêm-se

$$\rho_0 \left(\frac{\partial u_{i,0}}{\partial t} + u_{j,0} \frac{\partial u_{i,0}}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial p_2}{\partial x_i} - \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{ij,0}}{\partial x_j} = 0, \quad e \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial p_0}{\partial x_i} = 0. \quad (2.46)$$

Como consequência de (2.46), tem-se que p_0 independe da posição, $p_0(\mathbf{x}, t) = p_0(t)$. Assim, a expansão (2.41) torna-se

$$p(\mathbf{x}, t) = p_0(t) + \gamma(Ma)^2 p_2(\mathbf{x}, t), \quad (2.47)$$

onde $p_0(t)$ é a componente termodinâmica da pressão e $p_2(\mathbf{x}, t)$ é a componente dinâmica da pressão. Comparando na equação (2.44) os termos Ma de mesma potência e desprezando-se os termos da ordem de Ma e $(Ma)^2$, obtêm-se,

$$\rho_0 c_p \left(\frac{\partial T_0}{\partial t} + u_{j,0} \frac{\partial T_0}{\partial x_j} \right) - \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{\partial p_0}{\partial t} - \frac{1}{Pr Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\kappa \frac{\partial T_0}{\partial x_i} \right) - \dot{\omega}_T = 0. \quad (2.48)$$

Desta maneira, as equações da conservação da massa, da quantidade de movimento, temperatura e estado termodinâmico, modificadas com a hipótese de escoamento com baixo número de Mach são

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0, \quad (2.49)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial p_2}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right], \quad (2.50)$$

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{\partial p_0}{\partial t} + \dot{\omega}_T, \quad (2.51)$$

$$p_0 = \frac{\rho T \mathcal{R}}{W}. \quad (2.52)$$

Assumindo-se que o escoamento ocorre em um ambiente aberto, a pressão termodinâmica p_0 é constante e a derivada da pressão em relação ao tempo na equação (2.51) desaparece. Para completar o modelo, a próxima seção apresenta o modelo químico utilizado no presente trabalho.

2.3 Modelo da reação química

As chamas de difusão constituem uma classe de problemas reativos onde combustível e oxidante não são misturados a nível molecular antes de entrarem na zona de reação. No presente trabalho, a reação química será considerada infinitamente rápida, estequiométrica e irreversível. Para descrever o processo de combustão com esta hipótese será necessário definir um escalar que representará uma quantidade conservada (veja Turns (1996)). Para tanto, considera-se a reação química que envolve somente as espécies químicas combustível (C), oxidante (O) e produto (P), descrita pela reação (lê-se combustível mais s vezes oxidante produz 1 mais s vezes produto)

sendo s a razão de massa estequiométrica entre as quantidades de oxidante e combustível dada por

$$s = \left(\frac{Y_O}{Y_C} \right)_{est}, \quad (2.54)$$

sendo Y_O a fração mássica do oxidante e Y_C a fração mássica do combustível. A fração mássica Y_l de cada espécie C , O e P é descrita pela equação

$$\frac{\partial \rho Y_l}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_l)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Y_l}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_l, \quad \text{para } l = C, O, P. \quad (2.55)$$

Como a reação química é estequiométrica, as espécies químicas reagentes, combustível e oxidante, são transformadas completamente e instantaneamente em produtos. Desta forma, a taxa de consumo do oxidante satisfaz

$$\dot{\omega}_O = s \dot{\omega}_C, \quad (2.56)$$

e a taxa de reação para a temperatura, segundo Poinot e Veynante (2005), é dada por

$$\dot{\omega}_T = -\Delta h_C^* \dot{\omega}_C, \quad (2.57)$$

onde Δh_C^* é a entalpia de formação da espécie química combustível.

Usando as equações (2.51) e (2.55) e as expressões (2.56) e (2.57), obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho Y_C}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_C)}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Y_C}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_C, \\ \frac{\partial \rho Y_O}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_O)}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Y_O}{\partial x_j} \right) + s \dot{\omega}_C, \\ \frac{\partial \rho T}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j T)}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\kappa}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - \frac{\Delta h_C^*}{c_p} \dot{\omega}_C. \end{aligned} \quad (2.58)$$

A fração mássica do produto da reação Y_P é obtido a partir da Lei de Conservação de Massa $\sum_l Y_l = 1$, ou seja,

$$Y_P = 1 - Y_O - Y_C. \quad (2.59)$$

Assumindo que o número de Lewis,

$$Le = \frac{\kappa}{\rho c_p D} = \frac{Sc}{Pr}, \quad (2.60)$$

é unitário, isto é, $\rho D = \frac{\kappa}{c_p}$, espécies químicas e temperatura difundem da mesma maneira. Combinando-se as equações descritas em (2.58) duas a duas, conforme Poinot e Veynante (2005), definem-se três quantidades escalares

$$Z_1 = s Y_C - Y_O, \quad Z_2 = \frac{c_p T}{\Delta h_C^*} + Y_C, \quad Z_3 = \frac{s c_p T}{\Delta h_C^*} + Y_O, \quad (2.61)$$

onde s é a razão estequiométrica entre as quantidades de oxidante e combustível. O escalar Z_1 é denominado fração de mistura. Não é difícil perceber que os três escalares Z_i , com $i = 1, 2, 3$,

satisfazem a equação de advecção-difusão sem termo fonte

$$\frac{\partial \rho Z_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j Z_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Z_i}{\partial x_j} \right), \quad \text{para } i = 1, 2, 3. \quad (2.62)$$

Em uma chama de difusão, combustível e oxidante entram separadamente na zona de reação (chama não pré-misturada, como mostra a Figura 1.1). Desta maneira, os escalares Z_i assumem dois valores na entrada da zona de reação: $Z_{i,C}$ na região da entrada do combustível e $Z_{i,O}$ na região da entrada do oxidante. Os escalares Z_i normalizados são definidos por

$$z_i = \frac{Z_i - Z_{i,O}}{Z_{i,C} - Z_{i,O}} \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \quad (2.63)$$

os quais continuam satisfazendo a equação (2.62) e possuem o mesmo valor na entrada da zona de reação, quando $Z_i = Z_{i,C}$ tem-se $z_i = 1$ (indicando a presença de combustível) e quando $Z_i = Z_{i,O}$ tem-se $z_i = 0$ (indicando a presença de oxidante). Assim, pode-se resolver a equação (2.62) para apenas uma das variáveis z_i , e esta nova variável escalar z é denominada *escalar conservado*. A introdução do escalar conservado z permite reduzir o número de variáveis do problema e divide o cálculo das espécies químicas e da temperatura em dois subproblemas:

1. determinar a mistura, onde a equação de advecção-difusão (2.62) é solucionada para se obter a variável $z(\mathbf{x}, t)$; e
2. determinar a estrutura da chama, onde as relações entre as frações mássicas $Y_i(z)$, a temperatura $T(z)$ e o escalar conservado z são utilizadas.

No presente trabalho, o segundo subproblema é resolvido por meio da estrutura de chama de Burke-Schumann, descrita por Poinot e Veynante (2005) e Kuo (2005), na qual assume-se que combustível e oxidante não coexistem. A estrutura de chama é definida da seguinte maneira:

se a mistura é *rica*, $z \geq z_{est}$ então

$$Y_C(z) = Y_C^* \frac{z - z_{est}}{1 - z_{est}}, \quad (2.64)$$

$$Y_O(z) = 0, \quad (2.65)$$

$$T(z) = zT_C^* + (1 - z)T_O^* + \frac{\Delta h_C^* Y_C^*}{c_p} z_{est} \frac{1 - z}{1 - z_{est}}, \quad (2.66)$$

e se a mistura é *pobre*, $z < z_{est}$ então

$$Y_C(z) = 0, \quad (2.67)$$

$$Y_O(z) = Y_O^* \left(1 - \frac{z}{z_{est}} \right), \quad (2.68)$$

$$T(z) = zT_C^* + (1 - z)T_O^* + \frac{\Delta h_C^* Y_C^*}{c_p} z, \quad (2.69)$$

onde Y_C^* e Y_O^* são, respectivamente, a fração mássica de combustível e de oxidante na entrada da zona de reação e T_O^* e T_C^* são, respectivamente, a temperatura do oxidante e do combustível na entrada da zona de reação.

A posição da chama ocorre onde as frações mássicas das espécies químicas reagentes Y_C e Y_O são nulas, isto é, combustível e oxidante tornaram-se produtos da reação. Neste local, z é igual ao seu valor estequiométrico z_{est} definido por

$$z_{est} = \frac{1}{1 + \Phi}, \quad \text{com } \Phi = s \frac{Y_C^*}{Y_O^*}, \quad (2.70)$$

onde Φ é chamada razão de equivalência. Além disso, quando $z = z_{est}$ na equação (2.64), a chama obtém temperatura máxima dada por

$$T = z_{est}T_C^* + (1 - z_{est})T_O^* + \frac{\Delta h_C^* Y_C^*}{c_p} z_{est} = \frac{1}{1 + \Phi} \left(T_C^* + T_O^* + \frac{\Delta h_C^*}{c_p} Y_C^* \right). \quad (2.71)$$

As espécies químicas reagentes podem estar acompanhadas por espécies químicas inertes, como o nitrogênio (N_2) que não fazem parte da reação química (veja Versteeg e Malalasekera (2007), Turns (1996), Kuo (2005) e Poinso e Veynante (2005)). A fração mássica da espécie inerte pode ser obtida a partir da relação

$$Y_I(z) = Y_{I,O}(1 - z) + Y_{I,C}z, \quad (2.72)$$

onde $Y_{I,O}$ é o valor da espécie química inerte na região da entrada do oxidante e $Y_{I,C}$ é o valor da espécie química inerte na região da entrada do combustível. Neste caso, a fração mássica dos produtos da combustão é obtida por meio da expressão

$$Y_P = 1 - Y_O - Y_C - Y_I. \quad (2.73)$$

Quando o produto da reação contém duas ou mais espécies, a razão entre a massa de cada componente e a massa total pode ser usada para aproximar a fração mássica dos diferentes componentes do produto da reação. Por exemplo, considere a reação química,

As razões entre as massas dos componentes e a massa total são, respectivamente,

$$r_{P1} = \frac{s/2}{1 + s} \quad \text{e} \quad r_{P2} = \frac{1 + s/2}{1 + s}. \quad (2.75)$$

Desta forma, tem-se

$$Y_{P1} = r_{P1}Y_P \quad \text{e} \quad Y_{P2} = r_{P2}Y_P. \quad (2.76)$$

2.4 Modelo matemático para a fase dispersa de um escoamento incompressível

No presente trabalho, a fase dispersa é descrita por *gotículas* inertes que não evaporam e as equações empregadas que a modelam são baseadas nas equações de seu movimento conforme García (2009), Sirignano (1999), Crowe *et al.* (1998), Turns (1996), Kuo (2005) e Apte *et al.* (2009).

Os escoamentos contendo uma fase dispersa são descritos por algumas propriedades, como por exemplo, a massa específica, a temperatura de cada gotícula, a velocidade e parâmetros associados ao acoplamento entre as fases, conforme Crowe *et al.* (1998). Esses escoamentos podem ser clas-

sificados em dois grupos: os escoamentos *densos* e os escoamentos *diluídos*. Segundo Crowe *et al.* (1998), em um escoamento denso o movimento de uma gotícula é controlado pelas colisões entre as gotículas, enquanto que em um escoamento diluído o movimento de uma gotícula é controlado pelas forças fluido-dinâmicas (arrasto e sustentação).

O *número de Stokes* St de um escoamento que contém gotículas determina o quanto a velocidade do escoamento influencia na velocidade das gotículas. O número de Stokes é a razão entre o *tempo de reação* da gotícula τ_p (o tempo que uma gotícula leva para responder a variações do escoamento) e o tempo característico do escoamento t^* , dado por

$$St = \frac{\tau_p}{t^*} = \tau_p \frac{\mathbf{u}^*}{L}, \quad (2.77)$$

onde $\mathbf{u}^*$ e L são, respectivamente, a velocidade e o comprimento característico do escoamento da fase contínua. Se $St \ll 1$ então o tempo de reação das gotículas às mudanças na velocidade do escoamento é muito menor que o tempo característico do escoamento. Neste caso, as gotículas têm tempo para responder às mudanças na velocidade do escoamento e as velocidades do escoamento e das gotículas serão aproximadamente iguais. Por outro lado, se $St \gg 1$, as gotículas não têm tempo para responder às mudanças na velocidade do escoamento e as velocidades das gotículas são pouco afetadas pela velocidade do escoamento.

No presente trabalho as seguintes hipóteses são assumidas: as gotículas são inertes e esféricas, a densidade da fase dispersa é muito maior que a densidade da fase contínua, as gotículas são tratadas isoladamente (uma gotícula não afeta as outras), a evaporação e os efeitos de deformação são desconsiderados e as gotículas são representadas por pontos no espaço.

2.4.1 Equações do movimento das gotículas

A dinâmica das gotículas é modelada empregando uma abordagem lagrangiana. As posições das gotículas são obtidas resolvendo a equação

$$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \mathbf{u}_p, \quad (2.78)$$

onde $\mathbf{x}_p = (x_{p,1}, x_{p,2}, x_{p,3})$ e $\mathbf{u}_p = (u_{p,1}, u_{p,2}, u_{p,3})$ são, respectivamente, a posição e a velocidade da gotícula p .

A equação que descreve a velocidade de cada gotícula p é obtida a partir da Segunda Lei de Newton,

$$\frac{d(m_p \mathbf{u}_p)}{dt} = \mathbf{F}_p, \quad (2.79)$$

onde m_p é a massa da gotícula p e $\mathbf{F}_p$ é a soma de todas as forças agindo sobre a gotícula p . No presente trabalho, assumir-se-á que as forças agindo sobre a gotícula são a força de arrasto $\mathbf{F}_{p,a}$, a força de empuxo $\mathbf{F}_{p,e}$ e a força gravitacional $\mathbf{F}_{p,g}$. Desta forma, tem-se que

$$\mathbf{F}_p = \mathbf{F}_{p,g} + \mathbf{F}_{p,e} + \mathbf{F}_{p,a}. \quad (2.80)$$

Sobre uma esfera, as forças descritas na expressão (2.80) são dadas, respectivamente, por

$$\mathbf{F}_{p,g} + \mathbf{F}_{p,e} = \frac{\pi d_p^3}{6} \mathbf{g}(\rho_d - \rho_c) \quad \text{e} \quad \mathbf{F}_{p,a} = \frac{\pi d_p^2}{8} C_a \rho_c |\mathbf{u}_{c,p} - \mathbf{u}_p|(\mathbf{u}_{c,p} - \mathbf{u}_p), \quad (2.81)$$

sendo $\mathbf{g}$ a aceleração da gravidade, ρ_d a massa específica da fase dispersa, d_p o diâmetro da gotícula p , ρ_c a massa específica da fase contínua, $\mathbf{u}_p$ a velocidade da gotícula p , $\mathbf{u}_{c,p}$ a velocidade da fase contínua na posição da gotícula p e C_a o coeficiente de arrasto que, segundo Bini e Jones (2009), é modelado por

$$C_a = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} \left(1 + \frac{Re_p^{\frac{2}{3}}}{6} \right), & 0 < Re_p < 1000, \\ 0.424, & Re_p \geq 1000. \end{cases} \quad (2.82)$$

Em (2.82), Re_p é o número de Reynolds da gotícula p , dado por

$$Re_p = \frac{d_p \rho_c |\mathbf{u}_{c,p} - \mathbf{u}_p|}{\mu_c}, \quad (2.83)$$

sendo μ_c a viscosidade dinâmica da fase contínua. Substituindo a resultante das forças agindo sobre a gotícula p em (2.79) obtém-se

$$\frac{d(m_p \mathbf{u}_p)}{dt} = \frac{\pi d_p^3}{6} \mathbf{g} (\rho_d - \rho_c) + C_a \frac{\pi d_p^2}{8} \rho_c |\mathbf{u}_{c,p} - \mathbf{u}_p| (\mathbf{u}_{c,p} - \mathbf{u}_p). \quad (2.84)$$

O lado esquerdo da equação (2.84) pode ser reescrito como

$$\frac{d(m_p \mathbf{u}_p)}{dt} = m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} + \mathbf{u}_p \frac{dm_p}{dt}. \quad (2.85)$$

O termo $\frac{dm_p}{dt}$ desaparece da equação (2.85) pois assumiu-se que as gotículas não evaporam. Substituindo (2.85) na equação (2.84) e dividindo-a pela massa da gotícula

$$m_p = \frac{\pi d_p^3 \rho_d}{6}, \quad (2.86)$$

obtém-se

$$\frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \frac{1}{\tau_p} (\mathbf{u}_{c,p} - \mathbf{u}_p) + \left(1 - \frac{\rho_c}{\rho_d} \right) \mathbf{g}, \quad (2.87)$$

onde τ_p é o tempo de reação da gotícula p , dado por

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{3C_a \rho_c}{4d_p \rho_d} |\mathbf{u}_{c,p} - \mathbf{u}_p|. \quad (2.88)$$

2.5 Acoplamento entre as fases

Um aspecto importante na análise de escoamentos bifásicos é o modo como o acoplamento entre as fases é descrito. Se o escoamento de uma fase afeta o outro sem haver o efeito inverso, então o escoamento é acoplado em um sentido apenas. Se existe efeito mútuo então o acoplamento é nos dois sentidos. No presente trabalho, em um escoamento incompressível contendo gotícula inertes, é considerado o acoplamento da quantidade de movimento nos dois sentidos. O acoplamento no sentido da fase contínua para a fase dispersa é feito por meio dos termos indicados com o índice (c, p) , descritos na Seção 2.4.1. O acoplamento no sentido da fase dispersa para a fase contínua é feito por meio do acréscimo de um termo fonte, oriundo das propriedades da fase dispersa, na

equação da quantidade de movimento linear (2.8). Desta forma, tem-se que

$$S_{u_i} = -\frac{1}{V} \sum_{p=1}^{n_p} m_p \frac{du_{p,i}}{dt}, \quad (2.89)$$

onde n_p é o número de gotículas em um volume V e S_{u_i} , com $i = 1, 2, 3$, são os termos fontes associados às equações da quantidade de movimento linear (2.8).

2.6 Sumário dos modelos matemáticos

Esta seção apresenta três modelos matemáticos que serão utilizados no presente trabalho. A Seção 2.6.1 apresenta o modelo para um escoamento incompressível (Nós (2007), Roma *et al.* (1999), Ceniceros *et al.* (2010b)). A Seção 2.6.2 apresenta o modelo para um escoamento incompressível (não-reativo) com gotículas inertes que não evaporam (veja a Seção 2.4). A Seção 2.6.3 apresenta o modelo para um escoamento reativo com baixo número de Mach.

2.6.1 Modelo matemático para um escoamento incompressível (não-reativo)

O modelo matemático para um escoamento incompressível (não-reativo) usado neste trabalho é dado pelas equações

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (2.90)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right], \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \quad (2.91)$$

onde ρ é a massa específica (constante), $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ é o campo de velocidade do escoamento, p é a pressão e μ é a viscosidade do escoamento (constante). Para o caso turbulento μ inclui a viscosidade turbulenta, veja o Apêndice A. As equações (2.90)-(2.91) possuem no total quatro variáveis, a pressão p e as três componentes do campo de velocidade $\mathbf{u}$ para um total de quatro equações.

2.6.2 Modelo matemático para um escoamento incompressível (não-reativo) com gotículas inertes

O modelo matemático para um escoamento incompressível (não-reativo) com gotículas inertes, usado neste trabalho é dado pelas equações que descrevem o escoamento incompressível na fase contínua e pelas equações que descrevem o movimento das gotículas. O modelo usado para a fase contínua é dado por

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (2.92)$$

$$\rho_c \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + S_{u_i}, \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \quad (2.93)$$

onde ρ_c é a massa específica (constante) da fase contínua, $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ é a velocidade do escoamento, p é a pressão e μ é a viscosidade do escoamento (constante). Para o caso turbulento μ

inclui a viscosidade turbulenta, veja o Apêndice A. O termo fonte S_{u_i} representa um dos sentidos do acoplamento entre as fases contínua e dispersa dado pela expressão (2.89). O modelo usado para a fase dispersa é dado por

$$\frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \frac{1}{\tau_p}(\mathbf{u}_{c,p} - \mathbf{u}_p) + \left(1 - \frac{\rho_c}{\rho_d}\right) \mathbf{g}, \quad (2.94)$$

$$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \mathbf{u}_p, \quad \text{para } p = 1, 2, \dots, N_p, \quad (2.95)$$

onde $\mathbf{u}_p = (u_{p,1}, u_{p,2}, u_{p,3})$ e $\mathbf{x}_p = (x_{p,1}, x_{p,2}, x_{p,3})$ são, respectivamente, a velocidade e a posição da gotícula p , ρ_d é a massa específica da fase dispersa, $\mathbf{u}_{c,p} = (u_{c,p,1}, u_{c,p,2}, u_{c,p,3})$ é a velocidade da fase contínua na posição da gotícula p , $\mathbf{g}$ é a aceleração gravitacional, τ_p é o tempo de reação da gotícula p devido às variações da quantidade de movimento do escoamento dado pela expressão (2.88) e N_p o número de gotículas presentes no escoamento. As equações (2.92)-(2.93) possuem no total quatro variáveis, a pressão p e as três componentes do campo de velocidade $\mathbf{u}$ para um total de quatro equações. Já as equações (2.94)-(2.95) possuem no total $6N_p$ variáveis, as posições (três coordenadas) e as velocidades (três componentes) de N_p gotículas, para um total de $6N_p$ equações.

2.6.3 Modelo matemático para um escoamento reativo com baixo número de Mach

O modelo matemático para um escoamento reativo com baixo número de Mach usado no presente trabalho é dado pelas equações

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0, \quad (2.96)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p_2}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right], \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \quad (2.97)$$

$$\frac{\partial(\rho z)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i z)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x_i} \right), \quad (2.98)$$

$$p_0 = \frac{\rho T \mathcal{R}}{W}, \quad (2.99)$$

onde ρ é a massa específica, $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ é o campo de velocidade do escoamento, p_2 é a pressão dinâmica, z é o escalar conservado, p_0 é a pressão termodinâmica (pressão ambiente constante), T é a temperatura, $\mathcal{R}$ é constante universal dos gases, W é o peso molecular da mistura e μ é a viscosidade do escoamento (constante). Para o caso turbulento μ inclui a viscosidade turbulenta, veja o Apêndice A. As equações (2.96)-(2.99) possuem no total seis variáveis, a massa específica ρ , a pressão p_2 , as três componentes do campo de velocidade $\mathbf{u}$ e o escalar conservado z , para um total de seis equações. A temperatura T e as espécies químicas Y_C , Y_O e Y_P são obtidas por meio das expressões (2.64)-(2.69).

Nos próximos capítulos são apresentadas a metodologia numérica proposta, uma técnica de refinamento adaptativo de malhas para a resolução destes problemas, a verificação numérica e os resultados numéricos obtidos.

2.7 Nomenclatura do presente capítulo

c_p	Calor específico à pressão constante ($J/Kg \times K$ ou $J/Kmol \times K$)
c_s	Velocidade do som (m/s)
c_v	Calor específico ao volume constante ($J/Kg \times K$ ou $J/Kmol \times K$)
C	Espécie química combustível
C_a	Coeficiente de arrasto
C_S	Constante de Smagorinsky
d_p	Diâmetro da gotícula p (m)
D	Coeficiente de difusão de massa (m^2/s)
e_t	Energia total (J ou J/kg)
f	Forças externas (N)
g	Aceleração gravitacional (m/s^2)
h	Entalpia absoluta (J/K)
h_s	Entalpia sensível (J/K)
h_t	Entalpia total absoluta (J/K)
I	Espécie química inerte
$\dot{m}$	Fluxo de massa (kg/s)
m	Massa (kg)
N	Número de espécies químicas
n_p	Número de gotículas
O	Espécie química oxidante
p	Pressão (atm)
p_0	Pressão termodinâmica (atm)
p_2	Pressão dinâmica (atm)
P	Espécie química produto
$\dot{q}$	Fluxo de calor (W/kg)
$\dot{Q}$	Taxa de transferência de calor (por radiação) (W/kg)
r_p	Raio da gotícula (m)
$\mathcal{R}$	Constante universal dos gases ($J/Kmol \times K$)
R_M	Parâmetro da equação do estado termodinâmico ($J/kg \times K$)
s	Razão estequiométrica entre a fração mássica de oxidante e combustível
$\mathcal{S}$	Tensor taxa de deformação <i>filtrado</i>
t	Tempo (s)
T	Temperatura (K)
u	Velocidade do escoamento (m/s)
$\mathbf{v}^d$	Velocidade de difusão das espécies (m/s)
V	Volume (m^3)
W	Peso molecular ($kg/Kmol$)
$\mathbf{x}_p$	Posição de uma gotícula (m)
Y	Fração mássica de uma espécie química
z	Escalar conservado normalizado
Z	Escalar conservado

Letras Gregas

δ_{ij}	Delta de Kronecker
Δ	Tamanho do <i>filtro</i>
Δh	Entalpia de formação (J/Kg ou $J/Kmol$)
Φ	Razão de equivalência
γ	Razão entre c_p e c_v
κ	Condutividade térmica ($kg/m \times s$)
μ	Viscosidade dinâmica ($N \times s/m^2$)
μ_t	Viscosidade turbulenta ($N \times s/m^2$)
ρ	Massa específica, densidade (kg/m^3)
τ_{ji}	Tensor de tensões viscosas (N/m^2)
τ_p	Tempo de reação de uma gotícula (s)
$\dot{\omega}$	Taxa de produção/consumo das espécies ($kg/s \times m^3$)
$\dot{\omega}_T$	Calor liberado devido às reações químicas (W/m^3)

Adimensionais

Ma	Número de Mach	Le	Número de Lewis
Pr	Número de Prandtl	Re	Número de Reynolds
Sc	Número de Schimdt	St	Número de Stokes

Índices

a	Adimensional	c	Fase contínua
d	Fase dispersa	i, j, k	Notação indicial
l	Espécie química	p	Gotícula
est	Valores estequiométricos	$*$	Valores característicos
$\star$	Valores na entrada da zona de reação	C	Espécie química combustível
O	Espécie química oxidante	P	Espécie química produto

Operadores

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \quad \text{Derivada total}$$

Tabela de Conversões

$$W - J/s \quad J - kg/m^2 \times s^2 \quad J - Nm \quad N - Pa \times m^2$$

Capítulo 3

Metodologia numérica

Neste capítulo são apresentadas as metodologias que serão aplicadas para obter as soluções numéricas dos modelos apresentados no capítulo anterior. As fases do escoamento são aproximadas por um método *Euleriano-Lagrangiano*. A fase contínua é aproximada na forma euleriana, ou seja, por meio das equações que descrevem um escoamento reativo com baixo número de Mach discretizadas em uma malha Cartesiana bloco-estruturada. A fase dispersa é aproximada na forma lagrangiana, onde as propriedades de cada gotícula (posição, velocidade e diâmetro) são calculadas em termos da sua trajetória. Para a discretização temporal da fase contínua são utilizados esquemas *Implícitos-Explícitos*, (IMEX), de segunda ordem, descritos por Ascher *et al.* (1995) e Wang e Ruuth (2008). Para a fase dispersa, é utilizado o método de Euler Modificado que também possui segunda ordem de aproximação. Uma versão da extensão do método da projeção, proposto por Pember *et al.* (1998), é utilizado para desacoplar a pressão na equação da quantidade do movimento linear. Este método é baseado no método da Projeção de Chorin (1968) e Temam (1968). Para o acoplamento entre as fases contínua e dispersa é utilizada a *função Delta de Dirac* (veja Griffith (2005) e Roma (1996)). A discretização espacial é feita por meio do esquema de diferenças finitas de segunda ordem (veja Strikwerda (2004)). As soluções dos sistemas lineares originados das discretizações temporal e espacial é aproximada por meio do método *Multigrid* conforme Roma (1996) e Nós (2007), para mais detalhes veja Briggs e McCormick (2000) e Trottenberg *et al.* (2001).

O capítulo é dividido em três seções. A Seção 3.1 apresenta o método da projeção de Chorin-Teman e uma versão da extensão do método da projeção para escoamento reativos com baixo número de Mach. A Seção 3.2 apresenta a metodologia numérica utilizada para aproximar a fase contínua do escoamento. Esta metodologia inclui: a discretização temporal da fase contínua, a discretização espacial e o método *Multigrid* para a solução dos sistemas lineares. A Seção 3.3 apresenta a metodologia numérica para a fase dispersa, a qual inclui a discretização temporal e os operadores de interpolação e *espalhamento*, responsáveis pela troca de informações entre as fases.

3.1 Método da Projeção

A solução numérica das equações que modelam um escoamento reativo com baixo número de Mach são calculadas por meio de uma versão estendida de um método da projeção (veja Pember *et al.* (1998)), o qual é uma variação do método da Projeção de Chorin-Temam para um escoamento incompressível (veja Roma (1996), Griffith (2005), Nós (2007) e Cenicerós *et al.*

(2010b)).

O objetivo do método da projeção é desacoplar, na equação da quantidade de movimento linear (2.5), os cálculos do campo de velocidade e da pressão. Em trabalhos independentes, Chorin (1968) e Temam (1968) constataram que para escoamentos incompressíveis a pressão não possui significado termodinâmico, mas força a condição de incompressibilidade.

O método da projeção pode ser resumido em dois passos:

1. Determinar uma aproximação para um campo de velocidade auxiliar $\mathbf{u}^*$ solucionando um problema parabólico.
2. Resolver uma equação elíptica para garantir a condição de incompressibilidade e obter uma correção usada para determinar a pressão e corrigir o campo de velocidade $\mathbf{u}$.

O método da projeção é um método de passo fracionado, diferindo dos demais métodos na maneira de avançar o campo de velocidade auxiliar e corrigir a pressão, conforme apresentam Chorin (1968), Kim e Moin (1985), Roma (1996), Bell *et al.* (1989) e Griffith (2005). Alguns métodos de passo fracionado resolvem a pressão diretamente na equação elíptica, como descreve Ferziger e Perić (1999).

O método da Projeção de Chorin-Temam para escoamentos incompressíveis é baseado no *Teorema da Decomposição de Helmholtz-Hodge* descrito pelo Teorema 1.

Teorema 1 *Seja Ω uma região no espaço (ou no plano) com fronteira $\partial\Omega$ suave. Um campo vetorial $\mathbf{w}$ em Ω pode ser decomposto de maneira única como*

$$\mathbf{w} = \mathbf{u}_d + \nabla\phi, \quad (3.1)$$

onde $\nabla \cdot \mathbf{u}_d = 0$, ϕ é uma propriedade escalar e $\mathbf{u}_d$ satisfaz $\mathbf{u}_d \cdot \mathbf{n} = 0$ em $\partial\Omega$.

Para a demonstração do Teorema 1 veja Chorin e Marsden (1993).

A decomposição descrita na expressão (3.1) pode ser vista como a projeção do campo vetorial no espaço dos campos vetoriais com divergente nulo. Desta forma, o campo de velocidade auxiliar obtido no passo 1 é projetado no espaço dos campos vetoriais com divergente nulo. A transformação que leva o campo de velocidade auxiliar no espaço dos campos vetoriais com divergente nulo é o operador de projeção $\mathcal{P}$ dado por

$$\mathcal{P} = \mathcal{I} - \frac{1}{\rho} \nabla \left\{ \left[\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla \right) \right]^{-1} \right\} \nabla \cdot. \quad (3.2)$$

Desta maneira, a decomposição do campo de velocidade auxiliar é dada por

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla\phi, \quad (3.3)$$

sendo ϕ uma correção para o campo de velocidade $\mathbf{u}$ e para a pressão p . Para determinar a correção ϕ , aplica-se o operador $\nabla \cdot$ na equação (3.3) obtendo-se

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla\phi \right) = \nabla \cdot \mathbf{u}^*, \quad (3.4)$$

pois $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$.

3.1.1 Extensão do método da projeção para escoamentos reativos com baixo número de Mach

A extensão do método da projeção para escoamentos reativos com baixo número de Mach (Pember *et al.* (1998)) é baseada na expansão das equações de Navier-Stokes em relação ao número de Mach proposta por Majda e Sethian (1985) e Rehm e Baum (1978). Segundo Pember *et al.* (1998) a hipótese do modelo para baixo número de Mach assegura que para um escoamento em um domínio espacial aberto com o número de Mach suficientemente pequeno ($Ma < 0.3$), a pressão p pode ser decomposta como uma soma

$$p(\mathbf{x}, t) = p_0 + p_2(\mathbf{x}, t), \quad (3.5)$$

onde $\frac{p_2(\mathbf{x}, t)}{p_0} = O((Ma)^2)$, p_0 é a pressão termodinâmica constante e p_2 é a pressão dinâmica. Todas as propriedades termodinâmicas são independentes de p_2 (veja a Seção 2.2).

