

PROJETO DE GRADUAÇÃO

ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA PARA MÉTODOS DE INTERPOLAÇÃO EXPLÍCITOS E IMPLÍCITOS EM VOLUMES FINITOS

Por,

Luiza Sampaio da Rocha

Brasília, 9 de dezembro de 2020

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

FACULDADE DE TECNOLOGIA

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
Faculdade de Tecnologia
Departamento de Engenharia Mecânica

PROJETO DE GRADUAÇÃO

ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA PARA MÉTODOS DE INTERPOLAÇÃO EXPLÍCITOS E IMPLÍCITOS EM VOLUMES FINITOS

Por,

Luiza Sampaio da Rocha

Relatório submetido como requisito parcial para obtenção
do grau de Engenheiro Mecânico

Banca Examinadora

Prof. Roberto Francisco Bobenrieth Miserda _____
ENM/UnB (Orientador)

Prof. Braulio Gutierrez Pimenta _____
ENM/UnB

Prof. Adriano Possebon Rosa _____
ENM/UnB

Brasília 9 de dezembro de 2020

Agradecimentos

Inicialmente gostaria de agradecer aos excelentes professores que tive a honra de conhecer até então, pois foram fundamentais desde o despertar da curiosidade pelas diversas áreas da ciência até a conclusão desta etapa na graduação.

Começando pelos orientadores e professores que tive quando frequentei o Kumon na adolescência. Aya Komatsu, Yumi Aoto, Elisa e Paulo Onishi me acompanharam por longos anos e plantaram a sementinha do gosto pelos estudos. Sempre muito gentis e com um amor imensurável pela educação, guardo-os no coração. Agradeço também a professores que além de suas obrigações dentro de sala de aula, me ofereceram orientação em momentos difíceis, trazendo mais humanidade a esta universidade. Obrigado professores Taygoara, Eugênio, entre outros.

Gostaria de agradecer, claro, à banca examinadora. Agradeço aos professores Adriano Possebon e Braulio Gutierrez por todas as sugestões e discussões que acrescentaram em muito neste trabalho. Além de serem também professores excelentes, extremamente prestativos, que trazem nova luz à engenharia. Creio que boa parte das melhores matérias que cursei nesta universidade foram ministradas pelos senhores!

Agradeço também ao professor Roberto Miserda, não só grande responsável pela minha formação acadêmica, mas também pessoal. Obrigado imensamente por acreditar no meu potencial e por todas as discussões acadêmicas e filosóficas que me trouxeram conhecimentos inestimáveis, me motivando a persistir neste curso às vezes tão árduo.

Não posso deixar de agradecer também aos amigos que formei nesta jornada e me acompanharam tanto nas dores quanto alegrias. Aos meus amigos Gesse, Isa, Janta, Tonho e Rogério, obrigado por serem amigos de toda hora, presentes até para ouvir os meus desabafos mais tolos. Obrigado também aos amigos Geo, Pantu, Zazá, Geraldo e Victor que estiveram comigo na equipe Draco Volans representando a Universidade de Brasília e virando noites aos fins de semanas.

Inclusive, muitíssimo obrigado à equipe Draco Volans. Graças a participação nesta, pude vivenciar a engenharia na prática em um ambiente de muito companheirismo, mas também trabalho árduo. A UnB tem esta característica de ser extremamente plural e diversa, oferecendo oportunidades diversas aos seus alunos, o que foi meu suporte em diversos momentos em que as coisas não iam bem. Por isso, só tenho a agradecer.

“At times the world may seem an unfriendly and sinister place, but believe that there is much more good in it than bad. All you have to do is look hard enough, and what might seem to be a series of unfortunate events may in fact be the first steps of a journey.”

— **Lemony Snicket, *A Very Bad Beginning***

Resumo

Neste trabalho, são realizadas análises de convergência de malha para diferentes métodos de interpolação, explícitos e implícitos, utilizados em simulações numéricas baseados em discretizações de volumes finitos. O grande diferencial deste trabalho está na abordagem dada à análise de convergência, que é realizada nos domínios do espaço e do tempo em conjunto. O objetivo é verificar, para cada um dos diferentes métodos de interpolação, se a ordem de convergência computada corresponde à ordem de convergência de projeto e, com esta informação, determinar a relação custo/benefício computacional para cada um dos métodos explícitos e implícitos testados. Para isto será utilizado o problema do tubo de choque, que será simulado utilizando o código VAT (*Virtual Aeroacoustic Tunnel*) desenvolvido pelo Laboratório de Aeroacústica Computacional da Universidade de Brasília (Caalab-UnB).

Palavras-chaves: análise de convergência de malha. convergência no espaço-tempo. VAT. volumes finitos. métodos explícitos. métodos implícitos.

Abstract

In this work, grid-convergence analyzes are performed for different interpolation methods, explicit and implicit, used in numerical simulations based on finite volume discretizations. The main differential of this work is in the approach given to the convergence analysis, which is performed in the domains of space and time together. The objective is to verify, for each of the interpolation methods, whether the convergence order corresponds to the convergence order of design and, with this information, determine the computational cost/benefit ratio for each of the explicit and implicit methods tested. For this, the shock-tube problem will be used, which will be simulated using the VAT code (Virtual Aeroacoustic Tunnel) developed by the Computational Aeroacoustics Laboratory of the University of Brasília (Caalab-UnB).

Key-words: mesh convergence analysis. space-time convergence. VAT. finite volumes. explicit methods. implicit methods.

Lista de Figuras

| | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 1 – Visualização do escoamento (a) e erro de discretização global (b) para pás supersônicas estáticas obtidos por Pimenta e Miserda (2019). | 3 |
| Figura 2 – Visualização do escoamento (a) e erro de discretização global (b) para pás supersônicas em movimento obtidos por Pimenta e Miserda (2019) | 3 |
| Figura 3 – Visualização do escoamento no domínio bidimensional do tempo-espaço (a) e erro de discretização global (b) para o tubo de choque obtidos por Miserda, Pimenta e Rocha (2020) | 4 |
| Figura 4 – Visualização do escoamento compressível transônico simulado por Bonfiglioli e Paciorri (2014) | 5 |
| Figura 5 – Desenho esquemático da evolução do escoamento em um tubo de choque. | 13 |
| Figura 6 – Volume de controle sobre uma onda de choque. | 14 |
| Figura 7 – Desenho esquemático da onda de choque estacionária (a) e não estacionária (b). | 15 |
| Figura 8 – Reflexão da onda de choque e posterior interação da mesma com a superfície de contato. | 17 |
| Figura 9 – Leque de expansão incidente e sua reflexão. | 18 |
| Figura 10 – Curvas características C_+ e C_- para um leque de expansão. | 19 |
| Figura 11 – Volume V_P ao redor de um ponto de malha x_i para o caso unidimensional. | 30 |
| Figura 12 – Malha cartesiana unidimensional mostrando os pontos da geometria com os versores normais de superfície. | 31 |
| Figura 13 – Variáveis utilizadas como parâmetro na escolha das constantes de calibração. | 39 |
| Figura 14 – Erros relacionados à oscilação numérica (δ_1) e ao sobre amortecimento (δ_2) com a variação das constantes de calibração para a resolução de $\Delta x^* = 1/512$ utilizando o método implícito de cálculo do fluxo líquido. | 41 |
| Figura 15 – Erros relacionados à oscilação numérica (δ_1) e ao sobre amortecimento (δ_2) com a variação das constantes de calibração para a resolução de $\Delta x^* = 1/1024$ utilizando o método implícito de cálculo do fluxo líquido. | 42 |

| | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 16 – Erros relacionados à oscilação numérica (δ_1) e ao sobre amortecimento (δ_2) com a variação das constantes de calibração para a resolução de $\Delta x^* = 1/2048$ utilizando o método implícito de cálculo do fluxo líquido. | 43 |
| Figura 17 – Erros relacionados à oscilação numérica (δ_1) e ao sobre amortecimento (δ_2) com a variação das constantes de calibração para a resolução de $\Delta x^* = 1/4096$ utilizando o método implícito de cálculo do fluxo líquido. | 44 |
| Figura 18 – Custo computacional para as diferentes combinações dos métodos de discretização temporal (Runge-Kutta e <i>Multistep</i>) e discretização espacial (Explícito e Implícito). | 45 |
| Figura 19 – Visualização do campo de pressão adimensionalizado obtido através dos métodos de Runge-Kutta (esq.) e <i>Multistep</i> (dir.) para a marcha temporal. | 46 |
| Figura 20 – Visualização do campo de pressão adimensionalizado no instante $t^* = 0,2$ obtido através dos métodos de discretização temporal (Runge-Kutta e <i>Multistep</i>) e discretização espacial (Explícito e Implícito). | 47 |
| Figura 21 – Caso A - Explícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 32h = 1/1024$. | 49 |
| Figura 22 – Caso A - Explícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 16h = 1/2048$. | 49 |
| Figura 23 – Caso A - Explícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 8h = 1/4096$. | 50 |
| Figura 24 – Caso A - Explícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 4h = 1/8192$. | 50 |
| Figura 25 – Caso A - Explícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 2h = 1/16384$. | 51 |
| Figura 26 – Caso A - Explícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = h = 1/32768$. | 51 |
| Figura 27 – Caso A - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 64h = 1/512$. | 52 |
| Figura 28 – Caso A - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 32h = 1/1024$. | 52 |
| Figura 29 – Caso A - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 16h = 1/2048$. | 53 |
| Figura 30 – Caso A - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 8h = 1/4096$. | 53 |
| Figura 31 – Caso A - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 4h = 1/8192$. | 54 |
| Figura 32 – Caso B - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 64h = 1/512$. | 55 |
| Figura 33 – Caso B - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 32h = 1/1024$. | 55 |

| | |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 34 – Caso B - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 16h = 1/2048$ | 56 |
| Figura 35 – Caso B - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 8h = 1/4096$ | 56 |
| Figura 36 – Caso B - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 4h = 1/8192$ | 57 |
| Figura 37 – Caso C - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 64h = 1/512$ | 58 |
| Figura 38 – Caso C - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 32h = 1/1024$ | 58 |
| Figura 39 – Caso C - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 16h = 1/2048$ | 59 |
| Figura 40 – Caso C - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 8h = 1/4096$ | 59 |
| Figura 41 – Caso C - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 4h = 1/8192$ | 60 |
| Figura 42 – Norma global do erro de discretização L_1 em função de h para o caso do tubo de choque. | 61 |
| Figura 43 – Caso A - Explícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a massa específica ρ | 63 |
| Figura 44 – Caso A - Explícito: Erro de discretização local ϵ_{2h} para a massa específica ρ | 64 |
| Figura 45 – Caso A - Explícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a quantidade de movimento ρu | 65 |
| Figura 46 – Caso A - Explícito: Erro de discretização local ϵ_{2h} para a quantidade de movimento ρu | 66 |
| Figura 47 – Caso A - Explícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a energia total ρe_T | 67 |
| Figura 48 – Caso A - Explícito: Erro de discretização local ϵ_{2h} para a energia total ρe_T | 68 |
| Figura 49 – Caso A - Implícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a massa específica ρ | 69 |
| Figura 50 – Caso A - Implícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a quantidade de movimento ρu | 70 |
| Figura 51 – Caso A - Implícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a energia total ρe_T | 71 |
| Figura 52 – Caso B - Implícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a massa específica ρ | 72 |
| Figura 53 – Caso B - Implícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a quantidade de movimento ρu | 73 |

| | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 54 – Caso B - Implícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a energia total ρe_T | 74 |
| Figura 55 – Caso C - Implícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a massa específica ρ | 75 |
| Figura 56 – Caso C - Implícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a quantidade de movimento ρu | 76 |
| Figura 57 – Caso C - Implícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a energia total ρe_T | 77 |
| Figura 58 – Visualização da variável β_T para um choque normal estacionário. | 78 |
| Figura 59 – Choque Normal: Visualização do escoamento permanente com a presença de uma onda de choque sem dissipação artificial. | 79 |
| Figura 60 – Norma global do erro de discretização L_1 em função de h para o caso do choque normal estacionário. | 80 |
| Figura 61 – Onda de choque com origem no centro do tubo de choque. | 81 |
| Figura 62 – Onda de choque com origem descentralizada no tubo de choque. | 82 |
| Figura 63 – Escoamento no tubo de choque para diafragma em diferentes posições. | 82 |
| Figura 64 – Comparação entre valores adimensionais teóricos (linha tracejada) e numéricos (linha contínua) para as propriedades do escoamento em $t_1^* = 0,19909189$ | 84 |
| Figura 65 – Comparação entre valores adimensionais teóricos (linha tracejada) e numéricos (linha contínua) para as propriedades do escoamento em $t_2^* = 0,42662547$ | 85 |
| Figura 66 – Comparação entre valores adimensionais teóricos (linha tracejada) e numéricos (linha contínua) para as propriedades do escoamento em $t_3^* = 0,55461312$ | 87 |
| Figura 67 – Comparação entre valores adimensionais teóricos (linha tracejada) e numéricos (linha contínua) para as propriedades do escoamento em $t_4^* = 0,59727566$ | 88 |

Lista de Tabelas

| | |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Tabela 1 – Coeficientes ótimos para o método <i>multistep</i> linear de quarta ordem com cinco passos (RUUTH; HUNSDORFER, 2005). | 34 |
| Tabela 2 – Valores de entrada no código VAT para o tubo de choque com malha de resolução $\Delta x^* = 1/1024$ | 38 |
| Tabela 3 – Constantes de calibração escolhidas para os quatro casos de análise de convergência. | 40 |
| Tabela 4 – Valores de entrada no código VAT para o choque normal estacionário com malha de resolução $\Delta x^* = 1/1024$ | 79 |
| Tabela 5 – Valores adimensionais teóricos e numéricos para a pressão em um tubo de choque. | 89 |
| Tabela 6 – Valores adimensionais teóricos e numéricos para a temperatura em um tubo de choque. | 90 |
| Tabela 7 – Valores adimensionais teóricos e numéricos para a massa específica em um tubo de choque. | 90 |
| Tabela 8 – Valores teóricos e numéricos para o número de Mach local em um tubo de choque. | 91 |
| Tabela 9 – Valores teóricos e numéricos para o ângulo de propagação das perturbações em um tubo de choque. | 91 |

Lista de símbolos

Símbolos Latinos

| | |
|--------------------|--------------------------------------------------------|
| a | Velocidade do som |
| a_i | Velocidade do som na região i |
| C_{\pm} | Curva característica positiva ou negativa |
| CFL | Número de Courant |
| CFL_i | Número de Courant local |
| c_P | Calor específico à pressão constante |
| c_V | Calor específico à volume constante |
| \mathcal{D} | Dissipação artificial |
| d | Operador de dissipação numérica |
| E | Energia |
| e | Energia interna específica |
| $\epsilon^{(2)}$ | Coefficiente de dissipação artificial de segunda ordem |
| $\epsilon^{(4)}$ | Coefficiente de dissipação artificial de quarta ordem |
| e_i | Energia interna específica na região i |
| e_k | Energia cinética específica |
| e_T | Energia total específica |
| e_{T_i} | Energia total específica na região i |
| \mathbf{F} | Força |
| \mathbf{F} | Vetor de fluxo na direção x |
| \mathcal{F} | Função de fluxo |
| f | Fluxo líquido da velocidade |
| h_i | Entalpia específica na região i |
| \mathbf{I} | Matriz identidade |
| $\hat{\mathbf{i}}$ | Versor na direção x |
| J_{\pm} | Invariantes de Riemman |
| K | Constante genérica |
| $K^{(2)}$ | Constante de calibração de segunda ordem |

| | |
|------------------------|---------------------------------------------------------------------|
| $K^{(4)}$ | Constante de calibração de quarta ordem |
| K_s | Módulo de elasticidade volumétrica |
| L | Comprimento característico |
| \mathbf{L}_1 | Norma do erro de discretização |
| M | Número de Mach |
| m | Massa |
| M_{S_i} | Número de Mach da onda de choque que se propaga no meio i |
| $\hat{\mathbf{n}}$ | Versor normal à superfície |
| N | Propriedade extensiva de um fluido |
| p | Pressão |
| p_i | Pressão na região i |
| p_{ij} | Razão p_i/p_j |
| Q | Calor |
| W | Trabalho |
| q_s | Fluxo volumétrico |
| R | Constante universal dos gases |
| \mathbf{S} | Vetor de superfície |
| S | Superfície |
| s | Entropia |
| T | Temperatura |
| t | Tempo |
| T_{ij} | Razão T_i/T_j |
| \mathbf{U} | Vetor das variáveis conservativas |
| u | Componente na direção x da velocidade do escoamento |
| \mathbf{U}_0 | Vetor de solução exata |
| $\tilde{\mathbf{U}}_0$ | Extrapolação da solução exata |
| u_i | Componente na direção x da velocidade do escoamento na região i |
| u_{p_i} | Escoamento induzido pela onda de choque que se propaga no meio i |
| \mathbf{V} | Velocidade |
| V | Volume |
| v | Volume específico |
| v_i | Volume específico na região i |
| W_{CS_i} | Velocidade da i -ésima superfície de contato |
| $W_{E_{hi}}$ | Velocidades de propagação da frente do i -ésimo leque de expansão |
| $W_{E_{ti}}$ | Velocidades de propagação da cauda do i -ésimo leque de expansão |

| | |
|-----------|---------------------------------------------------------|
| W_{S_i} | Velocidade da onda de choque que se propaga no meio i |
| x | Eixo cartesiano x |

Símbolos Gregos

| | |
|-----------------|--------------------------------------------------------------|
| α | Constante definida por $(\gamma + 1)/(\gamma - 1)$ |
| β | Constante definida por $(\gamma - 1)/2\gamma$ |
| β_T | Variável de visualização baseada no gradiente de temperatura |
| ϵ_{rh} | Erro de discretização local |
| γ | Coeficiente de expansão adiabática |
| η | Propriedade intensiva de um fluido |
| Π | Tensor de fluxo |
| Ψ_{den} | Sensor de massa específica |
| Ψ_{div} | Sensor do divergente do campo de velocidade |
| Ψ_{prs} | Sensor de pressão |
| ρ | Massa específica |
| ρ_i | Massa específica na região i |
| ρ_{ij} | Razão ρ_i/ρ_j |

Siglas

| | |
|------|-----------------------------------------------------------|
| AIAA | <i>American Institute of Aeronautics and Astronautics</i> |
| CFD | <i>Computational Fluid Dynamics</i> |
| ER | Método de extrapolação de Richardson |
| VAT | <i>Virtual Aeroacoustic Tunnel</i> |

Sobrescritos

| | |
|-----|-----------------------|
| * | Valor adimensional |
| - | Média volumétrica |
| · | Taxa |
| ~ | Média de Favre |
| b | Referente à fronteira |
| n | Coordenada no tempo |

Subscritos

| | |
|----------|----------------------------------------|
| – | Média calculada |
| 0 | Inicial |
| i | Coordenada no eixo x |
| ∞ | Referente ao escoamento não perturbado |
| n | Componente normal |
| ref | Valor de referência |
| rh | Nível de refinamento de malha rh |
| s | Relativo à onda de choque |
| T | Total |

Sumário

| | | |
|----------|------------------------------------------------------------|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 1 |
| 1.1 | Contextualização e Motivação | 1 |
| 1.2 | Revisão Bibliográfica | 2 |
| 1.3 | Objetivos | 6 |
| 2 | FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA | 7 |
| 2.1 | Mecânica dos Fluidos | 7 |
| 2.1.1 | Equação da Continuidade | 8 |
| 2.1.2 | Equação da Quantidade de Movimento | 8 |
| 2.1.3 | Equação da Energia | 9 |
| 2.1.4 | Formulação para um Volume de Controle Infinitesimal | 9 |
| 2.2 | Termodinâmica | 10 |
| 2.2.1 | Equações Constitutivas | 10 |
| 2.2.2 | Processos Termodinâmicos | 10 |
| 2.3 | Regimes de Escoamento e Compressibilidade | 11 |
| 3 | TUBO DE CHOQUE | 13 |
| 3.1 | Onda de Choque Incidente | 14 |
| 3.2 | Reflexão da Onda de Choque | 16 |
| 3.3 | Leque de Expansão Incidente | 17 |
| 3.4 | Reflexão do Leque de Expansão | 20 |
| 3.5 | Interação entre a Superfície de Contato e a Onda de Choque | 21 |
| 4 | METODOLOGIA NUMÉRICA | 23 |
| 4.1 | Equações Governantes | 23 |
| 4.2 | Discretização em Volumes Finitos | 25 |
| 4.2.1 | Método Explícito | 25 |
| 4.2.2 | Método Implícito | 26 |
| 4.3 | Cálculo do Fluxo através da Face pelo Método Explícito | 26 |
| 4.3.1 | Método de Interpolação | 27 |

| | | |
|------------|----------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 4.4 | Cálculo do Fluxo Total pelo Método Implícito | 27 |
| 4.5 | Média de Favre | 28 |
| 4.6 | Dissipação Numérica | 28 |
| 4.6.1 | Cálculo das Derivadas | 29 |
| 4.7 | Fronteira Imersa | 31 |
| 4.8 | Marcha Temporal | 33 |
| 4.8.1 | Método de Runge-Kutta | 33 |
| 4.8.2 | Método <i>Multistep</i> | 33 |
| | 5 ESTUDO DE CONVERGÊNCIA | 35 |
| 5.1 | Extrapolção de Richardson | 35 |
| | 6 RESULTADOS | 37 |
| 6.1 | Arquivo de Entrada | 37 |
| 6.1.1 | Escolha das Constantes de Calibração | 39 |
| 6.2 | Custo computacional e Soluções Encontradas | 45 |
| 6.3 | Análise de Convergência de Malha para o Tubo de Choque | 48 |
| 6.3.1 | Ordem de Convergência do Método | 61 |
| 6.3.2 | Erro Local | 62 |
| 6.4 | Análise de Convergência de Malha para o Choque Normal | 78 |
| 6.5 | Verificação dos Resultados | 80 |
| 6.5.1 | Resultados Obtidos antes da Reflexão da Onda de Choque | 83 |
| 6.5.2 | Resultados Obtidos após a Reflexão da Onda de Choque | 85 |
| 6.5.3 | Resultados Obtidos após a Interação entre Onda de Choque e Superfície de Contato | 86 |
| 6.5.4 | Resultados Obtidos após a Reflexão do Leque de Expansão | 86 |
| 6.5.5 | Análise de resultados | 89 |
| | 7 CONSIDERAÇÕES FINAIS | 92 |
| 7.1 | Conclusões | 92 |
| 7.2 | Sugestões para Trabalhos Futuros | 93 |
| | REFERÊNCIAS | 94 |

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contextualização e Motivação

A fim de determinar a confiabilidade de resultados obtidos através de códigos numéricos, alguns elementos são fundamentais. Além da modelagem física adequada, são necessárias a verificação e validação de resultados e quantificação de incertezas. Por verificação se entende o processo de investigação quanto à implementação correta do código numérico e a exatidão dos resultados obtidos dado o modelo matemático adotado. Por validação se entende o processo de avaliação da precisão física dos resultados, comparando-os a resultados experimentais (OBERKAMPF; ROY, 2010).