Os escoamentos reativos com baixo número de Mach incluem variações de densidade de amplitude finita, e a restrição no divergente do campo de velocidade não é homogênea, como o é para escoamentos incompressíveis. A extensão da metodologia para escoamentos reativos com baixo número de Mach também se baseia no Teorema 1 e mantém o mesmo operador de projeção definido pela expressão (3.2). A diferença entre o método da projeção e a sua extensão para escoamentos reativos com baixo número de Mach está na maneira de decompor o campo de velocidade auxiliar. Define-se $\nabla \cdot \nabla \xi = S$, sendo $S = \nabla \cdot \mathbf{u}$ e decompõe-se o campo de velocidade auxiliar da seguinte maneira

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}_d + \nabla \xi + \frac{1}{\rho} \nabla \phi, \quad (3.6)$$

sendo $\nabla \cdot \mathbf{u}_d = 0$, $\nabla \cdot \mathbf{u}^* \neq 0$, ϕ e ξ variáveis escalares. Desta forma, projetando-se o campo vetorial $\mathbf{u}^* - \nabla \xi$ no espaço vetorial dos campos com divergente nulo, pode-se escrever o campo de velocidade como segue

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_d + \nabla \xi. \quad (3.7)$$

Aplicando-se o operador $\nabla \cdot$ na equação (3.7) verifica-se a condição $\nabla \cdot \mathbf{u} = S$. A expressão para o termo S é obtida por intermédio da equação da conservação da massa,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(u_j \rho)}{\partial x_j} = 0, \quad (3.8)$$

e da equação do estado termodinâmico

$$p_0 = \frac{\rho \mathcal{R} T}{W}. \quad (3.9)$$

Derivando-se a equação (3.9) em relação ao tempo obtém-se

$$\frac{Dp_0}{Dt} = \frac{T\mathcal{R}}{W} \frac{D\rho}{Dt} + \frac{\rho\mathcal{R}}{W} \frac{DT}{Dt} + T\rho\mathcal{R} \sum_l \frac{1}{W_l} \frac{DY_l}{Dt}, \quad \text{para } l = C, O, P. \quad (3.10)$$

onde p_0 é a pressão termodinâmica, T é a temperatura, W é o peso molecular da mistura, ρ é a

massa específica da mistura, Y_l e W_l , são respectivamente, a fração mássica e o peso molecular da espécie química l . Como p_0 é contante e substituindo-se a equação da conservação da massa,

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (3.11)$$

na expressão (3.10) obtém-se

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{T} \frac{DT}{Dt} + W \sum_l \frac{1}{W_l} \frac{DY_l}{Dt}, \quad \text{para } l = C, O, P. \quad (3.12)$$

Assim, a restrição para o divergente da velocidade para um escoamento reativo com baixo número de Mach é dada pela expressão

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + W \sum_l \left[\frac{1}{W_l} \left(\frac{\partial Y_l}{\partial t} + u_j \frac{\partial Y_l}{\partial x_j} \right) \right] \\ &= \frac{1}{\rho T} \left(\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j T)}{\partial x_j} \right) + \frac{W}{\rho} \sum_l \left[\frac{1}{W_l} \left(\frac{\partial(\rho Y_l)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_l)}{\partial x_j} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.13)$$

para $l = C, O, P$.

A equação para a correção ϕ é obtida ao aplicar o operador $\nabla \cdot$ na expressão (3.6), obtendo-se

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla \phi \right) = \nabla \cdot \mathbf{u}^* - S, \quad (3.14)$$

pois $\nabla \cdot \mathbf{u}_d = 0$ e $\nabla \cdot \nabla \xi = S$, note que $\nabla \cdot = \frac{\partial}{\partial x_j}$.

3.2 Solução das equações que modelam a fase contínua

3.2.1 Discretização temporal

Considere a equação

$$\frac{\partial u(t)}{\partial t} = g(u(t)) + f(u(t)), \quad (3.15)$$

onde $g(u(t))$ representa o termo advectivo e $f(u(t))$ o termo difusivo. Wang e Ruuth (2008) e Ascher *et al.* (1995) propõe esquemas temporais denominados IMEX (métodos Implícitos-Explícitos) pois tratam explicitamente o termo advectivo e implicitamente o termo difusivo. O tratamento explícito do termo advectivo evita a resolução de um sistema não linear e o tratamento implícito do termo difusivo evita a escolha de um tamanho de passo Δt muito restritivo (da ordem de $(\Delta x)^2$, onde $\Delta x = \min\{\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3\}$ e Δx_i é o espaçamento na direção x_i , com $i = 1, 2, 3$).

Os métodos IMEX são obtidos por meio de uma expansão em série de Taylor da equação (3.15). No trabalho de Wang e Ruuth (2008) é apresentada uma forma geral de um método de s passos, para a qual os autores mostram que com um tamanho de passo Δt variável, o método possui ordem de aproximação s . No presente trabalho, serão apresentados os esquemas IMEX de dois passos. Considere três instantes de tempo t^{n-1} , t^n e t^{n+1} , de forma que o tamanho do passo seja $\Delta t^n = t^n - t^{n-1}$ e $\Delta t^{n+1} = t^{n+1} - t^n$. A forma geral dos esquemas de dois passos com um tamanho

de passo de integração variável é dada pela expressão

$$\frac{\alpha_2 u^{n+1} + \alpha_1 u^n + \alpha_0 u^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} = \theta_2 f(u)^{n+1} + \theta_1 f(u)^n + \theta_0 f(u)^{n-1} + \beta_1 g(u)^n + \beta_0 g(u)^{n-1}, \quad (3.16)$$

onde u^n é uma aproximação para $u(t^n)$ e α_i , β_i e θ_i são parâmetros que dependem de Δt^{n+1} e Δt^n , com $\alpha_2 \neq 0$ e $\theta_2 \neq 0$. A apresentação paramétrica dos esquemas IMEX em função de α_i , β_i e θ_i facilita a escolha de diferentes métodos. Para os esquemas de dois passos é possível escolher entre os métodos Cranck-Nicolson Adams-Bashforth (CNAB), Cranck-Nicolson Adams-Bashforth Modificado (MCNAB), Gear extrapolado e Cranck-Nicolson *Leap-Frog* (CNLF). Os parâmetros α_i , β_i e θ_i são dados, respectivamente, por

$$\alpha_2 = \frac{\Delta t^n + 2\gamma\Delta t^{n+1}}{\Delta t^n + \Delta t^{n+1}}, \quad \alpha_1 = \frac{\Delta t^{n+1} - \Delta t^n - 2\gamma\Delta t^{n+1}}{\Delta t^n}, \quad \alpha_0 = -\alpha_2 - \alpha_1, \quad (3.17)$$

$$\beta_1 = \frac{\Delta t^n + \gamma\Delta t^{n+1}}{\Delta t^n}, \quad \beta_0 = -\frac{\gamma\Delta t^{n+1}}{\Delta t^n}, \quad (3.18)$$

$$\theta_2 = \gamma + c \frac{\Delta t^{n+1}}{\Delta t^n + \Delta t^{n+1}}, \quad \theta_1 = 1 - \gamma - c \frac{\Delta t^{n+1}}{\Delta t^n}, \quad \text{e} \quad \theta_0 = c \left(\frac{\Delta t^{n+1}}{\Delta t^n} - \frac{\Delta t^{n+1}}{\Delta t^n + \Delta t^{n+1}} \right), \quad (3.19)$$

onde c e γ são parâmetros que definem o método escolhido. Nas expressões (3.17)-(3.19), os esquemas CNAB, MCNAB, Gear e CNLF são obtidos com as seguintes escolhas para o par de parâmetros (c, γ) , respectivamente, $\left(0, \frac{1}{2}\right)$, $\left(\frac{1}{8}, \frac{1}{2}\right)$, $(0, 1)$ e $(1, 0)$. Os esquemas temporais IMEX de dois passos precisam de um esquema temporal de um passo para aproximar o primeiro passo de integração. A forma geral dos esquemas IMEX de um passo é dada pela expressão,

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t^{n+1}} = (1 - \theta)f(u)^n + \theta f(u)^{n+1} + g(u)^n. \quad (3.20)$$

Na expressão (3.20), é possível escolher entre os métodos Cranck-Nicolson com $\theta = \frac{1}{2}$ e Euler semi-implícito com $\theta = 1$.

3.2.2 Estratégia semi-implícita

Na equação da quantidade de movimento linear (2.5), Nós (2007) utilizou a estratégia semi-implícita proposta por Gottlieb e Orszag (1993) e Douglas e Dupont (1971) para tratar a não linearidade do termo difusivo. A ideia funciona bem para equações predominantemente difusivas, porém é menos eficiente para problemas dispersivos, conforme descreve Nós (2007).

A ideia é reescrever a equação da quantidade de movimento como

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p_2}{\partial x_i} + \tilde{g}_i, \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \quad (3.21)$$

sendo $\lambda = c_1 |\mu|_{\max}$, com $c_1 > 0$ (para mais detalhes veja Nós (2007), Gottlieb e Orszag (1993) e Douglas e Dupont (1971)), ρ a massa específica da mistura, $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ o campo de velocidade do escoamento e p_2 a pressão dinâmica. O termo $\tilde{g}_i$ é dado por

$$\tilde{g}_i = \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] - \lambda \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + F_i \right\} - \rho \left(u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right), \quad (3.22)$$

sendo μ a viscosidade dinâmica mais a viscosidade turbulenta e F_i o termo que contém as forças que agem sobre o sistema.

Assim a aproximação temporal para as equações (3.21) são dadas por

$$\frac{\alpha_2 u_i^{n+1} + \alpha_1 u_i^n + \alpha_0 u_i^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} = \theta_2 \tilde{f}_i^{n+1} + \theta_1 \tilde{f}_i^n + \theta_0 \tilde{f}_i^{n-1} + \beta_1 \tilde{g}_i^n + \beta_0 \tilde{g}_i^{n-1}, \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \quad (3.23)$$

sendo $\tilde{g}_i$ dado pela expressão (3.22) e $\tilde{f}_i$ dado por

$$\tilde{f}_i = \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p_2}{\partial x_i}. \quad (3.24)$$

Para a equação do transporte do escalar conservado (2.62), também foi utilizada a estratégia semi-implícita descrita para a equação da quantidade de movimento. Assim a aproximação temporal para a equação do escalar conservado (fração de mistura) via método IMEX é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_2 (\rho z)^{n+1} + \alpha_1 (\rho z)^n + \alpha_0 (\rho z)^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} &= \theta_2 \left(\tilde{D} \frac{\partial^2 z}{\partial x_j^2} \right)^{n+1} + \theta_1 \left(\tilde{D} \frac{\partial^2 z}{\partial x_j^2} \right)^n + \theta_0 \left(\tilde{D} \frac{\partial^2 z}{\partial x_j^2} \right)^{n-1} + \\ &+ \beta_1 \tilde{g}_0^n + \beta_0 \tilde{g}_0^{n-1}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

sendo $\tilde{g}_0$ e $\tilde{D}$, respectivamente,

$$\tilde{g}_0 = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial \rho u_j z}{\partial x_j} - \tilde{D} \frac{\partial^2 z}{\partial x_j^2}, \quad \text{e} \quad \tilde{D} = c_1 |\rho D|_{\max}, \quad \text{com } c_1 > 0. \quad (3.26)$$

A condição de estabilidade dos esquemas numéricos IMEX para a fase contínua é dada pela condição de estabilidade CFL, descrita por Strikwerda (2004), dada por

$$\Delta t_c = C \min \left(\frac{\Delta x_1}{|u_1|_{\max}}, \frac{\Delta x_2}{|u_2|_{\max}}, \frac{\Delta x_3}{|u_3|_{\max}} \right), \quad \text{com } 0 < C < 1, \quad (3.27)$$

já que os termos difusivos nas equações (3.23) e (3.25) são tratados implicitamente.

3.2.3 Discretização do domínio computacional

As equações discretas para a fase contínua definidas em um domínio *físico* $\Omega = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times [a_3, b_3]$, são aproximadas em uma malha computacional bloco-estruturada refinada localmente que cobre Ω . Nesta seção são apresentados os elementos de uma malha Cartesiana estruturada uniforme. No Capítulo 4 são descritas as propriedades de uma malha bloco-estruturada com refinamento adaptativo.

Uma célula computacional do domínio Ω corresponde a um paralelepípedo de dimensões Δx_1 , Δx_2 e Δx_3 , com

$$\Delta x_1 = \frac{b_1 - a_1}{n_1}, \quad \Delta x_2 = \frac{b_2 - a_2}{n_2}, \quad \Delta x_3 = \frac{b_3 - a_3}{n_3}, \quad (3.28)$$

e n_i , com $i = 1, 2, 3$ é o número de partições em cada uma direções. A posição do centro de cada

célula computacional é dada por

$$\mathbf{x}_{ijk} = (x_{1,i}, x_{2,j}, x_{3,k}) = \left(a_1 + \left(i - \frac{1}{2} \right) \Delta x_1, a_2 + \left(j - \frac{1}{2} \right) \Delta x_2, a_3 + \left(k - \frac{1}{2} \right) \Delta x_3 \right), \quad (3.29)$$

para $1 \leq i \leq n_1$, $1 \leq j \leq n_2$ e $1 \leq k \leq n_3$.

Dado que o domínio computacional está coberto por células computacionais, é necessário definir em qual posição da célula serão aproximados os valores de cada variável tratada. No presente trabalho é utilizado o modelo MAC (*marker and cell*): a aproximação de grandezas vetoriais é feita nas faces de cada célula computacional da malha Cartesiana e a aproximação das variáveis escalares é feita no centro de cada célula computacional, como mostra a Figura 3.1.

Figura 3.1: Localização das variáveis escalares e vetoriais discretizadas em uma célula computacional. (a) Variáveis escalares no centro de uma célula computacional. (b) Componente da velocidade na direção x_1 no centro da face x_2x_3 . (c) Componente da velocidade na direção x_2 no centro da face x_1x_3 . (d) Componente da velocidade na direção x_3 no centro da face x_1x_2 .

As variáveis escalares localizadas no centro de cada célula computacional são denotadas por ϕ_{ijk} , enquanto que as componentes do campo de velocidade $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$, localizadas nas faces de cada célula computacional são denotadas por

$$\mathbf{u}_{ijk} = \left(u_{1,i-\frac{1}{2}jk}, u_{2,ij-\frac{1}{2}k}, u_{3,ijk-\frac{1}{2}} \right). \quad (3.30)$$

3.2.4 Discretização espacial

As equações que descrevem a fase contínua são aproximadas por diferenças finitas de segunda ordem, em uma malha Cartesiana deslocada, adaptativa e bloco-estruturada. A malha Cartesiana refinada localmente e a estratégia do refinamento adaptativo serão descritas no Capítulo 4. Na malha Cartesiana deslocada, veja Fortuna (2000) e Trottenberg *et al.* (2001), são introduzidos os operadores de interpolação e de diferenças finitas para as aproximações dos operadores diferenciais espaciais.

Desta forma, os operadores diferenciais discretos: gradiente ($\mathbf{G}$), divergente ($\mathbf{D}$) e laplaciano ($\mathbf{L}$) são definidos, respectivamente, pelas expressões

$$(\mathbf{G}\phi)_{ijk} = ((\mathbf{D}_1\phi)_{i-\frac{1}{2}jk}, (\mathbf{D}_2\phi)_{ij-\frac{1}{2}k}, (\mathbf{D}_3\phi)_{ijk-\frac{1}{2}}), \quad (3.31)$$

$$(\mathbf{D} \cdot \mathbf{u})_{ijk} = \frac{u_{1,i+\frac{1}{2}jk} - u_{1,i-\frac{1}{2}jk}}{\Delta x_1} + \frac{u_{2,ij+\frac{1}{2}k} - u_{2,ij-\frac{1}{2}k}}{\Delta x_2} + \frac{u_{3,ijk+\frac{1}{2}} - u_{3,ijk-\frac{1}{2}}}{\Delta x_3}, \quad (3.32)$$

$$(\mathbf{L}\phi)_{ijk} = \frac{\phi_{i+1jk} - 2\phi_{ijk} + \phi_{i-1jk}}{\Delta x_1^2} + \frac{\phi_{ij+1k} - 2\phi_{ijk} + \phi_{ij-1k}}{\Delta x_2^2} + \frac{\phi_{ijk+1} - 2\phi_{ijk} + \phi_{ijk-1}}{\Delta x_3^2}, \quad (3.33)$$

onde $\mathbf{D}_1$, $\mathbf{D}_2$ e $\mathbf{D}_3$ são dados por

$$(\mathbf{D}_1\phi)_{i-\frac{1}{2}jk} = \frac{\phi_{ijk} - \phi_{i-1jk}}{\Delta x_1}, \quad (3.34)$$

$$(\mathbf{D}_2\phi)_{ij-\frac{1}{2}k} = \frac{\phi_{ijk} - \phi_{ij-1k}}{\Delta x_2} \quad \text{e} \quad (3.35)$$

$$(\mathbf{D}_3\phi)_{ijk-\frac{1}{2}} = \frac{\phi_{ijk} - \phi_{ijk-1}}{\Delta x_3}. \quad (3.36)$$

Os operadores de interpolação do centro de uma célula computacional para a face x_2x_3 ($\mathbf{I}_{x_2x_3}^{c \rightarrow f}$) e da face x_2x_3 para o centro de uma célula computacional ($\mathbf{I}_{x_2x_3}^{f \rightarrow c}$) são definidos respectivamente pelas expressões

$$(\mathbf{I}_{x_2x_3}^{c \rightarrow f}\phi)_{i+\frac{1}{2}jk} = \frac{\phi_{i+1jk} + \phi_{ijk}}{2}, \quad (3.37)$$

$$(\mathbf{I}_{x_2x_3}^{f \rightarrow c}u_1)_{ijk} = \frac{u_{1,i+\frac{1}{2}jk} + u_{1,i-\frac{1}{2}jk}}{2}. \quad (3.38)$$

Os operadores $\mathbf{I}_{x_1x_3}^{c \rightarrow f}$, $\mathbf{I}_{x_1x_3}^{f \rightarrow c}$, $\mathbf{I}_{x_1x_2}^{c \rightarrow f}$ e $\mathbf{I}_{x_1x_2}^{f \rightarrow c}$, relacionados às faces x_1x_3 e x_1x_2 são definidos de maneira similar.

A discretização do termo advectivo na equação da conservação da massa (3.8) por diferenças finitas centradas de segunda ordem não é estável. Strikwerda (2004) sugere o acréscimo de um termo de difusão numérica nesta equação para evitar tal instabilidade. Assim é obtida uma equação da conservação da massa modificada dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = \epsilon \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_j^2}, \quad (3.39)$$

onde $\epsilon = O(\Delta x)$ e $\Delta x = \min\{\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3\}$. A discretização por diferenças finitas centradas de segunda ordem gera oscilações numéricas que tornam este método instável quando aplicado aos termos advectivos das equações do transporte da fração de mistura (2.62) e da conservação da massa modificada (3.39) (quando o termo advectivo domina o termo difusivo), conforme descrevem Strikwerda (2004), Trottenberg *et al.* (2001) e Versteeg e Malalasekera (2007). Para verificar se a equação possui termo advectivo dominante é necessário analisar o número de Péclet de malha. O número de Péclet (Pe) é a razão entre a taxa de advecção de uma propriedade física do escoamento e a taxa de difusão, definido por

$$Pe = \frac{Lu^*}{D^*}, \quad (3.40)$$

onde L é o comprimento característico do escoamento, D^* é o coeficiente de difusão característico do escoamento e u^* é a velocidade característica do escoamento. Desta forma, o número de Péclet fornece a razão entre a escala de tempo difusiva $\frac{L^2}{\rho^* D^*}$ e a escala de tempo advectiva $\frac{L}{u^* \rho^*}$. Se $Pe \ll 1$, então a advecção é dominada pela difusão, sendo o transporte essencialmente afetado pela difusão. Se $Pe \gg 1$, então a advecção domina a difusão. A seguinte inequação é conhecida como a condição de Péclet

$$\frac{\Delta x}{D} \max(u_1, u_2, u_3) \leq 2. \quad (3.41)$$

Se a condição de Péclet é satisfeita, então a aproximação por diferenças finitas centradas fornece uma aproximação estável para o termo advectivo ($O(\Delta x^2)$). Caso contrário, pode-se es-

perar complicações numéricas como oscilações e instabilidade. Para contornar esta dificuldade Trottenberg *et al.* (2001) sugere a utilização de um esquema que combina diferenças finitas de primeira e segunda ordem ou um esquema de alta ordem para o termo advectivo.

No presente trabalho, utiliza-se o esquema QUICK (*Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics*) que possui terceira ordem para aproximar o termo advectivo. Para mais detalhes veja os trabalhos de Versteeg e Malalasekera (2007) e Ferziger e Perić (1999). Considere o termo advectivo da equação (3.39). A Figura 3.2 mostra as aproximações quadráticas de uma variável escalar, do centro para as faces de uma célula computacional, utilizadas pelo esquema QUICK.

Figura 3.2: Aproximações quadráticas utilizadas pelo esquema QUICK em uma dimensão.

A aproximação da massa específica ρ , nas faces de uma célula computacional na direção x_1 , é obtida por meio de uma interpolação quadrática dada por,

$$\rho_{i+\frac{1}{2}jk} = \begin{cases} \frac{6}{8}\rho_{ijk} + \frac{3}{8}\rho_{i+1jk} - \frac{1}{8}\rho_{i-1jk}, & \text{se } u_{i+\frac{1}{2}jk} \geq 0, \\ \frac{6}{8}\rho_{i+1jk} + \frac{3}{8}\rho_{ijk} - \frac{1}{8}\rho_{i+2jk}, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.42)$$

$$\rho_{i-\frac{1}{2}jk} = \begin{cases} \frac{6}{8}\rho_{i-1jk} + \frac{3}{8}\rho_{ijk} - \frac{1}{8}\rho_{i-2jk}, & \text{se } u_{i-\frac{1}{2}jk} \geq 0, \\ \frac{6}{8}\rho_{ijk} + \frac{3}{8}\rho_{i-1jk} - \frac{1}{8}\rho_{i+1jk}, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.43)$$

A aproximação é análoga para os valores de ρ calculados nas faces nas direções x_2 e x_3 . Tendo as aproximações da propriedade ρ nas faces da célula computacional, a aproximação do termo advectivo é obtida por meio da expressão,

$$\begin{aligned} (\mathbf{D}u\rho)_{ijk} &= \frac{u_{i+\frac{1}{2}jk}\rho_{i+\frac{1}{2}jk} - u_{i-\frac{1}{2}jk}\rho_{i-\frac{1}{2}jk}}{\Delta x_1} + \frac{u_{ij+\frac{1}{2}k}\rho_{ij+\frac{1}{2}k} - u_{ij-\frac{1}{2}k}\rho_{ij-\frac{1}{2}k}}{\Delta x_2} + \\ &+ \frac{u_{ijk+\frac{1}{2}}\rho_{ijk+\frac{1}{2}} - u_{ijk-\frac{1}{2}}\rho_{ijk-\frac{1}{2}}}{\Delta x_3}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

3.2.5 Método *Multigrid*

Uma vez feitas as discretizações espacial e temporal, a extensão do método da projeção requer a solução de doze sistemas lineares por passo de integração (seis para $k = 1$ e seis para $k = 2$). A solução destes sistemas lineares é feita por meio do método *Multigrid*-Multinível (descrito no Capítulo 4). Para estender o código AMR3D (veja Nós (2007)) para um escoamento reativo com baixo número de Mach, foi necessário acrescentar a resolução de uma equação de transporte para uma variável escalar localizada no centro de uma célula computacional. A resolução do sistema linear originado pela discretização desta equação de transporte é descrita brevemente. Detalhes dos métodos *multigrid* para as componentes das velocidades localizadas nas faces da célula computacional são encontrados em Nós (2007).

A ideia básica dos métodos *multigrid* consiste na combinação de dois princípios: suavizar as altas frequências do erro e calcular uma correção para a solução em uma malha mais grossa.

Considere o sistema linear:

$$A_{lb}\phi_{lb} = f_{lb}, \quad (3.45)$$

obtido a partir da discretização de uma equação diferencial parcial em um domínio computacional Ω_{lb} , com espaçamento $\Delta x_{1,lb}$, $\Delta x_{2,lb}$, $\Delta x_{3,lb}$ e uma sequência de malhas cada vez mais grossas Ω_{lb-l} com $l = 1, 2, \dots, nvl$, onde $nvl = lb - 1$ é o número de *níveis virtuais*, isto é, as malhas que estão abaixo do nível físico lb , A_{lb} é o operador contínuo discretizado, ϕ_{lb} é a solução exata e f_{lb} é o lado direito do problema na malha Ω_{lb} .

O erro na malha Ω_{lb} é definido por $\mathbf{e}_{lb} = \phi_{lb} - \tilde{\phi}_{lb}$, onde $\tilde{\phi}_{lb}$ é uma solução aproximada do sistema linear (3.45). Desta forma, a solução aproximada $\tilde{\phi}_{lb}$, pode ser vista como uma correção da solução ϕ_{lb} , ou seja, $\phi_{lb} = \tilde{\phi}_{lb} + \mathbf{e}_{lb}$. Assim, pode-se reescrever o sistema linear (3.45) substituindo ϕ_{lb} por $\tilde{\phi}_{lb} + \mathbf{e}_{lb}$ e obtendo a equação residual,

$$A_{lb}\mathbf{e}_{lb} = \mathbf{r}_{lb}, \quad (3.46)$$

sendo $\mathbf{r}_{lb} = f_{lb} - A_{lb}\tilde{\phi}_{lb}$ o resíduo do sistema linear (3.45). Se $\mathbf{e}_{lb}$ for suave, então pode-se aproximá-lo na malha progressivamente mais grossa, Ω_{lb-1} , e assim sucessivamente, até a malha mais grossa Ω_1 . Desta forma, obtém-se a equação residual na malha mais grossa, dada por

$$A_1\mathbf{e}_1 = \mathbf{r}_1. \quad (3.47)$$

Para resolver o sistema (3.45) são necessários operadores que transmitam as informações entre as malhas finas e grossas. Para cada nível $l = 2, \dots, lb$, considere $\mathcal{R}_l^{l-1}$ o operador de restrição que transfere informações da malha Ω_l para a malha Ω_{l-1} e $\mathcal{P}_{l-1}^l$ o operador de prolongamento que transfere informações da malha Ω_{l-1} para a malha Ω_l . Em cada nível, um método iterativo, como por exemplo, o método de Gauss-Seidel, é utilizado para resolver o sistema (3.46). O objetivo é suavizar as altas frequências do erro neste nível. Na malha mais grossa Ω_1 o sistema (3.47) deve ser resolvido exatamente. Numericamente isto significa que o método iterativo utilizado para suavizar o erro nas malhas mais finas é aplicado um número maior de vezes na malha mais grossa. Muitos métodos de relaxação eliminam as componentes de alta frequência do erro, mas não conseguem eliminar as componentes de baixa frequência. Esta característica é conhecida como uma propriedade de suavização. Por isso, um bom método de relaxação torna o método *multigrid*

eficiente já que as baixas frequências do erro em uma malha são vistas como altas frequências em uma malha progressivamente mais grossa (para mais detalhes veja Briggs e McCormick (2000)).

Existem muitos operadores de prolongamento, restrição e suavização que podem ser empregados nos métodos *multigrid*. Os operadores de prolongamento e de restrição dependem da localização das variáveis no domínio computacional, Trottenberg *et al.* (2001) apresenta muitos exemplos de operadores tanto de restrição e prolongamento quanto de relaxação. No presente trabalho, utiliza-se o método de Gauss-Seidel preto-vermelho para a suavização.

O operador de restrição padrão utilizado, para as variáveis localizadas no centro de uma célula computacional, é descrito por meio da expressão

$$\phi_{l-1} = \frac{1}{8} \sum_{m=1}^8 \phi_{l,m}, \quad \text{para } l = 2, 3, \dots, lb. \quad (3.48)$$

A Figura 3.3 mostra o operador de interpolação para uma variável localizada no centro de uma célula computacional, descrito pela expressão (3.48).

Figura 3.3: Restrição para uma variável escalar calculada no centro de uma célula computacional.

O operador de prolongamento utilizado para as variáveis localizadas no centro das células computacionais é dado por

$$\begin{aligned} \phi_l = & (1 - t_1)(1 - t_2)(1 - t_3)\phi_{l-1,1} + t_1(1 - t_2)(1 - t_3)\phi_{l-1,2} + \\ & + t_1t_2(1 - t_3)\phi_{l-1,3} + (1 - t_1)t_2(1 - t_3)\phi_{l-1,4} + \\ & + (1 - t_1)(1 - t_2)t_3\phi_{l-1,5} + t_1(1 - t_2)t_3\phi_{l-1,6} + \\ & + t_1t_2t_3\phi_{l-1,7} + (1 - t_1)t_2t_3\phi_{l-1,8}, \quad \text{para } l = 2, 3, \dots, lb, \end{aligned} \quad (3.49)$$

onde t_1 , t_2 e t_3 definem os pesos, que podem valer $\frac{1}{4}$ ou $\frac{3}{4}$. A Figura 3.4 mostra o operador de prolongamento descrito pela expressão (3.49).

O método *multigrid* ciclo V para uma malha uniforme é descrito pelo algoritmo 3.1. Para mais detalhes veja Nós (2007), Trottenberg *et al.* (2001) e Briggs e McCormick (2000).

Figura 3.4: Prolongamento para uma variável calculada no centro da célula computacional.

Algoritmo 3.1 *Multigrid* Ciclo V - Malha uniforme:

- 1: suavize $A_{lb}\phi_{lb} = f_{lb}$, ν_1 vezes com $\phi_{lb,0} = \tilde{\phi}_{lb}$;
 - 2: calcule $\mathbf{r}_{lb} = f_{lb} - A_{lb}\phi_{lb}$;
 - 3: **para** $l = lb, 2, -1$ **faça**
 - 4: suavize $A_{lb}\mathbf{e}_l = \mathbf{r}_l$, ν_1 vezes com $\mathbf{e}_{l,0} = 0$;
 - 5: restrinja $\mathbf{r}_l : \mathbf{r}_{l-1} = \mathcal{R}_l^{l-1}$;
 - 6: **fim para**
 - 7: solucione $A_1\mathbf{e}_1 = \mathbf{r}_1$ (suavize ν vezes);
 - 8: **para** $l = 2, lb$ **faça**
 - 9: calcule $\mathbf{e}_l : \mathbf{e}_l = \mathbf{e}_l + \mathcal{P}_{l-1}^l(\mathbf{e}_{l-1})$;
 - 10: suavize $A_l\mathbf{e}_l = \mathbf{r}_l$, ν_2 vezes com $\mathbf{e}_{l,0} = \mathbf{e}_l$;
 - 11: **fim para**
 - 12: corrija $\phi_{lb} = \phi_{lb} + \mathbf{e}_{lb}$;
 - 13: suavize $A_{lb}\phi_{lb} = \mathbf{f}_{lb}$, ν_1 vezes com $\phi_{l,0} = \tilde{\phi}_l$.
-

3.2.6 Sumário da metodologia numérica para a fase contínua

Para simplificar a descrição da metodologia numérica para a fase contínua, primeiramente, será descrita a versão estendida do método da Projeção. Com isso, os Algoritmos 3.2 e 3.3 descrevem um passo de integração da metodologia numérica para a simulação de um escoamento com baixo número de Mach e para um escoamento incompressível não-reativo.

O acoplamento pressão-velocidade presente na equação (3.23) é tratado com a extensão do método da projeção para escoamentos reativos com baixo número de Mach. No presente trabalho utiliza-se uma versão estendida baseada na metodologia numérica proposta por Pember *et al.* (1998). Além disso, faz-se uso da estratégia semi-implícita proposta por Bell *et al.* (1989), também aplicada por Roma (1996) e Nós (2007). Dados $\mathbf{u}^n$, $\mathbf{u}^{n-1}$, p^n , p^{n-1} , ρ_c^n , ρ_c^{n-1} , S^{n+1} , Δt^{n-1} , Δt^n , Δt^{n+1} , α_2 , θ_2 e λ , a ideia da versão estendida do método da projeção, é descrita por meio dos seguintes passos.

Passo 1. Determine o campo de velocidade auxiliar $\mathbf{u}^*$ por meio da equação

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_2 u_i^* + \alpha_1 u_i^n + \alpha_0 u_i^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} &= \theta_2 \left(\frac{\lambda}{\rho_c^{n+1}} \frac{\partial^2 u_i^*}{\partial x_j^2} - \frac{1}{\rho_c^{n+1}} \frac{\partial p_2^n}{\partial x_i} \right) + \\ &+ \theta_1 \tilde{f}_i^n + \theta_0 \tilde{f}_i^{n-1} + \beta_1 \tilde{g}_i^n + \beta_0 \tilde{g}_i^{n-1}, \end{aligned} \quad (3.50)$$

para $i = 1, 2, 3$ e com $\tilde{f}_i$ e $\tilde{g}_i$ dadas, respectivamente, pelas expressões (3.24) e (3.22).

Passo 2. Projete $\mathbf{u}^* - \nabla \xi$ no espaço vetorial dos campos com divergente nulo, sendo que ξ satisfaz $\nabla \cdot \nabla \xi = \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1}$. Isto é necessário pois $\nabla \cdot \mathbf{u}^* \neq S^{n+1}$. Desta maneira, $\mathbf{u}^*$ pode ser decomposto como segue

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t^{n+1} \theta_2}{\alpha_2 \rho_c^{n+1}} \nabla \phi. \quad (3.51)$$

sendo $\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}_d + \nabla \xi$, $\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = S^{n+1}$, $\nabla \cdot \mathbf{u}_d = 0$, ϕ a correção para a pressão p_2^n e para o campo de velocidade $\mathbf{u}^{n+1}$.