Em meio às diversas áreas das ciências e engenharia, a área de mecânica dos fluidos computacional (CFD) foi uma das primeiras a se preocupar seriamente com o desenvolvimento de metodologias de verificação e validação (OBERKAMPF; TRUCANO, 2002). Já no ano de 1992, a AIAA (*American Institute of Aeronautics and Astronautics*) realizou um comitê cujas as discussões resultaram no *Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations* em 1998 (AIAA, 1998). Esta foi uma das primeiras publicações estabelecendo termos, conceitos e procedimentos no tópico de verificação e validação. Entretanto, mesmo com uma base bem estabelecida para a execução de análises rígidas, considera-se que os procedimentos de verificação e validação em CFD ainda estão em seus estágios iniciais (OBERKAMPF; TRUCANO, 2002). Por exemplo, no estudo realizado por Abanto et al. (2005), foram feitas análises de convergência para três pacotes comerciais em CFD com ordens de convergência formal igual ou superior a segunda ordem. Entretanto o que se obteve foi a constatação de que os mesmos alcançavam somente a primeira ordem de convergência, ou mesmo divergiam, para a maioria dos testes conduzidos.

Voltando-se especificamente para o campo da verificação, pode-se delimitar duas áreas: a verificação do código e a verificação de resultados. Na verificação de resultados, são comparados os resultados numéricos a soluções exatas para o modelo matemático adotado, demonstrando sua exatidão. Sem uma análise prévia da convergência, não é possível concluir algo da verificação de resultados, já que não se sabe se os mesmos convergem para a mesma solução. Então, na verificação do código é identificado se o algoritmo foi corretamente implementado. Um indício deste, seria a demonstração de que a ordem de

convergência do método de fato coincide com a ordem teórica ou formal (OBERKAMPF; ROY, 2010).

As análises descritas anteriormente se tornam ainda mais relevantes quando se deseja avançar em áreas onde a experimentação seria custosa ou até inviável. Por exemplo: atualmente são utilizadas simulações de tráfego urbano para soluções de transporte, modelagens de sistemas orgânicos em problemas da medicina, previsões climáticas, simulações de catástrofes meteorológicas, entre outros. Para estes, se demonstra novamente fundamental verificações e validações exaustivas dos algoritmos para que seja garantida a credibilidade e confiabilidade dos resultados.

A metodologia escolhida também afeta resultados obtidos através de simulações. Destacando os métodos explícitos e implícitos, no primeiro as variáveis dependentes são calculadas diretamente a partir de valores conhecidos, enquanto que no segundo as mesmas são calculadas através da resolução de um sistema de equações lineares. Isto acarreta em uma maior estabilidade do código, porém acompanhado de um grande custo computacional (FLOW-3D, 2020). Para este problema, vislumbra-se uma solução conforme são feitos avanços no campo da computação quântica. Nesta nova área, princípios como sobreposição, interferência e emaranhamento quântico são utilizados para realizar cálculos análogos aos já realizados na computação clássica (NASEM, 2019). Observa-se que a partir desta abordagem pode-se obter uma vantagem com relação ao custo computacional para diversos problemas (BOIXO et al., 2018), inclusive para a questão específica de inversão de matrizes (HARROW; HASSIDIM; LLOYD, 2009), ligada à aplicação de métodos implícitos.

1.2 Revisão Bibliográfica

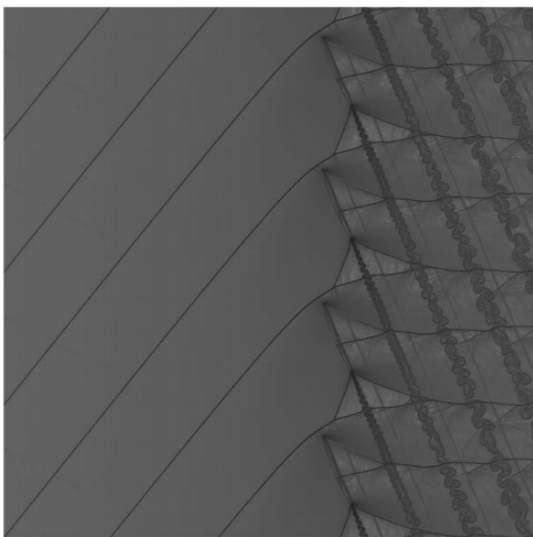
A análise de convergência é entendida como o critério mais rigoroso no que diz respeito à verificação do código, podendo revelar as deficiências mais sutis do código (OBERKAMPF; ROY, 2010). Um dos problemas em aberto é a determinação do erro de discretização; e, por conseguinte, a ordem de convergência para modelos onde estão presentes singularidades ou descontinuidades. Alguns trabalhos sugerem que em simulação de escoamentos compressíveis onde há descontinuidades, como ondas de choque, a ordem de convergência fatalmente é reduzida à primeira ordem ((CARPENTER; CASPER, 1999) e (ROY, 2003)).

Na publicação de Pimenta e Miserda (2019) foi feita uma análise de convergência do código VAT (*Virtual Aeroacoustic Tunnel*) no domínio bidimensional do espaço. Este código utiliza métodos explícitos com quarta ordem de convergência formal na discretização do espaço e terceira ordem formal na discretização do tempo.

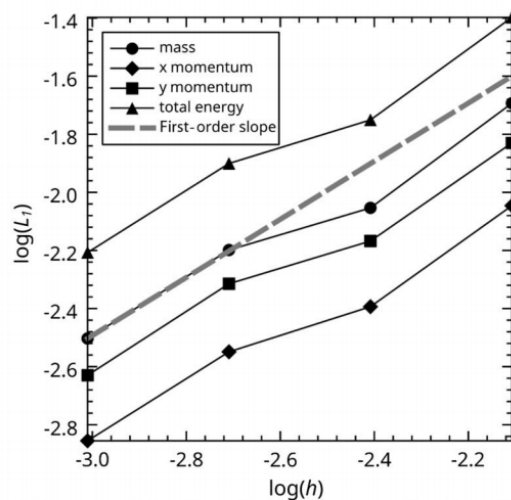
Foram simulados dois casos de pás de rotor supersônicas: no primeiro caso foram consideradas pás estáticas, com escoamento incidente supersônico; já no segundo, as pás

do rotor se moviam com velocidade supersônica, enquanto o escoamento incidente, com velocidade subsônica. Para o computo da norma do erro global, denominado L_1 , foram considerados os erros devido às ondas de choque e à fronteira das pás.

Nas Figuras 1a e 2a são mostradas visualizações dos escoamentos simulados na malha de maior nível de refinamento. Os resultados obtidos de suas análises de convergência são mostrados respectivamente nas Figuras 1b e 2b. Nestas são observadas as curvas da norma do erro de discretização L_1 em função do grau de refinamento h , equivalente ao passo Δx escolhido. Da inclinação das retas, concluiu-se a convergência de primeira ordem do método, apesar da terceira ordem de convergência formal.

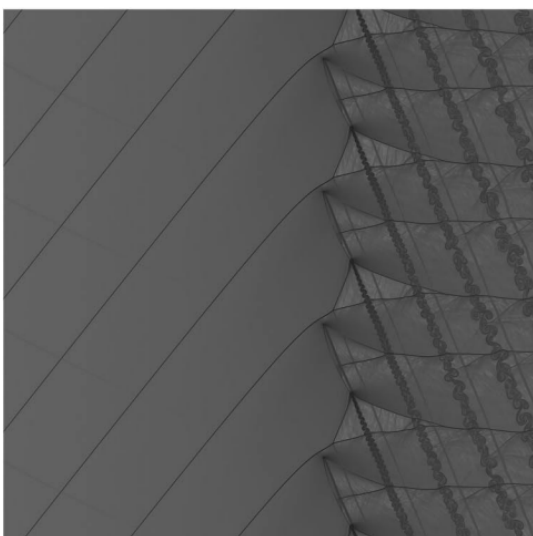


(a) $\Delta x = \Delta y = h = 1/2048$

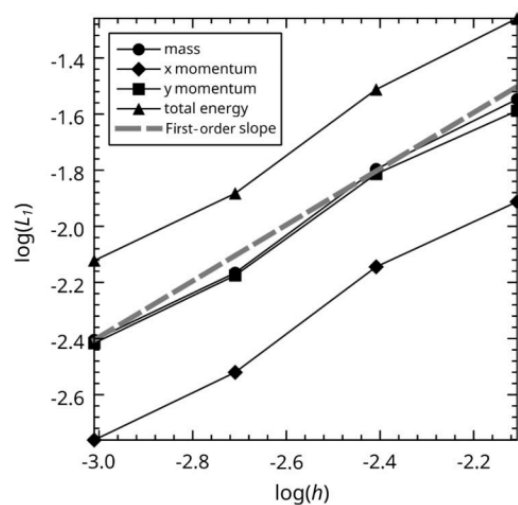


(b) Norma do do erro de discretização L_1 em função do grau de refinamento h

Figura 1 – Visualização do escoamento (a) e erro de discretização global (b) para pás supersônicas estáticas obtidos por Pimenta e Miserda (2019).



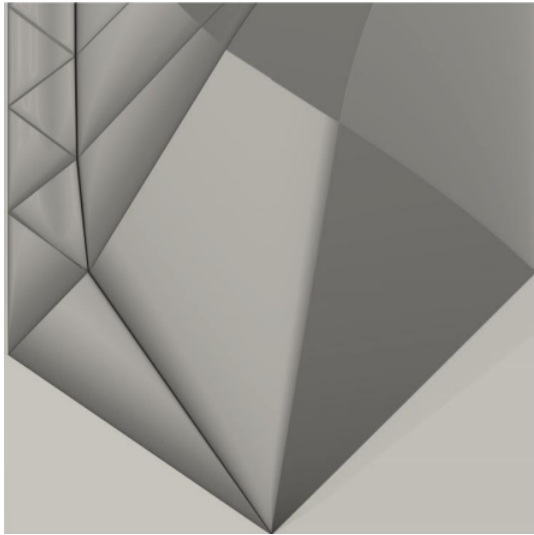
(a) $\Delta x = \Delta y = h = 1/2048$



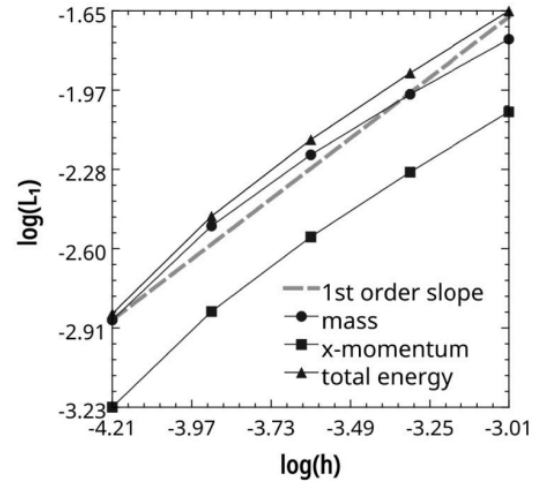
(b) Norma do do erro de discretização L_1 em função do grau de refinamento h

Figura 2 – Visualização do escoamento (a) e erro de discretização global (b) para pás supersônicas em movimento obtidos por Pimenta e Miserda (2019)

Mais adiante, na publicação de [Miserda, Pimenta e Rocha \(2020\)](#), foi feito algo semelhante para o mesmo algoritmo incluindo agora resultados para uma simulação do tubo de choque. O que adianta algum dos resultados encontrados neste trabalho. Da mesma forma, na Figura 3a é mostrada uma visualização do escoamento em sua malha mais refinada, porém o domínio bidimensional consiste no tempo (eixo vertical) e espaço (eixo horizontal). O resultado da análise de convergência é mostrado em seguida na Figura 3b. Novamente, a partir da curvatura das retas apresentadas, constatou-se uma primeira ordem de convergência real do código.



(a) $\Delta x = h = 1/32768$



(b) Norma do do erro de discretização L_1 em função do grau de refinamento h

Figura 3 – Visualização do escoamento no domínio bidimensional do tempo-espaço (a) e erro de discretização global (b) para o tubo de choque obtidos por [Miserda, Pimenta e Rocha \(2020\)](#)

As análises de convergência nas publicações de [Pimenta e Miserda \(2019\)](#) e [Miserda, Pimenta e Rocha \(2020\)](#) foram realizadas utilizando o método de extrapolação de Richardson, seguindo a abordagem de [Bonfiglioli e Paciorri \(2014\)](#). Na publicação destes, foram calculadas as ordens reais de convergência para dois métodos, captura de choque e *shock-fitting*, em malhas não estruturadas. No método de captura de choque, as ondas de choque são obtidas como a solução das equações governantes que regem o escoamento. Já no método de *shock-fitting*, as ondas de choque são explicitamente introduzidas na solução do escoamento, como por exemplo, através de relações de Rankine-Hugoniot ([ANDERSON, 1995](#)). Ambos os métodos aplicados por [Bonfiglioli e Paciorri \(2014\)](#) possuíam segunda ordem de convergência formal.

Na Figura 4 é mostrado o caso simulado pelos autores onde há presença de choque. Nela é visualizado um escoamento radial transônico de uma fonte posicionada no centro do domínio, o que gera um choque estacionário de formato circular. Esta visualização é realizada através da variável $n(Z_4)$, que corresponde à ordem de convergência localmente observada da componente $\sqrt{\rho}V$. Para o método de shock-fitting (Fig. 4b), foi obtida uma ordem de convergência bem próxima à ordem formal do método. Já para o método

de captura de choque (Fig. 4a), a ordem de convergência real encontrada foi inferior à primeira ordem. Deve-se observar que, para nenhuma das análises, foram incluídos pontos próximos ou sobre a onda de choque.

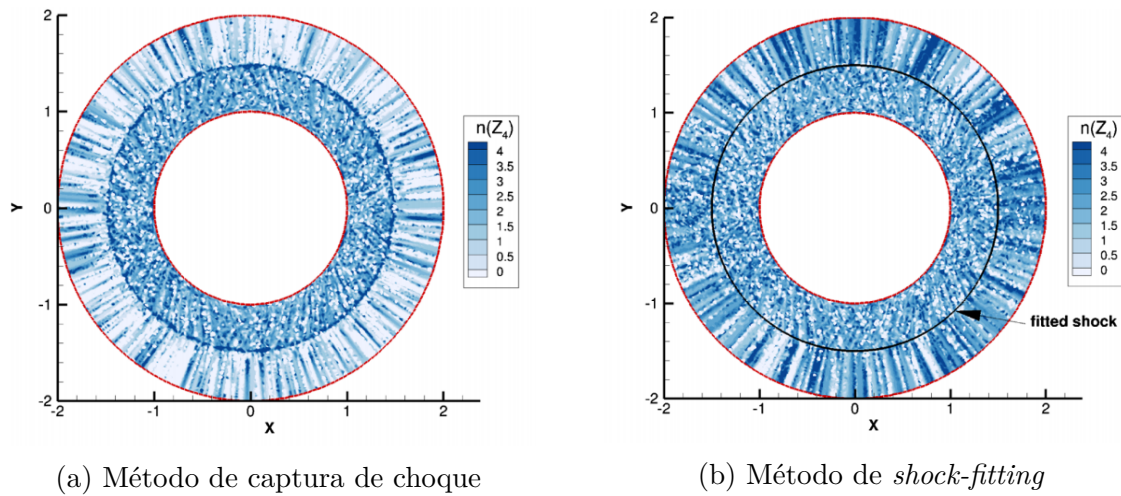


Figura 4 – Visualização do escoamento compressível transônico simulado por Bonfiglioli e Paciorri (2014)

A verificação da ordem de convergência tal qual a de projeto já foi obtida para algoritmos que lidam com escoamentos compressíveis quando a solução é suave, até mesmo se valendo de análises de convergência combinando o espaço e o tempo, como é apresentado na publicação de Kamm, Rider e Brock (2003). Entretanto para casos onde são encontradas ondas de choque, pouco se sabe sobre como conter a queda na ordem de convergência a montante da descontinuidade.

Segundo Roy (2009), o erro de discretização é propagado da mesma forma que a solução do problema modelado. Na publicação de Banks, Aslam e Rider (2008), o autor conclui que para as equações de Euler, onde é considerado escoamento invíscido, a solução não é única quando na presença de descontinuidades. No entanto, tal questão dificilmente se apresenta em soluções numéricas dada a viscosidade numérica presente na forma de erros de truncamento, discretização, entre outros (OBERKAMPF; ROY, 2010). Tendo em vista estas observações, pode-se formular a hipótese de que, ajustando-se uma dissipação artificial de modo a controlar o erro difundido pela onda de choque, haverá uma melhoria da ordem de convergência. O que é uma das propostas de abordagem deste trabalho.

1.3 Objetivos

Com o presente trabalho espera-se verificar a ordem de precisão de um algoritmo computacional baseado em volumes finitos, tanto para métodos de interpolação explícita como implícita, e compará-la à ordem de precisão formal. Em havendo divergências, pretende-se explorar suas possíveis origens, visando o aperfeiçoamento do método. Por fim, deve ser investigada a relação custo/benefício entre precisão alcançada e gastos em recurso computacional associado a cada metodologia.

Para o estudo de convergência de malha, é implementada uma versão 1D do código VAT (*Virtual Aeroacoustic Tunnel*), desenvolvido pelo Laboratório de Aeroacústica Computacional, UnB. O caso escolhido para a análise de convergência foi o do tubo de choque, um problema amplamente estudado que possui teoria analítica bem estabelecida e vasta bibliografia, o que viabiliza a verificação de resultados.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

No capítulo de fundamentação teórica serão tratados alguns conceitos chave para a compreensão de escoamentos compressíveis e os fenômenos que serão encontrados no caso teste escolhido para a análise de convergência do método numérico, o tubo de choque.