Passo 3. Aplique o operador de projeção, $\mathcal{P}(\mathbf{u}^* - \nabla \xi) = \mathbf{u}_d$. Isso é feito substituindo-se a expressão (3.51) na equação (3.50), obtendo-se

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_2 u_i^{n+1} + \alpha_1 u_i^n + \alpha_0 u_i^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} &= -\frac{\theta_2}{\rho_c^{n+1}} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \theta_2 \left[\frac{\lambda}{\rho_c^{n+1}} \frac{\partial^2 u_i^{n+1}}{\partial x_j^2} - \frac{1}{\rho_c^{n+1}} \frac{\partial p_2^n}{\partial x_i} + \right. \\ &+ \left. \frac{\lambda \Delta t^{n+1}}{\alpha_2 \rho_c^{n+1}} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\rho_c^{n+1}} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) \right] + \\ &+ \theta_1 \tilde{f}_i^n + \theta_0 \tilde{f}_i^{n-1} + \beta_1 \tilde{g}_i^n + \beta_0 \tilde{g}_i^{n-1}, \end{aligned} \quad (3.52)$$

com $i = 1, 2, 3$ e $\tilde{f}_i$ e $\tilde{g}_i$ dadas, respectivamente, pelas expressões (3.24) e (3.22). Subtraindo a equação (3.52) da equação (3.23) obtém-se a expressão

$$\frac{\partial p_2^{n+1}}{\partial x_i} = \frac{\partial p_2^n}{\partial x_i} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} - \frac{\lambda \Delta t^{n+1}}{\alpha_2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\rho_c^{n+1}} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right). \quad (3.53)$$

Como observado por Nós (2007), ao desprezar o último termo do lado direito da expressão (3.53), obtém-se uma aproximação de pelo menos primeira ordem para a pressão por meio da expressão

$$\frac{\partial p_2^{n+1}}{\partial x_i} = \frac{\partial p_2^n}{\partial x_i} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i}. \quad (3.54)$$

Passo 4. Resolva a equação que determina a correção ϕ . Para isso basta aplicar o operador $\nabla \cdot$ na equação (3.51) obtendo-se

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho_c^{n+1}} \nabla \phi \right) = \frac{\alpha_2}{\theta_2 \Delta t^{n+1}} (\nabla \cdot \mathbf{u}^* - S^{n+1}), \quad (3.55)$$

ou na notação indicial,

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\rho_c^{n+1}} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) = \frac{\alpha_2}{\theta_2 \Delta t^{n+1}} \left(\frac{\partial u_j^*}{\partial x_j} - S^{n+1} \right). \quad (3.56)$$

Após determinar a correção ϕ , a pressão e o campo de velocidade são corrigidos, respectivamente, por

$$\begin{aligned} p_2^{n+1} &= p_2^n + \phi, \\ u_i^{n+1} &= u_i^* - \frac{\Delta t^{n+1} \theta_2}{\alpha_2 \rho_c^{n+1}} \frac{\partial \phi}{\partial x_i}, \quad \text{para } i = 1, 2, 3. \end{aligned} \quad (3.57)$$

As condições de fronteira para a equação elíptica (3.55) são obtidas a partir das condições de fronteira impostas para o campo de velocidade $\mathbf{u}^{n+1}$. O uso das condições de fronteira Dirichlet para o campo de velocidade $\mathbf{u}^{n+1}$ implica em condições de fronteira homogêneas de Neumann para a correção ϕ . Vale ressaltar que neste caso, é necessário satisfazer a condição de compatibilidade dada por

$$\int_{\Omega} \frac{\alpha_2}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* d\Omega = \int_{\partial\Omega} \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \phi^{n+1} dS = 0, \quad (3.58)$$

que garante a unicidade da solução do sistema linear obtido a partir da discretização da equação (3.55). Para mais detalhes veja Thomas (1995) e Hackbusch (1992).

O Algoritmo 3.2 descreve um passo de integração para um escoamento reativo com baixo número de Mach. No início de cada passo de integração é assumido que os valores para Δt^{n-1} , Δt^n , $\mathbf{u}^{n-1}$, $\mathbf{u}^n$, p_2^{n-1} , p_2^n , μ^{n-1} , μ^n , ρ_c^{n-1} , ρ_c^n , z^{n-1} , z^n , D^{n-1} , D^n , Y_l^{n-1} , Y_l^n , T^{n-1} e T^n são conhecidos.

Algoritmo 3.2 Um passo de integração - Escoamento reativo com baixo número de Mach:

- 1: $\Delta t^{n+1} = \Delta t_c$ (equação (3.27));
 - 2: calcule α_i , β_i e θ_i (expressões (3.17)-(3.19));
 - 3: **para** $k \geq 0$ **faça**
 - 4: $\rho_c^{n+1,0} = \rho_c^n$, $D^{n+1,0} = D^n$, $z^{n+1,0} = z^n$, $\mathbf{u}^{n+1,0} = \mathbf{u}^n$, $p_2^{n+1,0} = p_2^n$, $T^{n+1,0} = T^n$, $Y_l^{n+1,0} = Y_l^n$;
 - 5: calcule $\rho_c^{n+1,k}$ (equação (3.39));
 - 6: calcule $z^{n+1,k}$ (equação (3.25));
 - 7: calcule $Y_l^{n+1,k}$, com $l = O, C, P$ e $T^{n+1,k}$ (expressões (2.64)-(2.69));
 - 7: calcule $\mu^{n+1,k} = \mu(T^{n+1,k})$ e $D^{n+1,k}$ (mais detalhes na Seção 6.3) e determine λ (veja a Seção 3.2.2);
 - 8: calcule S^{n+1} (expressão (3.13));
 - 9: calcule $\mathbf{u}^{n+1,k}$ e $p_2^{n+1,k}$ (por meio do método da Projeção estendido);
 - 10: **fim para**
 - 11: $D^{n-1} = D^n$, $D^n = D^{n+1}$, $\mu^{n-1} = \mu^n$, $\mu^n = \mu^{n+1}$;
 - 12: $\rho_c^{n-1} = \rho_c^n$, $\rho_c^n = \rho_c^{n+1}$;
 - 13: $z^{n-1} = z^n$, $z^n = z^{n+1}$;
 - 14: $\mathbf{u}^{n-1} = \mathbf{u}^n$, $\mathbf{u}^n = \mathbf{u}^{n+1}$;
 - 15: $p_2^{n-1} = p_2^n$, $p_2^n = p_2^{n+1}$;
 - 16: $\Delta t^{n-1} = \Delta t^n$, $\Delta t^n = \Delta t^{n+1}$;
 - 17: $t^n = t^{n+1}$, $t^{n+1} = t^n + \Delta t^{n+1}$.
-

O termo S^{n+1} , dado pela expressão (3.13), no Algoritmo 3.2 é aproximado por meio da expressão

$$\begin{aligned}
 S^{n+1} = & \frac{1}{(\rho_c T)^{n+1}} \left[\frac{\alpha_2(\rho_c T)^{n+1} + \alpha_1(\rho_c T)^n + \alpha_0(\rho_c T)^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} + \beta_1 \left(\frac{\partial \rho_c u_i T}{\partial x_i} \right)^n + \right. \\
 & \left. + \beta_0 \left(\frac{\partial \rho_c u_i T}{\partial x_i} \right)^{n-1} \right] + \frac{W}{\rho_c^{n+1}} \sum_l \left[\frac{1}{W_l} \left(\frac{\alpha_2(\rho_c Y_l)^{n+1} + \alpha_1(\rho_c Y_l)^n + \alpha_0(\rho_c Y_l)^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \beta_1 \left(\frac{\partial \rho_c u_i Y_l}{\partial x_i} \right)^n + \beta_0 \left(\frac{\partial \rho_c u_i Y_l}{\partial x_i} \right)^{n-1} \right) \right], \quad \text{com } l = C, O, P.
 \end{aligned} \tag{3.59}$$

Note que a iteração em k é necessária para separar a solução em duas partes, uma para as componentes da velocidade e uma para a correção da pressão. Além disso, esta iteração atualiza a viscosidade μ e o coeficiente de difusão D . No presente trabalho duas iterações garantiram a convergência de metodologia.

O Algoritmo 3.3 descreve um passo de integração para um escoamento incompressível não-reativo. No início de cada passo de integração assume-se que os valores para Δt^{n-1} , Δt^n , $\mathbf{u}^{n-1}$, $\mathbf{u}^n$, p_2^{n-1} , p_2^n , μ^{n-1} , μ^n são conhecidos. Para o caso incompressível, o termo S^{n+1} na versão estendida do método da Projeção é nula, além disso, no presente trabalho, ρ_c é constante.

Algoritmo 3.3 Um passo de integração - Escoamento incompressível (não-reativo):

- 1: $\Delta t^{n+1} = \Delta t_c$ (equação (3.27));
 - 2: calcule α_i , β_i e θ_i (expressões (3.17)-(3.19));
 - 3: **para** $k \geq 0$ **faça**
 - 4: $\mathbf{u}^{n+1,0} = \mathbf{u}^n$, $p_2^{n+1,0} = p_2^n$;
 - 5: calcule $\mu^{n+1,k}$ (veja a Seção 6.3) e determine λ ;
 - 6: calcule $\mathbf{u}^{n+1,k}$ e $p_2^{n+1,k}$ (por meio do método da Projeção, $S^{n+1} = 0$);
 - 7: **fim para**
 - 8: $\mu^{n-1} = \mu^n$, $\mu^n = \mu^{n+1}$;
 - 9: $\mathbf{u}^{n-1} = \mathbf{u}^n$, $\mathbf{u}^n = \mathbf{u}^{n+1}$;
 - 10: $p_2^{n-1} = p_2^n$, $p_2^n = p_2^{n+1}$;
 - 11: $\Delta t^{n-1} = \Delta t^n$, $\Delta t^n = \Delta t^{n+1}$;
 - 12: $t^n = t^{n+1}$, $t^{n+1} = t^n + \Delta t^{n+1}$.
-

3.3 Solução das equações que modelam a fase dispersa

Na formulação lagrangiana da fase dispersa, cada gotícula é representada no domínio computacional por meio da sua posição $\mathbf{X}_p(t)$. A Figura 3.5 mostra uma célula computacional de uma malha euleriana com a representação lagrangiana das gotículas, a posição de um campo de velocidade $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ e a posição de uma variável escalar ϕ .

As propriedades da fase dispersa são modeladas por meio das equações descritas no Capítulo 2 para cada gotícula. Denota-se por N_p o número de gotículas presentes na simulação numérica.

Figura 3.5: Localização de uma variável escalar ϕ e uma vetorial $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ discretizadas, respectivamente no centro e nas faces de uma célula computacional e as gotículas lagrangianas, representadas pelo símbolo $\bullet$, contidas nesta célula.

Associado a cada gotícula tem-se o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{Y}_p(t)}{dt} &= \mathcal{F}(t, \mathcal{Y}_p), \quad t \in [t_0, \bar{t}], \\ \mathcal{Y}_p(t_0) &= \mathcal{Y}_p^0, \quad \text{para } 1 \leq p \leq N_p, \end{aligned} \quad (3.60)$$

sendo t_0 o tempo inicial da simulação, $\bar{t}$ o tempo final da simulação, $\mathcal{Y}_p = [\mathbf{X}_p, \mathbf{U}_p]^T$ e $\mathcal{F}$ representa o lado direito das equações, o qual pode envolver propriedades vindas da fase contínua do escoamento.

O tamanho do passo no tempo para a fase dispersa é dado por

$$\Delta t_d = C \min \left(\frac{\Delta x_1}{|u_{1,p}|_{\max}}, \frac{\Delta x_2}{|u_{2,p}|_{\max}}, \frac{\Delta x_3}{|u_{3,p}|_{\max}} \right), \quad \text{com } 0 < C < 1 \text{ e } 0 \leq p \leq N_p. \quad (3.61)$$

3.3.1 Discretização temporal da fase dispersa

A discretização temporal das equações que modelam a fase dispersa na formulação lagrangiana é feita por meio do método de Euler Modificado. O método de Euler Modificado é um método de passo único de segunda ordem de aproximação. Ao aplicar tal método ao sistema (3.60) obtém-se

$$\begin{cases} \mathcal{Y}_p^{n+1} = \mathcal{Y}_p^n + \frac{\Delta t}{2}(\kappa_1 + \kappa_2), \\ \mathcal{Y}_p^0 = \mathcal{Y}_p(t_0), \\ \kappa_1 = \mathcal{F}(t^n, \mathcal{Y}_p^n), \\ \kappa_2 = \mathcal{F}(t^n + \Delta t, \mathcal{Y}_p^n + \Delta t \kappa_1), \end{cases} \quad (3.62)$$

onde p e n são inteiros tais que $1 \leq p \leq N_p$, $n \geq 0$ e $\mathcal{Y}_p^n \approx \mathcal{Y}_p(t^n)$. Mais detalhes sobre o método de Euler Modificado podem ser encontrados em Burden e Faires (2005) e Stoer e Bulirsch (2002).

3.3.2 Operadores de interpolação entre as fases contínua e dispersa

Para o acoplamento entre as fases contínua e dispersa são necessários operadores de interpolação que levem as variáveis representadas na formulação euleriana para a posição das variáveis repre-

sentadas na formulação lagrangiana e vice-versa. Os termos responsáveis pelo acoplamento entre as fases são descritos na Seção 2.5. O operador de interpolação no sentido fase dispersa-contínua é chamado operador de *espalhamento*. Os operadores de interpolação e espalhamento que determinam o acoplamento entre as fases contínua e dispersa são uma aproximação suave da *função Delta de Dirac* ($\delta_{\Delta x}(\mathbf{x}_{ijk} - \mathbf{X}_p)$) conforme descrevem Griffith (2005) e Roma (1996). Tal função é dada pela expressão

$$\delta_{\Delta x}(\mathbf{x}_{ijk} - \mathbf{X}_p) = \delta_{\Delta x_1}(x_{1,ijk} - X_{p,1})\delta_{\Delta x_2}(x_{2,ijk} - X_{p,2})\delta_{\Delta x_3}(x_{3,ijk} - X_{p,3}), \quad (3.63)$$

onde $1 \leq p \leq N_p$, $\mathbf{x}_{ijk}$ e $\mathbf{X}_p$ representam, respectivamente, a posição de uma variável no domínio computacional e a posição da gotícula lagrangiana p . Uma aproximação suave para a função *Delta de Dirac* unidimensional, é dada por

$$\delta_{\Delta x_i}(x_i - X_{p,i}) \approx \frac{1}{\Delta x_i} \psi\left(\frac{x_i - X_{p,i}}{\Delta x_i}\right), \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \quad (3.64)$$

onde a função ψ é

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{1}{8} \left(3 - 2|r| + \sqrt{1 + 4|r| - 4r^2} \right), & \text{se } 0 \leq |r| < 1, \\ \frac{1}{8} \left(5 - 2|r| - \sqrt{12|r| - 7 - 4r^2} \right), & \text{se } 1 \leq |r| < 2, \\ 0, & \text{se } 2 \leq |r|. \end{cases} \quad (3.65)$$

Essa função é determinada pela imposição das seguintes condições:

1. $\psi(r)$ é contínua para todo número real r ,
2. $\psi(r) = 0$ para $|r| \geq 2$,
3. $\sum_j (r - j)\psi(r - j) = 0$, para todo r tal que $-\infty < j < +\infty$,
4. $\sum_{j \text{ pares}} \psi(r - j) = \sum_{j \text{ ímpares}} \psi(r - j) = \frac{1}{2}$, para todo r ,
5. $\sum_j [\psi(r - j)]^2 = \frac{3}{8}$, para todo r .

Tanto o operador de interpolação quanto o operador de espalhamento são definidos pelas expressões (3.63)-(3.65). Para fazer o acoplamento entre as fases é necessário localizar as gotículas em cada uma das células do domínio computacional. A localização das gotículas em uma malha estruturada uniforme é imediata. Dada uma gotícula p com $\mathbf{X}_p = (X_{p,1}, X_{p,2}, X_{p,3})$, os índices (i, j, k) , da célula computacional que contém a gotícula p , são obtidos por meio das expressões

$$i = \left\lfloor \frac{X_{p,1} - a_1}{\Delta x_1} \right\rfloor + 1, \quad j = \left\lfloor \frac{X_{p,2} - a_2}{\Delta x_2} \right\rfloor + 1 \quad \text{e} \quad k = \left\lfloor \frac{X_{p,3} - a_3}{\Delta x_3} \right\rfloor + 1, \quad (3.66)$$

onde Δx_1 , Δx_2 e Δx_3 são os espaçamentos em cada uma das direções a_1 , a_2 e a_3 são as coordenadas da posição inicial do domínio computacional e $\lfloor \cdot \rfloor$ é a parte inteira de um número real.

Com isso, o *espalhamento* das forças que agem sobre uma gotícula em uma célula computacional (i, j, k) é dado por

$$S_{\mathbf{u},p} = -\delta(\mathbf{x}_{ijk} - \mathbf{X}_p) \frac{d\mathbf{U}_p}{dt}. \quad (3.67)$$

O *espalhamento* das forças que agem sobre todas as gotículas contidas em uma célula computacional é

$$S_{\mathbf{u}} = \sum_{p=1}^{n_p} S_{\mathbf{u},p}, \quad (3.68)$$

sendo n_p o número de gotículas contidas na célula computacional (i, j, k) .

3.3.3 Sumário da metodologia numérica para um escoamento incompressível contendo gotículas

Para o escoamento incompressível contendo gotículas, a fase dispersa é aproximada por meio do método de Euler Modificado. O Algoritmo 3.4 descreve um passo de integração para um escoamento incompressível (não-reativo) com gotículas inertes. No início de cada passo de integração assume-se que os valores para Δt^{n-1} , Δt^n , $\mathbf{u}^{n-1}$, $\mathbf{u}^n$, p_2^{n-1} , p_2^n , μ^{n-1} , μ^n , $\mathbf{X}_p^n$ e $\mathbf{U}_p^n$ são conhecidos.

Algoritmo 3.4 Um passo de integração - Escoamento incompressível (não-reativo) com gotículas:

- 1: $\Delta t^{n+1} = \min\{\Delta t_c, \Delta t_d\}$, (Δt_c - equação (3.27), Δt_d - equação (3.61));
 - 2: calcule α_i , β_i e θ_i (equações (3.17)-(3.19));
 - 3: injete gotículas (mais detalhes na Seção 6.2);
 - 4: **para** $p = 1, N_p$ **faça**
 - 5: determine a célula (i, j, k) que contém p (expressão (3.66));
 - 6: calcule $\mathbf{u}_{c,p}$ (interpole $\mathbf{u}_c$ para a posição $\mathbf{X}_p^n$);
 - 7: calcule $\mathbf{U}_p^{n+1}$ e $\mathbf{X}_p^{n+1}$ (método 3.62);
 - 8: se p saiu do domínio computacional, então remova p ;
 - 9: **fim para**
 - 10: “espalhe” as forças (equação 3.68);
 - 11: **para** $k \geq 0$ **faça**
 - 12: $\mathbf{u}_c^{n+1,0} = \mathbf{u}_c^n$, $p_2^{n+1,0} = p_2^n$;
 - 13: calcule $\mu^{n+1,k}$ (veja a Seção 6.3) e determine λ ;
 - 14: calcule $\mathbf{u}_c^{n+1,k}$ e $p_2^{n+1,k}$ (por meio do método da Projeção, $S^{n+1} = 0$);
 - 15: **fim para**
 - 16: $\mu^{n-1} = \mu^n$, $\mu^n = \mu^{n+1}$;
 - 17: $\mathbf{u}^{n-1} = \mathbf{u}^n$, $\mathbf{u}^n = \mathbf{u}^{n+1}$;
 - 18: $p_2^{n-1} = p_2^n$, $p_2^n = p_2^{n+1}$;
 - 19: $\mathbf{X}_p^n = \mathbf{X}_p^{n+1}$, $\mathbf{U}_p^n = \mathbf{U}_p^{n+1}$;
 - 20: $\Delta t^{n-1} = \Delta t^n$, $\Delta t^n = \Delta t^{n+1}$;
 - 21: $t^n = t^{n+1}$, $t^{n+1} = t^n + \Delta t^{n+1}$.
-

No Capítulo 4 é descrito a aplicação das metodologias numéricas descritas neste capítulo, considerando uma malha bloco-estruturada com refinamento adaptativo. No Capítulo 5 são apresentadas as verificações numéricas das metodologias propostas e no Capítulo 6 são apresentados os resultados numéricos.

3.4 Nomenclatura do presente capítulo

a_1, a_2, a_3	Coordenadas da posição inicial do domínio computacional
b_1, b_2, b_3	Coordenadas da posição final do domínio computacional
c	Parâmetro dos coeficientes α_i , β_i e θ_i
C	Constante CFL
D	Coefficiente de difusão de massa (m^2/s)
F_i	Forças externas (N)
L	Comprimento característico do escoamento (m)
n_1, n_2, n_3	Número de partições em cada uma das direções
n_p	Número de gotículas em uma célula computacional
N_p	Número de gotículas
O	Espécie química oxidante
p	Pressão (atm)
p_2	Pressão dinâmica (atm)
p_0	Pressão termodinâmica (atm)
$\mathcal{R}$	Constante universal dos gases ($J/Kmol \times K$)
s	Número de passos do esquema temporal
S	Restrição do divergente da velocidade (m/s^2)
t	Tempo (s)
T	Temperatura (K)
$\mathbf{u}$	Velocidade do escoamento (m/s)
$\mathbf{u}^*$	Campo de velocidade auxiliar (m/s)
$\mathbf{u}_d$	Campo de velocidade com divergente nulo (m/s)
$\mathbf{X}_p$	Posição da gotícula (m)
W	Peso molecular ($kg/Kmol$)
Y	Fração mássica das espécies
z	Fração de mistura

Letras Gregas

α_i, θ_i e β_i	Parâmetros dos esquemas temporais IMEX
δ	Delta de Dirac
Δt	Tamanho do passo no tempo (s)
Δx_i	Espaçamento na direção i (m)
ϵ	Coefficiente de difusão numérica
γ	Parâmetro dos coeficientes α , β e θ
κ_1, κ_2	Parâmetros do método de Euler Modificado
μ	Viscosidade dinâmica ($N \times s/m^2$)
ρ	Massa específica, densidade (kg/m^3)
Ω	Domínio computacional
ϕ	Correção da pressão e da velocidade
ξ	Variável escalar

Adimensionais

Pe Número de Péclet Ma Número de Mach

Índices

i, j, k	Direções das coordenadas	l	Espécie química
p	Gotícula	n	Tempo
$*$	Valores característicos	C	Espécie química combustível
P	Espécie química produto	O	Espécie química oxidante
c	Fase contínua	d	Fase dispersa

Operadores

∇	Gradiente	$\mathbf{G}$	Gradiente Discreto
Δ	Laplaciano	$\mathbf{L}$	Laplaciano Discreto
$\nabla \cdot$	Divergente	$\mathbf{D}$	Divergente Discreto
$\mathcal{P}$	Projeção	$\frac{D}{Dt}$	Derivada total
$\lfloor \cdot \rfloor$	Parte inteira de um número real	$\mathcal{I}$	Identidade
I	Operador de Interpolação		

Siglas

IMEX	Implícito-Explícito
CNAB	Cranck Nicolson Adams-Bashforth
MCNAB	<i>Modified Cranck Nicolson Adams-Bashforth</i>
CNLF	<i>Cranck Nicolson Leap Frog</i>
CFL	<i>Courant-Friedrichs-Lewy</i>
QUICK	<i>Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics</i>

Capítulo 4

Malha adaptativa bloco-estruturada

A adaptatividade é um conceito importante para a eficiência de métodos numéricos aplicados à resolução de equações diferenciais parciais. A principal vantagem da técnica de malhas adaptativas é concentrar boa resolução em regiões de interesse. A princípio, distinguem-se dois tipos de aproximação adaptativa: o *refinamento estático*, no qual as regiões de refinamento no domínio computacional são determinadas antes da execução do método numérico iniciar, e o *refinamento dinâmico*, no qual as regiões de refinamento são determinadas durante a execução do método numérico, controlado por algum critério de adaptatividade apropriado. Na prática, as duas aproximações podem ser combinadas.

Para a discretização do domínio computacional, o presente trabalho utiliza uma malha bloco-estruturada com refinamento adaptativo e dinâmico baseando-se na estratégia de refinamento adaptativo de malhas, (*Adaptive Mesh Refinement* - AMR), proposta por Berger e Oliger (1984), Berger e Rigoutsos (1991) e Berger e Colella (1989).

A Seção 4.1 descreve o tipo e as características da malha adaptativa utilizada. A Seção 4.2 explica o procedimento de geração da malha com refinamento adaptativo, bem como os critérios de refinamento utilizados para os problemas de aplicação. A Seção 4.3 apresenta o tratamento das células computacionais *fantasmas*. A Seção 4.4 apresenta o método *Multigrid*-Multinível usado para resolver o sistema linear derivado da discretização espacial e temporal da equação do transporte da fração de mistura. O capítulo é encerrado com a apresentação da metodologia numérica com refinamento adaptativo de malhas para um escoamento incompressível (não-reativo) com gotículas inertes.

4.1 Descrição de uma malha bloco-estruturada

A descrição da malha bloco-estruturada utilizada no presente trabalho segue as descrições feitas por Berger e Colella (1989), Roma (1996) e Nós (2007). Uma malha bloco-estruturada é formada por um conjunto de blocos (paralelepípedos) discretizados em diferentes níveis de refinamento. As faces de cada bloco estão alinhadas com as faces dos eixos coordenados do domínio computacional. Cada bloco é um conjunto de células computacionais. Os blocos que compõem um nível de refinamento tem o mesmo espaçamento Δx_1 , Δx_2 e Δx_3 . A razão de refinamento r entre o espaçamento de dois níveis de refinamento consecutivos é constante, de maneira que

$$\Delta x_{i,l+1} = \frac{\Delta x_{i,l}}{r}, \quad \text{para } i = 1, 2, 3. \quad (4.1)$$

A Figura 4.1 apresenta uma malha bloco-estruturada tridimensional com a malha base e mais dois níveis de refinamento.

Figura 4.1: Malha bloco-estruturada em um domínio computacional $[0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$ com dois níveis de refinamento: (a) malha tri-dimensional, (b) corte na direção $x_1 = 0.42$, (c) corte na direção $x_3 = 0.45$ e (d) corte na direção $x_2 = 0.3$, Nós (2007).

Considere $G_{l,m}$ como sendo o m -ésimo bloco de um nível de refinamento l . Uma malha bloco-estruturada deve atender à algumas restrições. Uma restrição é que para cada dois blocos distintos de um nível de refinamento l , $G_{l,i}$ e $G_{l,j}$, tem-se que $G_{l,i} \cap G_{l,j} = \emptyset$ (exceto pelas faces). Assim, define-se para cada nível de refinamento l , a malha do nível l por

$$G_l = \bigcup_{k=1}^{n_l} G_{l,k},$$

onde n_l é o número de blocos do nível l . A partir desse ponto uma malha do nível l é um conjunto de blocos discretizados no nível de refinamento l . Uma malha bloco-estruturada é a união das malhas de todos os níveis

$$G = \bigcup_l G_l.$$

A Figura 4.2 mostra um exemplo de malha bloco-estruturada bidimensional. A Figura 4.2(a)

mostra a malha do nível base. As Figuras 4.2(b) e 4.2(d) mostram as regiões cobertas por um nível de refinamento. As Figuras 4.2(c) e 4.2(e) mostram os blocos discretizados que formam cada nível de refinamento. A Figura 4.2(f) mostra a malha bloco-estruturada formada pela união dos três níveis de refinamento.

Figura 4.2: Elementos de uma malha bloco-estruturada bidimensional: (a) malha base; (b)-(d) regiões cobertas por um nível de refinamento; (c) nível de refinamento com dois blocos discretizados; (e) nível de refinamento com três blocos discretizados e (f) malha bloco-estruturada.

Outra restrição é que blocos em níveis diferentes adjacentes precisam estar propriamente aninhados, ou seja,

1. um bloco em um nível fino deve começar e terminar no canto de uma célula computacional do próximo nível mais grosso; e
2. para cada canto de um bloco do nível fino, deve existir pelo menos uma célula computacional do próximo nível mais grosso em todas as direções (à direita, à esquerda, para frente, para trás, para cima e para baixo) que separa este bloco do nível fino de uma célula computacional do segundo próximo nível mais grosso (a menos que este bloco toque a fronteira do domínio computacional, veja a Figura 4.2(f)).

As Figuras 4.3(a) e 4.3(b) são exemplos, em duas dimensões, com dois e três blocos em níveis diferentes que não estão propriamente aninhados. A primeira restrição é violada na Figura 4.3(a)

e a segunda, é violada na Figura 4.3(b). A Figura 4.3(c) mostra três blocos em níveis diferentes propriamente aninhados. Note que é permitido um bloco de um nível interceptar dois blocos do nível sucessivamente mais grosso.

Figura 4.3: Exemplos de malhas não propriamente aninhadas (a)-(b) e malha propriamente aninhada (c).

As malhas são refinadas no espaço com razão de refinamento $r = 2$. Uma importante diferença do trabalho original de Berger e Colella (1989) em relação ao presente trabalho, é que não há refinamento no tamanho do passo de integração, Δt . Isto significa que a solução numérica, em todos os níveis de refinamento, é determinada com o mesmo tamanho de passo de integração Δt dado pelo espaçamento da malha mais fina. Note que isso não significa que o tamanho do passo Δt seja contante, veja Seção 3.2. Com isso, garante-se que o erro da discretização espacial e temporal tenham a mesma ordem de aproximação.

4.2 Geração de uma malha bloco-estruturada

O número de níveis de refinamento da malha bloco-estruturada é fixo e denotado por npl . Cada nível de refinamento, do mais grosso para o mais fino, é denotado por $lb, lb+1, \dots, lt$. Aqui abusa-se da linguagem dizendo que o nível base que cobre todo o domínio computacional, lb , é o primeiro nível de refinamento. São selecionadas para refinamento células dos níveis $lt - 1, lt - 2, \dots, lb$. Quando uma célula de um nível l é selecionada para ser refinada, o resultado deste refinamento são células correspondentes no nível $l + 1$.

Dada uma lista de células computacionais de um nível l selecionadas para refinamento, utiliza-se um método proposto por Berger e Rigoutsos (1991) que agrupa tais células em blocos do nível l (não discretizados) de tal forma que: o volume de todas as células computacionais dadas na lista é coberto. O volume do bloco que não precisa de refinamento e o número de blocos gerados são tão pequenos quanto possíveis. Denota-se por $\epsilon_{\min}$ o parâmetro que ajusta estas duas quantidades por meio da expressão

$$\epsilon_{\min} \leq \frac{\text{ncells}}{\text{ncellm}}, \quad (4.2)$$

onde $\epsilon_{\min} \in (0, 1)$, ncells é o número de células computacionais selecionadas pelo critério de um bloco no nível l e ncellm é o número total de células computacionais que formam este mesmo bloco no nível l . Assim, se $\epsilon_{\min} = 0.85$ significa que pelo menos 85% das células computacionais de um novo bloco de um nível l são células selecionadas pelo critério, veja a Figura 4.4. Este método utiliza-se de técnicas da área de visão computacional e de reconhecimento de padrões. Para mais

detalhes veja Berger e Rigoutsos (1991). Cada um dos blocos do nível l , começando pelos blocos do nível $l - 1$ e decrescendo até l_0 , é discretizado com espaçamento do nível $l + 1$. Pelo critério de seleção de células para refinamento, sabe-se que para cada bloco de um nível l existem blocos do nível $l - 1$ que o contém. Para garantir a segunda restrição de malhas propriamente aninhadas, os blocos do nível $l - 1$ são aumentados com pelo menos duas células computacionais em todas as direções.

Figura 4.4: Células computacionais selecionadas para a geração nível mais fino.

4.2.1 Malha inicial do domínio computacional

A malha bloco-estruturada inicial é gerada por meio de um refinamento estático, de maneira que o refinamento local contenha a região de entrada do escoamento (denominada *bocal*), veja as Figuras 4.5(a)-4.5(b). Esse refinamento estático continua sendo gerado a cada remalhagem. Esta região precisa de refinamento para que os fenômenos físicos que ocorrem na região de entrada do escoamento sejam bem capturados durante toda a simulação. Assim como as gotículas que são injetadas a cada passo de integração devem estar contidas no nível de refinamento mais fino durante toda a simulação. Detalhes sobre a injeção das gotículas são dados na Seção 6.2.

Figura 4.5: Zoom de uma malha inicial com quatro níveis de refinamento adaptativo estático e velocidade do escoamento.

4.2.2 Seleção de células computacionais para refinamento

Para cada nível l começando em $lt - 1$ e decrescendo até lb , células computacionais do nível l são selecionadas (se necessário) para refinamento. Uma célula computacional é selecionada para refinamento se ela satisfaz algum dos critérios descritos abaixo e for uma célula visível. Isto é, não existe um nível mais fino que a cobre. Os critérios utilizados são descritos a seguir.

Se o tensor de tensões viscosas, a vorticidade ou a viscosidade turbulenta, denotadas por ψ satisfazem

$$\tilde{\psi} \leq \frac{|\psi_{ijk}|}{\psi_{\max}} \leq 1, \quad (4.3)$$

onde $\tilde{\psi}$ é um valor no intervalo $[0, 1]$. O valor $\tilde{\psi}$ é o valor mínimo da propriedade ψ normalizada, escolhido apropriadamente. Se a temperatura ou a componente da velocidade na direção do escoamento satisfazem

$$\psi_{ijk} \geq \tilde{\psi}, \quad (4.4)$$

sendo $\tilde{\psi}$ é um limite inferior da propriedade escolhido apropriadamente. Por exemplo, para a temperatura determinou-se $\tilde{\psi} = 800 \text{ K}$.

Os critérios não são utilizados todos ao mesmo tempo em todas as simulações numéricas. A escolha deles depende do problema que está sendo resolvido. Mais detalhes no Capítulo 6.

Quando trata-se de escoamentos com gotículas, mais um critério de refinamento é considerado. Assume-se que todas as gotículas estão contidas no nível de refinamento mais fino. Essa escolha inicial visa garantir que os operadores de interpolação e espalhamento (responsáveis pelo acoplamento entre as fases, veja a Seção 3.3.2) sejam aproximados no nível mais fino de refinamento. Para atender a essa restrição foi definida no nível mais fino da malha bloco-estruturada uma região de segurança (veja um exemplo da região de segurança em duas dimensões na Figura 4.6). Se alguma gotícula estiver fora da região de segurança, a célula computacional correspondente do nível $lt - 1$ que contém essa gotícula (mais uma vizinhança) é selecionada para refinamento.