2.1 Mecânica dos Fluidos

O primeiro passo para o entendimento de escoamentos em fluidos é a compreensão de suas equações governantes. Nesta seção será adotado o modelo de um volume de controle finito fixo no espaço pelo qual o escoamento flui, para depois alcançar a formulação das equações para um volume de controle infinitesimal. Por meio desta abordagem, onde se assume um volume de controle fixo, se obtém as equações governantes na forma conservativa.

São três os princípios básicos que governam o escoamento de um fluido: os princípios de conservação da massa, conservação da quantidade de movimento e conservação da energia total. Estes podem ser equacionados, respectivamente, como

$$\frac{Dm}{Dt} = 0, \quad \frac{D(m\mathbf{V})}{Dt} = \mathbf{F}, \quad \frac{DE_T}{Dt} = \dot{Q} - \dot{W}. \quad (2.1)$$

No entanto os princípios apresentados na Eq. 2.1 são válidos para um sistema fechado, que não permite transferência de massa para dentro ou para fora do mesmo. Por isso é aplicado o teorema do transporte de Reynolds,

$$\frac{DN}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \eta \rho dV + \oint_S \eta \rho \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S}, \quad (2.2)$$

possibilitando a passagem de uma abordagem de sistema fechado (lado esquerdo da Eq. 2.2) para uma abordagem de volume de controle pelo qual o escoamento flui (lado direito da Eq. 2.2).

A variável N representa uma propriedade extensiva do fluido associada ao sistema, podendo esta ser a massa (m), a quantidade de movimento ($m\mathbf{V}$) ou a energia total (E_T), por exemplo. Pode-se obter o valor intensivo η , o valor de N para um elemento infinitesimal, como

$$\eta = \frac{dN}{dm}. \quad (2.3)$$

Assim, integrando η para um volume de controle V , tem-se claramente a relação entre propriedade extensiva e intensiva como

$$N = \int_V \eta \rho dV. \quad (2.4)$$

Com isto posto, pode-se identificar o primeiro termo do lado direito da Eq. 2.2 como a taxa de variação temporal da propriedade N dentro do volume de controle, e o segundo termo, como o fluxo da mesma propriedade através do volume de controle. Do último termo da equação, é observado que o campo de velocidades \mathbf{V} é o responsável pelo transporte de qualquer propriedade através do volume de controle, ou seja, o mecanismo advectivo.

2.1.1 Equação da Continuidade

O princípio da conservação de massa afirma que, para um sistema fechado, a massa do mesmo não deve variar, permanecendo constante. Aplicando o teorema do transporte de Reynolds para este princípio, obtém-se sua formulação para um volume de controle como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \oint_S \rho \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} = 0. \quad (2.5)$$

2.1.2 Equação da Quantidade de Movimento

Para obter a segunda equação governante, parte-se da segunda lei de Newton, que relaciona a ação de forças sobre um corpo à variação de quantidade de movimento do mesmo. Assim, aplicando novamente o teorema do transporte de Reynolds, tem-se que

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \mathbf{V} \rho dV + \oint_S \mathbf{V} \rho \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} = \mathbf{F}. \quad (2.6)$$

As forças que agem sobre o corpo podem ser forças de campo, como as forças devido o campo gravitacional ou o campo eletromagnético; ou de superfície, como as forças devido o campo de pressão ou tensões cisalhantes. A força exercida pelo campo de pressão sobre o volume de controle pode ser escrita como uma integral de superfície como na Eq. 2.7.

$$\mathbf{F} = \oint_S p d\mathbf{S} \quad (2.7)$$

Considerando apenas este forçamento, a equação da quantidade de movimento é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \mathbf{V} \rho dV + \oint_S \mathbf{V} \rho \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} = - \oint_S p d\mathbf{S}. \quad (2.8)$$

2.1.3 Equação da Energia

Por fim, a segunda lei da termodinâmica é aplicada à um volume de controle por meio do teorema do transporte de Reynolds (Eq. 2.9). A segunda lei da termodinâmica afirma que a energia total de um sistema só é alterada através da realização de trabalho pelo sistema, \dot{W} , ou da transferência de calor para o mesmo, \dot{Q} .

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V e_T \rho dV + \oint_S e_T \rho \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} = \dot{Q} - \dot{W} \quad (2.9)$$

Considerando o escoamento adiabático e desprezando os efeitos viscosos, a equação da energia é reescrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V e_T \rho dV + \oint_S e_T \rho \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} = - \oint_S (p \mathbf{I} \cdot \mathbf{V}) \cdot d\mathbf{S}. \quad (2.10)$$

2.1.4 Formulação para um Volume de Controle Infinitesimal

Para a obtenção das equações governantes na forma diferencial a partir da formulação integral, aplica-se o Teorema da Divergência. Assim, das Eq. 2.5, 2.8 e 2.10, obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) dV = 0, \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \mathbf{V} \rho dV + \int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \otimes \mathbf{V}) dV = - \int_V (\nabla p) dV, \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V e_T \rho dV + \int_V \nabla \cdot (e_T \rho \mathbf{V}) dV = - \int_V \nabla \cdot (p \mathbf{I} \cdot \mathbf{V}) dV. \quad (2.13)$$

Para um volume de controle fixo no espaço e indeformável em relação ao referencial

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \eta \rho dV = \int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} (\eta \rho) \right] dV. \quad (2.14)$$

Com isso, pode-se reduzir as equações anteriores ao mesmo intervalo de integração; e, pelo Teorema da Localização, obter a forma diferencial para um volume de controle fixo como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0, \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{V}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \otimes \mathbf{V}) = - \nabla p, \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e_T) + \nabla \cdot (\rho e_T \mathbf{V}) = - \nabla \cdot (p \mathbf{I} \cdot \mathbf{V}). \quad (2.17)$$

2.2 Termodinâmica

2.2.1 Equações Constitutivas

Para fechar o sistema de equações governantes, é necessário estabelecer algumas relações entre as variáveis termodinâmicas, de forma a compatibilizar o número de equações com o número de incógnitas. Dadas duas ou mais variáveis termodinâmicas, é possível determinar o estado termodinâmico de um gás através das funções de estado. Para gases ideais, onde as forças intermoleculares são desprezíveis, é válida a equação de Clapeyron

$$p = \rho RT, \quad (2.18)$$

onde R é a constante do gás, comumente assumida como $287 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$ para o ar. Além disso, é possível assumir a hipótese de gás caloricamente perfeito, onde o calor específico à volume constante c_V e à pressão constante c_P se mantêm invariantes, e vale a relação

$$e = c_V T. \quad (2.19)$$

Com estas hipóteses, as Eq. 2.18 e 2.19 podem ser reescritas em termos de $\gamma = c_P/c_V$ e $R = c_P - c_V$, finalmente obtendo as equações de estado necessárias como

$$p = (\gamma - 1)\rho e, \quad (2.20)$$

$$T = \frac{(\gamma - 1)e}{R}. \quad (2.21)$$

2.2.2 Processos Termodinâmicos

De acordo com a primeira lei da termodinâmica,

$$\Delta E_T = \delta Q - \delta W. \quad (2.22)$$

A energia total E_T é dita uma variável de estado, ou seja, é uma variável completamente definida, a menos de uma constante, dado um estado termodinâmico. No entanto, Q e W são variáveis que dependem do tipo de processo termodinâmico sofrido pelo sistema, e assim, não é possível determinar δQ e δW somente a partir dos estados termodinâmicos final e inicial. Com isso, são definidos três tipos de processos para a melhor compreensão de como se dá a troca de calor e a geração de trabalho em um sistema. São eles: processos adiabáticos, processos reversíveis e processos isentrópicos.

Um processo adiabático é dito aquele em que não há troca de calor entre o sistema e suas vizinhanças, ou seja, $\delta Q = 0$. Na ausência do termo responsável pela transferência

de calor na dedução das equações governantes (Seção 2.1), todo o escoamento descrito pela Eq. 4.4 é dito adiabático. No escoamento dentro de um tubo de choque, por exemplo, a formação das ondas de choque ocorrem por meio de uma compressão adiabática.

Para um processo reversível, não ocorrem fenômenos de dissipação de energia, e todo o trabalho realizado pelo sistema ou sobre ele, pode ser obtido como $\delta W = -p\Delta V$. Com isso a variação de energia no sistema é definida como

$$\Delta E_T = \delta Q - p\Delta V. \quad (2.23)$$

Por fim, um processo isentrópico é dito aquele em que não há retirada ou adição de calor ao sistema ou quaisquer fenômenos dissipativos. Ou seja, se trata de um processo idealizado adiabático e reversível. Em escoamentos isentrópicos são validas as relações

$$\frac{p_2}{p_1} = \left(\frac{\rho_2}{\rho_1}\right)^\gamma = \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{\gamma/(\gamma-1)} = K, \quad (2.24)$$

onde K é uma constante qualquer. Estas relações são frequentemente utilizadas na análise de escoamentos compressíveis, especialmente na formação de leques de expansão, a ser explicado no Capítulo 3.

2.3 Regimes de Escoamento e Compressibilidade

A compressibilidade de fluido pode ser compreendida como a variação de seu volume quando sob efeito de forças externas. Definindo um módulo de elasticidade volumétrica K_s , a relação entre a variação de pressão e a compressibilidade de um fluido poderia ser escrita como

$$\Delta p = -K_s \frac{\Delta V}{V_0}, \quad (2.25)$$

onde $\Delta V/V_0$ representa a variação de volume em relação ao volume inicial V_0 devido a uma variação de pressão Δp .

Para líquidos, a compressibilidade é normalmente muito pequena, com o módulo de elasticidade K_s da água da ordem de 2 GPa, por exemplo; e frequentemente é assumida a hipótese de incompressibilidade. Entretanto, para gases sob compressão ou expansão isotérmica, é fácil demonstrar utilizando a hipótese de gás ideal que o valor de K_s é igual à pressão inicial p_0 . Assim, para pequenas variações de pressão, um gás ideal experimenta grandes variações em seu volume quando comparado a líquidos ou sólidos.

Para definir a partir de que ponto é necessário assumir a hipótese de compressibilidade dos gases, parte-se do princípio de conservação da massa, segundo o qual

$$\rho_0 V_0 = (\rho_0 + \Delta\rho)(V_0 + \Delta V) \approx \rho_0 V_0 + \rho_0 \Delta V + \Delta\rho V_0, \quad (2.26)$$

ou seja

$$\frac{\Delta V}{V_0} = -\frac{\Delta\rho}{\rho_0}. \quad (2.27)$$

Assim, a Equação 2.25 pode ser reescrita de maneira mais conveniente em termos da massa específica ρ como

$$\Delta p \approx K_s \frac{\Delta \rho}{\rho_0}. \quad (2.28)$$

Ainda, de acordo com a equação de Bernoulli, a variação de pressão Δp é da ordem da pressão dinâmica $\frac{1}{2}\rho u^2$, e pela equação de Newton-Laplace, a velocidade de propagação do som é igual a $a = \sqrt{K_s/\rho_0}$. Com isso, a Eq. 2.28 é reescrita novamente como

$$\frac{\Delta \rho}{\rho_0} \approx \frac{1}{K_s} \frac{\rho u^2}{2} \approx \frac{1}{2} M^2, \quad (2.29)$$

onde M é o número de Mach, dado pela razão $M = \frac{u}{a}$.

Geralmente, a hipótese de incompressibilidade para gases deixa de ser satisfatória a partir de $M > 0,3$, quando é verificado através da Equação 2.29 que a variação da massa específica é de aproximadamente 5%.

Segundo Anderson (2003), os regimes de escoamento podem ser divididos em quatro: subsônico, transônico, supersônico e hipersônico. Onde o parâmetro de diferenciação entre eles é o número de Mach no escoamento não perturbado

$$M_\infty = \frac{u_\infty}{a_\infty}. \quad (2.30)$$

Os regimes de escoamento subsônico ocorrem para $M_\infty \leq 0,8$ e são caracterizados pelas linhas de corrente suaves sem a presença de quaisquer discontinuidades. Nestes regimes o escoamento geralmente se mantém subsônico em todo o domínio.

Os escoamentos transônicos ocorrem para $0,8 \leq M_\infty \leq 1$. Para estes, podem ocorrer zonas onde o número de Mach supera a unidade devido à aceleração local do fluido, sendo possível a observação de discontinuidades como ondas de choque.

Quando $M_\infty > 1$, o regime é definido supersônico. Normalmente $M > 1$ em todo o escoamento, porém podem haver regiões do escoamento em que o número de Mach é subsônico, a depender da intensidade das ondas de choque que se formam.

Por fim, o regime de escoamento mais complexo, denominado hipersônico, ocorre para $M_\infty > 5$. A partir de $M_\infty = 5$ ocorre a ionização das moléculas do fluido, os gradientes de entropia se tornam muito elevados, entre outros aspectos que dificultam a análise deste regime.

3 TUBO DE CHOQUE

O tubo de choque foi pela primeira vez estudado pelo cientista francês Paul Vieille em 1890, no estudo de propagação de chamas. Desde então diversas outras aplicações foram encontradas para o equipamento, como o estudo de escoamentos subsônicos, transônicos e supersônicos; difração e refração de ondas; propriedades químicas e termodinâmicas de gases sob o efeito de temperaturas e pressões extremas; entre outras.

O tubo de choque consiste basicamente em um longo tubo de seção transversal constante dividido por um diafragma em duas câmaras, uma sob alta e outra sob baixa pressão. Com o rompimento deste diafragma, se dá o surgimento de uma onda de choque tão forte quanto o diferencial de pressão entre as câmaras. Com a propagação desta onda, segue um escoamento que pode ter velocidade induzida subsônica ou supersônica a altas temperaturas. O desenho esquemático da evolução deste sistema com o tempo é mostrado na Fig. 5.

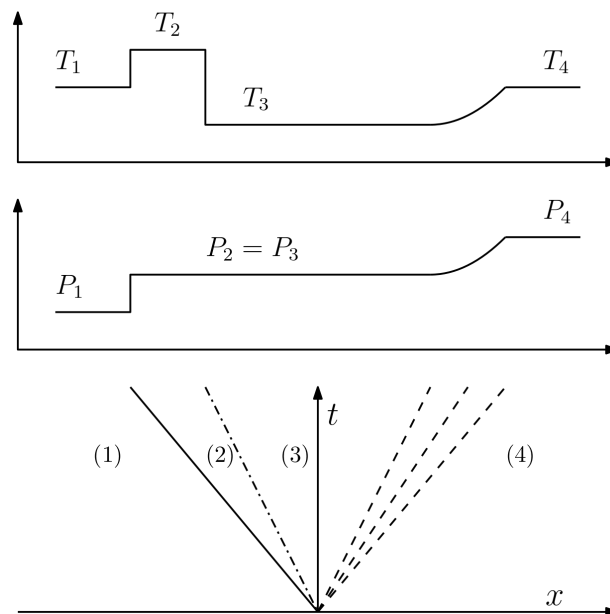


Figura 5 – Desenho esquemático da evolução do escoamento em um tubo de choque.

Nas seções seguintes serão tratados alguns dos fenômenos que se seguem a partir do instante em que o diafragma é rompido. A dedução das equações para o tubo de choque são baseadas em trabalhos de [Glass e Patterson \(1955\)](#) e [Holder e Schultz \(1960\)](#).

3.1 Onda de Choque Incidente

Primeiramente é considerada uma onda de choque estacionária em um escoamento permanente, onde as propriedades a montante e a jusante do choque são diferenciadas pelo subscrito 1 e 2, respectivamente (Fig. 7a). Aplicando as equações governantes a um volume de controle tal qual o mostrado na Fig. 6, a equação da continuidade (Eq. 2.5) pode ser escrita como

$$\rho_2 u_2 = \rho_1 u_1. \quad (3.1)$$

A equação unidimensional para a conservação da quantidade de movimento é escrita a partir da sua formulação integral (Eq. 2.8), desconsiderando o termo de transiente, como

$$p_2 + \rho_2 u_2^2 = p_1 + \rho_1 u_1^2. \quad (3.2)$$

E a equação da energia na forma integral (Eq. 2.10) é reescrita da seguinte forma

$$\rho_2 e_{T_2} u_2 + p_2 u_2 = \rho_1 e_{T_1} u_1 + p_1 u_1. \quad (3.3)$$

Dividindo a equação acima pela Eq. 3.1, e ainda relembrando a definição de energia total $e_T = e + u^2/2$ e de entalpia $h = e + pv$, onde v é o volume específico, tem-se que

$$h_2 + \frac{1}{2}u_2^2 = h_1 + \frac{1}{2}u_1^2. \quad (3.4)$$

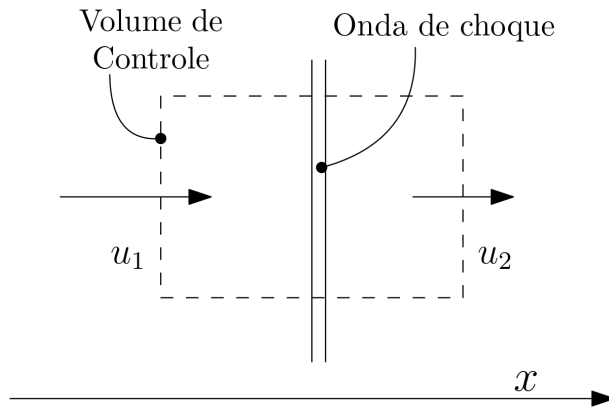


Figura 6 – Volume de controle sobre uma onda de choque.

Para tratar uma onda de choque que se move, podem ser utilizadas as equações propostas para uma onda estacionária (Eq. 3.1, 3.2 e 3.4) desde que se mantenha como referencial a onda de choque. Com isso, as equações governantes são reescritas como

$$\rho_1 u_{1s} = \rho_2 u_{2s}, \quad (3.5)$$

$$p_1 + \rho_1 u_{1s}^2 = p_2 + \rho_2 u_{2s}^2, \quad (3.6)$$

$$h_1 + \frac{1}{2} u_{1s}^2 = h_2 + \frac{1}{2} u_{2s}^2. \quad (3.7)$$

onde o subscrito s denota a velocidade do escoamento relativo à onda de choque. Da Figura 7 observa-se que, para uma onda de choque que se locomove em um meio estagnado com velocidade W_{S_1} , gerando um escoamento induzido u_{p_1} ,

$$u_{1s} = W_{S_1}, \quad u_{2s} = (W_{S_1} - u_{p_1}). \quad (3.8)$$

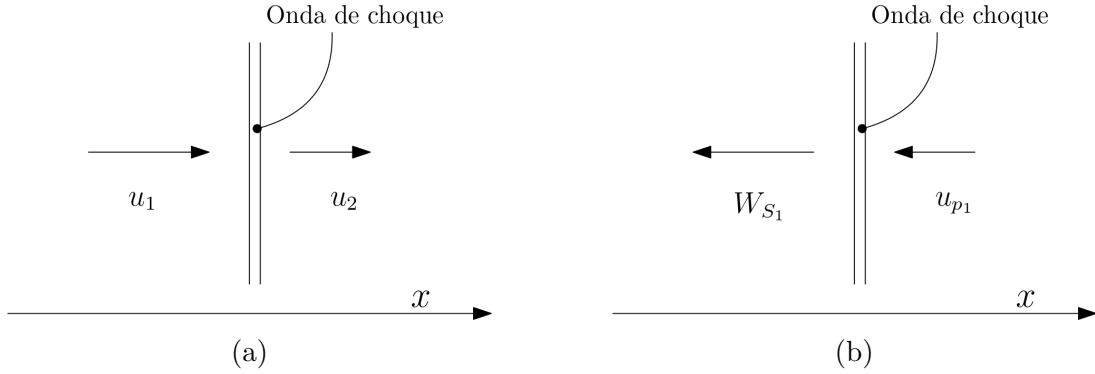


Figura 7 – Desenho esquemático da onda de choque estacionária (a) e não estacionário (b).