Figura 4.6: Exemplo de região de segurança bidimensional. A região de segurança está contornada por uma linha tracejada.

4.2.3 Localização das gotículas na malha bloco-estruturada

As gotículas são armazenadas em uma lista encadeada com cabeça a qual possui $N_p + 1$ células, onde N_p é o número de gotículas presentes na simulação. Uma lista encadeada é uma sequência de células, como mostra a Figura 4.7. Cada célula da lista é composta pelo conteúdo e pelo endereço da célula seguinte, para mais detalhes veja Feofiloff (2009).

Figura 4.7: Lista encadeada.

Para identificar a célula computacional que contém uma gotícula em uma malha Cartesiana estruturada, basta determinar os índices desta célula computacional por meio da expressão (3.66).

Na malha bloco-estruturada refinada localmente é necessário identificar a célula computacional que contém a gotícula e o bloco discretizado que contém essa célula computacional. Para fazer esta identificação rapidamente são utilizadas as seguintes estruturas de dados construídas no início da simulação numérica e a cada remalhagem:

- Mapa euleriano: é formado por dois vetores (*arrays*) com $n_{cell_{l-1}}$ posições, onde $n_{cell_{l-1}}$ é o número de células computacionais do nível $l-1$ que estão cobertas pelo nível l . Considere que ambos vetores são indexados por células do nível $l-1$, isto é, uma posição de qualquer um dos dois vetores é acessada por um identificador de uma célula no nível $l-1$. A n -ésima posição do primeiro vetor armazena um ponteiro para o bloco do nível l que contém a correspondente célula n . A n -ésima posição do segundo vetor armazena verdadeiro ou falso, dependendo se a correspondente célula n está ou não na região de segurança.
- Mapa lagrangiano: para cada gotícula p é armazenado um ponteiro para o bloco no nível l que contém p . Considerando todos os ponteiros para todas as gotículas têm-se um mapa lagrangiano.

Os mapas são construídos no início da simulação numérica e a cada remalhagem, pois são nesses momentos que uma nova malha euleriana é construída. A cada passo de integração a localização do bloco discretizado (e assim, da célula computacional) que contém uma gotícula se resume a uma consulta no mapa lagrangiano. A obtenção de tal bloco é importante para a aplicação dos operadores de acoplamento entre as fases dispersa e contínua. Com este bloco, obtém-se rapidamente a célula que contém uma gotícula mais suas células vizinhas. O primeiro mapa euleriano é usado para atualizar o mapa lagrangiano quando uma gotícula sai do bloco que estava. O segundo mapa euleriano é usado para verificar se uma gotícula está ou não na região de segurança, indicando ou não a necessidade de remalhagem.

4.3 Células computacionais *fantasmas*

É importante ressaltar que uma parte essencial da técnica AMR é a existência de células *fantasmas*, conforme observado por Roma (1996). Os operadores de interpolação e de diferenças finitas descritos na Seção 3.2.4 são aplicados por nível e por bloco discretizado. Os blocos discretizados de um mesmo nível são disjuntos, isto é, dados dois blocos discretizados de um mesmo nível de refinamento, estes não compartilham células computacionais interiores. As células fantasmas são células computacionais auxiliares que contornam cada bloco discretizado (veja um simples exemplo em duas dimensões mostrado pelas Figuras 4.8(a)-4.8(b)). As células fantasmas fornecem condições de fronteiras por meio de interpolações polinomiais de células computacionais de blocos discretizados pertencentes ao mesmo nível de refinamento e que são vizinhos (*blocos irmãos*, veja como exemplo os blocos $G_{2,1}$ e $G_{2,2}$ na Figura 4.3(c)) e entre blocos discretizados de níveis diferentes. Por exemplo, os valores das propriedades nas células fantasmas pertencentes a um bloco discretizado do nível $l+1$ são obtidos por intermédio da interpolação dos valores entre os blocos discretizados do nível l e $l+1$.

Figura 4.8: Células computacionais fantasmas.

4.4 Método *Multigrid*-Multinível

Uma vez que a discretização espacial na malha bloco-estruturada foi introduzida é necessário, a cada passo de integração temporal, resolver os sistemas lineares resultantes da aproximação. Para resolver estes sistemas lineares é empregado o método *multigrid*-multinível, para mais detalhes veja Trottenberg *et al.* (2001). Aqui “multinível” se refere ao fato de que os níveis de refinamento da malha bloco-estruturada (níveis físicos) são também considerados níveis do método *multigrid* (veja Seção 3.2.5). O método *Multigrid*-Multinível ciclo V para um problema na malha bloco-estruturada é descrito pelo algoritmo 4.1. Para mais detalhes veja Nós (2007) e Roma (1996).

Algoritmo 4.1 *Multigrid*-Multinível Ciclo V - Malha bloco-estruturada:

- 1: **para** $l = lt, lb, -1$ **faça**
 - 2: suavize $A_l \phi_l = \mathbf{f}_l$, ν_1 vezes com $\phi_{l,0} = \tilde{\phi}_l$;
 - 3: calcule $\mathbf{r}_{lb} = \mathbf{f}_{lb} - A_{lb} \phi_{lb}$;
 - 4: **fim para**
 - 5: **para** $l = lb, 2, -1$ **faça**
 - 6: suavize $A_l \mathbf{e}_l = \mathbf{r}_l$, ν_1 vezes com $\mathbf{e}_{l,0} = 0$;
 - 7: restrinja $\mathbf{r}_l : \mathbf{r}_{l-1} = \mathcal{R}_l^{l-1}$;
 - 8: **fim para**
 - 9: solucione $A_1 \mathbf{e}_1 = \mathbf{r}_1$ (suavizar ν vezes);
 - 10: **para** $l = 2, lb$ **faça**
 - 11: calcule $\mathbf{e}_l : \mathbf{e}_l = \mathbf{e}_l + \mathcal{P}_{l-1}^l(\mathbf{e}_{l-1})$;
 - 12: suavize $A_l \mathbf{e}_l = \mathbf{r}_l$, ν_2 vezes com $\mathbf{e}_{l,0} = \mathbf{e}_l$;
 - 13: **fim para**
 - 14: **para** $l = lb, lt$ **faça**
 - 15: corrija $\phi_l = \phi_l + \mathbf{e}_l$.
 - 16: suavize $A_l \phi_l = \mathbf{f}_l$, ν_2 vezes com $\phi_{l,0} = \phi_l$.
 - 17: **fim para**
-

É importante ressaltar que os níveis de refinamento físicos diferem dos níveis *multigrid* usuais (níveis virtuais) já que eles não cobrem todo o domínio computacional (exceto o nível base). O critério de convergência adotado foi $O(\Delta x^2)$, sendo $\Delta x = \min\{\Delta x_{1,lt}, \Delta x_{2,lt}, \Delta x_{3,lt}\}$ o espaçamento

do nível mais fino lt . Os operadores de prolongamento, restrição e suavização são descritos na Seção 3.2.5.

4.5 Sumário da metodologia numérica na malha bloco-estruturada

A metodologia numérica com refinamento adaptativo de malhas proposta no presente trabalho visam simular os três modelos matemáticos descritos na Seção 2.6. A diferença entre os algoritmos em uma malha uniforme e em uma malha bloco-estruturada, para os escoamentos sem a fase dispersa, está no procedimento de remalhagem. Para os escoamentos com a fase dispersa aparecem diferenças significativas, por exemplo, o uso dos mapas euleriano e lagrangiano. O Algoritmo 4.2 apresenta, para um passo de integração, uma metodologia numérica com refinamento adaptativo de malhas para o escoamento incompressível (não-reativo) com gotículas inertes. No início de cada passo de integração assume-se que os valores para Δt^{n-1} , Δt^n , $\mathbf{u}^{n-1}$, $\mathbf{u}^n$, p_2^{n-1} , p_2^n , μ^{n-1} , μ^n , $\mathbf{X}_p^n$ e $\mathbf{U}_p^n$ são conhecidos.

Algoritmo 4.2 Um passo de integração na malha bloco-estruturada - Escoamento incompressível (não-reativo) com gotículas:

- 1: $\Delta t^{n+1} = \min\{\Delta t_c, \Delta t_d\}$, (Δt_c - equação (3.27), Δt_d - equação (3.61));
 - 2: calcule α_i , β_i e θ_i (equações (3.17)-(3.19));
 - 3: injete gotículas (mais detalhes na Seção 6.2);
 - 4: atualize o mapa lagrangiano;
 - 5: **para** $p = 1, N_p$ **faça**
 - 6: determine a célula (i, j, k) que contém p (expressão (3.66));
 - 7: consulte o mapa lagrangiano identificando o bloco do nível lt que contém p ;
 - 8: calcule $\mathbf{u}_{c,p}$ (interpole $\mathbf{u}_c$ para a posição $\mathbf{X}_p^n$);
 - 9: calcule $\mathbf{U}_p^{n+1}$ e $\mathbf{X}_p^{n+1}$ (método 3.62);
 - 10: se p saiu do domínio computacional, então remova p ;
 - 10: se necessário, atualize o mapa lagrangiano;
 - 11: “espalhe” as forças da gotícula p (equação 3.68);
 - 12: **fim para**
 - 13: **para** $k \geq 0$ **faça**
 - 14: $\mathbf{u}_c^{n+1,0} = \mathbf{u}_c^n$, $p_2^{n+1,0} = p_2^n$;
 - 15: calcule $\mu^{n+1,k}$ (veja a Seção 6.3) e determine λ ;
 - 16: calcule $\mathbf{u}_c^{n+1,k}$ e $p_2^{n+1,k}$ (por meio do método da Projeção, $S^{n+1} = 0$);
 - 17: **fim para**
 - 18: verifique os critérios de remalhagem (veja a Seção 4.2);
 - 19: **se** necessário remalhar **então**
 - 20: gere uma nova malha bloco-estruturada;
 - 21: inicialize a nova malha bloco-estruturada;
 - 22: apague a malha bloco-estruturada antiga;
 - 23: construa os mapas euleriano e lagrangiano;
 - 24: **fim se**
 - 25: $\mu^{n-1} = \mu^n$, $\mu^n = \mu^{n+1}$, $\mathbf{u}^{n-1} = \mathbf{u}^n$, $\mathbf{u}^n = \mathbf{u}^{n+1}$, $p_2^{n-1} = p_2^n$, $p_2^n = p_2^{n+1}$;
 - 26: $\mathbf{X}_p^n = \mathbf{X}_p^{n+1}$, $\mathbf{U}_p^n = \mathbf{U}_p^{n+1}$;
 - 27: $\Delta t^{n-1} = \Delta t^n$, $\Delta t^n = \Delta t^{n+1}$, $t^n = t^{n+1}$, $t^{n+1} = t^n + \Delta t^{n+1}$.
-

A metodologia numérica dos escoamentos sem a presença de uma fase dispersa em uma malha bloco-estruturada com refinamento adaptativo, descrita nos Algoritmos 3.2 e 3.3, inclui apenas os passos do Algoritmo 4.2 que: verifica os critérios de refinamento, constrói e destrói a malha

bloco-estruturada, se necessário.

4.6 Nomenclatura do presente capítulo

$C_{\min}$	Valor mínimo no critério de refinamento
G	Bloco discretizado da malha composta
l	Nível de refinamento
lb	Nível base de refinamento
lt	Nível de refinamento mais fino
$ncellm$	Número de células que formarão o bloco discretizado no nível $l + 1$
$ncells$	Número de células computacionais selecionadas para refinamento
n_l	Número de blocos discretizados do nível l
nvl	Número de níveis virtuais
npl	Número de níveis físicos
N_p	Número de gotículas
p_2	Pressão dinâmica (<i>atm</i>)
r	Razão de refinamento
t	Tempo (<i>s</i>)
$\mathbf{u}$	Velocidade do escoamento (<i>m/s</i>)
$\mathbf{U}$	Velocidade da gotícula (<i>m/s</i>)

Letras Gregas

$\epsilon_{\min}$	Parâmetro que ajusta o número de células selecionadas para refinamento
Δt	Tamanho do passo no tempo (<i>s</i>)
Δx_i	Espaçamento na direção i (<i>m</i>)
Ω	Domínio computacional
ψ	Variável escalar
$\tilde{\psi}$	Valor mínimo da propriedade ψ normalizada
ν	Número de suavizações do método <i>Multigrid</i> -Multinível

Índices

p	Gotícula	n	Tempo
m	Blocos discretizados	c	Fase contínua

Operadores

$\mathcal{P}$	Prolongamento	$\mathcal{R}$	Restrição
---------------	---------------	---------------	-----------

Siglas

AMR	<i>Adaptative Mesh Refinement</i>
-----	-----------------------------------

Capítulo 5

Verificação da metodologia numérica

Neste capítulo, apresentam-se as verificações das implementações dos esquemas numéricos empregados nas discretizações das equações do escoamento da fase contínua e da dinâmica da fase dispersa, descritos nos Capítulos 3 e 4. Tais verificações numéricas são realizadas empregando-se a estratégia de *soluções manufaturadas* a serem descritas na Seção 5.1. Neste contexto, a Seção 5.2 apresenta a verificação da implementação do esquema numérico empregado para resolver as equações de Navier-Stokes para um escoamento incompressível, a Seção 5.3 a do esquema numérico empregado à equação de advecção-difusão de uma grandeza escalar e, a Seção 5.4, a do esquema numérico completo empregado num escoamento reativo com baixo número de Mach. O Capítulo se encerra com a apresentação da verificação dos esquemas numéricos das equações que modelam a fase dispersa, dos operadores de *interpolação* e de *espalhamento*, responsáveis pelo acoplamento entre as fases contínua e dispersa.

5.1 Verificação numérica por meio de soluções manufaturadas

A verificação da metodologia numérica foi realizada em um domínio computacional $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$, em uma malha composta, bloco-estruturada, com o mesmo espaçamento em todas as direções (isto é, $\Delta x_1 = \Delta x_2 = \Delta x_3$). Esta malha composta possui um nível de refinamento num formato de “L” como mostra a Figura 5.1. As verificações em malhas compostas têm por objetivo confirmar que o uso deste tipo de malha não deteriora a acurácia do método que, quando a solução do problema é bastante suave em todo lugar, deve ser a mesma que se tem em uma malha uniforme, isto é, o uso de uma malha adaptativa no processo de resolução das equações só pode ser benéfico.

As normas L_2 e L_∞ , utilizadas para medir os erros das propriedades localizadas no centro da célula computacional, são definidas na malha composta pelas expressões (5.1)-(5.2). Para variáveis vetoriais como a velocidade, localizadas nas faces, tais normas são definidas por (5.3)-(5.4),

$$\|\psi\|_2 = \left(\sum_n |\psi_n|^2 \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (5.1)$$

$$\|\psi\|_\infty = \max_n |\psi_n|, \quad (5.2)$$

$$\|u_i\|_2 = \left(\sum_n |u_{i,n}|^2 a_{i,n} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \quad (5.3)$$

Figura 5.1: Malha composta utilizada na verificação numérica: (a) malha 3D no formato “L”, (b) corte no domínio computacional na direção x_1 , (c)-(d) cortes no domínio computacional na direção x_2 e (e)-(f) cortes no domínio computacional na direção x_3 (Nós (2007)).

$$\|u_i\|_\infty = \max_n |u_{i,n}|, \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \quad (5.4)$$

onde $a_{i,n}$ são os pesos para as normas das componentes do campo de velocidade, necessários na malha composta. Para a componente da velocidade u_1 , na direção x_1 , tem-se

$$a_{1,n} = \begin{cases} \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3 & \text{nas faces } x_2 x_3 \text{ da malha grossa,} \\ \frac{\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3}{r^2} & \text{nas faces } x_2 x_3 \text{ da malha fina,} \\ \frac{(2r+1)\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3}{r^2} & \text{nas faces } x_2 x_3 \text{ da interface da malha grossa-fina,} \end{cases} \quad (5.5)$$

onde r é a razão de refinamento entre as malhas ($r = 2$, fixado). Os pesos $a_{2,n}$ e $a_{3,n}$ das componentes u_2 e u_3 do campo de velocidade são definidos de maneira similar.

Para analisar a convergência dos esquemas numéricos descritos no Capítulo 3, assume-se que a solução numérica pode ser obtida por meio de uma expansão assintótica em potências do espaçamento $h = \min(\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3)$ da malha, conforme descreve Stoer e Bulirsch (2002). Por exemplo, em uma malha uniforme a solução numérica $\psi(\mathbf{x}, \bar{t}, h)$ de uma variável escalar ψ pode ser escrita na forma assintótica como

$$\psi(\mathbf{x}, \bar{t}, h) = \psi_e(\mathbf{x}, \bar{t}) + E_q(\mathbf{x}, \bar{t})h^q + E_{q+1}(\mathbf{x}, \bar{t})h^{q+1} + \dots, \quad (5.6)$$

onde ψ_e é a solução exata, E_i é um coeficiente que não depende de h , com $i = q, q+1, \dots$, $\bar{t}$ é um instante de tempo fixo e q é a ordem de aproximação do método numérico utilizado na aproximação. Desta forma, aproximando a solução em uma malha mais fina ainda, uma com espaçamento $\frac{h}{2}$, obtêm-se

$$\psi(\mathbf{x}, \bar{t}, h) \approx \psi_e(\mathbf{x}, \bar{t}) + E_q(\mathbf{x}, \bar{t})h^q \quad \text{e} \quad \psi\left(\mathbf{x}, \bar{t}, \frac{h}{2}\right) \approx \psi_e(\mathbf{x}, \bar{t}) + E_q(\mathbf{x}, \bar{t})\frac{h^q}{2^q}. \quad (5.7)$$

As aproximações na expressão (5.7) implicam na seguinte estimativa para a taxa de convergência do esquema numérico

$$\frac{\|\psi(\mathbf{x}, \bar{t}, h) - \psi_e(\mathbf{x}, \bar{t})\|}{\left\|\psi\left(\mathbf{x}, \bar{t}, \frac{h}{2}\right) - \psi_e(\mathbf{x}, \bar{t})\right\|} \approx 2^q, \quad (5.8)$$

onde $\|\cdot\|$ é uma norma definida por (5.1)-(5.5). Observe que as razões 2^q , obtidas na expressão (5.8), implicam em métodos numéricos de q -ésima ordem. A ordem de convergência q é obtida aplicando-se $\log_2$ na expressão (5.8). Nas verificações numéricas feitas na malha bloco-estruturada o refinamento é fixo e mantém suas dimensões inalteradas. Nas próximas seções, são apresentados os estudos de convergência numérica por refinamento de malha dos métodos numéricos descritos nos Capítulos 3 e 4.

5.2 Escoamento incompressível

Aqui, apresenta-se a verificação do esquema numérico empregado para resolver as equações de Navier-Stokes que descrevem um escoamento incompressível. Oriundo do trabalho de Nós (2007), a

implementação desta metodologia numérica evoluiu ao longo do tempo para um código-base denominado “AMR3D”, fruto de um trabalho colaborativo com o Laboratório de Dinâmica de Fluidos da Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia (MFLab/FEMEC-UFU). A verificação da implementação daquelas equações neste código é o ponto de partida de qualquer desenvolvimento novo. As equações de Navier-Stokes para um escoamento incompressível são dadas por

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + f_i, \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \quad (5.9)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (5.10)$$

sendo f_i o termo forçante que garantirá a igualdade das equações descritas na expressão (5.9) dado por

$$f_i = \rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right]. \quad (5.11)$$

Manufatura-se a solução de (5.9)-(5.10) impondo-se as funções

$$\rho_e(\mathbf{x}, t) = 1, \quad (5.12)$$

$$\mu_e(\mathbf{x}, t) = \mu_0 + \mu_1 \cos^2(2\pi(x_1 + x_2 + x_3) + t), \quad (5.13)$$

$$u_{1,e}(\mathbf{x}, t) = 1 + \exp(-4\pi^2 \lambda t) [\cos(2\pi(x_2 - t)) + \sin(2\pi(x_3 - t))], \quad (5.14)$$

$$u_{2,e}(\mathbf{x}, t) = 1 + \exp(-4\pi^2 \lambda t) [\sin(2\pi(x_1 - t)) + \cos(2\pi(x_3 - t))], \quad (5.15)$$

$$u_{3,e}(\mathbf{x}, t) = 1 + \exp(-4\pi^2 \lambda t) [\cos(2\pi(x_1 - t)) + \sin(2\pi(x_2 - t))], \quad (5.16)$$

$$p_e(\mathbf{x}, t) = \cos(2\pi(x_1 + x_2 + x_3) + t), \quad (5.17)$$

com $\mu_0 = 1$, $\mu_1 = 0.5$, $\lambda = 0.05$ e o campo de velocidade tem divergente zero. As funções utilizadas como solução exata para o campo de velocidade são descritas por Griffith (2005).

Neste teste, foram utilizadas condições de fronteira Dirichlet para as componentes do campo de velocidade e Neumann para a pressão, vindas das soluções exatas. Conforme apresentado na Seção 3.2.1, a escolha das condições de fronteira para a pressão são determinadas pela escolha das condições de fronteira das componentes do campo de velocidade. A Tabela 5.1, apresenta os erros globais e a ordem de aproximação para o campo de velocidade $\mathbf{u}$ e para a pressão p na malha composta apresentada anteriormente, empregando-se o método de Gear extrapolado dado por (3.16). Constata-se segunda ordem para todas as grandezas.

Para a aproximação do campo de velocidade $\mathbf{u}$, espera-se segunda ordem de convergência. Para a pressão espera-se pelo menos primeira ordem de convergência devido a utilização do método da projeção que desacopla a pressão e a velocidade nas equações de Navier-Stokes, conforme descrevem Chorin (1968), Roma (1996) e Nós (2007). Nesta verificação, o tempo final de simulação foi $\bar{t} = 0.5$ e foi utilizado o modelo de turbulência LES (*Large Eddy Simulation*), descrito no Apêndice A. A constante de Smagorinsky utilizada foi $C_s = 0.18$.

A implementação das equações de Navier-Stokes para um escoamento incompressível (5.9)-(5.10) foram verificadas para os diferentes esquemas temporais IMEX descritos na Seção 3.2.1, sendo os erros globais para cada um deles muito similares. Durante o processo de verificação numérica, observou-se que o método de Gear extrapolado gasta mais tempo de processamento. O

Tabela 5.1: Erro global e ordem de aproximação para o campo de velocidade e pressão na malha composta.

N	$\ u_{1,e} - u_1\ _2$	q	$\ u_{2,e} - u_2\ _2$	q	$\ u_{3,e} - u_3\ _2$	q	$\ p_e - p\ _2$	q
16^3	3.4348×10^{-3}	—	3.4765×10^{-3}	—	3.4310×10^{-3}	—	1.4308×10^{-1}	—
32^3	8.6952×10^{-4}	1.99	8.7751×10^{-4}	1.99	8.6033×10^{-4}	1.99	4.0890×10^{-2}	1.80
64^3	2.1885×10^{-4}	1.99	2.2058×10^{-4}	1.99	2.1586×10^{-4}	1.99	1.1163×10^{-2}	1.87
128^3	5.4830×10^{-5}	2.00	5.5216×10^{-5}	2.00	5.4000×10^{-5}	2.00	3.0100×10^{-3}	1.94

tempo gasto por passo de integração (normalizado pelo tempo do método de Gear extrapolado) foi, em média, 0.79 para o MCNAB, 0.83 para o CNAB, 0.98 para o CNLF e 1 para Gear extrapolado. Embora o método de Gear extrapolado seja aquele que apresenta o maior tempo computacional por passo de integração, é justo ele aquele que permite maiores passos de integração com garantia de estabilidade sendo portanto, no fim, a escolha mais eficiente.

5.3 Advecção-difusão de uma grandeza escalar

Ao AMR3D original, agrega-se a implementação da equação de advecção-difusão de variáveis escalares (por exemplo, fração de mistura),

$$\frac{\partial(\rho z)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j z)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) + f_z, \quad (5.18)$$

onde f_z é o termo forçante. Para esta verificação, foram escolhidas funções suaves para ρ , $\mathbf{u}$, D e z dadas por

$$z_e(\mathbf{x}, t) = \exp(-t)(x_2^3 + x_3^2) \sin(\pi x_1), \quad (5.19)$$

$$D_e(\mathbf{x}, t) = (x_1^3 + x_2^3 + x_3^3 + 1) \exp(-t), \quad (5.20)$$

$$\rho_e(\mathbf{x}, t) = (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \exp(-t), \quad (5.21)$$

$$u_{1,e}(\mathbf{x}, t) = \sin^2(2\pi(x_1 + x_2 + x_3) + t), \quad (5.22)$$

$$u_{2,e}(\mathbf{x}, t) = \cos^2(2\pi(x_1 + x_2 + x_3) + t), \quad (5.23)$$

$$u_{3,e}(\mathbf{x}, t) = \sin(2\pi(x_1 + x_2 + x_3) + t), \quad (5.24)$$

Como exemplo, a Tabela 5.2 apresenta os erros e a ordem de aproximação na malha uniforme e na malha composta com um nível de refinamento (Figura 5.1). O tempo final nesta verificação foi $\bar{t} = 1$. Note que a segunda ordem de convergência é obtida em ambos os casos.

Tabela 5.2: Erro e ordem de aproximação para a equação do transporte (5.18).

Malha uniforme			Malha composta		
N	$\ z_e - z\ _2$	q	N	$\ z_e - z\ _2$	q
16^3	2.1594×10^{-4}	—	16^3	2.1154×10^{-4}	—
32^3	5.4075×10^{-5}	1.99	32^3	5.2973×10^{-5}	1.99
64^3	1.3463×10^{-5}	2.00	64^3	1.3188×10^{-5}	2.00
128^3	3.3660×10^{-6}	2.00	128^3	3.2950×10^{-6}	2.00

5.4 Escoamento reativo com baixo número de Mach

Além da implementação numérica para a advecção-difusão de uma grandeza escalar, é necessária a implementação para a equação da conservação de massa e a generalização do Método da Projeção, originalmente implementada no código AMR3D, para se poder simular escoamentos reativos com baixo número de Mach. Tal generalização é necessária para se poder resolver a correção de pressão que, no contexto de baixo Mach, provém de uma condição de divergência não nula do campo de velocidade. As equações utilizadas para a verificação do modelo matemático completo que descreve a fase contínua, neste caso, são

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = \epsilon \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_j^2} + f_\rho, \quad (5.25)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p_2}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] + f_i, \quad 1 \leq i \leq 3, \quad (5.26)$$

$$\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j z)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) + f_z, \quad (5.27)$$

$$p_0 = \rho z, \quad (5.28)$$

onde f_ρ , f_i e f_z são, respectivamente, os termos forçantes da equação da conservação de massa, da equação da conservação da quantidade de movimento e da equação da advecção-difusão da fração de mistura. O termo de difusão ρD é dado em função da viscosidade dinâmica μ , já que assume-se $Le = 1$, conforme Pember *et al.* (1998) e Poinso e Veynante (2005). Assim sendo, tem-se $\rho D = \frac{\mu}{Pr}$. A primeira e a última equação, (5.25) e (5.28), combinadas produzem uma restrição não nula para o divergente do campo de velocidade que requer que o Método da Projeção seja estendido, no caso de escoamentos reativos com baixo número de Mach, como descrito na Seção 3.1.1. Neste caso, obtém-se

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = \frac{1}{z} \frac{Dz}{Dt} = \frac{1}{p_0} \left[\frac{\partial(\rho z)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j z)}{\partial x_j} \right]. \quad (5.29)$$

Dependendo do regime do escoamento, há instabilidades numéricas oriundas das discretizações centradas de equações hiperbólicas. Para a equação da conservação de massa (tipo hiperbólico), foi adotada a estratégia de se acrescentar um termo de *difusão artificial*, $\epsilon = O(\Delta x)$, para estabilizá-la (veja a Seção 3.2.4). Assim sendo, o resultado é a equação (5.25), conforme Strikwerda (2004) e Trottenberg *et al.* (2001). As funções usadas para esta verificação foram

$$\rho_e(\mathbf{x}, t) = \rho_0 + \rho_1 \sin^2(2\pi(x_1 + x_2 + x_3) + t), \quad (5.30)$$

$$z_e(\mathbf{x}, t) = \frac{p_0}{\rho_e}, \quad (5.31)$$

$$\mu_e(\mathbf{x}, t) = \mu_0 + \mu_1 \cos^2(2\pi(x_1 + x_2 + x_3) + t), \quad (5.32)$$

$$u_{1,e}(\mathbf{x}, t) = \sin^2(2\pi(x_1 + x_2 + x_3) + t), \quad (5.33)$$

$$u_{2,e}(\mathbf{x}, t) = \cos^2(2\pi(x_1 + x_2 + x_3) + t), \quad (5.34)$$

$$u_{3,e}(\mathbf{x}, t) = \sin(2\pi(x_1 + x_2 + x_3) + t), \quad (5.35)$$

$$p_{2,e}(\mathbf{x}, t) = \cos(2\pi(x_1 + x_2 + x_3) + t), \quad (5.36)$$

com $p_0 = 1$, $\rho_0 = 0.5$, $\rho_1 = 1$, $\mu_0 = 1$, $\mu_1 = 0.5$ e o número de Prandtl, $Pr = 0.75$. Note que o divergente do campo de velocidade é diferente de zero. Na face x_1x_3 em $x_2 = 0$ foram empregadas condições de fronteira Dirichlet para as componentes do campo de velocidade, para o escalar conservado e para a massa específica. Para a pressão p_2 foi empregada condição de fronteira Neumann. Nas demais faces foram utilizadas condições de fronteira Neumann para as componentes do campo de velocidade, para o escalar conservado e para a massa específica e condição de fronteira Dirichlet para a pressão p_2 . Todas as condições de fronteira são oriundas das soluções manufaturadas. A Tabela 5.3 apresenta os erros e a ordem de aproximação numérica das componentes do campo de velocidade, da pressão dinâmica p_2 , da massa específica ρ e do escalar z na malha composta, obtidas para estas soluções manufaturadas. O tempo final utilizado nesta verificação foi $\bar{t} = 0.5$.

Tabela 5.3: Erro e ordem de aproximação do campo de velocidades, da pressão, da densidade e da fração de mistura na malha composta.

N	$\ u_{1,e} - u_1\ _2$	q	$\ u_{2,e} - u_2\ _2$	q	$\ u_{3,e} - u_3\ _2$	q
16^3	1.7730×10^{-2}	—	1.8726×10^{-2}	—	3.4106×10^{-3}	—
32^3	4.4185×10^{-3}	2.00	4.6506×10^{-3}	2.00	9.1857×10^{-4}	1.89
64^3	1.1145×10^{-3}	1.98	1.1676×10^{-3}	1.99	2.5448×10^{-4}	1.85
128^3	2.8220×10^{-4}	1.98	2.9866×10^{-4}	1.96	7.0944×10^{-5}	1.84
N	$\ p_{2,e} - p_2\ _2$	q	$\ \rho_e - \rho\ _2$	q	Erro $\ z_e - z\ _2$	q
16^3	7.3144×10^{-1}	—	4.0612×10^{-3}	—	3.4434×10^{-3}	—
32^3	2.0906×10^{-1}	1.80	9.8890×10^{-4}	2.03	8.3116×10^{-4}	2.05
64^3	5.8046×10^{-2}	1.84	2.4180×10^{-4}	2.03	2.0215×10^{-4}	2.03
128^3	2.0189×10^{-2}	1.52	5.9304×10^{-5}	2.02	5.0875×10^{-5}	1.99

5.5 Fase dispersa

A fase dispersa, descrita por meio de uma abordagem lagrangiana, é modelada por meio de um sistema de equações diferenciais ordinárias, conforme descrito na Seção 2.4.1. Na verificação numérica, foi utilizada a equação que descreve a posição $\mathbf{X}_p$, de cada gotícula p , dada por

$$\frac{d\mathbf{X}_p(t)}{dt} = \mathbf{U}_p(t), \quad (5.37)$$

$$\mathbf{X}_p(0) = (2.1, 0.1, 1).$$

A verificação numérica foi realizada em um domínio computacional $\Omega = [0, 3] \times [0, 3] \times [0, 6]$. As soluções manufaturadas utilizadas foram,

$$X_{1,e}(t) = 2 \exp(-3t) + 0.1, \quad (5.38)$$

$$X_{2,e}(t) = \frac{100}{1 + 99 \exp(-0.2t)}, \quad (5.39)$$

$$X_{3,e}(t) = t + \frac{1}{1-t}. \quad (5.40)$$

Substituindo as funções descritas na expressão (5.38)-(5.40) nas equações descritas pela ex-

pressão (5.37), obtêm-se

$$U_{1,e}(t) = -3X_{1,e}(t) + 0.3, \quad (5.41)$$

$$U_{2,e}(t) = \frac{198 \exp(0.2t)}{(99 + \exp(0.2t))^2}, \quad (5.42)$$

$$U_{3,e}(t) = 1 + (t - X_{3,e}(t))^2. \quad (5.43)$$

O método de Euler Modificado (3.62) foi utilizado para resolver numericamente o sistema (5.37). A verificação numérica é feita em uma malha uniforme e em uma malha composta. A Tabela 5.4 apresenta os erros e a ordem de aproximação para a verificação numérica do sistema (5.37). Nesta verificação o tempo final de simulação foi $\bar{t} = 0.6$. Conforme esperado é obtida segunda ordem de aproximação.

Tabela 5.4: Erro e ordem de aproximação das posições das gotículas.