Rearranjando a Eq. 3.5 em termos de u_{2s} , tem-se

$$u_{2s} = (W_{S_1} - u_{p_1}) = \frac{\rho_1}{\rho_2} W_{S_1}. \quad (3.9)$$

Substituindo a Eq. 3.9 na equação da quantidade movimento (Eq. 3.6), obtém-se que

$$W_{S_1}^2 = \frac{p_2 - p_1}{\rho_2 - \rho_1} \left(\frac{\rho_2}{\rho_1} \right). \quad (3.10)$$

Pelo mesmo processo, pode se obter a velocidade u_{2s} em termos de pressão e massa específica como

$$(W_{S_1} - u_{p_1})^2 = \frac{p_2 - p_1}{\rho_2 - \rho_1} \left(\frac{\rho_1}{\rho_2} \right). \quad (3.11)$$

Substituindo as Eqs. 3.10 e 3.11 na Eq. 3.7, lembrando a definição de entalpia $h = e + p/\rho$, a equação de Hugoniot é obtida:

$$e_1 - e_2 = \frac{1}{2} (p_1 + p_2) (v_1 - v_2). \quad (3.12)$$

Assumindo as hipóteses de gás caloricamente perfeito, onde vale $e = c_v T$ e $v = RT/p$, as seguintes relações são obtidas

$$\rho_{21} = \frac{1 + \alpha p_{21}}{\alpha + p_{21}}, \quad (3.13)$$

$$T_{21} = p_{21} \left(\frac{\alpha + p_{21}}{1 + \alpha p_{21}} \right), \quad (3.14)$$

em que T_{21} , ρ_{21} e p_{21} representam a razão entre os valores da propriedade a jusante e a montante do choque, e α é uma constante em função da razão de calor específico γ , definida como

$$\alpha = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}. \quad (3.15)$$

Colocando em evidência os termos relativos à pressão na Eq. 3.6 e utilizando a equação da continuidade, tem-se

$$p_2 - p_1 = \rho_1 u_{1s}^2 \left(1 - \frac{u_{2s}}{u_{1s}} \right). \quad (3.16)$$

Dividindo a Eq. 3.16 por p_1 e utilizando a relação $a_1^2 = \gamma p_1 / \rho_1$, obtém-se a razão entre as pressões antes e depois do choque

$$p_{21} = 1 + \frac{2\gamma}{\gamma + 1} (M_{S_1}^2 - 1), \quad (3.17)$$

em que M_{S_1} é o número de Mach de propagação do choque dado por $M_{S_1} = W_{S_1} / a_1$.

O valor da velocidade induzida pelo choque é obtido isolando a variável u_{p_1} na Eq. 3.5 e introduzindo a Eq. 3.13, obtendo

$$u_{p_1} = u_2 = W_{S_1} \left(1 - \frac{\alpha + p_{21}}{1 + \alpha p_{21}} \right). \quad (3.18)$$

Resolvendo a Eq. 3.17 para M_{S_1} e introduzindo-a na Eq. 3.18, obtém-se a mesma em termos da velocidade de propagação a_1 e da razão p_{21} como

$$u_{p_1} = a_1 \frac{p_{21} - 1}{\gamma [\beta (\alpha p_{21} + 1)]^{1/2}}, \quad (3.19)$$

em que α e β são constantes definidas por

$$\alpha = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}, \quad \beta = \frac{\gamma - 1}{2\gamma}. \quad (3.20)$$

3.2 Reflexão da Onda de Choque

Quando a onda de choque alcança a parede do tubo de choque, ela é refletida (Fig. 8). Para obter as relações entre as propriedades do escoamento antes e depois da reflexão do choque e a velocidade de propagação do choque refletido, impõe-se a condição de parede fixa. Sendo assim, a velocidade do escoamento após o choque refletido, na região (5), deve ser nula. Ou seja, o escoamento induzido pela onda de choque refletida u_{p_2} deve ser igual ao escoamento induzido pela onda de choque primária u_{p_1} .

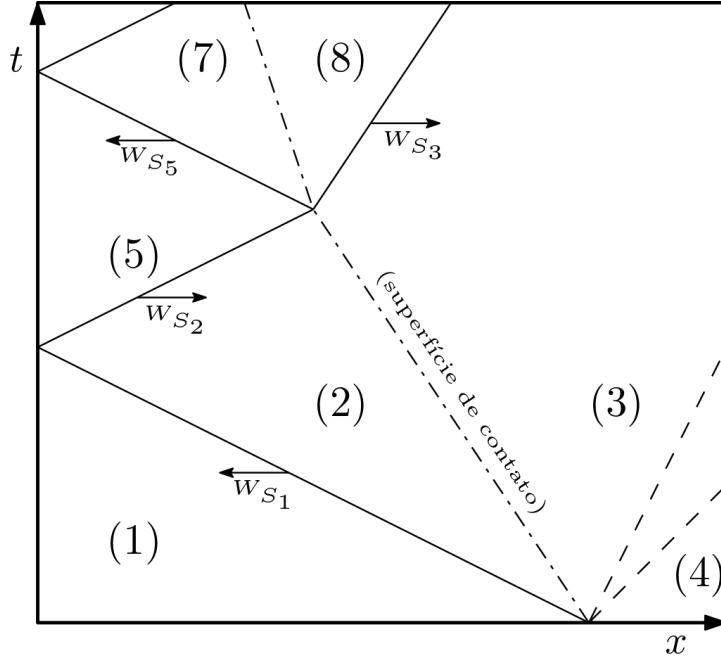


Figura 8 – Reflexão da onda de choque e posterior interação da mesma com a superfície de contato.

Assim, a partir da Eq. 3.19, impondo $u_{p1} = u_{p2}$ obtém-se

$$a_1 \frac{p_{21} - 1}{\gamma [\beta(\alpha p_{21} + 1)]^{1/2}} = a_2 \frac{p_{52} - 1}{\gamma [\beta(\alpha p_{52} + 1)]^{1/2}}. \quad (3.21)$$

Lembrando a relação $a^2 = \gamma RT$, a Eq. 3.14 é substituída na Eq. 3.21, obtendo a razão entre as pressões a montante e a jusante da onda de choque refletida como

$$p_{52} = \frac{(\alpha + 2)p_{21} - 1}{\alpha + p_{21}}. \quad (3.22)$$

Com o valor obtido nesta equação, calcula-se as outras propriedades através das Eq. 3.13 e 3.14.

Por fim, a velocidades de propagação da onda refletida W_{S_2} é obtida resolvendo a Eq. 3.17 para M_{S_1} . Lembrando que o choque refletido, diferente do choque primário, adentra uma região já perturbada com a velocidade do escoamento $u_2 = u_{p1}$, a seguinte equação é alcançada

$$W_{S_2} = a_2 \sqrt{\beta\alpha(p_{52} - 1) + 1} - u_2. \quad (3.23)$$

3.3 Leque de Expansão Incidente

Com a ruptura do diafragma que separa as câmaras de alta e baixa pressão do tubo de choque, há a formação de uma superfície de contato, que se locomove com a velocidade do escoamento induzido pelo choque (mostrado pela linha traço ponto na Fig. 5). Desprezando os mecanismos de difusão, esta superfície de contato é entendida como o

ponto de separação entre os fluidos que inicialmente estavam na região (1) e na região (4). Assim, com o deslocamento da superfície de contato em direção à zona de baixa pressão, o gás na região (4) é expandido isentropicamente, levando à criação de uma região (3) de pressão intermediária. O mecanismo responsável por este fenômeno é o leque de expansão (Fig.9).

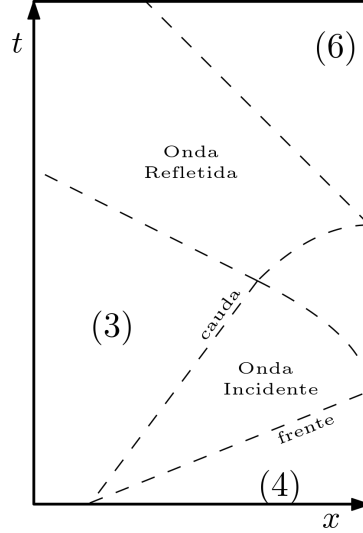


Figura 9 – Leque de expansão incidente e sua reflexão.

Na teoria do leque de expansão, são empregadas as equações de Euler, não permanente e unidimensionais

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = 0. \quad (3.25)$$

Sendo a pressão uma variável de estado, a mesma pode ser escrita como

$$dp(\rho, s) = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s d\rho + \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_\rho ds, \quad (3.26)$$

ou, para um processo isentrópico, onde vale as relações isentrópicas (Eq. 2.24), pode-se concluir que

$$\frac{dp(\rho)}{d\rho} = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s = K \gamma \rho^{\gamma-1}. \quad (3.27)$$

Resgatando a definição de velocidade de propagação do som $a^2 = (\partial p / \partial \rho)_s$ e aplicando-a na Eq. 3.27, obtém-se a massa específica como

$$\rho = K \left(\frac{a^2}{\gamma} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}}. \quad (3.28)$$

Com isso pode se obter as derivadas

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial a} \frac{\partial a}{\partial t} = \frac{2}{\gamma-1} \frac{\rho}{a} \frac{\partial a}{\partial t}, \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial a} \frac{\partial a}{\partial t} = \frac{2\rho a}{\gamma - 1} \frac{\partial a}{\partial t}. \quad (3.30)$$

Substituindo as derivadas das Eq. 3.29 e 3.30 nas Eq. 3.24 e 3.25, as equações governantes são escritas na forma

$$\frac{2}{\gamma - 1} \left(\frac{\partial a}{\partial t} + u \frac{\partial a}{\partial x} \right) + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{2a}{\gamma - 1} \frac{\partial a}{\partial x} = 0. \quad (3.32)$$

Adicionando e subtraindo as Eq. 3.31 e 3.32, a equação da onda que descreve um leque de expansão é escrita como

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + (u \pm a) \frac{\partial}{\partial x} \right] \left(u \pm \frac{2a}{\gamma - 1} \right) = 0, \quad (3.33)$$

onde o sinal positivo denota uma onda que se propaga no sentido positivo do eixo x e vice-versa.

Examinando a equação acima, observa-se que, havendo uma curva característica C_{\pm} tal que

$$\frac{dx}{dt} = u \pm a \quad (3.34)$$

a equação diferencial parcial, é reduzida a uma equação diferencial ordinária de solução

$$u \pm \frac{2a}{\gamma - 1} = J_{\pm}, \quad (3.35)$$

onde J_{\pm} são constantes chamadas invariantes de Riemman no método das características. É necessário enfatizar que a solução dada pela Eq. 3.35 só é válida sobre as curvas características da Eq. 3.34, e que para todas as curvas características C_+ , J_+ é constante. O mesmo vale para as curvas C_- , para as quais J_- também possui um valor constante.

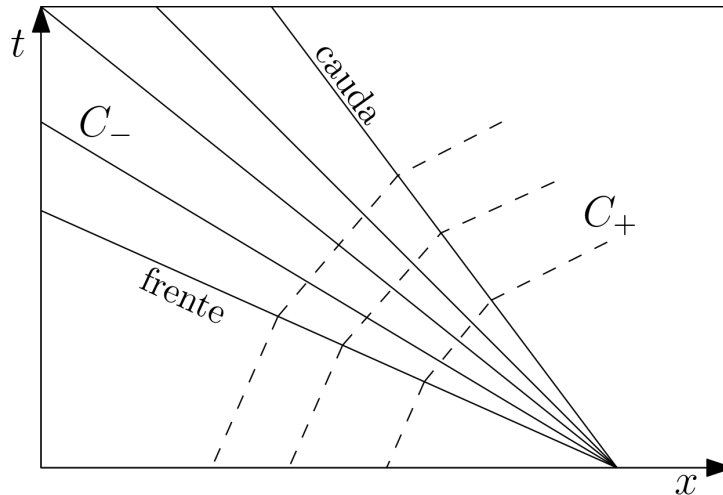


Figura 10 – Curvas características C_+ e C_- para um leque de expansão.

Para um leque de expansão que se desloca no sentido negativo do eixo x , tanto a frente quanto a cauda da onda (Fig. 10) terão a mesma constante J_+ , ou seja,

$$u_4 + \frac{2a_4}{\gamma - 1} = u_3 + \frac{2a_3}{\gamma - 1} = J_+. \quad (3.36)$$

Como o escoamento na região (4) é dado pelo fluido em estagnação, u_4 é nulo. Além disso, a velocidade do escoamento em (3) é igual à velocidade do escoamento induzido pela onda de choque em (2). Assim, a razão entre as velocidades de propagação do som em (3) e (4) é dado por

$$a_{34} = 1 - \gamma\beta \left(\frac{u_2}{a_4} \right). \quad (3.37)$$

Como é adotada a hipótese de gás ideal e o processo de expansão é isentrópico, as outras propriedades do fluido são calculadas através das relações

$$\frac{a_3}{a_4} = \left(\frac{T_3}{T_4} \right)^{1/2} = \left(\frac{\rho_3}{\rho_4} \right)^{\frac{\gamma-1}{2}} = \left(\frac{p_3}{p_4} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} = 1 - \gamma\beta \left(\frac{u_2}{a_4} \right). \quad (3.38)$$

Através da Eq. 3.34, as velocidades de propagação da frente de onda e da cauda do leque de expansão são obtidas respectivamente como

$$W_{E_{h1}} = a_4, \quad (3.39)$$

$$W_{E_{t1}} = a_3 - u_3. \quad (3.40)$$

3.4 Reflexão do Leque de Expansão

Utilizando novamente a Eq. 3.35 para um leque de expansão incidente que se desloca no sentido negativo do eixo x , tem-se

$$u_3 + \frac{2a_3}{\gamma - 1} = \frac{2a_4}{\gamma - 1}. \quad (3.41)$$

Com a reflexão total do leque de expansão, há a formação da região (6), e o leque refletido passa a deslocar-se no sentido positivo do eixo x . Novamente, pela condição de parede fixa e impenetrável, a velocidade do escoamento nesta região deve ser nula. Com isso, para uma curva C_- que corta todo o leque, vale a relação

$$-\frac{2a_6}{\gamma - 1} = u_3 - \frac{2a_3}{\gamma - 1}. \quad (3.42)$$

Combinando as Eq. 3.41 e 3.42, tem-se

$$a_{64} = 2a_{34} - 1. \quad (3.43)$$

Como é adotada a hipótese de gás ideal e o processo de expansão é isentrópico, as outras propriedades do fluido são calculadas através das relações

$$\frac{a_6}{a_4} = \left(\frac{T_6}{T_4}\right)^{1/2} = \left(\frac{\rho_6}{\rho_4}\right)^{\frac{\gamma-1}{2}} = \left(\frac{p_6}{p_4}\right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} \quad (3.44)$$

E as velocidades de propagação da frente e da cauda do leque de expansão refletido são obtidas através da Eq. 3.34 respectivamente como

$$W_{E_{h2}} = a_3 + u_3, \quad (3.45)$$

$$W_{E_{t2}} = a_6. \quad (3.46)$$

3.5 Interação entre a Superfície de Contato e a Onda de Choque

Após a reflexão da onda de choque, ocorre a refração da mesma caso venha a se encontrar com a superfície de contato em algum ponto (Fig. 8). Após a ocorrência deste fenômeno, além da transmissão da onda de choque há a reflexão de uma perturbação, que pode ser uma onda de choque, um leque de expansão ou uma onda de Mach. Para tubos de choque onde o gás empregado em ambas as câmaras de alta e baixa pressão é tal qual o ar, só é possível a reflexão de uma onda de choque independente das condições iniciais escolhidas (GLASS; MERTIN; PATTERSON, 1953).

Com a propagação onda de choque transmitida W_{S_3} , é induzida uma velocidade no escoamento u_{p_3} dada pela diferença entre as velocidades do escoamento antes e após a perturbação, nas regiões (3) e (8), respectivamente. Assim, usando a Eq. 3.19, tem-se que

$$u_{p_3} = u_3 - u_8 = a_3 \frac{p_{83} - 1}{\gamma [\beta(\alpha p_{83} + 1)]^{1/2}}. \quad (3.47)$$

O mesmo ocorre para a onda de choque refletida, porém o sentido de propagação é oposto e a velocidade do escoamento a montante do choque, na região (5), é nulo devido à condição de parede fixa imposta durante a reflexão do choque primário. Desta forma

$$u_{p_5} = u_7 = a_5 \frac{p_{75} - 1}{\gamma [\beta(\alpha p_{75} + 1)]^{1/2}}. \quad (3.48)$$

Através de uma superfície de contato, os valores de pressão estática e velocidade do escoamento devem se manter iguais, ou seja, $p_7 = p_8$ e $u_7 = u_8$. Combinando então as Eq. 3.47 e 3.48 obtém-se a equação para a pressão estática na região (7) e (8):

$$a_5 \frac{p_{75} - 1}{\gamma [\beta(\alpha p_{75} + 1)]^{1/2}} = u_3 - a_3 \frac{p_{83} - 1}{\gamma [\beta(\alpha p_{83} + 1)]^{1/2}}. \quad (3.49)$$

Conhecendo os valores de p_{75} e p_{83} , o valor das propriedades restantes são obtidos através das Eq. 3.13 e 3.14.

As velocidades de propagação das ondas de choque são obtidas de maneira semelhante à Eq. 3.23 como

$$W_{S_3} = a_3 \sqrt{\beta (\alpha p_{83} + 1)} - u_3, \quad (3.50)$$

$$W_{S_5} = a_5 \sqrt{\beta (\alpha p_{75} + 1)}, \quad (3.51)$$

onde W_{S_3} denota a onda de choque que se propaga na região (3) e W_{S_5} denota a onda de choque que se propaga em (5).

4 METODOLOGIA NUMÉRICA

Para a execução do trabalho, foi utilizado o código VAT (*Virtual Aeroacoustic Tunnel*) adaptado para um problema unidimensional. O código VAT é implementado na linguagem FORTRAN, com discretização espacial feita com base na formulação de volumes finitos. Como o trabalho tem o objetivo de analisar métodos explícitos e implícitos, foi implementado o método *multistep* além do método de Runge-Kutta de terceira ordem para a marcha temporal. Com o emprego do *multistep* se espera reduzir o tempo de execução do código. As condições de contorno nas paredes do tubo de choque são impostas através do método de fronteira imersa. Nas seções seguintes será apresentado com mais detalhes como o programa foi implementado.

Por conveniência, na primeira seção (Seção 4.1) será apresentada a adimensionalização das equações com as variáveis adimensionais indicadas pelo sobrescrito *, enquanto que nas seções seguintes deste capítulo são apresentadas as equações já adimensionalizadas sem indicação.

4.1 Equações Governantes

O escoamento no tubo de choque é essencialmente um escoamento compressível, uma vez que há a formação de ondas de choque e propagação de ondas com uma velocidade finita. Assim, são empregadas as equações de Euler na sua forma conservativa tal quais as deduzidas na Seção 2.1 (Eq. 2.15 a 2.17). É utilizada a adimensionalização das variáveis como proposta por Anderson, Tannehill e Pletcher (1997) da seguinte maneira

$$\begin{aligned} x^* &= \frac{x}{L}, & t^* &= \frac{t}{L/a_{ref}}, & u^* &= \frac{u}{a_{ref}}, & a^* &= \frac{a}{a_{ref}}, \\ p^* &= \frac{p}{\rho_{ref}(a_{ref})^2}, & \rho &= \frac{\rho}{\rho_{ref}}, & T^* &= \frac{T}{T_{ref}}, & e^* &= \frac{e}{(a_{ref})^2}. \end{aligned} \quad (4.1)$$

E, assim, as equações de Euler podem ser reescritas na sua forma adimensional como

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x_i^*}(\rho^* u_i^*) = 0, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t^*}(\rho^* u_i^*) + \frac{\partial}{\partial x_j^*}(\rho^* u_i^* u_j^*) = -\frac{\partial p^*}{\partial x_i^*}, \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t^*}(\rho^* e_T^*) + \frac{\partial}{\partial x_i^*}(\rho^* e_T^* u_i^*) = -\frac{\partial}{\partial x_i^*}(p^* u_i^*), \quad (4.4)$$

onde a energia total e_T^* é dada pela soma das energias interna e^* e cinética e_k^* , tal qual

$$e_T^* = e^* + e_k^* = e^* + \frac{u_i^* u_i^*}{2}. \quad (4.5)$$

Para o fechamento do sistema de equações, são utilizadas ainda as equações de estado (Eq. 2.20 e 2.21) na sua forma adimensional

$$p^* = (\gamma - 1)\rho^* e^*, \quad (4.6)$$

$$T^* = \frac{\gamma M_{ref}^2 p^*}{\rho^*}, \quad (4.7)$$

com o número de Mach de referência M_{ref} definido por

$$M_{ref} = \frac{a_{ref}}{\sqrt{\gamma R T_{ref}}}. \quad (4.8)$$

A utilização da forma conservativa das equações governantes torna conveniente sua expressão numa forma vetorial compacta (Eq. 4.9), onde o vetor \mathbf{F} representa os termos de fluxo e o vetor \mathbf{U} é o vetor solução, definidos pela Eq. 4.10. Além disso, a abordagem conservativa usa as variáveis de fluxo \mathbf{F} como variáveis dependentes, o que permite uma maior estabilidade numérica na captura do choque, uma vez que estas se mantêm constantes ao longo do mesmo (ANDERSON, 1995).

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t^*} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x^*} = \mathbf{0} \quad (4.9)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho^* \\ \rho^* u^* \\ \rho e_T^* \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho^* u^* \\ \rho^* (u^*)^2 + p^* \\ (\rho^* e_T^* + p^*) u^* \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

Ainda, introduzindo a definição do tensor

$$\mathbf{\Pi} = \mathbf{F} \otimes \hat{\mathbf{i}}, \quad (4.11)$$

onde $\hat{\mathbf{i}}$ representa o versor na direção x , a Eq. 4.10 é escrita como

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t^*} + \nabla \cdot \mathbf{\Pi} = \mathbf{0}. \quad (4.12)$$

4.2 Discretização em Volumes Finitos

4.2.1 Método Explícito

Para obter a formulação em volumes finitos para o método explícito, a Eq. 4.12 é integrada nos limites de um volume de controle V , e é aplicado o Teorema do Divergente. Desta forma, obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \mathbf{U} dV = - \int_V (\nabla \cdot \mathbf{\Pi}) dV = - \oint_S \mathbf{\Pi} \cdot d\mathbf{S}. \quad (4.13)$$

A média volumétrica de \mathbf{U} no volume de controle V é definida como

$$\bar{\mathbf{U}} \equiv \frac{1}{V} \int_V \mathbf{U} dV, \quad (4.14)$$

e introduzida na Eq. 4.13, obtendo-se

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} = - \frac{1}{V} \oint_S (\mathbf{\Pi} \cdot \hat{\mathbf{n}}) dS. \quad (4.15)$$

Para obter a variação do vetor $\bar{\mathbf{U}}$ para um intervalo de tempo Δt , é feita uma aproximação de primeira ordem no tempo para a variação temporal do vetor $\bar{\mathbf{U}}$ como

$$\left(\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} \right)_i = \frac{\Delta \bar{\mathbf{U}}_i}{\Delta t} + O(\Delta t). \quad (4.16)$$

Considerando um volume de controle suficientemente pequeno, pode-se admitir o tensor $\mathbf{\Pi}$ aproximadamente constante em toda a superfície S do volume de controle, ou seja,

$$\oint_S (\mathbf{\Pi} \cdot \hat{\mathbf{n}}) dS \simeq \mathbf{\Pi} \cdot \oint_S \hat{\mathbf{n}} dS = \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{S}. \quad (4.17)$$

Valendo-se das aproximações descritas nas Eq. 4.16 e 4.17, a Eq. 4.15 pode ser reescrita para um volume de controle unidimensional como

$$\Delta \bar{\mathbf{U}}_i = - \frac{\Delta t}{V_i} [(\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{S})_{i-1/2} + (\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{S})_{i+1/2}], \quad (4.18)$$

sendo $(\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{S})_{i+1/2}$ o fluxo do tensor $\mathbf{\Pi}$ através da superfície compartilhada pelos volumes (i) e $(i+1)$; e $(\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{S})_{i-1/2}$ o fluxo do mesmo tensor através da superfície compartilhada pelos volumes $(i-1)$ e (i) .

Por fim, a função de fluxo do tensor pelo volume de controle no passo Δt é definida como

$$\mathcal{F}_i = \frac{\Delta t}{V_i} [(\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{S})_{i-1/2} + (\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{S})_{i+1/2}], \quad (4.19)$$

e a Eq. 4.18 é reescrita como

$$\Delta \bar{\mathbf{U}}_i = -\mathcal{F}_i. \quad (4.20)$$

4.2.2 Método Implícito

De maneira similar ao que foi feito anteriormente, para a formulação implícita a Eq. 4.9 é integrada nos limites de um volume de controle V , obtendo-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \mathbf{U} dV = - \frac{\partial}{\partial x} \int_V \mathbf{F} dV. \quad (4.21)$$

Analogamente à Eq. 4.14, a média volumétrica de \mathbf{F} no volume de controle V é definida como

$$\bar{\mathbf{F}} \equiv \frac{1}{V} \int_V \mathbf{F} dV, \quad (4.22)$$

e a Eq. 4.21 é reescrita como

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} = - \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}}{\partial x}. \quad (4.23)$$

Com uma aproximação de primeira ordem no tempo e espaço, a Eq. 4.23 é novamente reescrita como

$$\Delta \bar{\mathbf{U}}_i = - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \Delta \bar{\mathbf{F}}_i, \quad (4.24)$$

sendo a função de fluxo do tensor pelo volume de controle no passo Δt definida por

$$\mathcal{F}_i = \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \Delta \bar{\mathbf{F}}_i, \quad (4.25)$$

4.3 Cálculo do Fluxo através da Face pelo Método Explícito

Para o cálculo da função de fluxo \mathcal{F}_i por meio do método explícito é necessário conhecer o fluxo do tensor $\mathbf{\Pi}$ sobre as faces do volume de controle. Para a face $S_{i+1/2}$, tem-se

$$(\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{S})_{i+1/2} = \begin{bmatrix} (\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{S})^1 \\ (\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{S})^2 \\ (\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{S})^3 \end{bmatrix}_{i+1/2}, \quad (4.26)$$

onde a primeira componente expressa o fluxo de massa

$$(\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{S})^1 = \rho_{i+1/2} (q_s)_{i+1/2}, \quad (4.27)$$

a segunda componente, o fluxo da quantidade de movimento

$$(\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{S})^2 = (\rho u)_{i+1/2} (q_s)_{i+1/2} + p_{i+1/2} (s_x)_{i+1/2}, \quad (4.28)$$

e a terceira, o fluxo de energia

$$(\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{S})^3 = (\rho e_T)_{i+1/2} (q_s)_{i+1/2} + p_{i+1/2} (q_s)_{i+1/2}. \quad (4.29)$$

Estes fluxos são calculados utilizando o fluxo volumétrico, definido por

$$(q_s)_{i+1/2} = \mathbf{u}_{i+1/2} \cdot \mathbf{S}_{i+1/2} = u_{i+1/2} (s_x)_{i+1/2}. \quad (4.30)$$

E no caso unidimensional, a componente vetorial adimensional de superfície na direção x , (s_x) , coincide com superfície adimensional do volume de controle S .

4.3.1 Método de Interpolação

O cálculo da função de fluxo pelo método explícito exige o valor de variáveis primitivas e conservativas na interface entre os volumes de controle, faces $S_{i-1/2}$ e $S_{i+1/2}$. Estes valores são obtidos através do esquema de interpolação de quarta ordem de precisão desenvolvido por [Pimenta \(2016\)](#), onde

$$\rho_{i+1/2} = \frac{9}{16}(\bar{\rho}_i + \bar{\rho}_{i+1}) - \frac{1}{16}(\bar{\rho}_{i-1} + \bar{\rho}_{i+2}), \quad (4.31)$$

$$(\rho u)_{i+1/2} = \frac{9}{16}(\overline{\rho u}_i + \overline{\rho u}_{i+1}) - \frac{1}{16}(\overline{\rho u}_{i-1} + \overline{\rho u}_{i+2}), \quad (4.32)$$

$$(\rho e_T)_{i+1/2} = \frac{9}{16}(\overline{\rho e_T}_i + \overline{\rho e_T}_{i+1}) - \frac{1}{16}(\overline{\rho e_T}_{i-1} + \overline{\rho e_T}_{i+2}), \quad (4.33)$$

$$u_{i+1/2} = \frac{9}{16}(\tilde{u}_i + \tilde{u}_{i+1}) - \frac{1}{16}(\tilde{u}_{i-1} + \tilde{u}_{i+2}), \quad (4.34)$$

$$p_{i+1/2} = \frac{9}{16}(\underline{p}_i + \underline{p}_{i+1}) - \frac{1}{16}(\underline{p}_{i-1} + \underline{p}_{i+2}). \quad (4.35)$$

4.4 Cálculo do Fluxo Total pelo Método Implícito

No método implícito, a função de fluxo \mathcal{F}_i (Eq. 4.25) é calculada implicitamente com quarta ordem de precisão através da expressão¹

$$\frac{1}{4}\Delta\bar{\mathbf{F}}_{i-1} + \Delta\bar{\mathbf{F}}_i + \frac{1}{4}\Delta\bar{\mathbf{F}}_{i+1} = \frac{3}{4}[\bar{\mathbf{F}}_{i+1} - \bar{\mathbf{F}}_{i-1}]. \quad (4.36)$$

A Eq. 4.36 pode ser também escrita em sua forma matricial

$$T_{ik}\Delta\bar{\mathbf{F}}_k = b[\bar{\mathbf{F}}_{i+1} - \bar{\mathbf{F}}_{i-1}]. \quad (4.37)$$

onde $b = 3/4$ e T_{ik} é uma matriz de Toeplitz, ou matriz de diagonais constantes, definida como

$$T_{ik} = \begin{cases} 1, & \text{para } j - i = 0 \\ a, & \text{para } |j - i| = 1 \\ 0, & \text{para } |j - i| > 1, \end{cases} \quad (4.38)$$

com $a = 1/4$.

Um sistema de Toeplitz como o da Equação 4.37 pode ser resolvido invertendo-se a matriz T_{ik} .

¹ Coeficientes fornecidos por PIMENTA, Bráulio Gutierrez em reunião particular, julho de 2020.

Salkuyeh (2006) demonstra que para uma matriz de Toeplitz de determinante não nulo, sua inversa pode ser determinada por uma somatória de senos e cossenos. Utilizando os resultados deste autor, a inversa da matriz T_{ik} de ordem n definida na Equação 4.38) pode ser calculada através da expressão

$$T_{ij}^{-1} = \frac{2}{n+1} \sum_{k=1}^n \frac{\text{sen} \frac{ik\pi}{n+1} \text{sen} \frac{jk\pi}{n+1}}{1 + 2a \cos \frac{k\pi}{n+1}}. \quad (4.39)$$

Com isso, chega-se à expressão da função de fluxo

$$\mathcal{F}_i = \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left[b \sum_{k=1}^{i_{max}} T_{ik}^{-1} (\bar{\mathbf{F}}_{k+1} - \bar{\mathbf{F}}_{k-1}) \right], \quad (4.40)$$

onde i_{max} é a última coordenada no eixo x.

4.5 Média de Favre

A média de Favre, definida como a média volumétrica ponderada pela massa específica, é utilizada para obtenção das variáveis primitivas médias dentro de um volume de controle (ANDERSON; TANNEHILL; PLETCHER, 1997). Assim, a velocidade u e a energia total específica e_T , são calculadas como

$$\tilde{u} = \frac{\overline{\rho u}}{\bar{\rho}}, \quad \tilde{e}_T = \frac{\overline{\rho e_T}}{\bar{\rho}}, \quad (4.41)$$

com o sobrescrito til indicando a média de Favre e a barra superior indicando os valores obtidos através da média volumétrica, definida pela Eq. 4.14.

Utilizando a definição de energia total específica dada na Eq. 4.5; e as equações constitutivas, nas Eq. 4.6 e 4.7, é possível obter as variáveis primitivas restantes a partir da média calculada, indicada pela barra subscrita, como

$$\underline{e}_k = \frac{\tilde{u}\tilde{u}}{2}, \quad \underline{e} = \tilde{e}_T - \underline{e}_k, \quad \underline{p} = (\gamma - 1)\bar{\rho}\underline{e}, \quad \underline{T} = \frac{\gamma M^2 \underline{p}}{\bar{\rho}}. \quad (4.42)$$

4.6 Dissipação Numérica

Dado o erro de discretização associado ao cálculo do fluxo \mathcal{F}_i , com o intuito de estabilizar o método numérico é adicionado o termo de dissipação artificial \mathcal{D}_i à Eq. 4.20, reescrevendo-a como

$$\Delta \bar{\mathbf{U}}_i = -\mathcal{F}_i + \mathcal{D}_i. \quad (4.43)$$

A dissipação artificial é baseada no modelo de [Jameson, Schmidt e Turkel \(1981\)](#) com modificações de acordo com [Pimenta \(2016\)](#). Assim, para um volume (i), o operador de dissipação numérica é dado como

$$\mathcal{D}_i = CFL_i(d_{i+1/2} - d_{i-1/2}). \quad (4.44)$$

Observa-se que a diferença das dissipações d na Eq. 4.44 é ponderada pelo número de Courant local, CFL_i . Este é definido para um volume unidimensional como

$$CFL_i = \frac{|u_i| + a_i}{\Delta x} \Delta t = \left(\sqrt{u_i u_i} + \sqrt{\gamma p_i / \rho_i} \right) \frac{\Delta t}{\sqrt{V_i}}. \quad (4.45)$$

E a parcela de dissipação artificial em uma superfície $S_{i+1/2}$, é calculada como

$$d_{i+1/2} = \epsilon_{i+1/2}^{(2)} [\bar{\mathbf{U}}_{i+1} - \bar{\mathbf{U}}_i] - \epsilon_{i+1/2}^{(4)} [\bar{\mathbf{U}}_{i+2} - 3\bar{\mathbf{U}}_{i+1} + 3\bar{\mathbf{U}}_i - \bar{\mathbf{U}}_{i-1}]. \quad (4.46)$$

Os coeficientes de dissipação artificial de segunda ordem, $\epsilon^{(2)}$, e quarta ordem, $\epsilon^{(4)}$, são descritos respectivamente para a mesma superfície $S_{i+1/2}$ como

$$\epsilon_{i+1/2}^{(2)} = \max \left[(\Psi_{prs})_{i+1/2}, (\Psi_{den})_{i+1/2}, (\Psi_{div})_{i+1/2} \right], \quad (4.47)$$

$$\epsilon_{i+1/2}^{(4)} = \max \left[0, \left(K^{(4)} - \epsilon_{i+1/2}^{(2)} \right) \right], \quad (4.48)$$

onde são utilizados os sensores de pressão Ψ_{prs} , massa específica Ψ_{den} e divergente Ψ_{div} definidos respectivamente como

$$(\Psi_{prs})_{i+1/2} = K_{prs}^{(2)} \cdot |\nabla \mathbf{p}|_{i+1/2}, \quad (4.49)$$

$$(\Psi_{den})_{i+1/2} = K_{den}^{(2)} \cdot |\nabla \bar{\rho}|_{i+1/2}, \quad (4.50)$$

$$(\Psi_{div})_{i+1/2} = K_{div}^{(2)} \cdot |\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}|_{i+1/2}. \quad (4.51)$$

Os sensores descritos acima são ajustados através de constantes de calibração $K^{(4)}$, $K_{prs}^{(2)}$, $K_{den}^{(2)}$ e $K_{div}^{(2)}$, que são dadas como variáveis de entrada no algoritmo.

4.6.1 Cálculo das Derivadas

Os gradientes de pressão e massa específica, e o divergente do campo de velocidades devem ser calculados. Para isso, é utilizado o Teorema do Gradiente aplicado a uma variável escalar proposto por [Hirsch \(2007\)](#) e implementado com quarta ordem de precisão por [Mendonça \(2004\)](#).

Utilizando a componente da velocidade na direção x como exemplo, integra-se seu gradiente sobre um volume V_P ao redor de um ponto de malha e é aplicado o Teorema do Gradiente

$$\int_{V_P} (\nabla u) dV_P = \oint_{S_P} u ds_P. \quad (4.52)$$

Ou, explicitando a derivada na direção x ,

$$\int_{V_P} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) dV_P = \oint_{S_P} u ds_P. \quad (4.53)$$

Este volume V_P não coincide com o volume de controle V , e sua escolha define a ordem de precisão do método. Na Figura 11 é mostrado o volume V_P delimitado pela linha grossa tracejada. Para obter a quarta ordem de precisão, este volume engloba dois volumes de controle consecutivos, delimitados pela linha fina contínua, que compartilham o mesmo ponto de malha x_i .

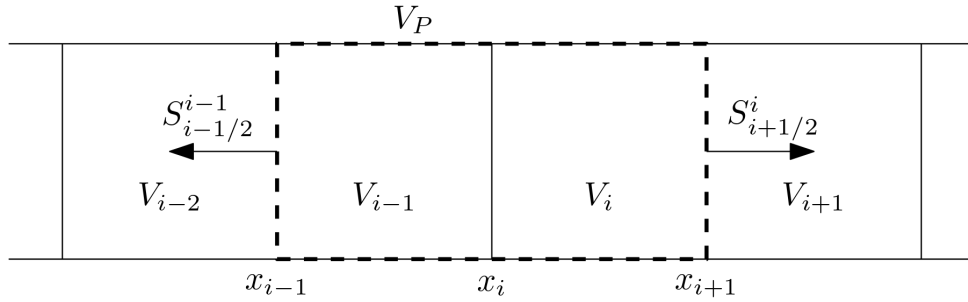


Figura 11 – Volume V_P ao redor de um ponto de malha x_i para o caso unidimensional.

Definindo a média volumétrica da derivada para o volume V_P como

$$\overline{\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)}_{x_i} = \frac{1}{V_P} \int_{V_P} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) dV_P, \quad (4.54)$$

pode-se reescrever a Eq. 4.53 da seguinte forma

$$\overline{\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)}_{x_i} = \frac{1}{V_P} \oint_{S_P} u ds_P = \frac{1}{V_P} f(\tilde{u})_{x_i}, \quad (4.55)$$

onde define-se $f(\tilde{u})$ o fluxo líquido da velocidade através da superfície S_P .

Este fluxo é calculado através da equação

$$f(\tilde{u})_{x_i} = f(\tilde{u})_{i+1/2} + f(\tilde{u})_{i-1/2}, \quad (4.56)$$

onde as parcelas referentes às superfícies $(S_x)_{i+1/2}^i$, coincidente com a face $S_{i+1/2}$ do volume de controle (i) ; e $(S_x)_{i-1/2}^{i-1}$, coincidente com a face $S_{i-3/2}$ do volume de controle $(i-1)$, são computadas respectivamente como

$$f(\tilde{u})_{i+1/2} = \frac{1}{2} (\tilde{u}_i + \tilde{u}_{i+1}) (S_x)_{i+1/2}^i, \quad (4.57)$$

$$f(\tilde{u})_{i-1/2} = \frac{1}{2} (\tilde{u}_{i-2} + \tilde{u}_{i-1}) (S_x)_{i-1/2}^{i-1}. \quad (4.58)$$

4.7 Fronteira Imersa

As fronteiras do tubo de choque são assumidas paredes adiabáticas e rígidas, onde é imposta a condição de impenetrabilidade. Assim deve-se garantir nas mesmas as seguintes condições

$$u = u_n^b = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial n} = 0, \quad (4.59)$$

em que n é o versor normal à superfície da parede e u_n^b é a velocidade das paredes do tubo de choque.

Pelo método da fronteira imersa, as condições de contorno são impostas diretamente nos volumes de controle que possuem um ou mais pontos da geometria de um sólido. A Figura 12 mostra parte da discretização unidimensional em volumes finitos, onde estão presentes os pontos da geometria e seus respectivos vetores normais à superfície (quadrados em preto com setas), os volumes de fronteira (quadrados em cinza escuro), e ainda os volumes de isolamento (quadrados na cor cinza claro). Os quadrados em branco representam volumes ordinários, que não possuem pontos da geometria sólida. No caso do tubo de choque unidimensional, são utilizados somente dois pontos para confinar o escoamento, posicionados em $x = 1/128 \times L$ e $x = 127/128 \times L$, onde L é o comprimento característico do tubo de choque (Fig 12).

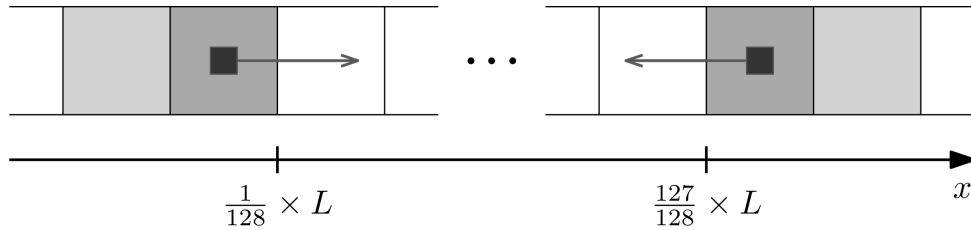


Figura 12 – Malha cartesiana unidimensional mostrando os pontos da geometria com os versores normais de superfície.