N	$\ X_{1,ex} - X_1\ _2$	q	$\ X_{2,ex} - X_2\ _2$	q	$\ X_{3,ex} - X_3\ $	q
32^3	2.9931×10^{-3}	—	1.1701×10^{-7}	—	4.2890×10^{-2}	—
64^3	7.4847×10^{-4}	2.00	2.9254×10^{-8}	2.00	1.0813×10^{-2}	1.99
128^3	1.8714×10^{-4}	2.00	7.3152×10^{-9}	2.00	2.7155×10^{-3}	1.99
256^3	4.6794×10^{-5}	2.00	1.8304×10^{-9}	2.00	6.8616×10^{-4}	1.98
512^3	1.1706×10^{-5}	2.00	4.5887×10^{-10}	1.99	1.7685×10^{-4}	1.96

Para completar a validação da fase dispersa é necessário verificar se a aproximação da *função Delta de Dirac*, a qual é utilizada para acoplar as fases dispersa e contínua, conforme descrito na Seção 3.3.2 está implementada corretamente. A função utilizada para aproximar a *Delta de Dirac* é dada pela expressão (3.65). O domínio computacional $\Omega = [0, 2] \times [0, 2] \times [0, 2]$ com um refinamento estático na região $[0.8, 2] \times [0.8, 2] \times [0.5, 1.2]$ é utilizado para a verificação numérica. O campo de velocidade $\mathbf{u}$ é dado pelas funções (5.33)-(5.35). A posição no domínio computacional para ser feita a interpolação do campo de velocidade foi $\mathbf{X}_p = (1.2, 1.335, 0.95)$. A Tabela 5.5 apresenta os resultados da verificação numérica do acoplamento entre as fases no sentido fase contínua para a fase dispersa. Conforme o esperado é obtida segunda ordem nesta aproximação.

Tabela 5.5: Erro e taxa de convergência da interpolação do campo de velocidade do escoamento para a posição $(1.2, 1.335, 0.95)$.

N	$\ U_{1,e} - U_{1,i}\ _2$	q	$\ U_{2,e} - U_{2,i}\ _2$	q	$\ U_{3,e} - U_{3,i}\ $	q
16^3	1.9052×10^{-1}	—	1.9332×10^{-1}	—	1.0514×10^2	—
32^3	5.6170×10^{-2}	1.76	5.5428×10^{-2}	1.80	2.8237×10^{-3}	1.90
64^3	1.4517×10^{-2}	1.95	1.4970×10^{-2}	1.89	6.9805×10^{-4}	2.02
128^3	3.7391×10^{-3}	1.96	3.5926×10^{-3}	2.06	1.8021×10^{-4}	1.95
256^3	9.3327×10^{-4}	2.00	9.3916×10^{-4}	1.93	4.4822×10^{-5}	2.00

5.6 Nomenclatura do presente capítulo

a	Pesos para o cálculo da norma na malha composta
D	Coeficiente de difusão
h	Espaçamento da malha espacial
p	Pressão (atm)
p_2	Pressão dinâmica (atm)
p_0	Pressão termodinâmica (atm)
q	Ordem de aproximação
r	Razão de refinamento
t	tempo (s)
$\mathbf{u}$	Velocidade do escoamento (m/s)
$\mathbf{U}_p$	Velocidade da gotícula (m/s)
$\mathbf{x}$	Posição (m)
$\mathbf{X}_p$	Posição da gotícula (m/s)
z	Escalar conservado normalizado

Letras Gregas

Δx_i	Espaçamento na direção i (m)
ϵ	Coeficiente de difusão numérica
ρ	Massa específica, densidade (kg/m^3)
Ω	Domínio computacional
ψ	Variável escalar
μ	Viscosidade dinâmica ($kg/m \times s$)

Adimensionais

Le	Número de Lewis	Pr	Número de Prandtl
------	-----------------	------	-------------------

Índices

p	Gotícula	n	Número de células computacionais
-----	----------	-----	----------------------------------

Operadores

$\ \cdot\ _2$	Norma L_2	$\ \cdot\ _\infty$	Norma do máximo
---------------	-------------	--------------------	-----------------

Siglas

LES	<i>Large-Eddy Simulation</i>
IMEX	Esquemas numéricos Implícitos-Explícitos
CNAB	Cranck Nicolson Adams-Bashforth
MCNAB	Cranck Nicolson Adams-Bashforth Modificado
CNLF	Cranck Nicolson <i>Leap-frog</i>

Capítulo 6

Resultados numéricos

O presente capítulo apresenta os resultados da aplicação da metodologia numérica proposta em três situações distintas. Na primeira, abordam-se dois casos de escoamentos incompressíveis (não-reativos): um jato laminar e um jato turbulento. A Seção 6.1 apresenta os resultados obtidos, contendo comparações dos decaimentos da componente axial da velocidade na linha de centro do domínio computacional com decaimentos descritos por Hussein *et al.* (1994), Turns (1996) e Boersma *et al.* (1998). Na segunda situação, aplica-se a metodologia numérica proposta a um escoamento incompressível (não-reativo) com gotículas lagrangianas inertes e que não se evaporam. A Seção 6.2 apresenta os resultados preliminares de uma simulação numérica baseada no experimento descrito no trabalho de Stårner e Masri (2003) e nos dados da simulação numérica feita por De *et al.* (2011). Finalmente, na terceira situação, com a metodologia proposta abordam-se dois escoamentos reativos com baixo número de Mach: um jato laminar e um jato turbulento. Os dados da simulação do jato laminar reativo são baseados no experimento descrito por Smooke *et al.* (1996). A simulação do jato turbulento reativo é baseada nos dados experimentais da chama de difusão D descrita em Balow e Frank (2007) e simulada numericamente por Pitsch e Steiner (2000) e Kempf *et al.* (2005), dentre outros. Informações sobre o número de remalhagens, células computacionais utilizadas, estabilidade do esquema temporal e tamanho do passo de integração, dentre outras, são coletadas com o objetivo de se mostrar o desempenho e o potencial da metodologia numérica quando aplicada no contexto aqui considerado.

6.1 Simulação de escoamentos incompressíveis (não-reativos)

Para a simulação de jatos incompressíveis (não-reativo) a densidade e a viscosidade dinâmica são constantes, $\rho = 1.184 \text{ kg/m}^3$ e $\mu = 1.85 \times 10^{-5} \text{ kg/ms}$. Na Seção 6.1.1, são apresentados os resultados numéricos das simulações de um jato laminar (não-reativo) e na Seção 6.1.2 os resultados da simulação de um jato turbulento não-reativo. As simulações computacionais são feitas empregando-se o modelo matemático dado pelas equações de Navier-Stokes. Dessa forma para um escoamento incompressível têm-se

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right], \quad \text{para } i = 1, 2, 3 \quad (6.1)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (6.2)$$

onde ρ é a massa específica, u_i é a componente do campo de velocidade em cada uma das direções, p é a pressão e μ é a viscosidade dinâmica. Para o caso turbulento utilizou-se o modelo de turbulência LES (veja o Apêndice A), após a filtragem das equações (6.1)-(6.2) o termo μ representa a viscosidade dinâmica mais a viscosidade turbulenta $\mu_t = (C_s \Delta)^2 |\mathcal{S}_{ij}|$, onde $\Delta = (\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3)^{\frac{1}{3}}$ é o tamanho do filtro, $|\mathcal{S}_{ij}|$ é o módulo da taxa de deformação dada por

$$|\mathcal{S}_{ij}| = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, \quad \text{com} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (6.3)$$

e C_s é a constante de Smagorinsky, $0.1 \leq C_s \leq 0.18$ (veja Pope (2000)). Para os resultados que se seguem, foi utilizada $C_s = 0.15$.

A Figura 6.1 mostra um esboço da entrada do domínio computacional composta por dois discos concêntricos, o menor denominado *bocal* com diâmetro d_0 e o segundo, denominado *piloto* que serve para estabilizar a velocidade (no caso turbulento) cujo diâmetro é d_1 . Na entrada do domínio computacional, são usadas condição de fronteira Dirichlet para as componentes do campo de velocidade e condição de fronteira Neumann nula para a correção da pressão. Nas demais faces do domínio computacional, são usadas as condições de fronteira Neumann nulas para as componentes do campo de velocidade e a condição de fronteira Dirichlet para a correção da pressão.

Figura 6.1: Esboço da entrada da componente da velocidade na direção do escoamento.

6.1.1 Escoamento incompressível (não-reativo) laminar

Os dados da simulação do jato laminar (não-reativo) foram baseados nos dados da simulação do jato laminar reativo descritos por Pember *et al.* (1998). O diâmetro do bocal do jato laminar é $d_0 = 4 \times 10^{-3} \text{ m}$. As dimensões do domínio computacional são $0.16 \text{ m} \times 0.16 \text{ m} \times 0.16 \text{ m}$. A velocidade na entrada do domínio é $u_{2,d_0} = 0.25 \text{ m/s}$ no bocal, $u_2 = 2 \times 10^{-3} \text{ m/s}$ na região piloto e no restante da entrada (veja a Figura 6.1). O número de Reynolds do jato laminar baseado na medida do diâmetro do bocal e na velocidade u_{2,d_0} é $Re \approx 65$.

A simulação foi realizada em uma malha cartesiana bloco-estruturada tridimensional adaptativa, composta por uma malha base mais três níveis de refinamento (quatro níveis no total). A malha base possui $32 \times 32 \times 32$ células computacionais. O nível de refinamento mais fino possui espaçamento $6.25 \times 10^{-4} \text{ m}$. Isso garante que a região de saída do jato contenha pelo menos 6 células computacionais do nível mais fino.

A seleção das células computacionais que geram um nível de refinamento é descrita na Seção 4.2. O critério de refinamento utilizado nesta simulação foi baseado na norma do tensor de tensões viscosas, por meio da expressão (4.3) e no valor da componente da velocidade na direção do escoamento por meio da expressão (4.4). O tamanho do passo de integração é determinado pela condição CFL (4.1) sendo $\Delta t = O(\Delta x^{0.988})$.

A Figura 6.3 mostra a componente da velocidade na direção do escoamento em um plano de corte central do domínio computacional com a malha bloco-estruturada de quatro níveis de refinamento. As Figuras 6.2(a)- 6.2(f) mostram, em um plano de corte no centro do domínio computacional, a evolução da componente da velocidade na direção do escoamento do jato laminar

(não-reativo).

Segundo Kuo (2005), Turns (1996) e Boersma *et al.* (1998), o decaimento da componente da velocidade na direção do escoamento para um jato laminar na linha de centro do domínio computacional é descrito pela expressão

$$\frac{u_2^*}{u_{d_0}} = 0.375 Re_r \left(\frac{r_0}{x_2} \right), \quad (6.4)$$

onde u_2^* é a velocidade do escoamento na linha de centro na direção do escoamento, u_{d_0} é a velocidade do escoamento na saída do bocal, r_0 é a medida do raio do bocal e Re_r é o número de Reynolds baseado na medida de r_0 , neste caso, $Re_r \approx 37.5$. A Figura 6.4 mostra o decaimento da componente da velocidade na direção do escoamento obtido nesta simulação e o decaimento descrito pela expressão (6.4). É importante ressaltar, conforme Turns (1996), que a comparação do decaimento é válida a partir $x_2^* = \frac{x_2}{r_0} \gtrsim 0.375 Re_r$, o qual, neste caso, é equivalente a $\frac{x_2}{d_0} \approx 10$. É necessário investigar a diferença entre os decaimentos na Figura 6.4 utilizando malhas com mais níveis de refinamento, aumentando o número de células computacionais no bocal a fim de descrever melhor a velocidade.

Para comparar o benefício do uso da malha composta (bloco-estruturada) versus o uso da malha uniforme, o mesmo problema foi simulado em uma malha uniforme equivalente ao nível mais fino da simulação do escoamento laminar, uma malha uniforme dada por $256 \times 256 \times 256$ células computacionais. A razão entre o tempo computacional gasto na malha uniforme e o tempo gasto na malha bloco-estruturada adaptativa (AMR) indica que no início da simulação numérica a malha AMR chegou a ser 146 vezes mais rápida que a malha uniforme e nos instantes de tempo finais, chegou a ser 16 vezes mais rápida. A simulação numérica do escoamento laminar realizou aproximadamente 50 remalhagens ao longo dos quase 30×10^3 passos de integração. A Figura 6.5 mostra a razão entre os tempos gastos em uma malha uniforme (TMU) e em uma malha composta (TMC) bloco-estruturada. A partir do passo de integração 2×10^3 o consumo de tempo por passo de integração é mantido aproximadamente constante.

Figura 6.3: Zoom da velocidade do escoamento em um corte central e malha bloco-estruturada .

6.1.2 Escoamento incompressível (não-reativo) turbulento

A simulação do jato turbulento incompressível (não-reativo) empregou os dados da velocidade e domínio físico da simulação da chama de difusão, descritos nos trabalhos de Balow e Frank (2007), Kempf *et al.* (2005) e Pitsch e Steiner (2000). O diâmetro do bocal é $d_0 = 7.2 \times 10^{-3} \text{ m}$ e o diâmetro da região piloto é $d_1 = 1.8 \times 10^{-2} \text{ m}$. As dimensões do domínio computacional nesta simulação são $40d_0 \times 80d_0 \times 40d_0$, aproximadamente $0.288 \text{ m} \times 0.576 \text{ m} \times 0.288 \text{ m}$.

As componentes da velocidade na entrada do domínio são dadas por $u_{1,in} = u_{3,in} = 0$ e

Figura 6.2: Escoamento incompressível (não-reativo) laminar: componente da velocidade na direção do escoamento em um plano de corte no domínio computacional em $x_3 = 8 \times 10^{-2} \text{ m}$ em diferentes instantes de tempo.

Figura 6.4: Decaimento da velocidade na direção do escoamento na linha de centro do domínio computacional.

Figura 6.5: Razão entre os tempos gastos em uma malha uniforme (TMU) e em uma malha composta bloco-estruturada (TMC).

$u_{2,in} = u_{d0} + u_{d1}$, com

$$u_{d1} = \frac{v_1 + v_0}{2} - \left(\frac{v_1 - v_0}{2} \right) \tanh \left[25 \left(\frac{r_j}{r_1} - \frac{r_1}{r_j} \right) \right] \quad (6.5)$$

$$u_{d0} = \frac{v_2 + v_0}{2} - \left(\frac{v_2 - v_0}{2} \right) \tanh \left[25 \left(\frac{r_j}{r_0} - \frac{r_0}{r_j} \right) \right], \quad (6.6)$$

onde $r_j = \sqrt{(x_3 - 0.5 \cdot b_3)^2 + (x_1 - 0.5 \cdot b_1)^2}$, $v_0 = 0.9 \text{ m/s}$, $v_1 = 11.4 \text{ m/s}$ e a velocidade do jato principal é $v_2 = 49.6 \text{ m/s}$, r_1 e r_0 são, respectivamente, os raios da região piloto e do bocal, b_1 e b_3 são os tamanhos do domínio nas direções x_1 e x_3 , respectivamente.

Além disso, foi acrescentada uma perturbação (ruído branco) na componente u_2 do campo de velocidade na direção do escoamento para simular a turbulência na entrada do domínio computacional conforme descreve Boersma *et al.* (1998), dada por $0.01 \times \text{ran} \times u_2$, onde ran é um número aleatório gerado uniformemente entre 0 e 1.

O número de Reynolds baseado no diâmetro do bocal é $Re = 2.24 \times 10^4$. A simulação foi realizada em uma malha bloco-estruturada composta por uma malha base mais três níveis de refinamento adaptativo (quatro níveis no total). A malha base possui $32 \times 64 \times 32$ células computacionais. A Figura 6.6 mostra uma malha bloco-estruturada utilizada nesta simulação. O nível mais fino possui espaçamento $1.125 \times 10^{-3} \text{ m}$, o qual garante que o diâmetro do bocal contenha pelo menos 6 células com-

Figura 6.6: Malha tridimensional com refinamento adaptativo.

putacionais. O que pode não ser suficiente para representar a física do problema, veja comentários na Seção 6.4. O critério de refinamento usado nesta simulação foi baseado na norma do tensor de tensões viscosas (o qual se mostrou equivalente ao critério baseado na vorticidade) e na norma da viscosidade turbulenta com 85% de eficiência (isto é, a razão entre o número de células que precisam ser refinadas sobre o número de células que formarão um bloco discretizado, veja a Seção 4.2). A marcação das células computacionais que necessitam de refinamento é descrita na Seção 4.2. Para esta simulação numérica, o tamanho do passo de integração, determinado pela condição CFL (4.1) foi $\Delta t = O(\Delta x^{1.65})$. As Figuras 6.7(a)-(f) mostram, em um corte central do domínio computacional, a evolução da componente da velocidade na direção do escoamento. A Figura 6.8 mostra a componente da velocidade na direção do escoamento e os detalhes da malha bloco-estruturada gerada, com quatro níveis de refinamento. As Figuras 6.9-6.10 mostram, em cortes transversais do domínio computacional em 15%, 25%, 50% e 75% na direção do escoamento, a componente da velocidade na direção do escoamento junto com a malha bloco-estruturada com quatro níveis de refinamento em um mesmo instante de tempo. Os cortes são, respectivamente, em $x_2 = 0.0864 \text{ m}$ nas Figuras 6.9(a)-(b), $x_2 = 0.144 \text{ m}$ nas Figuras 6.10(a)-(b), $x_2 = 0.288 \text{ m}$ nas Figuras 6.10(c)-(d) e $x_2 = 0.432 \text{ m}$ nas Figuras 6.10(e)-(f). As Figuras 6.11(a)-6.11(b) mostram detalhes da malha composta com refinamento adaptativo. A Figura 6.11(a) mostra, em um corte no centro do domínio computacional, a componente da velocidade na direção do escoamento junto com o refinamento adaptativo. A Figura 6.11(b) mostra os blocos discretizados que compõem a malha bloco-estruturada com refinamento adaptativo. Os contornos identificam os diferentes blocos discretizados de cada nível de refinamento. Note que a união de blocos discretizados com mesmo espaçamento formam um nível de refinamento.

O decaimento médio da velocidade de jatos turbulentos incompressíveis na linha de centro é

Figura 6.7: Escoamento incompressível (não-reativo) turbulento: componente da velocidade na direção do escoamento em um plano de corte no centro do domínio computacional em $x_3 = 1.44 \times 10^{-1} m$.

descrito pela expressão

$$\frac{u_2^*}{u_{d_0}} = \frac{B_u d_0}{(x_2 - x_0)} \quad (6.7)$$

onde $B_u = 5.8$ e $x_0 = 4d_0$, conforme Hussein *et al.* (1994) e Boersma *et al.* (1998). Boersma *et al.* (1998) descreve que o perfil do decaimento da velocidade depende do diâmetro do bocal e da velocidade inicial do jato. A Figura 6.12 mostra o decaimento obtido nesta simulação e o decaimento

Figura 6.8: Velocidade do jato na direção do escoamento com a malha bloco-estruturada em um plano de corte central.

Figura 6.9: Escoamento incompressível (não-reativo) turbulento: componente da velocidade na direção do escoamento em um instante de tempo em um plano de corte transversal em 15% (a)-(b).

descrito pela expressão (6.7). Vale ressaltar que seria necessário mais um nível de refinamento para que o bocal contivesse o número mínimo de células computacionais relatado na literatura. Além disso, verificou-se que o decaimento da velocidade na linha de centro é influenciado pela escolha da constante de Smagorinsky, do modelo de turbulência. Mais comentários são descritos na Seção 6.4.

Figura 6.10: Escoamento incompressível (não-reativo) turbulento: componente da velocidade na direção do escoamento em um instante de tempo em em planos de corte transversais em 25% (a)-(b), 50% (c)-(d) e 75% (e)-(f).

(a) Componente da velocidade e malha.

(b) Blocos discretizados e níveis de refinamento.

Figura 6.11: Detalhe de uma malha com quatro níveis de refinamento adaptativo na simulação do escoamento (não-reativo) turbulento.

Figura 6.12: Decaimento médio da componente da velocidade na direção do escoamento na linha de centro do domínio computacional.

Para ilustrar a eficácia da modelagem da turbulência, calculou-se o espectro da energia cinética turbulenta em dois pontos do domínio computacional. A Figura 6.13(a) mostra a localização dos

pontos escolhidos para a coleta das informações (estatísticas) para o cálculo da energia cinética turbulenta (para mais detalhes veja Pope (2000)). A Figura 6.13(b) mostra o espectro da energia cinética turbulenta nos dois pontos escolhidos. A imagem inferior se refere ao ponto $B = (1.44 \times 10^{-1} m, 1.125 \times 10^{-1} m, 1.44 \times 10^{-1} m)$ próximo a saída do bocal e a imagem superior mostra o espectro da energia cinética turbulenta no ponto $A = (1.44 \times 10^{-1} m, 3.24 \times 10^{-1} m, 1.44 \times 10^{-1} m)$. Ambas as imagens mostram certa concordância com o decaimento esperado de $-\frac{5}{3}$. Um próximo passo do trabalho incluirá um modelo de turbulência dinâmico, veja Germano *et al.* (1991) e outras maneiras de simular a turbulência na entrada do domínio computacional.

(a) Localização dos pontos escolhidos para o coleta das informações. (b) Decaimento do espectro da energia cinética turbulenta.

Figura 6.13: Decaimento do espectro da energia cinética turbulenta nos pontos A e B juntamente com a reta de inclinação $-\frac{5}{3}$.

A seguir são descritos alguns aspectos da implementação que mostram as vantagens e algumas dificuldades da metodologia adotada para simular um escoamento incompressível (não-reativo) turbulento. Para comparar o benefício do uso da malha composta bloco-estruturada com refinamento adaptativo versus o uso da malha uniforme, a simulação foi realizada em uma malha com $256 \times 512 \times 256$ células computacionais, a qual é equivalente ao nível de refinamento mais fino. Comparando-se com o tempo gasto pela simulação numérica quando o escoamento já estava desenvolvido (veja a Figura 6.13(a)) com aproximadamente 8.9×10^6 células computacionais (incluindo células *fantasmas* e células de níveis de *multigrid*, abaixo do nível base), a simulação numérica na

malha composta foi 5 vezes mais rápida. Vale ressaltar que a simulação numérica em uma malha uniforme possui um custo computacional constante, enquanto que para este problema de aplicação, a simulação na malha composta é muito mais rápida no início da simulação já que a quantidade de blocos discretizados é menor que no caso comparado (com o escoamento desenvolvido), chegando a ser 190 vezes mais rápida que a malha uniforme. As Figuras 6.14(a)-6.14(b) mostram a razão entre os tempos gastos na malha uniforme (TMU) e na malha composta (TMC) bloco-estruturada. A vantagem da simulação numérica na malha AMR sobre a simulação na malha uniforme está diretamente ligada ao número de células computacionais. Uma pequena porcentagem do tempo de processamento é gasto durante o processo de remalhagem (troca da malha e inicialização das variáveis), geralmente menos de 2% do tempo gasto em um passo de integração. Nesta simulação foram feitas 131 remalhagens ao longo dos 1.4×10^4 passos de integração.

Figura 6.14: Razão entre o tempo computacional gasto na malha uniforme (TMU) e na malha composta bloco-estruturada (TMC).

A respeito dos compiladores, foram medidos o tempo computacional de um único passo de integração utilizando-se os compiladores **gnu** (versão 4.4.4) e **intel** (versão 11.0) usando a *flag* “-O3”, em uma máquina (Intel Core 2 Quad processador 2.33 GHz e 16Gb RAM). O melhor desempenho foi obtido com o compilador da **gnu** o qual foi 1.2 vezes mais rápido que o compilador **intel** para esta simulação.

Um dos “gargalos” do atual código é a resolução da equação da correção da pressão a qual gasta 69.5% do tempo computacional em cada passo de integração. Fazendo um perfil do código, utilizando a *flag* “-pg” e executando o *gprof* é possível identificar as funções/subrotinas da implementação numérica que gastam mais tempo de processamento. Os resultados mostram que o conjunto de subrotinas envolvidas no cálculo de valores de células *fantasmas* gastam 43% do tempo computacional de um passo de integração. Uma razão é o grande número de blocos discretizados gerados quando o escoamento está desenvolvido. Para aumentar a eficiência, diminuiu-se a quantidade de blocos, aproveitando a estrutura do problema, substituindo-os por único bloco discretizado ao longo da direção do escoamento (um “tubo”). Esta redução de blocos é automática, sendo feita a medida que o escoamento vai se desenvolvendo. Com esta estratégia, diminuiu-se o número de chamadas para o conjunto de subrotinas que determina valores para as células *fantas-*

mas. A Tabela 6.1 mostra o número de células computacionais da simulação na malha uniforme e da simulação nas malhas com refinamento adaptativo, com e sem a estratégia do “tubo”. A coluna “Total” apresenta todas as células computacionais empregadas (isto é, a soma das células *fantasmas*, interiores, cobertas por níveis mais finos e níveis *multigrid*), a coluna “Interiores” apresenta o número total de células computacionais que compõem os “níveis físicos” (incluem-se células computacionais cobertas, mas não células computacionais *fantasmas* e de níveis *multigrid*) e a coluna “Visíveis” inclui apenas as células computacionais interiores e que não são cobertas por células computacionais de níveis de refinamento mais finos. Empregando-se a estratégia que diminui o número de blocos discretizados resultou em um aumento de eficiência de aproximadamente 30%, o que mostra a sobrecarga de cálculos acarretada pela quantidade de blocos de refinamento.

Tabela 6.1: Número de células computacionais em diferentes malhas.

Malha	Total	Interiores	Vísíveis
AMR	8.69×10^6	3.44×10^6	3.00×10^6
AMR (<i>tubo</i>)	7.47×10^6	3.40×10^6	2.92×10^6
Uniforme	41.5×10^6	33.5×10^6	33.5×10^6

6.2 Simulação de um escoamento (não-reativo) com gotículas inertes

Um dos objetivos do presente trabalho é o de explorar a metodologia numérica em desenvolvimento visando a identificação das primeiras dificuldades na simulação de gotículas (*fase dispersa*) em escoamentos turbulentos. A simulação computacional de escoamento contendo gotículas lagrangianas impõe uma sobrecarga computacional sobre a metodologia como um todo (García (2009) é De *et al.* (2011) citam entre 6×10^5 e 1×10^6 de gotículas).

As questões que surgem vão desde os modelos matemáticos mais adequados a serem empregados, (e.g. para descrever seu transporte, eventual evaporação, troca de massa e de quantidade de movimento) até as técnicas/algoritmos que devem ser consideradas para que o código computacional seja o mais eficiente possível sem perder a física do problema, (e.g. qual o nível adequado de refinamento da malha euleriana e como marcar a vizinhança de uma célula computacional que necessita de refinamento a custo computacional reduzido). Aqui, dá-se o primeiro passo para se propor um *módulo lagrangiano* para tratar gotículas em uma malha bloco-estruturada com refinamento adaptativo. O problema a ser considerado é o dado por um escoamento incompressível (não-reativo) turbulento e as gotículas são consideradas inertes e sem evaporação. A simulação numérica de um *spray* em escoamentos reativos é um problema complexo demais para ser abordado num primeiro momento (veja De *et al.* (2011), García (2009), Crowe *et al.* (1998) e Sirignano (1999)).

O problema-modelo selecionado a ser simulado numericamente é baseado no experimento realizado por Stårner e Masri (2003). No trabalho de Stårner e Masri (2003), os autores realizam experimentos em laboratório de dois jatos turbulentos (não-reativo) (em condições idênticas), com gotículas inertes: o primeiro com um *spray* de terebentina (*turpentine*, um solvente orgânico, considerado no referido trabalho como “não evaporativo”, veja Gounder e Masri (2009)) e o segundo com um *spray* de acetona (altamente volátil o qual exigiria do modelo matemático a inclusão de um

modelo de *evaporação*). O líquido pressurizado é alimentado por um nebulizador ultrasônico para produzir as gotículas dispersas. Estas gotículas são removidas do nebulizador por intermédio de um fluxo de ar através do bocal de injeção. Mais detalhes a respeito do experimento são descritos por Stårner e Masri (2003), Gounder e Masri (2009) e De *et al.* (2011).

Neste contexto, é descrita a seguir a simulação computacional de um jato turbulento (não-reactivo) com gotículas de terebentina. O modelo matemático para a fase contínua é aquele dado pelas equações de Navier-Stokes

$$\rho_c \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + S_{u_i}, \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \quad (6.8)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (6.9)$$

onde ρ_c a massa específica da fase contínua, μ é a viscosidade dinâmica mais a viscosidade turbulenta μ_t (veja o Apêndice A), u_i é a componente do campo de velocidade em cada uma das direções, p é a pressão e S_{u_i} contém o termo que acopla a fase dispersa à fase contínua.

A dinâmica das gotículas lagrangianas é modelada matematicamente pelo sistema de equações diferenciais ordinárias associado a cada gotícula p , dado por

$$\frac{dU_{i,p}}{dt} = \frac{1}{\tau_p} (u_{i,p} - U_{i,p}) + \left(1 - \frac{\rho_c}{\rho_d} \right) \mathbf{g}, \quad (6.10)$$

$$\frac{dX_{i,p}}{dt} = U_{i,p}, \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \quad (6.11)$$

sendo $(X_{1,p}, X_{2,p}, X_{3,p}) = \mathbf{X}_p$ a posição da gotícula, $(U_{1,p}, U_{2,p}, U_{3,p}) = \mathbf{U}_p$ a velocidade da gotícula, ρ_d a densidade da fase líquida, τ_p o tempo de resposta da gotícula e $\mathbf{g}$ a aceleração da gravidade, para mais detalhes veja a Seção 2.4.1.

Os dados da simulação, descritos por Stårner e Masri (2003) e De *et al.* (2011), são aqui apresentados brevemente. As gotículas de terebentina entram no domínio computacional através de um do bocal de injeção de tamanho $d_0 = 10 \times 10^{-3} \text{ m}$ junto com o escoamento da fase contínua à velocidade $u_{2,d_0} = 24 \text{ m/s}$, veja a Figura 6.15. No restante da entrada do domínio computacional a velocidade do escoamento da fase contínua é $u_2 = 3 \text{ m/s}$. O número de Reynolds do escoamento é 1.96×10^4 . As dimensões do domínio computacional são dadas por $30d_0 \times 60d_0 \times 30d_0$. A velocidade da fase contínua na entrada do domínio computacional é dada por um perfil tangencial (6.5), acrescido de uma perturbação de 2% (ruído branco, veja a Seção 6.1.2) para simular a turbulência. A turbulência é modelada por meio do modelo de Smagorinsky com constante $C_s = 0.15$.

A densidade da fase líquida (das gotículas de terebentina) é $\rho = 870 \text{ kg/m}^3$. A quantidade de massa líquida injetada é $m_{d,in} = 5.95 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$. As gotículas são distribuídas uniformemente em um disco de raio $r_0 = d_0/2$ no plano $x_2 = 0.3 \times d_0$, como mostra a Figura 6.16, conforme Stårner e Masri (2003). A velocidade inicial da gotículas na direção do escoamento é dada pela velocidade u_{2,d_0} acrescida de uma perturbação de 1%.

Figura 6.15: Esboço da entrada das gotículas e da componente da velocidade na direção do escoamento.

Figura 6.16: Distribuição uniforme sobre um disco.

O diâmetro médio das gotículas é $d_{p,M} = 40 \mu m$ e as gotículas são distribuídas por meio de uma função distribuição de probabilidade. São exemplos de distribuições de probabilidade as funções Gaussiana, log-normal, Nukiyama-Tanasawa e a log-hiperbólica, veja Crowe *et al.* (1998), Bhatia e Durst (1989) e Lefebvre (1989). No presente trabalho, inicialmente, emprega-se a distribuição log-normal a qual frequentemente é utilizada para representar gotículas, veja García (2009).

A distribuição log-normal é obtida a partir de uma distribuição normal. Se y possui uma distribuição log-normal, então $x = \ln(y)$ possui uma distribuição normal. A função densidade de probabilidade de uma distribuição log-normal é dada por

$$f(x; \mu_o, \sigma_o) = \frac{1}{x\sigma_o\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\ln x - \mu_o}{2\sigma_o^2}\right), \quad (6.12)$$

sendo os parâmetros σ_o e μ_o são obtidos a partir da média $d_{p,M}$ e da variância var por meio das expressões,

$$\mu_o = \ln\left(\frac{d_{p,M}^2}{\sqrt{var + d_{p,M}^2}}\right) \text{ e } \sigma_o = \sqrt{\ln\left(\frac{var}{d_{p,M}^2} + 1\right)}. \quad (6.13)$$

Para mais detalhes veja Mood *et al.* (1974). A Figura 6.17 mostra a distribuição log-normal do diâmetro das gotículas lagrangianas. O número de gotículas $N_{p,in}$ injetadas por passo no tempo depende da quantidade de massa da fase líquida que entra no domínio computacional,

$$m_{d,in}\Delta t = \sum_{p=1}^{N_{p,in}} \rho_d \frac{d_p^3}{6} \pi, \quad (6.14)$$

onde Δt é o tamanho do passo de integração e d_p é o diâmetro da gotícula p .

A simulação computacional é realizada em uma malha bloco-estruturada composta por uma malha base mais três níveis de refinamento adaptativo (quatro níveis de refinamento no total). A malha base possui $32 \times 64 \times 32$ células computacionais. O espaçamento do nível mais fino é $\Delta x = 1.17 \times 10^{-3} m$. O que garante oito células computacionais na região do bocal. Os critérios de

Figura 6.17: Distribuição log-normal para o diâmetro das gotículas.

refinamento utilizados para a fase contínua são os já descritos na Seção 6.1.2. Além destes critérios, nesta simulação assume-se que todas as gotículas devem estar no nível mais fino de refinamento, veja a Seção 4.2 (um critério bastante exigente que facilita a identificação de possíveis dificuldades de cunho computacional). A Figura 6.18 mostra a malha bloco-estruturada gerada em dois instantes de tempo diferentes e a velocidade do escoamento, em um corte transversal em 45% do domínio computacional na direção do escoamento. Os contornos identificam os blocos discretizados que compõem cada um dos quatro níveis de refinamento. As Figuras 6.19(a)-(d) e 6.20(a)-(b) mostram a evolução da velocidade das gotículas em um plano de corte no centro do domínio computacional.