No caso unidimensional o versor $\hat{\mathbf{n}}$ possui a mesma direção do versor $\hat{\mathbf{i}}$. Porém, para um caso mais geral, o versor poderia ser decomposto em $\hat{\mathbf{n}} = n_x \hat{\mathbf{i}} + n_y \hat{\mathbf{j}}$ para o caso bidimensional, por exemplo, e a derivada de uma propriedade g qualquer na direção normal à superfície poderia ser escrita como

$$\frac{\partial g}{\partial n} = \frac{\partial g}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial n} + \frac{\partial g}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial n} = n_x \frac{\partial g}{\partial x} + n_y \frac{\partial g}{\partial y}. \quad (4.60)$$

Voltando para o caso unidimensional, as condições de contorno na Eq. 4.59 são reescritas como

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} = \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} = 0. \quad (4.61)$$

Impondo a condição de impenetrabilidade para a equação de quantidade de movimento (Eq. 4.3), leva a constatação de que o campo de pressão na fronteira deve ser

imposto como

$$\frac{\partial p}{\partial x} = 0. \quad (4.62)$$

Com este resultado, a equação de Clapeyron (Eq. 4.6) é diferenciada com relação a x para obter a condição de contorno para a massa específica

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x} = 0. \quad (4.63)$$

Por fim, da Eq. 4.7, conclui-se também que

$$\frac{\partial e}{\partial x} = 0. \quad (4.64)$$

Definidas as condições de contorno a serem impostas no volume de controle de fronteira, as propriedades em cada um destes volumes são calculadas através do método de diferenças finitas progressiva com quarta ordem de precisão espacial tal qual proposto por [Anderson, Tannehill e Pletcher \(1997\)](#). De acordo com o método, para uma propriedade g qualquer, o valor da sua derivada na direção x em um volume de fronteira (i) é dada por

$$\left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_i^b = \frac{1}{12\Delta x} \left(-25g_i^b + 48g_{i+1}^b - 36g_{i+2}^b + 16g_{i+3}^b - 3g_{i+4}^b\right), \quad (4.65)$$

caso o versor n_x seja positivo, e

$$\left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_i^b = \frac{1}{12\Delta x} \left(-25g_i^b + 48g_{i-1}^b - 36g_{i-2}^b + 16g_{i-3}^b - 3g_{i-4}^b\right), \quad (4.66)$$

caso n_x seja negativo.

Aplicando as condições de derivada nula e rearranjando as Eq. 4.65 e 4.66, o valor da propriedade g no volume de fronteira (i) é aplicado da seguinte forma

$$g_i^b = \frac{1}{25} \left(+48g_{i+1}^b - 36g_{i+2}^b + 16g_{i+3}^b - 3g_{i+4}^b\right), \text{ para } n_x = 1, \quad (4.67)$$

$$g_i^b = \frac{1}{25} \left(+48g_{i-1}^b - 36g_{i-2}^b + 16g_{i-3}^b - 3g_{i-4}^b\right), \text{ para } n_x = -1. \quad (4.68)$$

Assim, o vetor solução \mathbf{U} na fronteira é dado por

$$\bar{\mathbf{U}}_i^b = \begin{bmatrix} \bar{\rho} \\ \bar{\rho}u_n \\ \bar{\rho} \left[\underline{e} + \frac{1}{2} (u_n u_n) \right] \end{bmatrix}_i^b = \begin{bmatrix} \bar{\rho} \\ 0 \\ \bar{\rho}\underline{e} \end{bmatrix}_i^b. \quad (4.69)$$

4.8 Marcha Temporal

Para a realização da marcha temporal da Equação 4.43 foram implementados dois métodos distintos, sendo um o método de Runge-Kutta e o outro o *multistep*. A implementação do método de *multistep* se justifica dada a necessidade de se reduzir o tempo de execução do código, tendo em vista o custo computacional adicionado ao se empregar métodos implícitos (a ser discutido na Seção 6.2). Ao passo que o Runge-Kutta realiza três passos intermediários para cada passo no tempo, o *multistep* não realiza passos intermediários, diminuindo seu tempo de execução. Em contra partida, o *multistep* exige maior alocação de memória pois requer que os valores de $\bar{\mathbf{U}}_i$ sejam guardados para os quatro instantes de tempo anteriores (mostrado em detalhes na Seção 4.8.2).

4.8.1 Método de Runge-Kutta

O método de marcha temporal de Runge-Kutta de terceira ordem relatado por Yee (1997) é dado pelos seguintes três passos

$$\bar{\mathbf{U}}_i^1 = \bar{\mathbf{U}}_i^n + \Delta\bar{\mathbf{U}}_i^n, \quad (4.70)$$

$$\bar{\mathbf{U}}_i^2 = \frac{3}{4}\bar{\mathbf{U}}_i^n + \frac{1}{4}\bar{\mathbf{U}}_i^1 + \frac{1}{4}\Delta\bar{\mathbf{U}}_i^1, \quad (4.71)$$

$$\bar{\mathbf{U}}_i^{n+1} = \frac{1}{3}\bar{\mathbf{U}}_i^n + \frac{2}{3}\bar{\mathbf{U}}_i^2 + \frac{2}{3}\Delta\bar{\mathbf{U}}_i^2. \quad (4.72)$$

4.8.2 Método *Multistep*

Um método *multistep* de k passos é um método linear explícito da forma

$$\bar{\mathbf{U}}_i^{n+1} = \sum_{j=0}^{k-1} [a_j \bar{\mathbf{U}}_i^{n-j} + b_j \Delta t (\Delta\bar{\mathbf{U}}_i^{n-j})]. \quad (4.73)$$

Neste trabalho é utilizado o método *multistep* de quarta ordem com cinco passos

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{U}}_i^{n+1} = & a_0 \bar{\mathbf{U}}_i^n + a_1 \bar{\mathbf{U}}_i^{n-1} + a_2 \bar{\mathbf{U}}_i^{n-2} + a_3 \bar{\mathbf{U}}_i^{n-3} + a_4 \bar{\mathbf{U}}_i^{n-4} + \\ & \Delta t [b_0 \Delta\bar{\mathbf{U}}_i^n + b_1 \Delta\bar{\mathbf{U}}_i^{n-1} + b_2 \Delta\bar{\mathbf{U}}_i^{n-2} + b_3 \Delta\bar{\mathbf{U}}_i^{n-3} + b_4 \Delta\bar{\mathbf{U}}_i^{n-4}], \end{aligned} \quad (4.74)$$

cujos coeficientes a_j e b_j , presentes na Tabela 1, foram otimizados por Ruuth e Hundsdorfer (2005) de forma a manter a estabilidade do método.

Foi escolhido um método de quarta ordem com o objetivo de conciliar as ordens de convergência formal dos métodos explícito e implícito de cálculo dos fluxos.

Tabela 1 – Coeficientes ótimos para o método *multistep* linear de quarta ordem com cinco passos (RUUTH; HUNSDORFER, 2005).

| Índice j | a_j | b_j |
|------------|--------------------|--------------------|
| 0 | 3,089334754787739 | 1,629978886421390 |
| 1 | -3,997727108450201 | -3,839438825282836 |
| 2 | 2,799704082644115 | 3,698752623531085 |
| 3 | -1,069321620028803 | -1,688757722449064 |
| 4 | 0,178009891047150 | 0,305220798719644 |

5 ESTUDO DE CONVERGÊNCIA

Um dos fatores a se avaliar quanto à eficiência de um método numérico é a sua ordem de convergência. Uma metodologia de alta ordem de convergência é desejável a medida que implica em resultados mais precisos sem a necessidade de recorrer a malhas extremamente refinadas.

A análise de convergência se torna importante na verificação da ordem de precisão dos resultados computados. Espera-se que esta corresponda à ordem de precisão de projeto, no entanto, falhas de implementação ou mesmo a natureza do problema a ser simulado, podem resultar em alguma divergência entre ambos.

5.1 Extrapolação de Richardson

Para a convergência de um esquema numérico, a solução computada \mathbf{U}_h deve se aproximar da solução exata \mathbf{U}_0 quando o passo da malha no espaço dado por h se aproxima de zero. Entretanto, quando a solução exata não é conhecida, pode-se estimá-la através do método de extrapolação de Richardson generalizada (ER). Assim, o estudo de convergência do código VAT foi realizado utilizando a técnica conforme a abordagem de [Bonfiglioli e Paciorri \(2014\)](#). A extrapolação é dita generalizada em alusão ao fato da mesma se aplicar a métodos de p -ésima ordem cuja malha é refinada por um fator arbitrário r . A ordem p do método é assumida como fixa e conhecida, normalmente definida igual à n , a ordem formal de convergência do esquema. A técnica de ER permite uma aproximação da solução exata \mathbf{U}_0 com ordem de precisão $(p + 1)$. O cálculo desta aproximação, $\tilde{\mathbf{U}}_0$, é dado por

$$\tilde{\mathbf{U}}_0 = \mathbf{U}_h - \frac{\mathbf{U}_{rh} - \mathbf{U}_h}{r^n - 1}. \quad (5.1)$$

Para o cálculo de $\tilde{\mathbf{U}}_0$ através da equação acima, é computado o valor médio de \mathbf{U}_h no nível de malha mais grosseiro rh . Assim, é importante notar que a aproximação $\tilde{\mathbf{U}}_0$ computada a partir da Eq. 5.1 só é conhecida para os níveis de malha mais grosseiros, rh . Portanto, a norma do erro \mathbf{L}_1 não é avaliada para \mathbf{U}_h .

Com o cômputo da extrapolação da resposta precisa, o erro local ϵ_{rh} é dado pela

seguinte diferença

$$\boldsymbol{\epsilon}_{rh} = \mathbf{U}_{rh} - \tilde{\mathbf{U}}_0, \quad (5.2)$$

sendo \mathbf{U}_{rh} o valor numérico obtido na malha mais esparsa rh e $\tilde{\mathbf{U}}_0$ a aproximação do valor exato. Enquanto que a norma \mathbf{L}_1 do erro associado à discretização é calculada através da equação

$$\mathbf{L}_1(\boldsymbol{\epsilon}_{rh}) = \frac{\sum_{i=1}^N |\epsilon_{rh}|_i}{N}, \quad (5.3)$$

onde N é o número de volumes finitos que compõem o domínio selecionado para análise.

6 RESULTADOS

No presente capítulo serão apresentados o que se obteve da análise de convergência, custo computacional e verificação de resultados para os métodos explícito e implícitos de cálculo do fluxo através de um volume de controle com uma abordagem de captura de choque.

A análise de convergência é realizada através do método de extrapolação de Richardson adaptado para uma malha no tempo e espaço, e a verificação é realizada através da comparação da resposta numérica com resultados analíticos para a teoria do tubo de choque.

Também é estudado o caso do choque normal unidimensional com o intuito de observar como se comporta a ordem de convergência em um problema de regime permanente.

6.1 Arquivo de Entrada

A simulação numérica do tubo de choque é realizada utilizando um domínio unidimensional. O domínio computacional possui a dimensão de um comprimento característico $L = 0,1$ m, igual ao comprimento do tubo de choque. Ao longo deste comprimento característico, são utilizados 1024 volumes finitos para a malha mais grosseira.

O escoamento é confinado entre dois volumes de fronteira, um posicionado no volume à esquerda do ponto onde $x = 1/128 \times L$ e outro à direita do ponto onde $x = 127/128 \times L$. Dessa forma, a simulação é iniciada com o escoamento em repouso ($u = 0$ m/s). O tubo de choque é dividido em duas regiões em $x = 0,5 \times L$, para as simulações a serem utilizadas na análise de convergência, e em $x = 0,875 \times L$, para um caso especial a ser utilizado para verificação de resultados. À primeira região é imposta a pressão de $P_1 = 101\,325,00$ Pa, e à segunda região é imposta a pressão de $P_4 = 710\,420,63$ Pa. A temperatura inicial em todo o domínio é atribuída igual a 300 K. Para o ar, o calor específico a volume constante foi atribuído como $c_v = 717,5$ J/kg e a constante dos gases como $R = 287,0$ J/kg · K. Os dados utilizados como variáveis de entrada do programa VAT se encontram compiladas na Tab. 2.

Para a definição do passo temporal, deve-se satisfazer a condição de Courant-

Friedrichs-Lewy. Este critério estabelece um parâmetro para a escolha dos passos no tempo Δt e no espaço Δx de forma a manter a estabilidade de métodos numéricos. Sendo assim, estes devem ser escolhidos de tal forma que

$$CFL = c \frac{\Delta t}{\Delta x} = c \Delta t \frac{n_{unit}}{L} \leq 1, \quad (6.1)$$

onde L é o comprimento característico, n_{unit} o número de volumes de controle sobre um comprimento característico, e c é a velocidade de propagação da perturbação a ser capturada na simulação. Ou seja, velocidade do domínio computacional $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ não deve ser inferior à velocidade do domínio analítico c . Caso o contrário, o domínio analítico não será totalmente englobado no domínio computacional, gerando instabilidades numéricas (ANDERSON, 1995).

Para o tubo de choque, c é escolhido igual à velocidade de propagação da onda de choque primária W_{S_1} , calculado através da Eq. 3.17 com os valores de P_1 e P_4 escolhidos da Tab. 2. Esta grandeza foi escolhida em razão de ser a maior velocidade de propagação encontrada no problema. Nas primeiras simulações, com constantes de calibração habituais, $K_{div}^{(2)} = 5 \times 10^{-4}$, $K_{pre}^{(2)} = 5 \times 10^{-3}$, $K_{rho}^{(2)} = 5 \times 10^{-3}$ e $K^{(4)} = 5 \times 10^{-2}$, foi utilizado um valor de $CFL = 0,02$ para que fosse mantida a estabilidade numérica.

Tabela 2 – Valores de entrada no código VAT para o tubo de choque com malha de resolução $\Delta x^* = 1/1024$.

| Símbolo | Valor | Descrição |
|-----------------|----------------------|-----------------------------------------------------------------------|
| n_L | 1 | Número de comprimentos característicos na direção x . |
| n_{unit} | 1024 | Número de volumes de controle ao longo do comprimento característico. |
| $P_1 = P_{ref}$ | 101325,00 | Pressão na câmara de baixa pressão (Pa). |
| P_4 | 710420,63 | Pressão na câmara de alta pressão (Pa). |
| $T_1 = T_{ref}$ | 300 | Temperatura na câmara de baixa pressão (K). |
| T_4 | 300 | Temperatura na câmara de alta pressão (K). |
| x_0 | 0,0 | Posição da origem no eixo x (m). |
| L | 0,1 | Comprimento característico (m). |
| Δt | $0,4 \times 10^{-8}$ | Passo temporal (s). |
| n_{max} | 71680 | Número de iterações até o final da simulação. |

6.1.1 Escolha das Constantes de Calibração

As constantes de calibração K_{div} , K_{pre} , K_{rho} e $K^{(4)}$ tem como função definir a intensidade da dissipação numérica, responsável pelo amortecimento de oscilações numéricas que surgem principalmente em descontinuidades, como a onda de choque. No entanto, quanto maior a dissipação numérica, maior o amortecimento da onda de choque, descaracterizando sua descontinuidade. Assim, as constantes foram escolhidas com base em dois parâmetros. O primeiro, a amplitude da oscilação numérica gerada no campo de pressão com relação a P_4 , e segundo, o ângulo de espalhamento da onda de choque, Eq. 6.2 e 6.3, respectivamente.

$$\delta_1 = \frac{\Delta P_1}{P_4} \times 100\% \quad (6.2)$$

$$\delta_2 = \left[1 - \frac{\arctan(\Delta P_2 / \Delta x)}{\pi/2} \right] \times 100\% \quad (6.3)$$

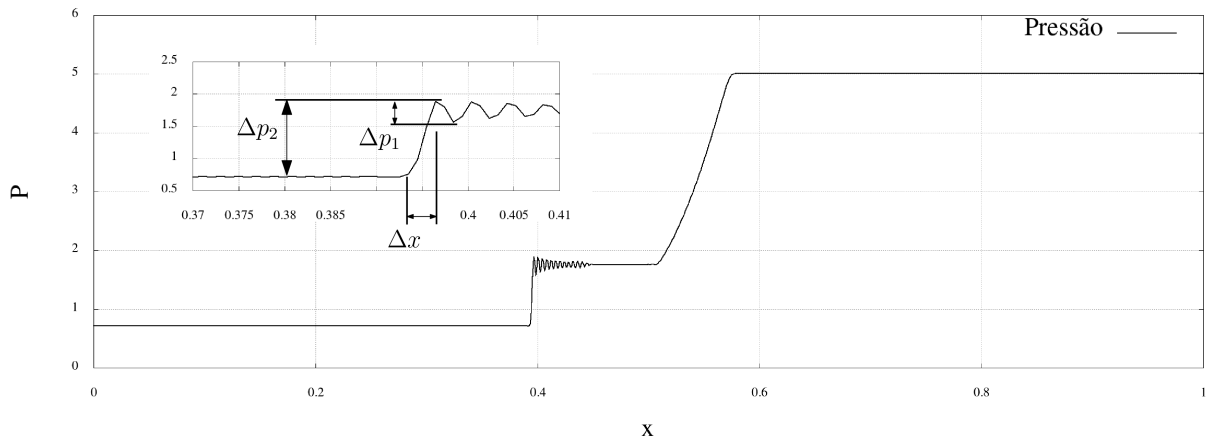


Figura 13 – Variáveis utilizadas como parâmetro na escolha das constantes de calibração.

As análises de convergência foram realizadas utilizando uma combinação específica de constantes para a simulação com o método de cálculo explícito do fluxo através da face de um volume de controle, denominado Caso A - Explícito. Para a simulação com o método de cálculo implícito do fluxo líquido de um volume de controle outras três combinações de constantes foram escolhidas, Caso A, B e C - Implícito. Os valores das constantes utilizadas nestes quatro casos de estudo se encontram compiladas na Tab. 3.

À princípio procurou-se valores para as constantes de calibração que mantivessem os erros ligados à oscilação numérica e ao espalhamento do choque inferiores a 2% para os dados de entrada presentes na Tab. 2. Estes parâmetros foram observados para um instante $t = 2,1 \times 10^{-5}$ s, antes da reflexão da onda de choque. Assim, para o método explícito foram escolhidas $K_{div}^{(2)} = 2,25 \times 10^{-2}$, $K_{pre}^{(2)} = 1,75 \times 10^{-2}$, $K_{rho}^{(2)} = 5,0 \times 10^{-3}$ e $K^{(4)} = 5,0 \times 10^{-2}$, resultando em um erro de 1,22% para o δ_1 , e de 1,78% para o δ_2 (Caso A - Explícito). Já para o método implícito, foram escolhidas $K_{div}^{(2)} = 1,08 \times 10^{-2}$,

$K_{pre}^{(2)} = 9,40 \times 10^{-3}$, $K_{rho}^{(2)} = 5,0 \times 10^{-3}$ e $K^{(4)} = 5,0 \times 10^{-2}$, resultando em um erro de 0,94% para o δ_1 , e de 1,22% para o δ_2 (Caso A - Implícito).

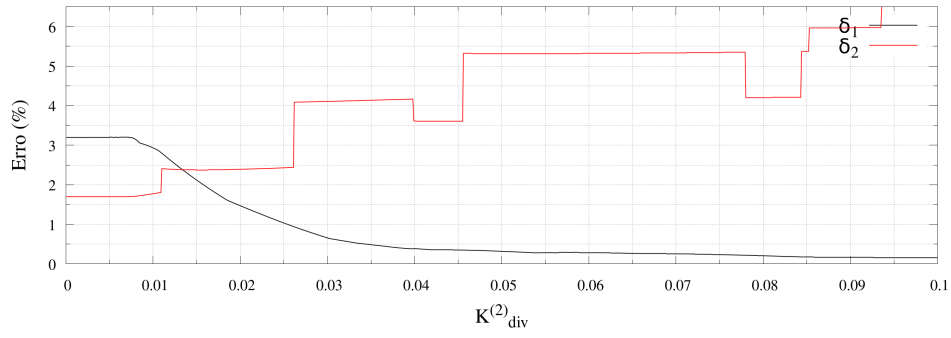
Posteriormente, outros dois cenários foram utilizados para a análise de convergência do método implícito. Para o primeiro caso, procurou-se constantes de calibração que resultassem no menor erro de oscilação numérica para a resolução de $\Delta x^* = 1/1024$ (Caso B - Implícito). Já no segundo caso, procurou-se ajustar os valores das constantes para cada resolução de Δx^* individualmente, observando apenas o erro relacionado à oscilação numérica igual à 0,5% (Caso C - Implícito).