Figura 6.18: Velocidade na direção do escoamento e malha bloco-estruturada gerada na simulação do escoamento com gotículas em um corte transversal.

Figura 6.19: Escoamento incompressível (não-reativo) turbulento com gotículas inertes: (a)-(d) velocidade das gotículas na direção do escoamento com um plano de corte central.

Na simulação numérica de um *spray* algumas gotículas podem estar na mesma célula computacional. Com isso pode acontecer de uma célula computacional ser selecionada para refinamento mais de uma vez. Desta maneira durante a seleção de células computacionais para refinamento tomou-se cuidado para que uma célula computacional não fosse marcada mais que uma vez. Além disso, não havendo interação entre as gotículas espera-se ganhar muito em eficiência por paralelização deste módulo.

Para comparar os resultados da simulação numérica com os resultados experimentais faz-se

Figura 6.20: Escoamento incompressível (não-reativo) turbulento com gotículas inertes: (a)-(b) velocidade das gotículas na direção do escoamento em um plano de corte central.

necessária a comparação do perfil da velocidade das gotículas nas linhas radiais do domínio computacional, como por exemplo, $x_2 = 20 \times d_0$. Para tanto, é necessário um tempo maior de simulação para o levantamento das estatísticas de velocidade e posicionamento das gotículas. A Figura 6.21 mostra o perfil da velocidade das gotículas (antes do escoamento atingir o regime permanente) na linha radial $x_2 = 20 \times d_0$. Uma das explicações para a diferença entre o perfil da velocidade das

Figura 6.21: Perfil da velocidade das gotículas na linha radial.

gotículas do experimento e da simulação é o fato de que seriam necessários pelo menos mais dois níveis de refinamento para que a velocidade do escoamento seja bem descrita no bocal de injeção, veja De *et al.* (2011). Este aumento no número de níveis de refinamento, no momento, tornaria a simulação inviável, veja mais comentários na Seção 6.4.

A respeito do acoplamento entre as fases, a vantagem da utilização da *Delta de Dirac* para aproximar os operadores responsáveis pela troca de informações entre as fases (veja a Seção 3.3.2) é que as células computacionais vizinhas a célula computacional que contém a gotícula também recebem influência da mesma e vice-versa. Neste contexto, o uso desta aproximação possui seu grau de originalidade.

Futuramente, pretende-se avaliar cuidadosamente a precisão desta aproximação no caso em que as gotículas estejam em diferentes níveis de refinamento. Além de outras distribuições de probabilidade para o tamanho das gotículas que podem ser encontradas na literatura, por exemplo, Lefebvre (1989), Crowe *et al.* (1998) e Bhatia e Durst (1989).

6.3 Simulação de escoamentos reativos a baixo Mach

A metodologia numérica proposta para a fase contínua, descrita na Seção 4.5 e que estende a capacidade do código AMR3D original, é aqui aplicada a dois escoamentos reativos: um laminar, descrito por Smooke *et al.* (1996) e simulado numericamente por Day e Bell (2000) e Northrup e Groth (2009), e um turbulento (baseado na Chama D), descrito por Balow e Frank (2007) e simulado numericamente por Kempf *et al.* (2005) e Pitsch e Steiner (2000). A Figura 6.22 mostra como ocorre a entrada do combustível e do oxidante na região de reação em uma chama não pré-misturada. As simulações computacionais são feitas empregando-se o modelo matemático para a fase contínua, descrito na Seção 2.6.3, dado pelas equações para um escoamento reativo com baixo número de Mach,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0, \quad (6.15)$$

$$\frac{\partial(\rho z)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j z)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j} \right), \quad (6.16)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p_2}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right], \quad (6.17)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = S, \quad (6.18)$$

onde ρ é a massa específica da mistura, $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ é o campo de velocidade, z é o escalar conservado, p_2 é a pressão dinâmica, D é o coeficiente de difusão das espécies químicas envolvidas na reação e S é a restrição para o divergente do campo de velocidade, dada por

Figura 6.22: Esboço da entrada do combustível e do ar na direção do escoamento reativo.

$$S = \frac{1}{\rho T} \left(\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j T)}{\partial x_j} \right) + \frac{W}{\rho} \sum_l \left[\frac{1}{W_l} \left(\frac{\partial(\rho Y_l)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_l)}{\partial x_j} \right) \right], \quad (6.19)$$

para $l = C, O, P$ sendo T a temperatura do escoamento, W o peso molecular da mistura, Y_l a fração mássica da espécie química l e W_l o peso molecular da espécie química l . A dedução da expressão (6.19) encontra-se na Seção 3.1.1. As espécies químicas Y_C , Y_O e Y_P e a temperatura T

são obtidas por meio da estrutura de chama de Burke-Schumann descrita na Seção 2.3.

Conforme Pember *et al.* (1998), os termos difusivos μ , D e κ são, em geral, considerados funções que dependem de ρ , T e Y_i . Para as simulações apresentadas, a viscosidade dinâmica μ é dada por

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{0.7}, \quad (6.20)$$

onde $\mu_0 = 1.85 \times 10^{-5} \text{ kg/m s}$ e $T_0 = 298 \text{ K}$. O termo ρD e a viscosidade dinâmica μ , estão relacionados por meio do número de Lewis, Le (veja Seção 2.3). Ao assumir-se $Le = 1$, a qual é uma aproximação razoável já que Le é aproximadamente 1 para muitos gases (para mais detalhes veja Pember *et al.* (1998) e Kuo (2005)), obtém-se

$$\rho D = \frac{\mu}{Pr}, \quad (6.21)$$

onde $Pr = 0.75$ (veja Pember *et al.* (1998)) é o número de Prandtl.

Na entrada do domínio computacional, são usadas a condição de fronteira Dirichlet para as componentes do campo de velocidade, para a massa específica e para o escalar conservado e a condição de fronteira Neumann nula para a correção da pressão. Nas demais faces do domínio computacional, são usadas as condições de fronteira Neumann nulas para as componentes do campo de velocidade para a massa específica e para o escalar conservado e a condição de fronteira Dirichlet para a pressão, conforme descrevem Day e Bell (2000), Pitsch e Steiner (2000) e Balow e Frank (2007).

Na Seção 6.3.1, são apresentados os resultados numéricos de uma simulação de um escoamento laminar reativo e na Seção 6.3.2, os resultados de uma simulação de um escoamento turbulento reativo.

6.3.1 Escoamento reativo laminar

A simulação do escoamento reativo laminar foi realizada com base nos dados de uma chama de difusão metano-ar, estudada por Smooke *et al.* (1996), Day e Bell (2000) e Northrup (2004). O domínio computacional possui $0.1 \text{ m} \times 0.1 \text{ m} \times 0.1 \text{ m}$. O diâmetro do bocal de injeção de combustível é $d_0 = 4 \times 10^{-3} \text{ m}$. O combustível (uma mistura de 65% N_2 , nitrogênio, e 35% CH_4 , metano), é injetado no domínio computacional por meio das frações mássicas, $Y_{CH_4}^* = 0.5149$ e $Y_{N_2,C} = 0.4851$, à temperatura ambiente $T_C^* = 298 \text{ K}$, com o perfil de velocidade

$$u_2(\mathbf{x}, t) = \frac{0.7}{2} - \frac{0.7}{2} \tanh \left[25 \left(\frac{r_j}{r_0} - \frac{r_0}{r_j} \right) \right] \text{ m/s}, \quad (6.22)$$

onde $r_j = \sqrt{(x_3 - 0.5 \cdot b_3)^2 + (x_1 - 0.5 \cdot b_1)^2}$, $r_0 = 2 \text{ mm}$ é o raio do bocal de injeção do combustível e b_1 e b_3 são os tamanhos do domínio computacional nas direções x_1 e x_3 , respectivamente.

O ar é injetado no domínio computacional por meio das frações mássicas $Y_{O_2}^* = 0.232$ e $Y_{N_2,O} = 0.768$, à temperatura ambiente $T_O^* = 298 \text{ K}$ e à velocidade $u_2(\mathbf{x}, t) = 0.35 \text{ m/s}$. As componentes da velocidade u_1 e u_2 são nulas. Os números de Reynolds e de Mach do escoamento, respectivamente, $Re = 169$ e $Ma = 1.6 \times 10^{-3}$. As Figuras 6.23(a)-(d) mostram, em um corte no centro do domínio computacional em $x_3 = 5 \times 10^{-2} \text{ m}$, a evolução da temperatura do escoamento e as malhas adaptativas correspondentes.

Figura 6.23: Escoamento reativo laminar: temperatura do escoamento e malhas adaptativas em um plano de corte em $x_3 = 5 \times 10^{-2} m$.

A simulação computacional foi realizada em uma malha bloco-estruturada composta por uma malha base mais três níveis de refinamento adaptativos (quatro níveis de refinamento no total). A malha base possui $32 \times 32 \times 32$ células computacionais. O espaçamento do nível de refinamento mais fino é $\Delta x = 3.9063 \times 10^{-4} m$, o que garante que o diâmetro do bocal contenha pelo menos 10 células computacionais. O critério de refinamento é baseado na norma do tensor de tensões viscosas e na temperatura. A marcação das células computacionais para o refinamento adaptativo é descrita na Seção 4.2. O tamanho do passo de integração é determinado pela condição CFL (4.1) sendo, tipicamente, dado por $\Delta t = O(\Delta x^{1.14})$.

Uma comparação qualitativa feita com os trabalhos de Day e Bell (2000), Smooke *et al.* (1996) e Northrup (2004) mostra que os resultados obtidos concordam com resultados encontrados na li-

temperatura. A simulação numérica descrita no presente trabalho, determina uma temperatura máxima de 2083 K . A simulação de Smooke *et al.* (1996) utiliza um mecanismo cinético com 26 espécies e 83 reações químicas em um domínio computacional bidimensional no qual determina uma temperatura máxima de 2025 K . A simulação numérica de Day e Bell (2000) utiliza o mesmo mecanismo cinético descrito por Smooke *et al.* (1996) e o mesmo domínio computacional com refinamento adaptativo, no qual determina uma temperatura máxima de 2029 K . Já Northrup (2004) utiliza um mecanismo cinético de dois passos com o mesmo domínio computacional e com refinamento adaptativo, determinando uma temperatura máxima de 2214 K e justifica a diferença valores ao uso do mecanismo cinético simplificado. A Tabela 6.2 apresenta as temperaturas máximas obtidas em cada um dos trabalhos. O mecanismo cinético utilizado no presente trabalho, com as hipóteses de química instantânea e estequiométrica, não capta o *descolamento* da chama do bocal (*lift-off*).

Tabela 6.2: Temperatura máxima da chama laminar.

Smooke <i>et al.</i> (1996)	Day e Bell (2000)	Northrup (2004)	Presente Trabalho
2025 K	2028 K	2214 K	2083 K

6.3.2 Escoamento reativo turbulento

Escoamentos reativos turbulentos compõem a classe de problemas para os quais desenvolveu-se e intenciona-se empregar a metodologia proposta. Para iniciar a investigação de seu potencial, tal metodologia é empregada a um problema modelo baseado numa chama de difusão. A simulação numérica aqui apresentada é baseada nos dados experimentais da chama de difusão são descritos por Balow e Frank (2007) e simulações numéricas foram feitas por Pitsch e Steiner (2000) e Kempf *et al.* (2005). O combustível é uma mistura composta por 25% de CH_4 , metano e 75% de ar. O domínio computacional é o mesmo descrito para o jato turbulento (não-reativo), descrito na Seção 6.1.2, bem como o perfil da velocidade na entrada do domínio computacional, veja (6.5)-(6.6). O diâmetro do bocal é $d_0 = 7.2 \times 10^{-3} m$ e o diâmetro da região piloto é $d_1 = 1.8 \times 10^{-2} m$, conforme mostra a Figura 6.22. As dimensões do domínio computacional nesta simulação são $40d_0 \times 80d_0 \times 40d_0$, aproximadamente $0.288 m \times 0.576 m \times 0.288 m$.

O número de Reynolds baseado no diâmetro do bocal d_0 é $Re = 2.24 \times 10^4$. Emprega-se uma malha bloco-estruturada composta pela malha base e mais três níveis de refinamento adaptativo (quatro níveis de refinamento no total, veja um exemplo na Figura 6.6). A malha base possui $32 \times 64 \times 32$ células computacionais. O nível mais fino possui espaçamento $1.125 \times 10^{-3} m$, o que garante que o diâmetro do bocal contenha pelo menos 6 células computacionais (na prática, isto é muito pouco, insuficiente para capturar o fenômeno. Boersma *et al.* (1998) descreve que 12 células são, no mínimo, suficientes. De *et al.* (2011) descrevem que 24 células são, no mínimo, suficientes para escoamentos com gotículas). Este é o preço que o código estendido, sendo sequencial pode pagar. Mais comentários a respeito do número de células computacionais são feitos na Seção 6.4.

O critério de refinamento usado nesta simulação foi baseado na norma da vorticidade, na norma da viscosidade turbulenta e na temperatura. A marcação das células computacionais para a criação da nova malha bloco-estruturada com refinamento adaptativo é descrita na Seção 4.2. Dentre os três critérios, a viscosidade turbulenta é o critério mais exigente. A Figura 6.24 mostra a temperatura do escoamento e a malha bloco-estruturada gerada em dois instantes de tempo diferentes em um

corte transversal na metade do domínio computacional na direção do escoamento.

Figura 6.24: Temperatura do escoamento e malha bloco-estruturada gerada, em corte transversal na metade do domínio computacional.

O escalar conservado z (fração de mistura) assume os seguintes valores na entrada do domínio computacional: $z = 0$ onde o ar é injetado, $z = 0.27$ na região piloto de diâmetro d_1 e $z = 1$ onde o combustível é injetado, no bocal de diâmetro d_0 . O valor estequiométrico do escalar conservado é $z_{est} = 0.351$. As Figuras 6.25(a)-(f) mostram a evolução da fração de mistura do escoamento em um plano de corte no centro do domínio computacional. Note que a escala de cores varia do azul, indicando a presença do ar (oxidante) até o vermelho na região próxima do bocal, indicando a presença do combustível. A escala de cor intermediária indica a região onde ocorre a mistura entre combustível e oxidante e consequentemente a reação química. A temperatura do escoamento é obtida a partir da fração de mistura (veja a Seção 2.3). Note que o aumento de temperatura ocorre nas regiões onde combustível e oxidante se misturam (zona de reação). As Figuras 6.26(a)-(f) mostram a evolução da temperatura do escoamento.

As Figuras 6.27-6.29 mostram os perfis do decaimento da componente da velocidade na direção do escoamento e do escalar conservado, e o comportamento da temperatura, na linha de centro do domínio computacional. São apresentados dois perfis em cada figura, os quais possuem um mês de diferença de tempo de simulação computacional, mostrando a evolução do decaimento. Além disso, são apresentados os dados experimentais descritos nos trabalhos de Balow e Frank (2007) e Pitsch e Steiner (2000). É importante salientar que, para o tempo de simulação considerado, não é esperada a concordância entre os dados da simulação e os dados experimentais pois, para tais levantamentos estatísticos, os resultados deveriam começar a ser coletados após pelo menos um *tempo de residência* isto é, o tempo que uma partícula leva para cruzar completamente o domínio computacional. Pelas figuras, é possível notar que o jato atingiu pouco além da metade do domínio.

Os decaimentos apresentados nas Figuras 6.27-6.29 foram coletados bem antes do tempo de residência, devido ao tempo computacional exigido para realizar cada passo de integração da simulação numérica. Para o estágio do escoamento mostrado na Figura 6.26(f) o tempo computacional

Figura 6.25: Escoamento reativo turbulento: Fração de mistura em um plano de corte no centro do domínio computacional em $x_3 = 1.44 \times 10^{-1} m$.

gasto por passo de integração, foi de aproximadamente 15 min. O tempo computacional por passo de integração tende a aumentar já que o jato está se desenvolvendo e com isso a malha blococ-estruturada adaptativa vai aumentando. Com base nas informações do jato incompressível turbu- lento (veja a Seção 6.1.2) serão necessárias pelo menos 13000 passos de integração para que o jato

Figura 6.26: Escoamento reativo turbulento: Temperatura do escoamento em um plano de corte no centro do domínio computacional em $x_3 = 1.44 \times 10^{-1} m$.

complete um tempo de residência.

Figura 6.27: Decaimento na linha de centro da velocidade média na direção do escoamento e dados experimentais.

Figura 6.28: Decaimento na linha de centro na direção do escoamento da fração demistura média e dados experimentais.

6.4 Sumário do presente capítulo

A dificuldade das simulações numéricas descritas é ainda maior pois, além do tempo de processamento requerido, há que se varrer uma quantidade enorme de parâmetros na simulação numérica para ajustar de maneira apropriada o modelo matemático e as condições de simulação. Dentre tais parâmetros, são particularmente notáveis:

Figura 6.29: Perfil da temperatura na linha de centro na direção do escoamento e dados experimentais.

- **Os parâmetros computacionais:** o número de níveis de refinamento, os critérios de remalhagem, os critérios de convergência do métodos *multigrid* e o tamanho do passo de integração.
- **Os parâmetros do modelo matemático:** o formato e a contribuição relativa do ruído na condição de entrada e a constante de Smagorinsky do modelo de turbulência.
- **Os parâmetros físicos:** o tamanho do domínio computacional, as distribuições estatísticas que regem a injeção das gotículas.

Algumas tentativas foram realizadas considerando três e cinco níveis de refinamento. Três níveis de refinamento mostraram-se inadequados, pois a física do problema (como a turbulência) não foi bem capturada. Neste caso a região do bocal teria apenas 3 células computacionais na região do bocal. Na prática, isto é muito pouco, insuficiente para capturar o fenômeno. Boersma *et al.* (1998) descreve que doze células são, no mínimo, suficientes. De *et al.* (2011) descrevem que vinte e quatro células computacionais são, no mínimo, suficientes para escoamentos com gotículas. Isso implicaria em pelo menos cinco níveis de refinamento para as simulações numéricas sem gotículas e seis níveis de refinamento para a simulação com gotículas. Com cinco níveis de refinamento, os resultados numéricos melhoraram muito mas o código estendido AMR3D, sendo totalmente sequencial, provou-se inadequado para tal simulação numérica, pois o tamanho do passo torna-se 2.5 vezes menor do que o caso com quatro níveis de refinamento estimando-se no mínimo 6 meses de processamento.

Testando diferentes valores entre $[0.1, 0.18]$ para a constante C_s do modelo de turbulência de Smagorinsky, determinou-se que $C_s = 0.15$ apresentou melhor decaimento da componente da velocidade na linha de centro. O mesmo pode-se descrever para a intensidade da turbulência na entrada do domínio computacional, para os resultados apresentados usou-se 2% de intensidade de ruído na componente da velocidade na direção do escoamento. Muitos trabalhos utilizam o

modelo de Smagorinsky dinâmico (Apte *et al.* (2009), Pitsch e Steiner (2000), Pierce e Moin (2004) e Bini e Jones (2009)). Futuramente, pretende-se investir neste modelo de turbulência.

Para simular escoamentos reativos, considerando o tempo computacional gasto em um passo de integração do tempo, é necessário lembrar que o código estendido AMR3D é totalmente sequencial, característica herdada do código AMR3D original. Além disso, para obter segunda ordem de precisão, a cada passo de integração no tempo são resolvidas duas vezes cinco equações parabólicas e uma equação elíptica, totalizando doze equações a derivadas parciais sendo que as de natureza elíptica são mal condicionadas e tomam cerca de 80% do tempo de processamento por passo no tempo. Algumas tentativas de diminuir o tempo gasto a cada passo de integração foram tomadas:

- **Aumento da constante CFL:** a constante utilizada para a simulação do escoamento reativo na expressão (3.27) é $C = 0.5$. Com seu aumento, aparece sinais de instabilidade numérica. A quantidade de iterações (V-ciclos) começa a aumentar aos poucos até o momento em que atinge o número máximo.
- **Uso da norma L_2 no cálculo do tamanho de passo Δt :** a substituição da norma L_∞ pela norma L_2 , na expressão (3.27) gera instabilidades numéricas. O resíduo no método *multigrid*-multinível cai bem mais lentamente que o usual e acaba-se por atingir um número máximo de iterações (V-ciclos) em poucos passos de integração no tempo (qualquer que seja este limite adotado).
- **Aumento da tolerância do *Multigrid*-multinível:** relaxando o critério de convergência do método *multigrid*-multinível para $O(\Delta x)$, onde Δx é o espaçamento da malha mais fina, o número de iterações realizado pela equação elíptica diminuiu em média 3 V-ciclos dos 25 que vinham sendo realizados. Uma economia de aproximadamente 1.2%. Diante da pequena diferença decidiu-se manter o critério de convergência de $O(\Delta x^2)$ para garantir que a precisão espacial não fosse comprometida. Esta decisão foi feita com base nas verificações numéricas que não atingiam segunda ordem de aproximação caso a tolerância para o resíduo não fosse escolhida pequena o suficiente.

Mesmo com o uso da técnica de refinamento adaptativo de malhas, o código estendido AMR3D em sua atual implementação mostra-se por demais custoso para problemas onde o escoamento reativo encontra-se no limiar de se desenvolver, quando muitos blocos de refinamento são gerados. O perfil do código para esta simulação identificou que o maior consumo de tempo é gasto na resolução da equação da correção da pressão, com aproximadamente 80% do tempo gasto em um passo de integração. As subrotinas mais requisitadas são responsáveis pelo preenchimento de células fantasmas as quais, juntas, consomem aproximadamente 91% do tempo gasto em um passo de integração do tempo, havendo 2 *bilhões de chamadas* desta subrotina em um único passo de integração. A estratégia de diminuir o número de blocos discretizados na região principal do escoamento foi mantida (o uso de “tubo” central) diminuindo em 30% o tempo gasto pelo conjunto de subrotinas responsáveis pelo preenchimento de células fantasmas. Além de investigar outras estratégias para diminuir o número de blocos discretizados, o caminho natural para resolver o principal “gargalo” do código estendido AMR3D, seria resolver pelo menos, a equação da correção da pressão (a equação elíptica) em computação paralela.

6.5 Nomenclatura do presente capítulo

d_0	Diâmetro do bocal de injeção de combustível (m)
d_1	Diâmetro do bocal piloto (m)
d_p	Diâmetro da gotícula p (m)
D	Coeficiente de difusão de massa (m^2/s)
N_p	Número de gotículas
p	Pressão (atm)
p_0	Pressão termodinâmica (atm)
p_2	Pressão dinâmica (atm)
r_0	Raio do bocal de injeção de combustível (m)
r_1	Raio do bocal piloto (m)
t	tempo (s)
T	Temperatura (K)
u_2	Componente da velocidade na direção do escoamento (m/s)
u_{2,d_0}	Componente da velocidade na direção do escoamento na entrada do combustível (m/s)
$\mathbf{u}$	Velocidade do escoamento (m/s)
$\mathbf{U}_p$	Velocidade da gotícula (m/s)
$\mathbf{X}_p$	Posição de uma gotícula (m)
Y	Fração mássica de uma espécie química
z	Escalar conservado normalizado

Letras Gregas

κ	Condutividade térmica ($kg/m\ s$)
μ	Viscosidade dinâmica ($N \times s/m^2$)
ρ	Massa específica, densidade (kg/m^3)

Adimensionais

Re_r	Número de Reynolds (raio)	Re	Número de Reynolds
Pr	Número de Prandtl	Le	Número de Lewis

Capítulo 7

Considerações finais

O presente trabalho estende de maneira original uma metodologia numérica anterior cujo foco eram os escoamentos incompressíveis. A extensão proposta é inédita e é aplicável à simulação computacional de escoamentos reativos a baixo número de Mach (*combustão computacional*). Tal proposta parte de três componentes principais: uma técnica de refinamento adaptativo de malhas para discretizar o domínio computacional, a utilização de esquemas implícitos-explicitos para a discretização no tempo das equações da dinâmica do escoamento e o Método da Projeção em variáveis primitivas para tratar o acoplamento pressão-velocidade. Embora formada por componentes individualmente conhecidas, a combinação de tais elementos é nova e resulta numa metodologia para abordar escoamentos a baixo número de Mach cujo uso e potencial são aqui cuidadosamente investigados.

A ideia é agregar ao modelo matemático inicialmente considerado e de onde se partiu, isto é, as equações de Navier-Stokes para um escoamento incompressível transiente com propriedades materiais variáveis, um novo conjunto de equações que modelam novas propriedades do fluido: *as equações de conservação de massa, das concentrações das espécies químicas e de energia*. Basicamente, empregando a abordagem dada por *fração de mistura* para descrever as concentrações de combustível e oxidante chega-se a um modelo matemático simplificado o qual é tratado pela primeira vez empregando-se malhas adaptativas bloco-estruturadas e o Método da Projeção. É preciso salientar que o método da Projeção, no contexto da extensão proposta, está baseado na imposição de um divergente *não nulo* para o campo de velocidade, oriunda da combinação de uma *equação termodinâmica de estado* com a equação de conservação de massa. A hipótese do número de Mach ser baixo é usada na dedução do modelo matemático aqui abordado. Para tratar escoamentos turbulentos, emprega-se a metodologia LES com o modelo de turbulência de Smagorinsky.

O código computacional oriundo das idéias anteriores, empregado nas simulações computacionais de escoamentos com baixo número de Mach, é novo e representa uma das contribuições do presente trabalho. Tal código teve por base o código computacional denominado “AMR3D”, escrito em Fortran90, cujo desenvolvimento tem sido feito num esforço conjunto e contínuo do IME-USP e do MFLab/FEMEC-UFU, por vários anos. Os métodos numéricos empregados na resolução das novas equações de advecção-difusão discretizadas (e.g. para a fração de mistura e para a energia) baseiam-se em métodos *multigrid*-multinível. Uma abordagem que, até recentemente, foi considerada natural no contexto de malhas adaptativas bloco-estruturadas (mais comentários sobre este assunto são feitos mais adiante visando à continuidade deste trabalho). Para tratar instabilidades numéricas oriundas da discretização da equação de conservação de massa (uma equação de caráter

hiperbólico), discretiza-se o termo de advecção empregando-se o método QUICK, além de se incluir um termo de difusão artificial, um procedimento comumente adotado.

Efetua-se uma bateria inicial de testes abordando casos de escoamentos incompressíveis nos regimes laminar e turbulento. Tipicamente, estes casos tratados permitem a identificação preliminar de forma mais rápida dos pontos da metodologia que devem receber atenção especial e ser otimizados (eventualmente reprogramados). Para tanto, empregou-se o código AMR3D, especialmente preparado para, dentre outros, estudos de otimização da parte responsável pela geração de malhas adaptativas. É preciso salientar que tais simulações computacionais foram executadas pela primeira vez no contexto do AMR3D.

Uma das primeiras alterações foi armazenar os arquivos de visualização no formato **Silo**. **Silo** é um formato de dados e uma biblioteca com interface para a linguagem Fortran90 e C projetada para ler e escrever dados científicos. A biblioteca **Silo** suporta malhas bloco-estruturadas e o uso do **HDF5** (*Hierarchical Data Format 5*). O **HDF5** é um formato de arquivos muito usado para armazenar e gerenciar dados. Esta medida reduziu o tamanho dos arquivos em aproximadamente 15%. Novos critérios de refinamento foram implementados, baseados na norma do tensor de tensões viscosas, na vorticidade e na norma da turbulência. A calibração destes critérios de refinamento foi feita cuidadosamente. Testes para a escolha da constante do modelo de Smagorinsky também foram realizados. Com a simulação de um jato turbulento foram identificadas informações relevantes associadas à metodologia numérica. Dentre elas, o uso abusivo de células *fantasmas* que levam a um alto custo computacional. O número de células *fantasmas* está associado ao número de blocos discretizados gerados pela estratégia AMR. A solução foi diminuir o número de blocos discretizados (estratégia do “tubo”). Esta simples medida resultou em um aumento de eficiência de quase 30%. Além disso, foram realizados testes com diferentes compiladores. Apesar das medidas tomadas, algumas simulações chegaram a levar 12 semanas com passos no tempo de até 15 minutos.

Aos testes anteriores, seguiram testes de verificação e validação das equações de advecção-difusão de grandezas escalares (incluindo a implementação do método *multigrid*-multinível, empregado na resolução dos sistemas lineares resultantes da discretização temporal e espacial) os quais comprovaram segunda ordem para estas grandezas. Foram realizados então testes para a conservação de massa. De natureza hiperbólica, estas equações demandam cuidados para sua estabilização. A utilização do esquema de diferenças finitas centradas (com o termo de difusão numérica) resultou no decaimento da ordem de convergência, como relatado na Seção 3.2.4. A substituição pelo esquema numérico QUICK resolveu o problema e manteve segunda ordem de aproximação.

A metodologia numérica para um escoamento incompressível (não-reativo) turbulento contendo gotículas inertes (sem evaporação) foi devidamente verificada para o modelo matemático da fase contínua e da fase dispersa. Alguns testes preliminares envolvendo a fase dispersa foram realizados. Estes testes tiveram como objetivo apontar as primeiras dificuldades a serem enfrentadas dentro do contexto AMR3D, ao se empregar uma nuvem de gotículas lagrangianas acompanhadas em sua trajetória. Para esta simulação foi acrescentado um critério de refinamento baseado na posição das gotículas lagrangianas. O critério de refinamento baseado nas gotículas está implementado de forma que uma célula computacional não seja remarcada na lista de pontos para refinamento. Isto porque uma mesma célula computacional pode conter mais que uma gotícula. A estrutura de dados (uma *lista encadeada*) utilizada para armazenar as gotículas facilita a remoção e a inserção

das mesmas. Serão necessários testes com outras distribuições estatísticas para o diâmetro das gotículas para verificar a representatividade dos dados.

A metodologia numérica introduzida para um escoamento com baixo número de Mach foi cuidadosamente verificada por intermédio da estratégia de soluções manufaturadas. Foram abordados preliminarmente alguns problemas de aplicação: escoamentos reativos laminar e turbulento (em particular, no último caso, a Chama de difusão “Chama D”). A simulação de escoamentos reativos a baixo número de Mach incluem a solução de mais duas equações a cada passo de integração. Com isso, surge a dificuldade na escolha da combinação apropriada de parâmetros da simulação. Aqui incluem-se parâmetros computacionais (critérios de refinamento e número de níveis físicos), parâmetros físicos (perturbação na entrada do escoamento) e parâmetros dos modelos envolvidos (constante do modelo de turbulência). Estes parâmetros devem ser escolhidos cuidadosamente por meio de testes numéricos. Um código sequencial como o AMR3D não permite uma ampla bateria de testes. Além disso, a comparação dos resultados numéricos com os resultados experimentais é feita por meio do decaimento da velocidade na linha de centro. A análise deste decaimento deve ser feita após o escoamento estar desenvolvido. O principal “gargalo” do código a ser atacado será a resolução do sistema linear associado a equação da correção da pressão em paralelo. Um trabalho que está sendo desenvolvido pelo grupo IME-MFLab.

7.1 Contribuições

Originalmente, o código AMR3D utiliza a técnica AMR e o método da Projeção de Chorin-Temman para escoamentos incompressíveis. A proposta de extensão da metodologia numérica para escoamentos reativos com baixo número de Mach, amplia a aplicabilidade da ferramenta a novos problemas de aplicação.

No cenário nacional o presente trabalho contribuiu para o desenvolvimento de um algoritmo adaptativo para a simulação tridimensional de escoamentos reativos com baixo número de Mach. A metodologia numérica associada ao modelo de reação química simplificado tem seu grau de originalidade. A inclusão da técnica de refinamento adaptativo de malhas, neste contexto, mostrou-se eficaz e vantajosa.

A aplicação da metodologia numérica proposta a escoamentos incompressíveis com gotículas inertes, até onde se sabe, tem seu grau de originalidade. As simulações computacionais preliminares de escoamentos incompressíveis com gotículas inertes mostra que o uso da técnica AMR é promissor.

Esta foi a primeira vez que uma simulação de jato foi feita pelo grupo IME-MFLab no contexto do código AMR3D. Estas simulações de jatos incompressíveis (não-reativos) e de jatos reativos com baixo número de Mach serviram para mostrar as vantagens e algumas dificuldades da metodologia numérica adaptativa. Dentre as vantagens destacamos o tempo computacional ganho que ainda pode ser melhorado evitando-se o uso abusivo de células *fantasmas*. Com a simples ideia, de se aproveitar a estrutura do problema com a estratégia do *tubo*, houve um ganho significativo de aproximadamente 30% no tempo computacional.

7.2 Continuidade

Durante a realização do presente trabalho surgiram algumas dificuldades que tornaram-se tópicos para a continuidade do mesmo. Dentre eles, destacam-se:

1. Investigação da simulação do problema via resolução matricial do sistema linear associado ao problema. Isso facilitaria a resolução do sistema com a utilização de bibliotecas, como a PETSc, que inclui métodos numéricos já paralelizados. Além disso, a inclusão da metodologia numérica proposta em uma versão paralela do código AMR3D.
2. Investigação e implementação de esquemas numéricos conservativos e de alta ordem para a aproximação dos termos advectivos. Com isso pretende-se retirar o termo de difusão numérica na equação da conservação da massa.
3. Simulação da chama de difusão com parâmetros de simulação “adequados”.
4. Desenvolvimento em combustão computacional com ênfase em *sprays* inertes com e sem modelagem de evaporação.
5. Implementação de estruturas de dados eficientes para a localização das gotículas em diferentes níveis de refinamento na malha bloco-estruturada.
6. Investigação do efeito da turbulência no transporte das gotículas. Implementação do modelo de turbulência de Smagorinsky dinâmico. Implementação de outras formas de simular a turbulência na entrada do domínio computacional.
7. Investigação da necessidade de manter as gotículas lagrangianas no nível mais fino de refinamento.
8. Aplicação da metodologia proposta junto com a metodologia da fronteira imersa para simular escoamentos reativos em geometrias complexas, por exemplo uma câmara de combustão.

Apêndice A

Modelo de turbulência

O fenômeno da turbulência é encontrado em muitos processos de combustão, como foguetes, fornos e queimadores industriais. A turbulência ocorre em escoamentos com altos número de Reynolds. Assumindo-se que as propriedades do escoamento podem ser decompostas em uma parte filtrada e uma parte *dinâmica*, também chamada flutuação como descrevem Versteeg e Malalasekera (2007), Poinot e Veynante (2005), Turns (1996) e Pope (2000). Esta decomposição é chamada de Decomposição de Reynolds e é dada por

$$q = \tilde{q} + q', \quad (\text{A.1})$$

onde $\tilde{q}$ representa a parte filtrada e q' representa uma flutuação.

Os métodos numéricos para descrever a turbulência podem ser agrupados em três categorias: as equações médias de Reynolds (RANS - *Reynolds Average Navier-Stokes*), a simulação das grandes escalas (LES - *Large Eddy Simulation*) e a simulação numérica direta (DNS - *Direct Numerical Simulation*). Os modelos de turbulência para as equações médias RANS foram desenvolvidos para resolver apenas os valores médios de todas as propriedades nas equações de Navier-Stokes. As equações de balanço das quantidades médias são obtidas a partir das equações de balanço instantâneas quando substituímos a expressão (A.1) nas equações descritas no Capítulo 2. As equações médias requerem modelos de fechamento, como o modelo $k - \epsilon$, para os termos extras que surgem das interações não lineares da turbulência. Na simulação numérica direta, as equações de Navier-Stokes instantâneas são resolvidas completamente sem qualquer modelo de turbulência. Todas as escalas de turbulência são explicitamente determinadas e seus efeitos capturados. A simulação numérica direta possui alto custo computacional pois é necessária uma malha muito fina para capturar todos os efeitos da turbulência, veja Pope (2000). Na aproximação LES as grandes escalas turbulentas são explicitamente calculadas ao passo que os efeitos das menores escalas são incluídos usando modelos de submalha conforme descrevem Versteeg e Malalasekera (2007), Poinot e Veynante (2005) e Pope (2000).

No presente trabalho foi utilizada a aproximação LES. As equações de conservação para esse modelo de turbulência são obtidas pela filtragem das equações de conservação instantâneas descritas no Capítulo 2. Os valores filtrados das propriedades são obtidos por meio da expressão

$$\tilde{q} = \int q(\mathbf{x}') F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}', \quad (\text{A.2})$$

onde F é o filtro do modelo da turbulência. Por exemplo, o filtro caixa é descrito por

$$F(\mathbf{x}) = F(x_1, x_2, x_3) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta^3}, & \text{se } |x_i| \leq \frac{\Delta}{2} \text{ para } 1 \leq i \leq 3 \text{ ou} \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

onde $\Delta^3 = \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3$. O filtro caixa corresponde a média sobre o cubo (célula computacional) com dimensões $\Delta x_1, \Delta x_2$ e Δx_3 . Os filtros são normalizados, ou seja,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(x_1, x_2, x_3) dx_1 dx_2 dx_3 = 1. \quad (\text{A.4})$$

Para mais exemplos de filtros veja Pope (2000) e Poinso e Veynante (2005).

Para os problemas com densidade variável costuma-se utilizar o filtro de Favre,

$$\tilde{q}(x) = \frac{1}{\bar{\rho}} \int \rho q(\mathbf{x}') F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}'. \quad (\text{A.5})$$

A quantidade filtrada $\tilde{q}$ é calculada numericamente ao passo que a perturbação $q' = q - \tilde{q}$ corresponde a parte não resolvida. As equações de conservação filtradas para o método LES são descritas por

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = 0, \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{\tau}_{ji} + t_{ji}), \text{ com } i = 1, 2, 3 \text{ e} \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{z}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{z})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \tilde{D} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} + \bar{\rho} q_z \right). \quad (\text{A.8})$$

As equações filtradas (A.6)-(A.8) necessitam de modelos de fechamento para os termos t_{ji} e $\bar{\rho} q_z$. O termo $t_{ij} = (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$ é modelado com a hipótese da viscosidade turbulenta conforme Pope (2000), Versteeg e Malalasekera (2007), Poinso e Veynante (2005) e Pierce e Moin (2004), dada por

$$t_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} t_{kk} = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) = -2\mu_t \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \tilde{S}_{kk} \right), \quad (\text{A.9})$$

sendo μ_t a viscosidade turbulenta dada pelo modelo de Smagorinsky,

$$\mu_t = (C_S \Delta)^2 |\mathcal{S}|, \text{ onde } |\mathcal{S}| = \sqrt{2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}}, \quad (\text{A.10})$$

onde $|\mathcal{S}|$ é o módulo da taxa de deformação filtrada, Δ é o tamanho do filtro e C_S é uma constante do modelo, calculada de maneira dinâmica (veja Germano *et al.* (1991) e Pitsch (2006)) ou escolhida constante dependendo do tipo de escoamento.

O termo q_z é modelado com a hipótese do gradiente da difusão descrita por Pierce e Moin (2004), dada por

$$q_z = -\bar{\rho}(\tilde{u}_i \tilde{z} - \tilde{u}_i \tilde{z}) = -\bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_i} \quad (\text{A.11})$$

onde a difusividade turbulenta é dada por

$$D_t = (C_z \Delta)^2 |\mathcal{S}_{ij}|. \quad (\text{A.12})$$

A diferença entre a difusividade turbulenta e a viscosidade turbulenta, nas equações (A.10) e (A.12), respectivamente, está nos coeficientes C_S e C_z destas equações. A razão entre estes coeficientes fornece o número de Schimdt turbulento, dado por

$$Sc_t = \frac{C_S}{C_z}. \quad (\text{A.13})$$

Desta forma, as equações filtradas (A.7) e (A.8) com os respectivos modelos de turbulência são dadas por

$$\bar{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \tilde{u}_i \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right], \quad (\text{A.14})$$

sendo $\mu = \mu_c + \mu_t$ e

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{z})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{z})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_i} \right), \quad (\text{A.15})$$

sendo $D = \bar{\rho}\tilde{D} + D_t$.

A.1 Modelo de turbulência para a taxa de reação

Conforme comentado na Seção 2.1 uma dificuldade ligada ao termo $\dot{\omega}_l$, o qual determina a taxa de produção ou de consumo da espécie química l , está na modelagem da turbulência. O termo $\dot{\omega}_C$, para uma reação de um único passo descrita na Seção 2.3, é dado por

$$\dot{\omega}_C = -A\rho^2 T^\alpha Y_C Y_O \exp\left(\frac{-T_a}{T}\right). \quad (\text{A.16})$$

Como a taxa de reação, na expressão (A.16) é não linear, modelar os termos $\dot{\omega}_C$ não é simplesmente expressá-lo como uma função das quantidades filtradas $\tilde{Y}_C$, $\tilde{Y}_O$ e $\tilde{T}$. O termo $\tilde{\omega}_C$ é obtido por meio de uma expansão em série de Taylor, conforme Versteeg e Malalasekera (2007), Poinot e Veynante (2005) e Veynante e Vervisch (2002). Após filtrar a temperatura, $T = \tilde{T} + T''$, dada uma função $f(T)$ tem-se que $f(T) = f(\tilde{T} + T'')$. Expandindo $f(T)$ em série de Taylor obtém-se

$$f(T) = f(\tilde{T} + T'') = f(\tilde{T}) + T'' f_{\tilde{T}}(\tilde{T}) + \frac{T''^2}{2} f_{\tilde{T}\tilde{T}}(\tilde{T}) + O(T''^3), \quad (\text{A.17})$$

sendo $f_{\tilde{T}} = \frac{\partial f(\tilde{T})}{\partial \tilde{T}}$.

Assim, os termos T^α e $\exp\left(-\frac{T_a}{T}\right)$ após a filtragem são substituídos, respectivamente, por

$$T^\alpha = \tilde{T}^\alpha \left(1 + \alpha \frac{T''}{\tilde{T}} + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2} \frac{T''^2}{\tilde{T}^2} + O(T''^3) \right) = \tilde{T}^\alpha \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} Q_n \frac{T''^n}{\tilde{T}^n} \right), \text{ e} \quad (\text{A.18})$$

$$\exp\left(\frac{-T_a}{T}\right) = \exp\left(\frac{-T_a}{\widetilde{T}}\right) \left[1 + \frac{T_a}{\widetilde{T}} \frac{T''}{\widetilde{T}} + \left(\frac{T_a^2}{\widetilde{T}^4} - 2 \frac{T_a}{\widetilde{T}^3} \right) \frac{T''^2}{2} + O(T''^3) \right] \quad (\text{A.19})$$

$$= \exp\left(\frac{-T_a}{\widetilde{T}}\right) \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} P_n \frac{T''^n}{\widetilde{T}^n} \right), \quad (\text{A.20})$$

onde Q_n e P_n são dados pelas expressões

$$Q_n = \frac{1}{n!} \prod_{k=1}^n (\alpha - k - n) \text{ e } P_n = \sum_{k=1}^n \frac{(n-1)!}{(n-k)![(k-1)!]^2 k} \left(\frac{T_a}{\widetilde{T}} \right)^n. \quad (\text{A.21})$$

Desta forma, o termo $\widetilde{\omega}_C$ é dado por

$$\begin{aligned} \widetilde{\omega}_C &= -A\rho^2 \widetilde{T}^\alpha \widetilde{Y}_C \widetilde{Y}_O \exp\left(\frac{-T_a}{\widetilde{T}}\right) \left[1 + \frac{Y_O''}{\widetilde{Y}_O} + \frac{Y_C''}{\widetilde{Y}_C} + \frac{Y_C'' Y_O''}{\widetilde{Y}_O \widetilde{Y}_C} + (P_1 + Q_1) \times \right. \\ &\quad \times \left(\frac{T''}{\widetilde{T}} + \frac{Y_C'' T''}{\widetilde{T} \widetilde{Y}_C} + \frac{T'' Y_O''}{\widetilde{Y}_O \widetilde{T}} + \frac{T'' Y_C'' Y_O''}{\widetilde{T} \widetilde{Y}_C \widetilde{Y}_O} \right) + (P_2 + P_1 Q_1 + Q_2) \times \\ &\quad \times \left. \left(\frac{T''^2}{\widetilde{T}^2} + \frac{Y_C'' T''^2}{\widetilde{T}^2 \widetilde{Y}_C} + \frac{T''^2 Y_O''}{\widetilde{Y}_O \widetilde{T}^2} + \frac{T''^2 Y_C'' Y_O''}{\widetilde{T}^2 \widetilde{Y}_C \widetilde{Y}_O} \right) + \dots \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

A.2 Modelo da fração de mistura em escoamentos turbulentos

Em um escoamento turbulento a equação de advecção-difusão da fração de mistura filtrada é dada pela equação (A.8). Entretanto os cálculos das frações mássicas das espécies químicas filtradas e da temperatura filtrada, por meio do modelo de fração de mistura, não são tão triviais quanto em um escoamento laminar. Para a simulação de escoamentos turbulentos, as relações lineares entre as frações mássicas das espécies químicas e a fração da mistura, descritas na Seção 2.3, relacionam os valores instantâneos e não os valores filtrados que são obtidos a partir das equações filtradas. O mesmo se aplica para a entalpia e para a temperatura. Para determinar as quantidades filtradas das frações mássicas das espécies e da temperatura é necessário utilizar a função densidade de probabilidade *beta*, β -pdf, como o fazem Versteeg e Malalasekera (2007), Apte *et al.* (2009), Pitsch (2006) e Pierce e Moin (2004), da seguinte maneira

$$\widetilde{Y}_l = \int_0^1 Y_l(y) P(y; a, b) dy, \text{ e } \widetilde{T} = \int_0^1 T(y) P(y; a, b) dy, \quad (\text{A.23})$$

onde $l = C, O, P$ e $P(y; a, b)$ é a função β -pdf dada por

$$P(y; a, b) = \frac{y^{a-1} (1-y)^{b-1}}{\beta(a, b)}, \text{ com } \beta(a, b) = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)} \text{ e } \beta(a, b) = \int_0^1 y^{a-1} (1-y)^{b-1} dy, \quad (\text{A.24})$$

onde β é a função *beta* e Γ é a função *Gamma*. Os parâmetros a e b são determinados a partir do valor filtrado e da variância filtrada da fração da mistura, respectivamente, $\widetilde{z}$ e $\widetilde{z}'$, como seguem

$$a = \tilde{z} \left(\frac{\tilde{z}(1 - \tilde{z})}{\tilde{z}'} - 1 \right), \quad \text{e} \quad b = (1 - \tilde{z}) \frac{a}{\tilde{z}}. \quad (\text{A.25})$$

A variância $\tilde{z}'$ é modelada segundo Pierce e Moin (2004) e Pitsch (2006), por meio da seguinte expressão

$$\tilde{z}' = C_z (\Delta)^2 |\nabla \tilde{z}|^2, \quad (\text{A.26})$$

onde C_z é uma constante do modelo de turbulência, ou é modelado dinamicamente (Germano *et al.* (1991) e Pierce e Moin (2004)).

Do modelo de fração de mistura descrito na Seção 2.3 obtém-se as seguintes expressões para a espécie química combustível Y_C , oxidante Y_O e produto Y_P e para a temperatura T , dadas respectivamente por

$$Y_C(z) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 \leq z < z_{est}, \\ Y_C^* \frac{z - z_{est}}{1 - z_{est}}, & \text{se } z_{est} \leq z \leq 1, \end{cases} \quad (\text{A.27})$$

$$Y_O(z) = \begin{cases} Y_O^* \left(1 - \frac{z}{z_{est}} \right), & \text{se } 0 \leq z < z_{est}, \\ 0, & \text{se } z_{est} \leq z \leq 1, \end{cases} \quad (\text{A.28})$$

$$Y_P(z) = \begin{cases} 1 - Y_O^* \left(1 - \frac{z}{z_{est}} \right), & \text{se } 0 \leq z < z_{est}, \\ 1 - Y_C^* \frac{z - z_{est}}{1 - z_{est}}, & \text{se } z_{est} \leq z \leq 1, \end{cases} \quad (\text{A.29})$$

$$T(z) = \begin{cases} zT_C^* + (1 - z)T_O^* + \frac{\Delta h_C^* Y_C^*}{c_p} z, & \text{se } 0 \leq z < z_{est}, \\ zT_C^* + (1 - z)T_O^* + \frac{\Delta h_C^* Y_C^*}{c_p} z_{est} \frac{1 - z}{1 - z_{est}}, & \text{se } z_{est} \leq z \leq 1. \end{cases} \quad (\text{A.30})$$

onde z_{est} é fração de mistura estequiométrica, Y_C^* é a fração mássica de combustível na entrada da zona de reação, Y_O^* é a fração mássica de oxidante na entrada da zona de reação, T_C^* é a temperatura do combustível na entrada da zona de reação, T_O^* é a temperatura do oxidante na entrada da zona de reação, c_p é o calor específico à pressão constante e Δh_C^* é a entalpia de formação da espécie química combustível. Substituindo-se as expressões (A.27)-(A.30) nas integrais descritas em (A.23) obtém-se, como em Cook e Riley (1994), as expressões

$$\tilde{Y}_C = \frac{Y_C^*}{1 - z_{est}} \left[\left(\frac{a}{a + b} \right) I_{1-z_{est}}(b, a + 1) - I_{1-z_{est}}(b, a) \right], \quad (\text{A.31})$$

$$\tilde{Y}_O = Y_O^* \left[I_{z_{est}}(a, b) - \frac{1}{z_{est}} \left(\frac{a}{a + b} \right) I_{z_{est}}(a + 1, b) \right], \quad (\text{A.32})$$

$$\tilde{Y}_P = 1 - \tilde{Y}_O - \tilde{Y}_C, \quad (\text{A.33})$$

$$\begin{aligned} \tilde{T} = & \left(\frac{a}{a+b} \right) I_{z_{est}}(a+1, b) \left(T_C^* + \frac{\Delta h_C^* Y_C^*}{c_p} \right) + T_O^* \left(\frac{b}{a+b} \right) I_{z_{est}}(a, b+1) + \\ & + T_C^* \left(\frac{a}{a+b} \right) I_{1-z_{est}}(b, a+1) + \left(\frac{b}{a+b} \right) I_{1-z_{est}}(b+1, a) \left(T_O^* + \frac{\Delta h_C^* Y_C^* z_{est}}{(1-z_{est})c_p} \right), \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

onde os parâmetros a e b são dados pela expressão (A.25). A função $I_x(a, b)$ é a função beta incompleta normalizada dada por

$$I_x(a, b) = \frac{\beta_x(a, b)}{\beta(a, b)} = \frac{1}{\beta(a, b)} \int_0^x y^{a-1} (1-y)^{b-1} dy, \quad \text{com } 0 < x < 1, \quad (\text{A.35})$$

onde $\beta_x(a, b)$ é a função beta incompleta.

A seguir mostra-se com detalhes como a expressão (A.31) para a fração mássica da espécie química combustível Y_C é obtida. As demais expressões (A.32)-(A.34) são obtidas de maneira análoga.

Substituindo-se a expressão (A.25) na integral (A.23) obtém-se

$$\tilde{Y}_C = \frac{Y_C^*}{(1-z_{est})\beta(a, b)} \int_{z_{est}}^1 z^a (1-z)^{b-1} dz - \frac{Y_C^* z_{est}}{(1-z_{est})\beta(a, b)} \int_{z_{est}}^1 z^{a-1} (1-z)^{b-1} dz. \quad (\text{A.36})$$

Fazendo-se a mudança de variável $v = 1 - z$, na expressão (A.36) obtém-se

$$\tilde{Y}_C = \frac{Y_C^*}{(1-z_{est})\beta(a, b)} \left[\int_0^{1-z_{est}} (1-v)^a v^{b-1} dv - z_{est} \int_0^{1-z_{est}} (1-v)^{a-1} v^{b-1} dv \right]. \quad (\text{A.37})$$

Multiplicando-se a primeira integral da expressão (A.37) por $\frac{\beta(b, a+1)}{\beta(b, a+1)}$ obtém-se

$$\tilde{Y}_C = \frac{Y_C^*}{(1-z_{est})} \left[\frac{\beta(b, a+1)}{\beta(a, b)} \frac{1}{\beta(b, a+1)} \int_0^{1-z_{est}} (1-v)^a v^{b-1} dv + \right. \quad (\text{A.38})$$

$$\left. - \frac{z_{est}}{\beta(a, b)} \int_0^{1-z_{est}} (1-v)^{a-1} v^{b-1} dv \right]. \quad (\text{A.39})$$

Aplicando-se a definição da função beta incompleta normalizada e usando o fato que

$$\frac{\beta(b, a+1)}{\beta(a, b)} = \frac{a\Gamma(a)\Gamma(b)}{(a+b)\Gamma(a+b)} \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} = \frac{a}{a+b}, \quad (\text{A.40})$$

obtém-se

$$\tilde{Y}_C = \frac{Y_C^*}{(1-z_{est})} \left[\left(\frac{a}{a+b} \right) I_{1-z_{est}}(b, a+1) - z_{est} I_{1-z_{est}}(a, b) \right]. \quad (\text{A.41})$$

Apêndice B

Sistema de equações rígido

Para exemplificar o significado da rigidez do termo da reação química, considere o exemplo de um sistema de equações rígidas originário de um processo químico descrito por Robertson (1966) (veja Butcher (2003) e Hairer e Wanner (1991)). Um modelo de processo químico consistindo de três espécies químicas, as quais são denotadas por A , B e C , é representado por

onde a seta “ $\longrightarrow$ ” representa o sentido da reação química. Sejam Y_A , Y_B e Y_C as frações mássicas das espécies A , B e C e $\dot{\omega}_A$, $\dot{\omega}_B$ e $\dot{\omega}_C$ as respectivas taxas de reação de cada espécie química. Por exemplo, a taxa de reação da primeira reação química na expressão (B.1) será denotada por k_A indicando a taxa na qual Y_A decresce e Y_B aumenta. Na segunda reação, k_B indica a produção da espécie química A a partir da espécie B e a fração mássica Y_C decresce a taxa de $k_B Y_B Y_C$. Na terceira reação, a produção da espécie C a partir da espécie B é dada por $k_C Y_B^2$. Desta forma, o processo de combustão (B.1) origina o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_A &= \frac{dY_A}{dt} = -k_A Y_A + k_B Y_C, \\ \dot{\omega}_B &= \frac{dY_B}{dt} = k_A Y_A - k_B Y_B Y_C - k_C Y_B^2, \\ \dot{\omega}_C &= \frac{dY_C}{dt} = k_C Y_B^2, \end{aligned} \tag{B.2}$$

sendo a condição inicial $Y_A(0) = 1$, $Y_B(0) = 0$ e $Y_C(0) = 0$ e os parâmetros k são as taxas da reação de cada reação química em (B.1).

O sistema (B.2) é denominado *rígido* quando uma ou mais variáveis “mudam rapidamente” em comparação às outras devido a existência de escalas de tempo diferentes, conforme Stoer e Bulirsch (2002) e Shampine e Gear (1979).

Se as taxas de reação k_A , k_B e k_C diferirem muito em magnitude o sistema (B.2) torna-se difícil de resolver numericamente. O exemplo de Robertson apresente taxas de reação $k_A = 4 \times 10^{-2}$ (lenta), $k_B = 10^4$ (rápida) e $k_C = 3 \times 10^7$ (muito rápida), tornando-se difícil resolver esse sistema

numericamente.

As frações mássicas das espécies químicas satisfazem $Y_A + Y_B + Y_C = 1$. Desta forma, o sistema (B.2) pode ser reescrito como

$$\begin{aligned}\frac{dY_B}{dt} &= k_A(1 - Y_B - Y_C) - k_B Y_B Y_C - k_C Y_B^2, \\ \frac{dY_C}{dt} &= k_C Y_B^2.\end{aligned}\tag{B.3}$$

De maneira compacta,

$$\frac{d\mathbf{Y}}{dt} = F(t, \mathbf{Y}).\tag{B.4}$$

Conforme Butcher (2003), sistemas de equações diferenciais rígidos são tipicamente não-lineares. Como a *rigidez* é associada ao comportamento das perturbações de uma dada solução, analisa-se a matriz Jacobiana. Considerando $\epsilon \mathbf{Z}$, uma perturbação da solução do sistema (B.3). Se $\mathbf{Y}$ é substituído por $\mathbf{Y} + \epsilon \mathbf{Z}$ em (B.4) e a solução é expandida em série de Taylor, obtém-se

$$\frac{d\mathbf{Y}}{dt} + \epsilon \frac{d\mathbf{Z}}{dt} = F(t, \mathbf{Y}) + \epsilon \frac{dF}{d\mathbf{Y}} \mathbf{Z}.\tag{B.5}$$

Subtraindo a expressão (B.4) de (B.5), obtém-se

$$\dot{\mathbf{Z}} = \mathcal{J} \mathbf{Z}.\tag{B.6}$$

A matriz Jacobiana do sistema (B.3) é dada por

$$\mathcal{J} = \begin{bmatrix} -k_A - k_B Y_C - 2k_C Y_B & -k_A - k_B Y_B \\ 2k_C Y_B & 0 \end{bmatrix}.\tag{B.7}$$

O polinômio característico da matriz (B.7) é dado por

$$p(\lambda) = \lambda^2 + (k_A + k_B Y_C + 2k_C Y_B)\lambda + 2k_C Y_B(k_A + k_B Y_B).\tag{B.8}$$

Dessa forma os autovalores de $\mathcal{J}$ são

$$\lambda = \frac{1}{2} \left[- (k_A + k_B Y_C + 2k_C Y_B) \pm \sqrt{(k_A + k_B Y_C + 2k_C Y_B)^2 - 8k_C Y_B(k_A + k_B Y_B)} \right].\tag{B.9}$$

A parte real dos autovalores, $Re(\lambda)$, de (B.3) é negativa já que k_A, k_B, k_C, Y_C e Y_B são sempre valores positivos. Para valores típicos de Y_B e Y_C tem-se $Re(\lambda) \ll 0$, ou seja, negativo e de grande magnitude. Segundo Butcher (2003), a existência de um ou mais valores de $\lambda \Delta t$ de grande magnitude e negativos, com Δt o intervalo de tempo entre duas soluções, é um sinal que o sistema é rígido.

Apêndice C

Dedução das formas da equação da energia

Este apêndice apresenta a dedução das diferentes formas da equação da conservação da energia descritas na Seção 2.1.4. A equação da conservação da energia total na notação indicial é dada por

$$\frac{De_t}{Dt} = -\frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{\partial(\sigma_{ij}u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{\partial(\tau_{ij}u_i)}{\partial x_j} - \frac{\partial(pu_i)}{\partial x_i} \quad (C.1)$$

onde e_t é a energia total, p é a pressão, $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ é o campo de velocidade, $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$ é o fluxo de calor dado por

$$q_j = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} + \rho \sum_{l=1}^N h_l Y_l v_{l,j}^d, \quad (C.2)$$

sendo κ o coeficiente de difusão de calor, T a temperatura, h_l a entalpia absoluta da espécie química l , Y_l a fração mássica da espécie química l , $\mathbf{v}_l^d = (v_{l,1}^d, v_{l,2}^d, v_{l,3}^d)$ é a velocidade de difusão da espécie química l e o tensor de tensões viscosas combinado com o tensor da pressão, σ_{ij} dado por

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right), \quad (C.3)$$

onde δ_{ij} é o delta de Kronecker.

A energia absoluta e é obtida por meio da expressão,

$$e = e_t - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 u_i^2. \quad (C.4)$$

Para obter-se a equação da conservação da energia absoluta é necessário obter a equação da conservação da energia cinética. Multiplicando-se a componente da velocidade u_i na equação da conservação da quantidade de movimento (2.8), obtém-se

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} u_1^2 \right) = -u_1 \frac{\partial p}{\partial x_1} + u_1 \frac{\partial \tau_{1j}}{\partial x_j}, \quad (C.5)$$

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} u_2^2 \right) = -u_2 \frac{\partial p}{\partial x_2} + u_2 \frac{\partial \tau_{2j}}{\partial x_j}, \quad (C.6)$$

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} u_3^2 \right) = -u_3 \frac{\partial p}{\partial x_3} + u_3 \frac{\partial \tau_{3j}}{\partial x_j}. \quad (C.7)$$

Subtraindo-se da equação (C.1) as equações (C.5)-(C.7) obtém-se na notação indicial a equação da conservação da energia absoluta, dada por

$$\rho \frac{De}{Dt} = -p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - \rho \sum_{l=1}^N h_l Y_l v_{l,j}^d \right] + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (C.8)$$

A equação da conservação da entalpia absoluta é obtida por meio da expressão,

$$h = e + \frac{p}{\rho}. \quad (C.9)$$

Substituindo-se a expressão (C.9) no lado esquerdo da equação (C.8) obtém-se

$$\begin{aligned} \rho \frac{De}{Dt} &= \rho \frac{Dh}{Dt} - \rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{p}{\rho} \right), \\ &= \rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} + \frac{p}{\rho} \frac{D\rho}{Dt}, \\ &= \rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} - p \frac{\partial u_i}{\partial x_i}. \end{aligned} \quad (C.10)$$

No terceiro passo da expressão (C.10) foi utilizada a equação da conservação da massa.

Assim, a equação da conservação da entalpia absoluta é dada por

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - \rho \sum_{l=1}^N h_l Y_l v_{l,j}^d \right] + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (C.11)$$

Seguindo a dedução feita por Turns (1996), o termo associado ao fluxo de calor,

$$\dot{q}_j = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} + \rho \sum_{l=1}^N h_l Y_l v_{l,j}^d, \quad (C.12)$$

pode ser reescrito, utilizando-se a segunda Lei de Fick da Difusão descrita na Seção 2.1.3, da seguinte forma,

$$\dot{q}_j = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} - \rho D \sum_{l=1}^N h_l \frac{\partial Y_l}{\partial x_j}. \quad (C.13)$$

Aplicando-se a definição da derivada do produto no termo $\sum_l h_l Y_l$ tem-se

$$\sum_{l=1}^N h_l \frac{\partial Y_l}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{l=1}^N h_l Y_l \right) - \sum_{l=1}^N Y_l \frac{\partial h_l}{\partial x_j}. \quad (C.14)$$

Desta forma, (C.13) torna-se

$$\dot{q}_j = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} - \rho D \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{l=1}^N h_l Y_l \right) + \rho D \sum_{l=1}^N Y_l \frac{\partial h_l}{\partial x_j}. \quad (\text{C.15})$$

Como $c_{pl} = \frac{\partial h_l}{\partial T}$, o terceiro termo do lado direito de (C.11) em termos da temperatura T e do calor específico à pressão constante c_p , torna-se

$$\sum_{l=1}^N Y_l \frac{\partial h_l}{\partial x_j} = \sum_{l=1}^N Y_l c_{pl} \frac{\partial T}{\partial x_j} = c_p \frac{\partial T}{\partial x_j}. \quad (\text{C.16})$$

Usando a definição da entalpia absoluta da mistura $h = \sum_l Y_l h_l$, (C.15) torna-se

$$\dot{q}_j = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} - \rho D \frac{\partial h}{\partial x_j} + \rho D c_p \frac{\partial T}{\partial x_j}. \quad (\text{C.17})$$

Assumindo que o o número de Lewis é unitário, isto é, $\rho D c_p = \kappa$, a equação da conservação da entalpia absoluta é dada por

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (\text{C.18})$$

Da definição de entalpia absoluta,

$$h = \sum_{l=1}^N \Delta h_l^* Y_l + \int c_p dT, \quad (\text{C.19})$$

onde Δh_l^* é a entalpia de formação da espécie química l , obtém-se

$$\begin{aligned} \rho \frac{Dh}{Dt} &= \rho \frac{\partial h}{\partial T} \frac{DT}{Dt} + \rho \sum_{l=1}^N \left(\Delta h_l^* \frac{DY_l}{Dt} \right), \\ &= \rho c_p \frac{DT}{Dt} + \sum_{l=1}^N \Delta h_l^* \left[\dot{\omega}_l + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Y_l}{\partial x_j} \right) \right], \\ &= \rho c_p \frac{DT}{Dt} - \dot{\omega}_T - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{l=1}^N \Delta h_l^* Y_l v_{l,j}^d \right), \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

Em (C.20) foram utilizada a equação da conservação da fração mássica das espécies químicas na forma *não conservativa*, a definição da taxa de calor liberado devido a reação química, dada por

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{l=1}^N \Delta h_l^* \dot{\omega}_l, \quad (\text{C.21})$$

e a segunda Lei de Fick da Difusão (2.13).

Substituindo (C.20) em (C.11) obtém-se

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - \rho \sum_{l=1}^N h_l Y_l v_{l,j}^d \right] + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \sum_{l=1}^N \Delta h_l^* Y_l v_{l,j}^d \right) + \dot{\omega}_T. \quad (\text{C.22})$$

Da definição de entalpia absoluta $h_{sl} = h_l - \Delta h_l^*$ a equação (C.22) pode ser reescrita como

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - \rho \sum_{l=1}^N h_{sl} Y_l v_{l,j}^d \right] + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{\omega}_T. \quad (\text{C.23})$$

Conforme descrito no Capítulo 2 o termo $\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ não será considerado. Além disso, se $c_p = c_{pl}$ o termo $\sum_l h_{sl} Y_l v_{l,j}^d$ na equações (C.23) é nulo. Da definição de entalpia sensível tem-se que

$$\sum_{l=1}^N h_{sl} Y_l v_{l,j}^d = \sum_{l=1}^N \left(\int_{T^*}^T c_{pl} dT \right) Y_l v_{l,j}^d = \left(\int_{T^*}^T c_p dT \right) \sum_{l=1}^N Y_l v_{l,j}^d = h_s \sum_{l=1}^N Y_l v_{l,j}^d = 0. \quad (\text{C.24})$$

O último termo é igual a zero já que $\sum_l Y_l v_{l,j}^d = 0$ (veja Poinot e Veynante (2005)).

Assim a equação de conservação da temperatura é dada por

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_T. \quad (\text{C.25})$$

Apêndice D

Adimensionalização das equações

Este apêndice mostra como é feita a adimensionalização das equações da conservação da massa, das espécies químicas, da quantidade de movimento, da temperatura e da equação do estado, descritas na Seção 2.1,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0, \quad (\text{D.1})$$

$$\frac{\partial(\rho Y_l)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_l)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Y_l}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_l, \quad (\text{D.2})$$

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right], \quad (\text{D.3})$$

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{Dp}{Dt} + \dot{\omega}_T, \quad (\text{D.4})$$

$$p = \frac{\rho \mathcal{R} T}{W}. \quad (\text{D.5})$$

As propriedades adimensionais são dadas por,

$$\rho^a = \frac{\rho}{\rho^*}, \quad u_i^a = \frac{u_i}{u^*}, \quad x_i^a = \frac{x_i}{L}, \quad t^a = u^* \frac{t}{L}, \quad \mu^a = \frac{\mu}{\mu^*}, \quad T^a = \frac{T}{T^*}, \quad p^a = \frac{p - p^*}{\rho^* u^* u^*}, \quad D^a = \frac{D}{D^*}, \quad (\text{D.6})$$

onde o símbolo “a” representa a propriedade adimensional e o símbolo “*”, os valores de referência do escoamento. Substituindo as expressões da equação (D.6) nas equações (D.1)-(D.5) obtém-se as equações de conservação adimensionais.