Para encontrar estes valores, foram feitas simulações com os dados de entrada presentes na Tab. 2 variando os valores das constantes K uma a uma, mantendo todas as outras constantes de calibração fixas conforme os valores de base $K_{div}^{(2)} = 5,0 \times 10^{-4}$, $K_{pre}^{(2)} = 5,0 \times 10^{-3}$, $K_{rho}^{(2)} = 5,0 \times 10^{-3}$ e $K^{(4)} = 5,0 \times 10^{-2}$. Com isso, os parâmetros de erro foram novamente observados para o instante $t = 2,1 \times 10^{-5}$ s, antes da reflexão da onda de choque, e obteve-se as curvas de erro para o método implícito na Fig. 15. O mesmo foi feito com as resoluções de Δx^* igual a 1/512, 1/2048 e 1/4096, resultando nas Figuras 14, 16 e 17, respectivamente.

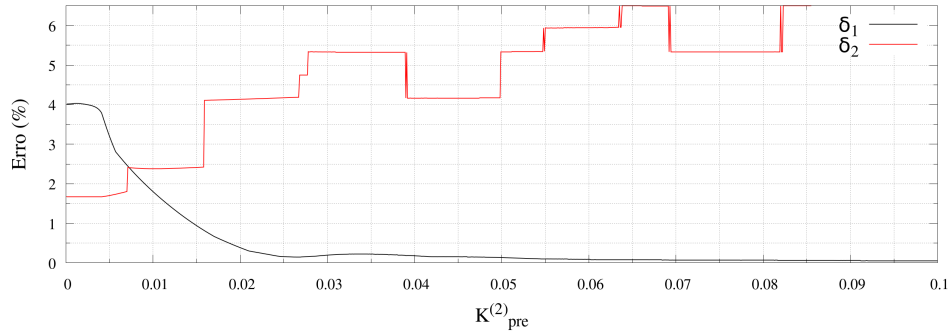
Como não foi observada uma influência significativa das constantes de calibração $K^{(4)}$ nos parâmetros analisados, esta foi mantida igual ao valor de base para os casos A - Explícito e Implícito. Para o Caso C - Implícito a constante foi reduzida na mesma proporção que as outras constantes também foram.

Tabela 3 – Constantes de calibração escolhidas para os quatro casos de análise de convergência.

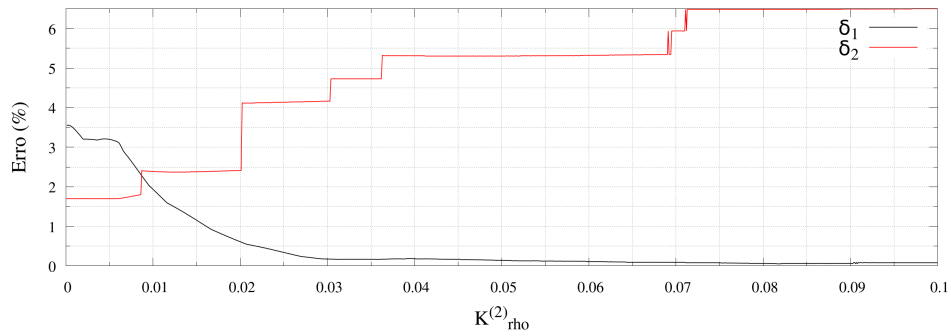
| Caso | Δx^* | $K_{div}^{(2)}$ | $K_{pre}^{(2)}$ | $K_{rho}^{(2)}$ | $K^{(4)}$ |
|---------------|--------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|
| A - Explícito | - | $2,25 \times 10^{-2}$ | $1,75 \times 10^{-2}$ | $5,0 \times 10^{-3}$ | $5,0 \times 10^{-2}$ |
| A - Implícito | - | $1,08 \times 10^{-2}$ | $9,40 \times 10^{-3}$ | $5,0 \times 10^{-3}$ | $5,0 \times 10^{-2}$ |
| B - Implícito | - | $4,00 \times 10^{-2}$ | $2,00 \times 10^{-2}$ | $2,5 \times 10^{-3}$ | $6,0 \times 10^{-1}$ |
| C - Implícito | 1/512 | $3,44 \times 10^{-2}$ | $1,87 \times 10^{-2}$ | $2,18 \times 10^{-2}$ | $2,0 \times 10^{-1}$ |
| | 1/1024 | $2,20 \times 10^{-2}$ | $1,21 \times 10^{-2}$ | $1,48 \times 10^{-2}$ | $1,3 \times 10^{-1}$ |
| | 1/2048 | $1,41 \times 10^{-2}$ | $8,33 \times 10^{-3}$ | $1,04 \times 10^{-2}$ | $9,0 \times 10^{-2}$ |
| | 1/4096 | $1,01 \times 10^{-2}$ | $5,75 \times 10^{-3}$ | $7,50 \times 10^{-3}$ | $6,4 \times 10^{-2}$ |
| | 1/8192 | $1,01 \times 10^{-2}$ | $5,75 \times 10^{-3}$ | $7,50 \times 10^{-3}$ | $6,4 \times 10^{-2}$ |



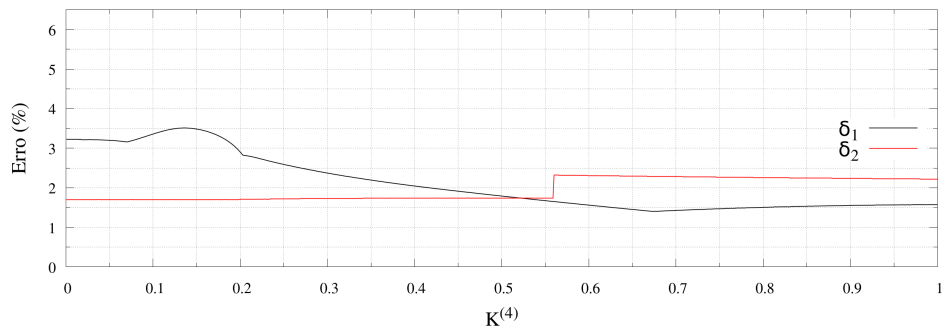
(a)



(b)

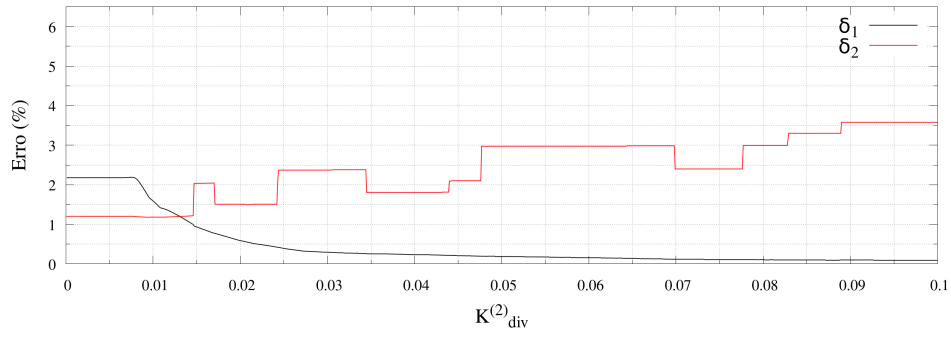


(c)

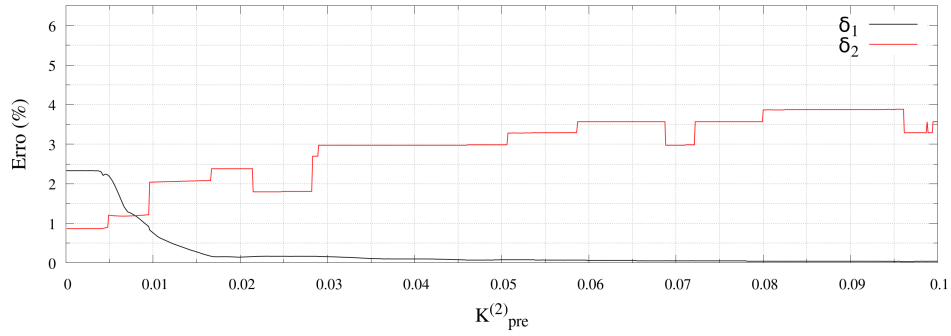


(d)

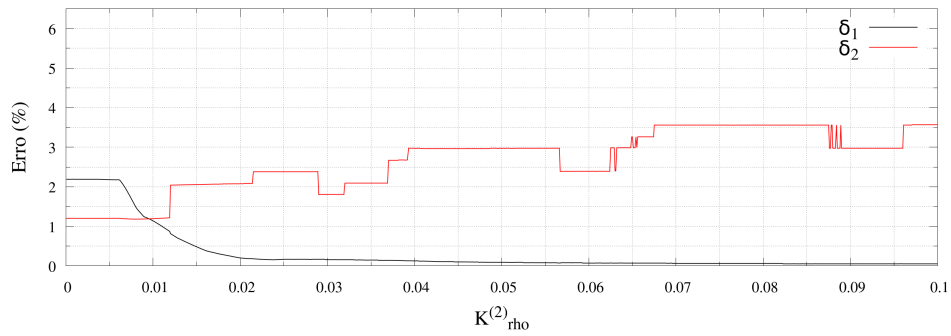
Figura 14 – Erros relacionados à oscilação numérica (δ_1) e ao sobre amortecimento (δ_2) com a variação das constantes de calibração para a resolução de $\Delta x^* = 1/512$ utilizando o método implícito de cálculo do fluxo líquido.



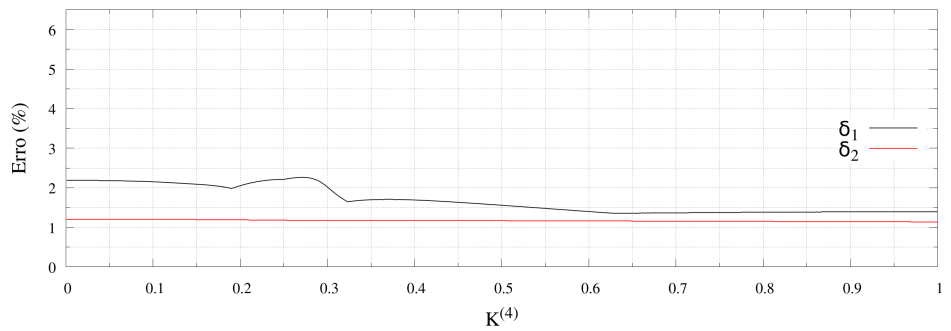
(a)



(b)

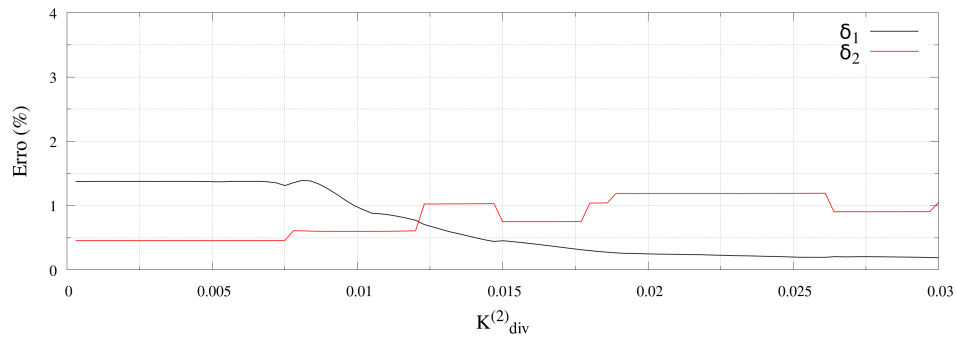


(c)

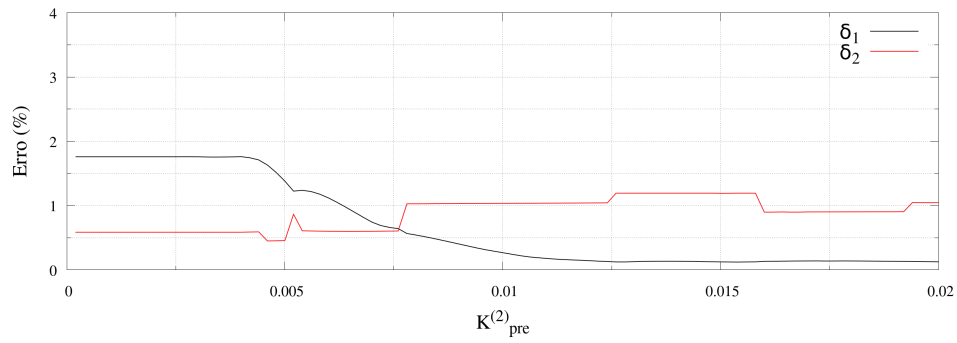


(d)

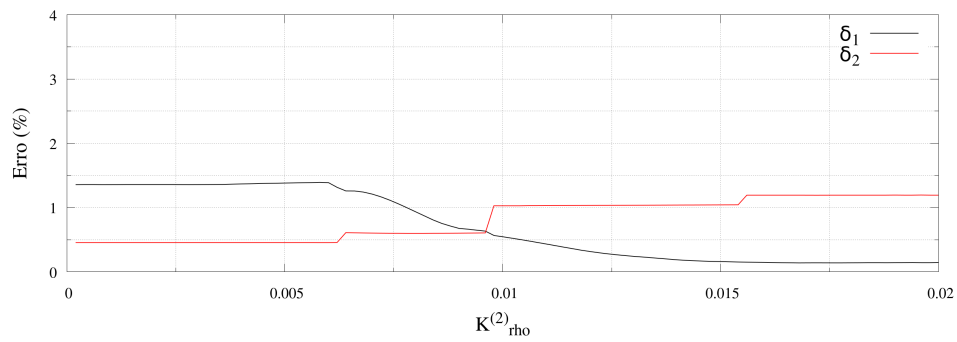
Figura 15 – Erros relacionados à oscilação numérica (δ_1) e ao sobre amortecimento (δ_2) com a variação das constantes de calibração para a resolução de $\Delta x^* = 1/1024$ utilizando o método implícito de cálculo do fluxo líquido.



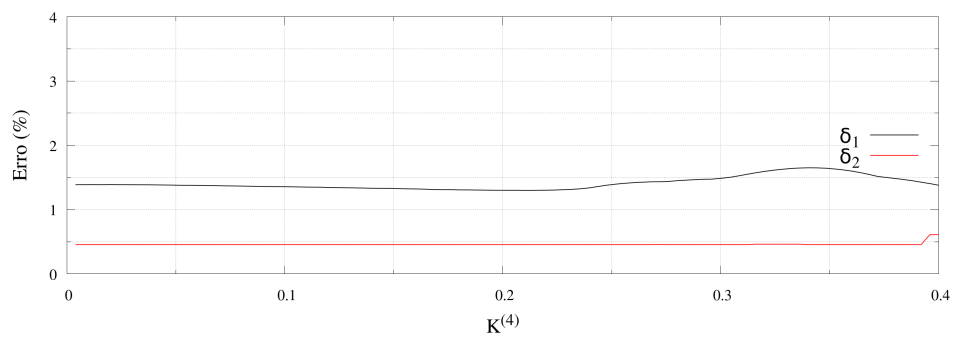
(a)



(b)

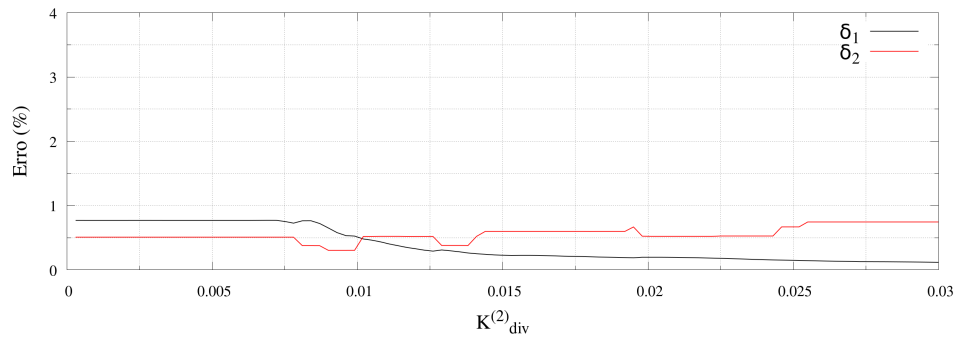


(c)

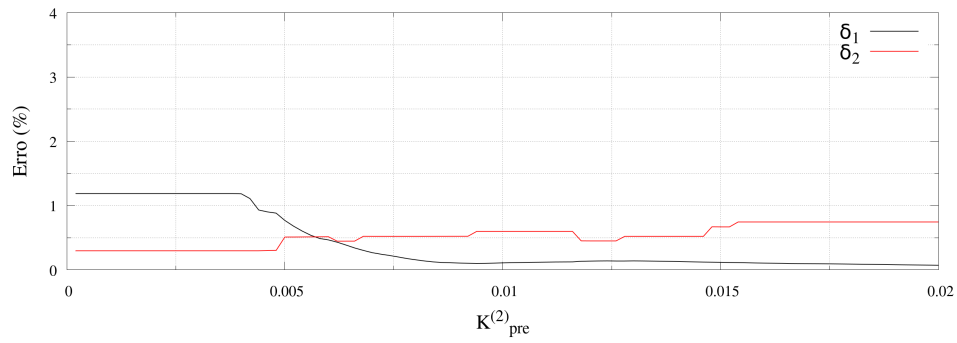


(d)

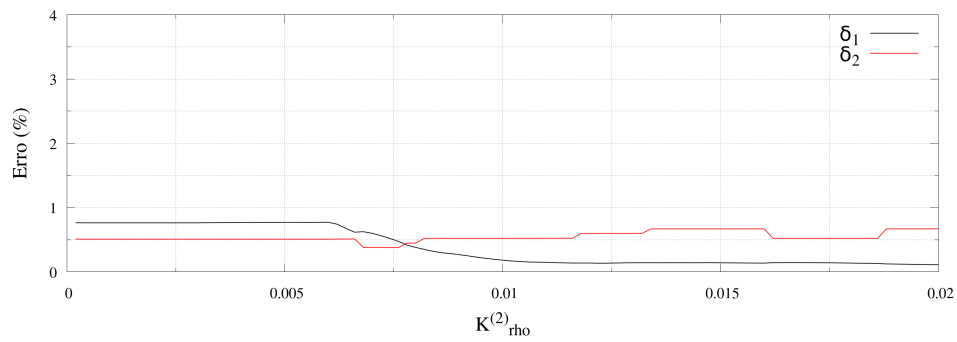
Figura 16 – Erros relacionados à oscilação numérica (δ_1) e ao sobre amortecimento (δ_2) com a variação das constantes de calibração para a resolução de $\Delta x^* = 1/2048$ utilizando o método implícito de cálculo do fluxo líquido.



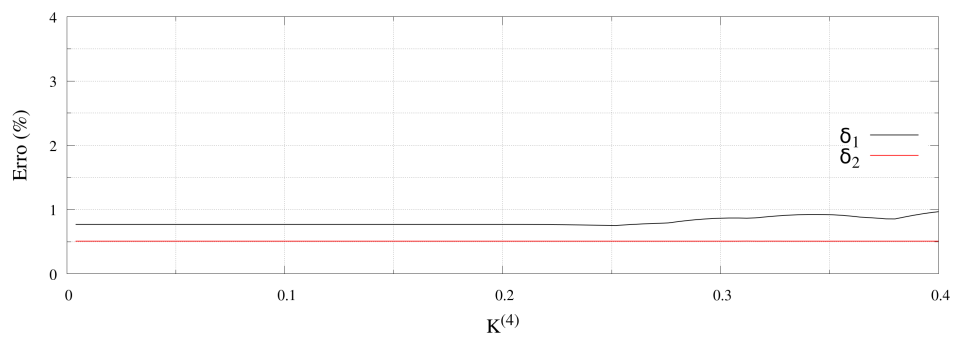
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 17 – Erros relacionados à oscilação numérica (δ_1) e ao sobre amortecimento (δ_2) com a variação das constantes de calibração para a resolução de $\Delta x^* = 1/4096$ utilizando o método implícito de cálculo do fluxo líquido.

6.2 Custo computacional e Soluções Encontradas

Como foi mostrado na Seção 4.4, o método implícito exige a solução de um sistema de matrizes. Este processo acarreta em um aumento substancial no número de operações realizadas a cada passo no tempo dada a somatória que deve ser computada na Equação 4.40. Para contornar este aumento significativo do custo computacional, foi implementado o método *multistep* para a marcha temporal (Seção 4.8.2) com objetivo de reduzir o tempo de execução do código. Este método foi comparado ao de Runge-Kutta com relação ao tempo de execução do código e resposta fornecida.