D.1 Equação da conservação da massa adimensional

Substituindo-se $\rho = \rho^a \rho^*$, $u_i = u_i^a u^*$, $t = L \frac{t^a}{u^*}$ e $x_i = x_i^a L$ na equação (D.1) obtém-se,

$$\frac{u^* \rho^*}{L} \frac{\partial \rho^a}{\partial t^a} + \frac{u^* \rho^*}{L} \frac{\partial(\rho^a u_j^a)}{\partial x_j^a} = 0,$$

$$\frac{u^* \rho^*}{L} \left(\frac{\partial \rho^a}{\partial t^a} + \frac{\partial(\rho^a u_j^a)}{\partial x_j^a} \right) = 0.$$

Portanto, a equação da conservação da massa específica adimensional é dada por,

$$\frac{\partial \rho^a}{\partial t^a} + \frac{\partial(\rho^a u_j^a)}{\partial x_j^a} = 0. \quad (\text{D.7})$$

D.2 Equação da conservação das espécies químicas adimensional

Substituindo-se $\rho = \rho^a \rho^*$, $u_i = u_i^a u^*$, $t = L \frac{t^a}{u^*}$, $D = D^a D^*$, $\dot{\omega}_l = \dot{\omega}_l^a u^* \frac{\rho^*}{L}$ e $x_i = x_i^a L$ na equação (D.2) obtém-se,

$$\begin{aligned} \frac{u^* \rho^*}{L} \frac{\partial(\rho^a Y_l)}{\partial t^a} + \frac{u^* \rho^*}{L} \frac{\partial(\rho^a u_j^a Y_l)}{\partial x_j^a} &= \frac{\rho^* D^*}{L^2} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\rho^a D^a \frac{\partial Y_l}{\partial x_j^a} \right) + \frac{u^* \rho^*}{L} \dot{\omega}_l^a, \\ \frac{u^* \rho^*}{L} \left(\frac{\partial(\rho^a Y_l)}{\partial t^a} + \frac{\partial(\rho^a u_j^a Y_l)}{\partial x_j^a} \right) &= \frac{\rho^* D^* \mu^*}{\mu^* L^2} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\rho^a D^a \frac{\partial Y_l}{\partial x_j^a} \right) + \frac{u^* \rho^*}{L} \dot{\omega}_l^a, \\ \frac{\partial(\rho^a Y_l)}{\partial t^a} + \frac{\partial(\rho^a u_j^a Y_l)}{\partial x_j^a} &= \frac{L}{\rho^* u^*} \left[\frac{\rho^* D^* \mu^*}{\mu^* L^2} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\rho^a D^a \frac{\partial Y_l}{\partial x_j^a} \right) + \frac{u^* \rho^*}{L} \dot{\omega}_l^a \right], \\ &= \frac{\mu^*}{\rho^* u^* L} \frac{\rho^* D^*}{\mu^*} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\rho^a D^a \frac{\partial Y_l}{\partial x_j^a} \right) + \dot{\omega}_l^a. \end{aligned}$$

Portanto, a equação da conservação da fração mássica da espécie l adimensional é dada por,

$$\frac{\partial(\rho^a Y_l)}{\partial t^a} + \frac{\partial(\rho^a u_j^a Y_l)}{\partial x_j^a} = \frac{1}{Re} \frac{1}{Sc} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\rho^a D^a \frac{\partial Y_l}{\partial x_j^a} \right) + \dot{\omega}_l^a. \quad (\text{D.8})$$

onde Re é o número de Reynolds e Sc é o número de Schmidt, definidos por, $Re = \frac{\rho L u}{\mu}$ e $Sc = \frac{\mu}{\rho D}$.

D.3 Equação da quantidade de movimento linear adimensional

A equação da quantidade de movimento linear pode ser adimensionalizada de duas maneiras. Na primeira, substitui-se $\rho = \rho^a \rho^*$, $u_i = u_i^a u^*$, $t = L \frac{t^a}{u^*}$, $\mu = \mu^a \mu^*$, $x_i = x_i^a L$ e $p = p^a \rho^* u^* u^* + p^*$ na equação (D.3) e obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\rho^* u^* u^*}{L} \frac{\partial \rho^a u_i^a}{\partial t^a} + \frac{\rho^* u^* u^*}{L} \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j^a} &= \frac{\rho^* u^* u^*}{L} \frac{\partial p^a}{\partial x_i^a} + \frac{\mu^* u^*}{L^2} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left[\mu^a \left(\frac{\partial u_i^a}{\partial x_j^a} + \frac{\partial u_j^a}{\partial x_i^a} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k^a}{\partial x_k^a} \right) \right], \\ \rho^a \left(\frac{\partial u_i^a}{\partial t^a} + u_j^a \frac{\partial u_i^a}{\partial x_j^a} \right) &= - \frac{p^*}{\rho^* u^*} \frac{\partial p^a}{\partial x_i^a} + \frac{\mu^*}{\rho^* L u^*} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left[\mu^a \left(\frac{\partial u_i^a}{\partial x_j^a} + \frac{\partial u_j^a}{\partial x_i^a} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k^a}{\partial x_k^a} \right) \right]. \end{aligned}$$

Portanto, a equação da quantidade de movimento linear adimensional é dada por,

$$\rho^a \left(\frac{\partial u_i^a}{\partial t^a} + u_j^a \frac{\partial u_i^a}{\partial x_j^a} \right) = - \frac{\partial p^a}{\partial x_i^a} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left[\mu^a \left(\frac{\partial u^a}{\partial x_j^a} + \frac{\partial u_j^a}{\partial x_i^a} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k^a}{\partial x_k^a} \right) \right]. \quad (D.9)$$

Na segunda, substitui-se todas as propriedades como na maneira anterior, com exceção da pressão que será adimensionalizada como $p = p^* p^a$. Desta forma, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\rho^* u^* u^*}{L} \frac{\partial \rho^a u_i^a}{\partial t^a} + \frac{\rho^* u^* u^*}{L} \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j^a} &= \frac{p^*}{L} \frac{\partial p^a}{\partial x_i^a} + \frac{\mu^* u^*}{L^2} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left[\mu^a \left(\frac{\partial u^a}{\partial x_j^a} + \frac{\partial u_j^a}{\partial x_i^a} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k^a}{\partial x_k^a} \right) \right], \\ \rho^a \left(\frac{\partial u_i^a}{\partial t^a} + u_j^a \frac{\partial u_i^a}{\partial x_j^a} \right) &= - \frac{p^*}{\rho^* u^* u^*} \frac{\partial p^a}{\partial x_i^a} + \frac{\mu^*}{\rho^* L u^*} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left[\mu^a \left(\frac{\partial u^a}{\partial x_j^a} + \frac{\partial u_j^a}{\partial x_i^a} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k^a}{\partial x_k^a} \right) \right]. \end{aligned}$$

Portanto, a equação da quantidade de movimento linear adimensional é dada por,

$$\rho^a \left(\frac{\partial u_i^a}{\partial t^a} + u_j^a \frac{\partial u_i^a}{\partial x_j^a} \right) = - \frac{1}{\gamma Ma^2} \frac{\partial p^a}{\partial x_i^a} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left[\mu^a \left(\frac{\partial u^a}{\partial x_j^a} + \frac{\partial u_j^a}{\partial x_i^a} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k^a}{\partial x_k^a} \right) \right], \quad (D.10)$$

onde Ma é o número de Mach definido por $Ma = \frac{u^*}{\sqrt{\gamma \frac{p^*}{\rho^*}}}$, e γ é a razão entre a capacidade de calor à pressão constante e a capacidade de calor a volume constante, $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$.

D.4 Equação da temperatura adimensional

A equação da temperatura adimensional também pode ser obtida de duas maneiras. Na primeira, substituindo-se $\rho = \rho^a \rho^*$, $u_i = u_i^a u^*$, $t = L \frac{t^a}{u^*}$, $\kappa = \kappa^a \kappa^*$, $x_i = x_i^a L$ e $p = p^a \rho^* u^* u^* + p^*$ na equação (D.4), obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{c_p^* \rho^* T^* u^*}{L} \rho^a c_p^a \frac{DT^a}{Dt^a} &= \frac{\rho^* u^* u^* u^*}{L} \frac{Dp^a}{Dt^a} + \frac{\kappa^* T^*}{L^2} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\kappa^a \frac{\partial T^a}{\partial x_j^a} \right) + \frac{u^* \rho^* T^* c_p^*}{L} \dot{\omega}_T, \\ \rho^a c_p^a \frac{DT^a}{Dt^a} &= - \frac{u^* u^*}{c_p^* T^*} \frac{Dp^a}{Dt^a} + \frac{\kappa^*}{c_p^* \mu^*} \frac{\mu^*}{\rho^* u^* L} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\kappa^a \frac{\partial T^a}{\partial x_j^a} \right) + \dot{\omega}_T, \\ &= \frac{\gamma \mathcal{R}^* u^* u^*}{c_p^* \gamma \mathcal{R}^* T^*} \frac{Dp^a}{Dt^a} + \frac{\kappa^*}{c_p^* \mu^*} \frac{\mu^*}{\rho^* u^* L} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\kappa^a \frac{\partial T^a}{\partial x_j^a} \right) + \dot{\omega}_T, \\ &= \frac{\gamma \mathcal{R}^* Ma^2}{c_p^*} \frac{Dp^a}{Dt^a} + \frac{1}{Pr} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\kappa^a \frac{\partial T^a}{\partial x_j^a} \right) + \dot{\omega}_T, \\ &= (\gamma - 1) Ma^2 \frac{Dp^a}{Dt^a} + \frac{1}{Pr} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\kappa^a \frac{\partial T^a}{\partial x_j^a} \right) + \dot{\omega}_T. \end{aligned}$$

Portanto a equação da temperatura adimensional é dada por

$$\rho^a c_p^a \frac{DT^a}{Dt^a} = (\gamma - 1) Ma^2 \frac{Dp^a}{Dt^a} + \frac{1}{Pr} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\kappa^a \frac{\partial T^a}{\partial x_j^a} \right) + \dot{\omega}_T, \quad (D.11)$$

sendo $Pr = \frac{\mu c_p}{\kappa}$ o número de Prandtl e $Ma = \frac{u^*}{\sqrt{\gamma \mathcal{R}^* T^*}}$ o número de Mach. Para obter a equação da temperatura adimensional (D.11) foram utilizadas as relações $R_M = \frac{\mathcal{R}}{W^* W^a} = \frac{\mathcal{R}^*}{W^a}$ e $\frac{c_p}{\mathcal{R}^*} = \frac{\gamma}{\gamma - 1}$.

Na segunda maneira de adimensionalizar, substitui-se na equação (D.4), todas as variáveis como anteriormente, com exceção da pressão que será substituída por $p = p^a p^*$. Desta forma, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{c_p^* \rho^* T^* u^*}{L} \rho^a c_p^a \frac{DT^a}{Dt^a} &= \frac{u^* p^*}{L} \frac{Dp^a}{Dt^a} + \frac{\kappa^* T^*}{L^2} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\kappa^a \frac{\partial T^a}{\partial x_j^a} \right) + \frac{u^* \rho^* T^* c_p^*}{L} \dot{\omega}_T, \\ \rho^a c_p^a \frac{DT^a}{Dt^a} &= - \frac{p^*}{c_p^* \rho^* T^*} \frac{Dp^a}{Dt^a} + \frac{\kappa^*}{c_p^* \mu^*} \frac{\mu^*}{\rho^* u^* L} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\kappa^a \frac{\partial T^a}{\partial x_j^a} \right) + \dot{\omega}_T, \\ &= \frac{\mathcal{R}^* p^*}{c_p^* \rho^* \mathcal{R}^* T^*} \frac{Dp^a}{Dt^a} + \frac{\kappa^*}{c_p^* \mu^*} \frac{\mu^*}{\rho^* u^* L} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\kappa^a \frac{\partial T^a}{\partial x_j^a} \right) + \dot{\omega}_T, \\ &= \frac{\mathcal{R}^*}{c_p^*} \frac{Dp^a}{Dt^a} + \frac{1}{Pr} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\kappa^a \frac{\partial T^a}{\partial x_j^a} \right) + \dot{\omega}_T, \\ &= \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{Dp^a}{Dt^a} + \frac{1}{Pr} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\kappa^a \frac{\partial T^a}{\partial x_j^a} \right) + \dot{\omega}_T. \end{aligned}$$

Portanto, a equação da temperatura adimensional é dada por,

$$\rho^a c_p^a \frac{DT^a}{Dt^a} = \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{Dp^a}{Dt^a} + \frac{1}{Pr} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j^a} \left(\kappa^a \frac{\partial T^a}{\partial x_j^a} \right) + \dot{\omega}_T. \quad (D.12)$$

Para obter a equação (D.12) utilizamos o fato que $p^* = \rho^* \mathcal{R}^* T^*$.

D.5 Equação do estado termodinâmico adimensional

Como na equação da quantidade de movimento linear adimensional e a da temperatura adimensional, a equação do estado termodinâmico também pode ser adimensionalizada de duas maneiras. Na primeira, substituindo -se $\rho = \rho^a \rho^*$, $T = T^a T^*$, $p = p^a \rho^* u^* u^* + p^*$, $W = W^* W^a$ na equação (D.5), tem-se

$$\begin{aligned} p^a \rho^* u^* u^* + p^* &= \frac{\rho^* \rho^a \mathcal{R}^* T^* T^a}{W^* W^a}, \\ \frac{\rho^a T^a}{W^a} &= \frac{p^a \rho^* u^* u^* + p^*}{\rho^* \mathcal{R}^* T^*}, \\ &= \frac{p^a \gamma u^* u^* + p^*}{\gamma \mathcal{R}^* T^*}, \\ &= \gamma Ma^2 p^a + 1. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\frac{\rho^a T^a}{W^a} = \gamma Ma^2 p^a + 1. \quad (\text{D.13})$$

Na segunda maneira, substituindo-se $\rho = \rho^a \rho^*$, $T = T^a T^*$, $p = p^a p^*$, $W = W^* W^a$, na equação (D.5) tem-se

$$\begin{aligned} p^a p^* &= \frac{\rho^* \rho^a \mathcal{R} T^* T^a}{W^* W^a}, \\ \frac{\rho^a T^a}{W^a} &= \frac{p^a p^*}{\rho^* \mathcal{R} T^*}. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\frac{\rho^a T^a}{W^a} = p^a. \quad (\text{D.14})$$

Referências Bibliográficas

- Apte et al.(2009)** S. V. Apte, K. Mahesh e P. Moin. Large-eddy simulation of evaporating spray in a coaxial combustor. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(2):2247–2256. Citado na pág. 2, 3, 18, 92, 102
- Ascher et al.(1995)** U. M. Ascher, S. J. Ruuth e B. T. R. Wetton. Implicit-explicit methods for time-dependent partial differential equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, páginas 797–823. Citado na pág. 1, 2, 25, 28
- Balow e Frank(2007)** R. Balow e J. Frank. Piloted ch4/air flames c, d, e, and f- release 2.1. www.ca.sandia.gov/TNF. Citado na pág. 65, 67, 83, 84, 86, 87
- Batchelor(2000)** G.K. Batchelor. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge University Press. Citado na pág. 8, 9
- Bell(2005)** J. Bell. Amr for low mach number reacting flow. *Adaptive Mesh Refinement-Theory and Applications*, páginas 203–221. Citado na pág. 4, 5, 7, 10
- Bell et al.(1989)** J.B. Bell, P. Colella e H.M. Glaz. A second-order projection method for the incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 85(2):257–283. Citado na pág. 26, 36
- Berger e Rigoutsos(1991)** M. Berger e I. Rigoutsos. An algorithm for point clustering and grid generation. *Systems, Man and Cybernetics, IEEE Transactions on*, 21(5):1278–1286. Citado na pág. 4, 45, 48, 49
- Berger e Olinger(1984)** M. J. Berger e J. Olinger. Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. *Journal of computational Physics*, 53(3):484–512. Citado na pág. 1, 2, 4, 45
- Berger e Colella(1989)** M.J. Berger e P. Colella. Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics. *Journal of computational Physics*, 82(1):64–84. Citado na pág. 1, 4, 45, 48
- Bhatia e Durst(1989)** J. C. Bhatia e F. Durst. Comparative study of some probability distributions applied to liquid sprays. *Particle & Particle Systems Characterization*, 6(1-4):151–162. Citado na pág. 79, 83
- Bini e Jones(2009)** M. Bini e W. P. Jones. Large eddy simulation of an evaporating acetone spray. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 30(3):471–480. Citado na pág. 5, 20, 92
- Boersma et al.(1998)** BJ Boersma, G. Brethouwer e FTM Nieuwstadt. A numerical investigation on the effect of the inflow conditions on the self-similar region of a round jet. *Physics of fluids*, 10:899. Citado na pág. 65, 67, 70, 71, 86, 91
- Briggs e McCormick(2000)** W. L. Briggs e S. F. McCormick. *A multigrid tutorial*, volume 72. Society for Industrial Mathematics. Citado na pág. 25, 35
- Burden e Faires(2005)** R. L. Burden e J. D. Faires. *Numerical Analysis*. Thomson Brooks cole. Citado na pág. 40

- Butcher(2003)** J. C. Butcher. *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. Wiley. Citado na pág. 10, 105, 106
- Ceniceros et al.(2010a)** H.D. Cenicerros, R.L. Nós e A.M. Roma. Three-dimensional, fully adaptive simulations of phase-field fluid models. *Journal of Computational Physics*, 229(17):6135–6155. Citado na pág. 1, 4
- Ceniceros et al.(2010b)** H.D. Cenicerros, A.M. Roma, A. Silveira-Neto e M.M. Villar. A robust, fully adaptive hybrid level-set/front-tracking method for two-phase flows with an accurate surface tension computation. *Communications in Computational Physics*, 8(1):51–94. Citado na pág. 1, 4, 21, 25
- Chorin(1968)** A. J. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Math. Comp*, 22(104):745–762. Citado na pág. 25, 26, 58
- Chorin e Marsden(1993)** A.J. Chorin e J.E. Marsden. *A mathematical introduction to fluid mechanics*, volume 4. Springer. Citado na pág. 8, 9, 10, 26
- Chrigui et al.(2012)** M. Chrigui, J. Gounder, A. Sadiki, A.R. Masri e J. Janicka. Partially premixed reacting acetone spray using les and fgm tabulated chemistry. *Combustion and Flame*, páginas 2718–2741. Citado na pág. 5
- Cook e Riley(1994)** A.W. Cook e J.J. Riley. A subgrid model for equilibrium chemistry in turbulent flows. *Physics of fluids*, 6:2868. Citado na pág. 103
- Crowe et al.(1998)** C. T. Crowe, M. Sommerfeld e Y. Tsuji. *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC. Citado na pág. 3, 7, 18, 19, 77, 79, 83
- Day e Bell(2000)** M.S. Day e J.B. Bell. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry. *Combustion Theory and Modelling*, 4(4):535–556. Citado na pág. 2, 3, 4, 5, 7, 83, 84, 85, 86
- De et al.(2011)** S. De, K. N. Lakshmisha e R. W. Bilger. Modeling of nonreacting and reacting turbulent spray jets using a fully stochastic separated flow approach. *Combustion and Flame*. Citado na pág. 4, 5, 6, 7, 65, 77, 78, 83, 86, 91
- Douglas e Dupont(1971)** J. Douglas e T. Dupont. Alternating-direction galerkin methods on rectangles. *Numerical Solution of Partial Differential Equations, II (SYNSPADE 1970)*, páginas 133–214. Citado na pág. 29
- Feofiloff(2009)** P. Feofiloff. *Algoritmos em linguagem C*. Elsevier Brazil. Citado na pág. 50
- Ferziger e Perić(1999)** J. H. Ferziger e M. Perić. *Computational methods for fluid dynamics*, volume 2. Springer Berlin. Citado na pág. 26, 33
- Fortuna(2000)** A. O. Fortuna. *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações*. Edusp. Citado na pág. 31
- Gao e Groth(2008)** X. Gao e CPT Groth. Parallel adaptive mesh refinement scheme for three-dimensional turbulent non-premixed combustion. Em *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada, AIAA paper*, volume 1017, página 2008. Citado na pág. 2, 3, 5
- García(2009)** M. M. García. *Development and validation of the Euler-Lagrange formulation on a parallel and unstructured solver for large-eddy simulation*. Tese de Doutorado, Institut National Polytechnique de Toulouse. Citado na pág. 2, 3, 5, 7, 18, 77, 79
- Germano et al.(1991)** M. Germano, U. Piomelli, P. Moin e W.H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 3:1760. Citado na pág. 75, 100, 103

- Gottlieb e Orszag(1993)** D. Gottlieb e S.A. Orszag. *Numerical analysis of spectral methods: theory and applications*, volume 26. Society for industrial and applied mathematics. Citado na pág. 29
- Gounder e Masri(2009)** J.D. Gounder e A.R. Masri. Flow field and mass flux measurements near the exit plane of spray jets. Em *11th Triennial International Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, ICLASS*. Citado na pág. 77, 78
- Griffith(2005)** B. E. Griffith. *Simulating the blood-muscle-valve mechanics of the heart by an adaptive and parallel version of the immersed boundary method*. Tese de Doutorado, New York University. Citado na pág. 25, 26, 41, 58
- Hackbusch(1992)** W. Hackbusch. *Elliptic differential equations*, volume 18. Springer. Citado na pág. 38
- Hairer e Wanner(1991)** H. Hairer e G. Wanner. *Solving ordinary differential equations II: stiff and differential - algebraic problems*. Springer. Citado na pág. 105
- Hou e Mahesh(2005)** Y. Hou e K. Mahesh. A robust, colocated, implicit algorithm for direct numerical simulation of compressible, turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 205 (1):205–221. Citado na pág. 12
- Hussein et al.(1994)** H.J. Hussein, S.P. Capp e W.K. George. Velocity measurements in a high-reynolds-number, momentum-conserving, axisymmetric, turbulent jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 258(1):31–75. Citado na pág. 65, 71, 74
- Kempf et al.(2005)** A. Kempf, F. Flemming e J. Janicka. Investigation of lengthscales, scalar dissipation, and flame orientation in a piloted diffusion flame by les. *Bull. Soc. Math. France*, 98:115–152. Citado na pág. 65, 67, 83, 86
- Kim e Moin(1985)** J. Kim e P. Moin. Application of a fractional-step method to incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 59(2):308–323. Citado na pág. 26
- Kuo(2005)** K. K. Kuo. *Principles of combustion*. Wiley. Citado na pág. 3, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 17, 18, 67, 84
- Lefebvre(1989)** A.H. Lefebvre. *Atomization and sprays*. CRC. Citado na pág. 79, 83
- Majda e Sethian(1985)** A. Majda e J. Sethian. The derivation and numerical solution of the equations for zero mach number combustion. *Combustion science and technology*, 42(3):185–205. Citado na pág. 4, 7, 14, 27
- Melo e Neto(1991)** S. T. Melo e F. M. Neto. *Mecânica dos fluidos e equações diferenciais*. IMPA. Citado na pág. 8, 9
- Mood et al.(1974)** A. M. Mood, F.A. Graybill e D.C. Boes. *Introduction to the Theory of Statistics*. New York: McGraw-Hill, 3rd edição. Citado na pág. 79
- Najm e Knio(2005)** HN Najm e OM Knio. Modeling low mach number reacting flow with detailed chemistry and transport. *Journal of Scientific Computing*, 25(1):263–287. Citado na pág. 3
- Nicoud(2000)** F. Nicoud. Conservative high-order finite-difference schemes for low-mach number flows. *Journal of Computational Physics*, 158(1):71–97. Citado na pág. 4, 7
- Nonaka et al.(2012)** A. Nonaka, AJ Aspden, M. Zingale, AS Almgren, JB Bell e SE Woosley. High-resolution simulations of convection preceding ignition in type ia supernovae using adaptive mesh refinement. *The Astrophysical Journal*, 745:73. Citado na pág. 5

- Northrup(2004)** S.A. Northrup. *A Parallel Adaptive-Mesh Refinement Scheme for Predicting Laminar Diffusion Flames*. Tese de Doutorado, University of Toronto. Citado na pág. 84, 85, 86
- Northrup e Groth(2009)** S.A. Northrup e C.P.T. Groth. Solution of laminar combusting flows using a parallel implicit adaptive mesh refinement algorithm. *Computational Fluid Dynamics 2006*, páginas 341–346. Citado na pág. 5, 83
- Nós(2007)** R. L. Nós. *Simulações de escoamentos tridimensionais bifásicos empregando métodos adaptativos e modelos de campo de fase*. Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo. Citado na pág. xi, 1, 4, 21, 25, 29, 34, 35, 36, 37, 45, 46, 52, 56, 57, 58
- Pember et al.(1998)** R. B. Pember, L. H. Howell, J. B. Bell, P. Colella, W. Y. Crutchfield, W. A. Fiveland e J. P. Jessee. An adaptive projection method for unsteady, low-mach number combustion. *Combustion Science and Technology*, 140(1):123–168. Citado na pág. 2, 3, 4, 5, 7, 10, 25, 27, 36, 60, 66, 84
- Pierce e Moin(2004)** C.D. Pierce e P. Moin. Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 504(1):73–97. Citado na pág. 3, 92, 100, 102, 103
- Pitsch(2006)** H. Pitsch. Large-eddy simulation of turbulent combustion. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 38:453–482. Citado na pág. 100, 102, 103
- Pitsch e Steiner(2000)** H. Pitsch e H. Steiner. Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (sandia flame d). *Physics of Fluids*, 12:2541. Citado na pág. 2, 65, 67, 83, 84, 86, 87, 92
- Plewa et al.(2005)** T. Plewa, T.J. Linde e V.G. Weirs. *Adaptive mesh refinement, theory and applications: proceedings of the Chicago Workshop on Adaptive Mesh Refinement Methods, Sept. 3-5, 2003*, volume 41. Springer Verlag. Citado na pág. 4
- Poinsot e Veynante(2005)** T. Poinsot e D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. RT Edwards, Inc. Citado na pág. 3, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 16, 17, 18, 60, 99, 100, 101, 110
- Pope(2000)** S.B. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University Press. Citado na pág. 66, 75, 99, 100
- Rehm e Baum(1978)** R.G. Rehm e H.R. Baum. The equations of motion for thermally driven, buoyant flows. *Journal of research of the National Bureau of Standards*, 83(3):297–308. Citado na pág. 4, 7, 14, 27
- Roma(1996)** A. M. Roma. *A multilevel self adaptative version of the immersed boundary method*. Tese de Doutorado, New York University. Citado na pág. 25, 26, 36, 41, 45, 51, 52, 58
- Roma et al.(1999)** A.M. Roma, C.S. Peskin e M.J. Berger. An adaptive version of the immersed boundary method. *Journal of computational physics*, 153(2):509–534. Citado na pág. 1, 4, 21
- Shampine e Gear(1979)** L.F. Shampine e C.W. Gear. A user's view of solving stiff ordinary differential equations. *SIAM review*, páginas 1–17. Citado na pág. 105
- Sirignano(1999)** WA Sirignano. *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge Univ Pr. Citado na pág. 3, 18, 77
- Smooke et al.(1996)** MD Smooke, A. Ern, MA Tanoff, BA Valdati, RK Mohammed, DF Marran e MB Long. Computational and experimental study of no in an axisymmetric laminar diffusion flame. Em *Symposium (International) on Combustion*, volume 26, páginas 2161–2170. Elsevier. Citado na pág. 65, 83, 84, 85, 86

- Stårner e Masri(2003)** S. H. Stårner e A. R. Masri. An experimental comparison of evaporating and non-evaporating sprays in a simple turbulent jet flow. Em *9th International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Sorrento, Italy*. Citado na pág. 4, 6, 7, 65, 77, 78
- Stoer e Bulirsch(2002)** J. Stoer e R. Bulirsch. *Introduction to numerical analysis*, volume 12. Springer Verlag. Citado na pág. 40, 57, 105
- Strikwerda(2004)** J.C. Strikwerda. *Finite difference schemes and partial differential equations*. Society for Industrial Mathematics. Citado na pág. 25, 30, 32, 60
- Temam(1968)** R. Temam. Une méthode d'approximation de la solution des équations de navier-stokes. *Bull. Soc. Math. France*, 98:115–152. Citado na pág. 25, 26
- Thomas(1995)** J.W. Thomas. *Numerical partial differential equations: finite difference methods*, volume 22. Springer Verlag. Citado na pág. 38
- Trottenberg et al.(2001)** U. Trottenberg, C. W. Oosterlee e A. Schüller. *Multigrid*. Academic Pr. Citado na pág. 25, 31, 32, 33, 35, 52, 60
- Turns(1996)** S. R. Turns. An introduction to combustion: concepts and applications. Citado na pág. 3, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 15, 18, 65, 67, 99, 108
- Versteeg e Malalasekera(2007)** H. K. Versteeg e W. Malalasekera. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Prentice Hall. Citado na pág. 3, 7, 8, 9, 10, 11, 18, 32, 33, 99, 100, 101, 102
- Veynante e Vervisch(2002)** D. Veynante e L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28(3):193–266. Citado na pág. 101
- Wang e Ruuth(2008)** D. Wang e Steven J. Ruuth. Variable step-size implicit-explicit linear multistep methods for time-dependent partial differential equations. *J. Comput. Math*, 26(6): 835–855. Citado na pág. 1, 2, 25, 28
- Zingale et al.(2009)** M. Zingale, AS Almgren, JB Bell, A. Nonaka e SE Woosley. Low mach number modeling of type ia supernovae. iv. white dwarf convection. *The Astrophysical Journal*, 704:196. Citado na pág. 5

Índice Remissivo

- Acoplamento
 - entre as fases, 18, 20, 25, 40, 81
 - pressão-velocidade, 1
- Bloco, 46, 48
 - discretizado, 4, 51, 70
- celula
 - Célula computacional
 - fantasma, 75
- Célula computacional, 4, 30–34, 39, 41, 48, 50, 51, 100
 - fantasma, 92
 - fantasma, 2, 45
 - visível, 77
 - vizinha, 82
- Célulacomputacional, 75
- Chama
 - de difusão, 84
- Chama não pré-misturada, 3
- Ordem de convergência, 57
- Decomposição
 - de Hodge (Teorema), 26
 - de Reynolds, 99
- Diâmetro
 - da gotícula, 19
- Difusão artificial, 60
- Discretização
 - espacial, 25
 - temporal, 25
- Distribuição
 - de probabilidade, 78
- Domínio computacional, 30, 34, 39–41, 55
- Energia, 12, 14
 - absoluta, 11
 - cinética, 10
 - sensível, 11
 - total, 10, 11
- Energia cinética turbulenta, 72
- Entalpia
 - absoluta, 10, 11
 - de formação, 10, 16
 - sensível, 10, 11
 - total, 10
- Equação
 - adimensional, 12, 111
 - da conservação da energia, 10, 107
 - da conservação da espécie química, 7, 112
 - da conservação de energia, 7
 - da conservação de massa, 7–9, 11, 15, 112
 - da quantidade de movimento linear, 7, 8, 14, 15, 112
 - da temperatura, 113
 - de advecção-difusão, 55, 59
 - do estado termodinâmico, 7, 114
- Escoamento
 - bifásico, 7
 - com baixo número de Mach, 4, 7, 13, 21, 60
 - incompressível, 3, 7, 13, 20, 58, 65
 - reativo, 7, 13, 83
 - Valores característicos do, 12
 - Velocidade do, 9
- Estratégia semi-implícita, 29, 30, 36
- Fase
 - contínua, 3, 7, 18–21, 25, 40, 62
 - dispersa, 3, 6, 7, 18–21, 25, 40, 61, 62
 - líquida, 78
- Formulação
 - euleriana, 3, 25, 40
 - lagrangiana, 3, 19, 25, 39, 40, 61
- Fração
 - de mistura, 3, 7, 10, 12, 16, 59, 86, 103
 - mássica, 8, 9, 15–17, 84
- Gotícula, 3, 49–51, 79
 - inerte, 7, 18–21, 45, 77
 - lagrangiana, 78
- Jato
 - laminar não-reativo, 65
 - turbulento não-reativo, 65, 69, 77
- Malha, 99
 - base, 46

- bloco-estruturada, 4, 25, 30, 42, 45, 46, 48–51, 53, 68, 70, 75
- Cartesiana, 25, 31, 50
- composta, 55
- Euleriana, 39
- uniforme, 30, 35, 41, 53, 68
- Região de segurança, 50, 51
- Método
 - Multigrid*, 25
 - Multigrid*-Multinível, 33
 - da projeção, 1, 25, 27
 - da projeção estendido, 4, 25, 60
 - de diferenças finitas, 4, 25, 31, 32
 - de Euler Modificado, 25, 40, 62
 - implícito-explicito, 1, 4, 25, 28
- Método
 - Multigrid*-Multinível, 52
- Mistura
 - pobre, 17
 - rica, 17
- Nível
 - base, 48, 52
 - de refinamento, 45–50
 - de *Multigrid*, 75
 - físico, 34
 - virtual, 34
- Normas, 55
- Número
 - adimensional, 12
 - de Lewis, 16, 83, 109
 - de Mach, 4, 7, 12–15, 22, 25–28, 33, 35, 113, 114
 - de Péclet, 32
 - de Prandtl, 12, 84, 114
 - de Reynolds, 12, 68, 78, 99, 112
 - de Schimdt turbulento, 101
 - de Schmidt, 12, 112
 - de Stokes, 18
- Operador
 - de interpolação, 31, 32, 40
 - de prolongamento, 34
 - de restrição, 34
 - de suavização, 34
 - de *espalhamento*, 40
- Operadores
 - diferenciais, 4, 31
 - diferenciais discretos, 31
- Passo de integração, 4
- Propriedades
 - adimensionais, 13, 111
- Razão de refinamento, 45, 57
- Refinamento
 - adaptativo, 1, 4, 70
 - critérios, 70
 - dinâmico, 45
 - estático, 45, 49
- Refinamento adaptativo, 30
- Refinamento adaptativo de malhas, 45
 - critérios, 50
- Sistema
 - de equações diferenciais ordinárias, 3, 10
 - linear, 2
 - rígido, 9
- Solução Manufaturada, 58
- Turbulência, 1, 99
 - simulação numérica direta, 5
- Verificação numérica, 55