Para as quatro combinações possíveis entre métodos explícito e implícito para cálculo de fluxos, e métodos de Runge-Kutta e *multistep* para a marcha temporal, foram rodadas simulações com malhas de diferentes níveis de refinamento até que atingissem o mesmo instante de evolução do escoamento. O tempo de execução das simulações podem ser observadas na Figura 18.

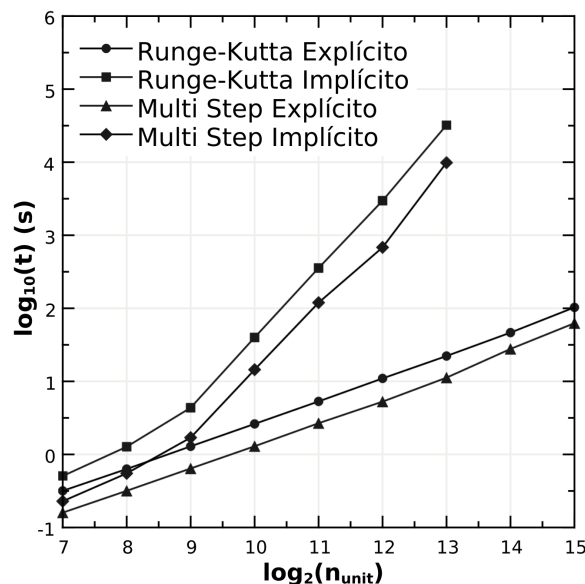


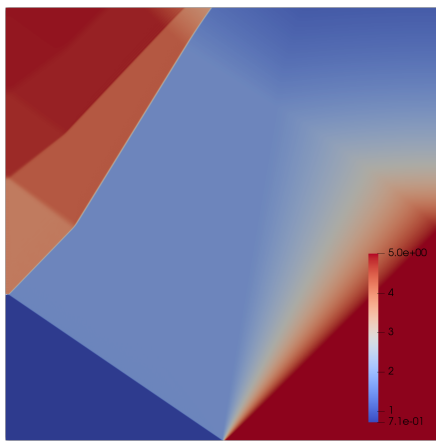
Figura 18 – Custo computacional para as diferentes combinações dos métodos de discretização temporal (Runge-Kutta e *Multistep*) e discretização espacial (Explícito e Implícito).

Enquanto que para o método explícito o tempo de execução é dobrado cada vez que o domínio espacial é refinado por um fator de 2, para o método implícito o tempo de execução é multiplicado por um fator de 10 para o mesmo fator de refinamento de malha. Também do gráfico da Fig. 18 conclui-se a importância da implementação do método *multistep*, uma vez que tanto para o método implícito quanto o explícito, o método em questão foi capaz de reduzir o tempo de execução do código pela metade. Porém um fator importante com relação à utilização do *multistep* é a memória disponível para o armazenamento das matrizes manipuladas pelo código. Como visto na Seção 4.8, ao contrário do método Runge-Kutta, o *multistep* não possui passos intermediários, daí sua

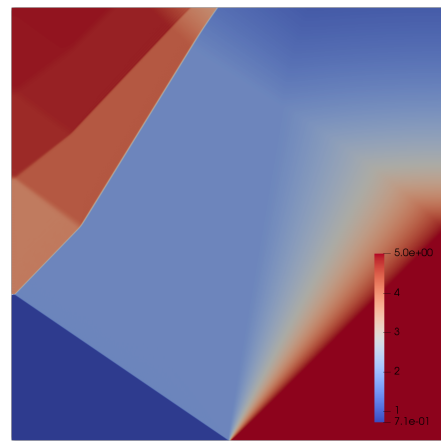
rapidez. No entanto para o uso deste é necessário o armazenamento de matrizes adicionais $\bar{\mathbf{U}}_i^{n-j}$ e $\Delta\bar{\mathbf{U}}_i^{n-j}$, o que requer quase três vezes mais armazenamento em comparação ao método de Runge-Kutta.

Confirmada a vantagem do método *multistep* sobre o Runge-Kutta com relação ao custo computacional, foram confrontadas as respostas fornecidas por ambos os métodos para o intervalo de tempo em que se pretende fazer a análise de convergência (Fig. 19). Ainda foram comparadas as respostas para o campo de pressão para as quatro combinações de métodos explícito/implícito e Runge-Kutta/*multistep* na Figura 20. Ambas as figuras foram geradas a partir dos dados de entrada da Tabela 2 com constantes de calibração iguais aos do Caso A - Explícito na Tabela 3.

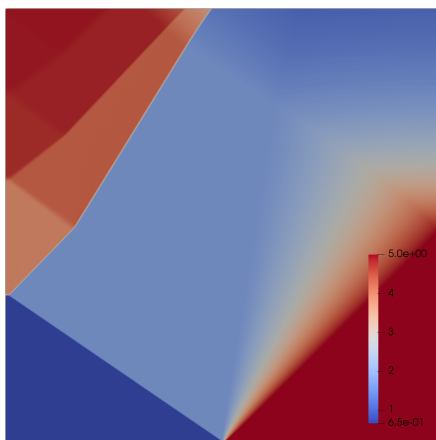
Nas Figuras 20a e 20b é ainda mais evidente que os dois métodos têm respostas concordantes. Outro aspecto interessante é que para as mesmas constantes de calibração o método implícito gera respostas mais precisas se comparado ao método explícito (Fig. 20c e 20d).



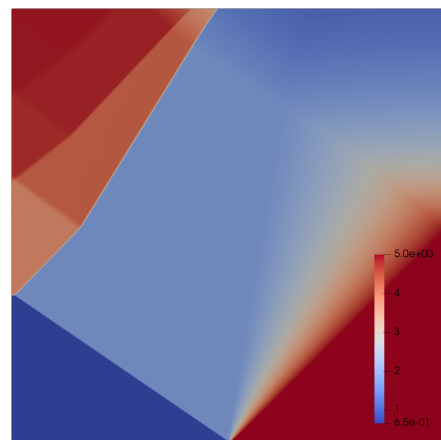
(a) Runge-Kutta Explícito



(b) *Multistep* Explícito

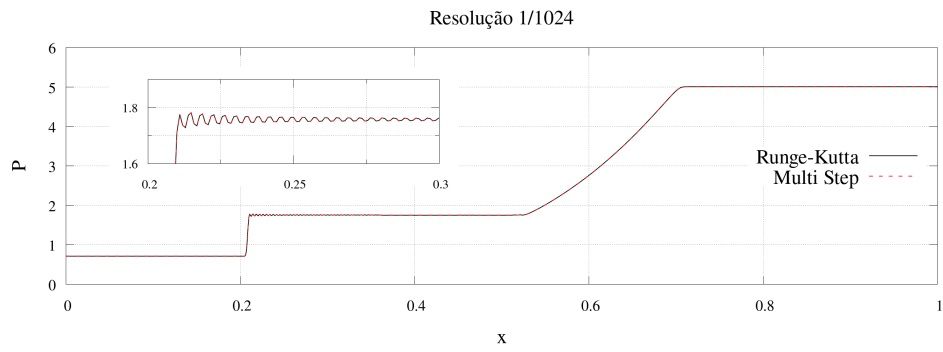


(c) Runge-Kutta Implícito

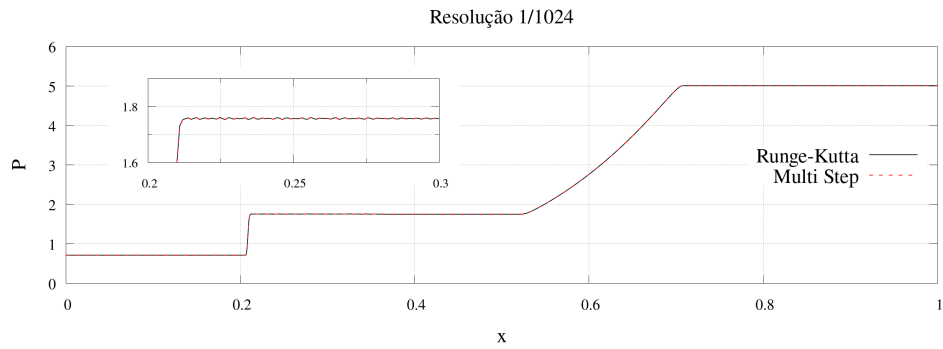


(d) *Multistep* Implícito

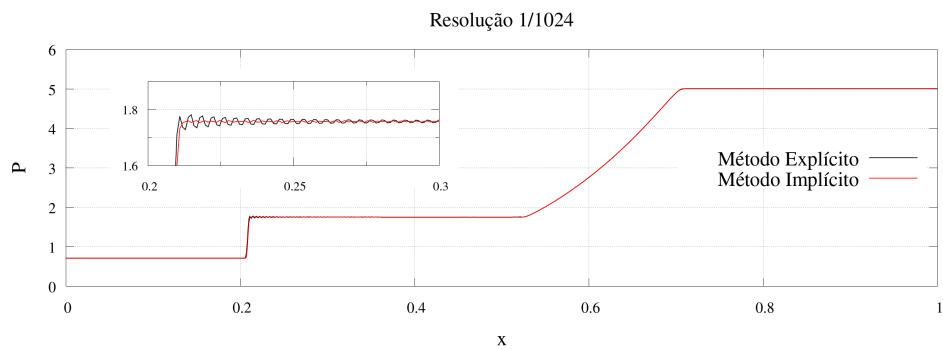
Figura 19 – Visualização do campo de pressão adimensionalizado obtido através dos métodos de Runge-Kutta (esq.) e *Multistep* (dir.) para a marcha temporal.



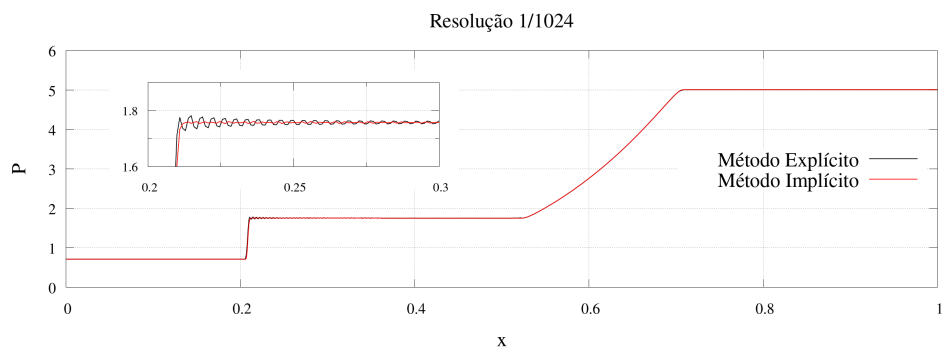
(a) Cálculo dos Fluxos Explícito



(b) Cálculo dos Fluxos Implícito



(c) Marcha temporal através do Runge-Kutta



(d) Marcha temporal através do *Multistep*

Figura 20 – Visualização do campo de pressão adimensionalizado no instante $t^* = 0,2$ obtido através dos métodos de discretização temporal (Runge-Kutta e *Multistep*) e discretização espacial (Explícito e Implícito).

6.3 Análise de Convergência de Malha para o Tubo de Choque

A análise de convergência é realizada no domínio do espaço-tempo em 6 níveis de refinamento para o método explícito, sendo eles $32h$, $16h$, $8h$, $4h$, $2h$ e h ; e em 5 níveis de refinamento para o método implícito, sendo eles $64h$, $32h$, $16h$, $8h$ e $4h$, em que $h = 1/32768 \times L$. A análise é feita em menos níveis de refinamento para o método implícito dado o custo computacional bem mais elevado, como mostrado na Seção 6.2.

A respeito do domínio temporal, a simulação numérica é executada até o instante $t = 2,8672 \times 10^{-4}$ s, resultando em 35.840 iterações para a malha mais grosseira e 2.293.760 de iterações para a malha mais refinada. Com isso, mesmo a malha mais grosseira atinge um valor de 18.350.080 volumes finitos no domínio do espaço tempo. Devido à limitações de recurso computacional para lidar com a massa de dados, foi calculado um passo temporal $\Delta t_{conv} = 70 \times \Delta t$ de maneira a compatibilizar o passo temporal com o passo no espaço reduzindo-o à mesma ordem de grandeza. Dessa forma, a malha mais grosseira é reduzida a $2,6 \times 10^5$ volumes finitos e a mais refinada se reduz a $1,1 \times 10^9$ volumes, utilizando o mesmo fator de refinamento de 2 para tempo e espaço.

As coordenadas dos volumes de fronteira foram colocadas nas posições $x = 1/128 \times L$ e $x = 127/128 \times L$, sendo o volume de fronteira posicionado à esquerda da coordenada para o ponto com componente normal positiva; e à direita da coordenada, para aquele que tivesse componente normal negativa, conforme o desenho esquemático da Fig. 12. Desta forma, todo o domínio do escoamento dentro do tubo de choque se mantém com o comprimento e a posição das fronteiras invariantes, independente do refinamento de malha.

Nas Figuras 21 a 41, são mostrados os níveis de refinamento utilizados nas análises de convergência através da variável de visualização $\beta_T = |\nabla T|^{1/10}$, em que a distância em x é exibida no eixo horizontal e o tempo, no eixo vertical.

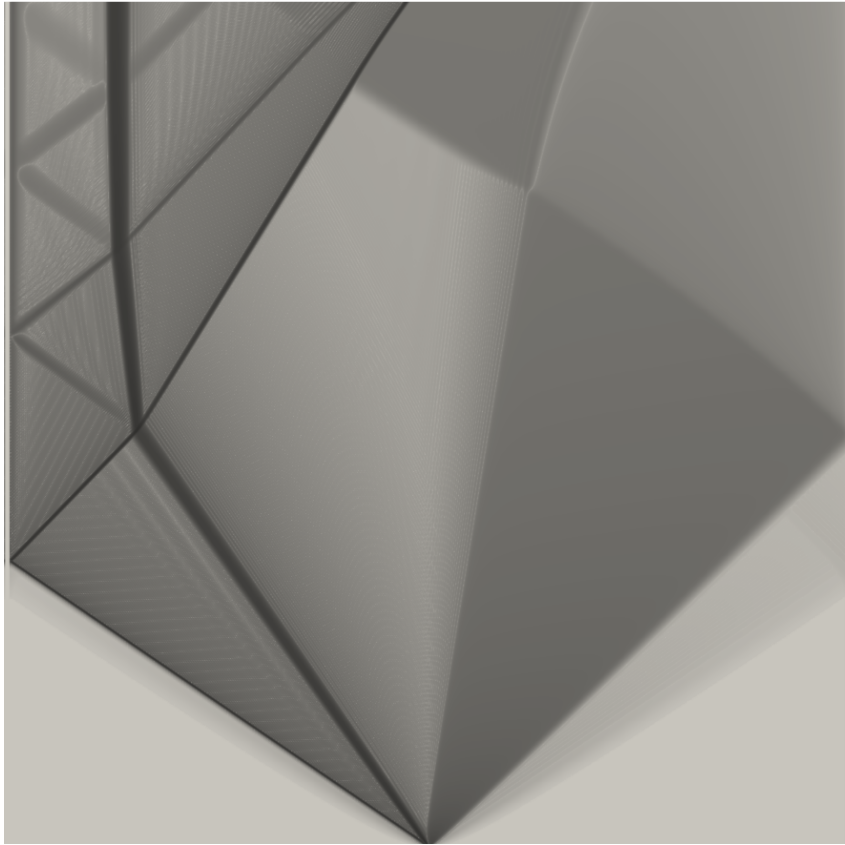


Figura 21 – Caso A - Explícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.

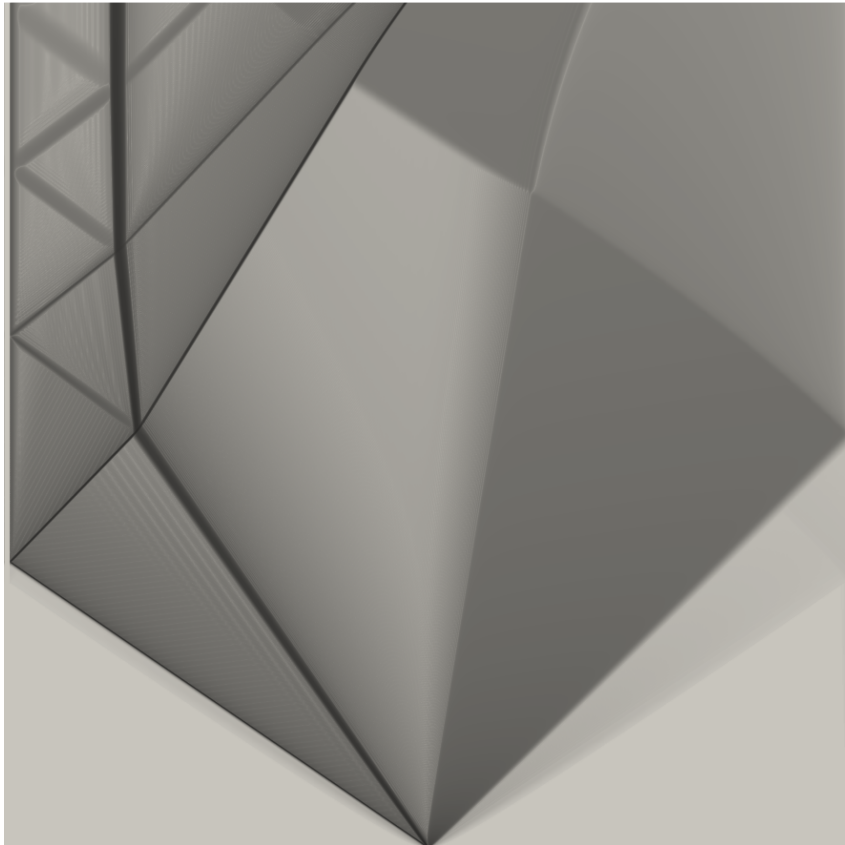


Figura 22 – Caso A - Explícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.

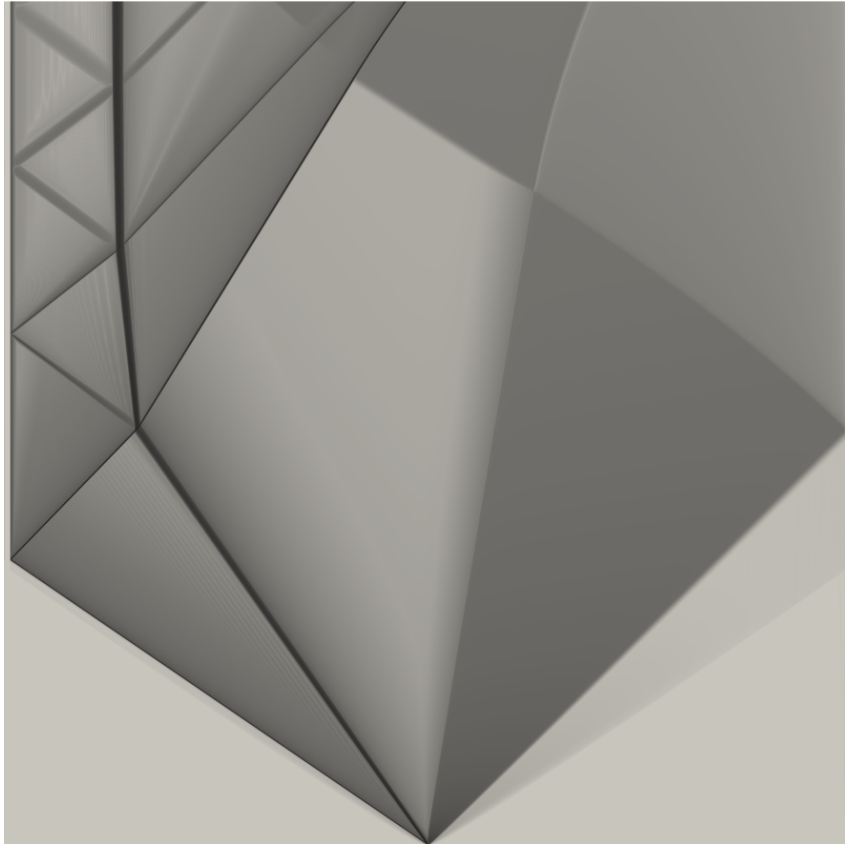


Figura 23 – Caso A - Explícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.

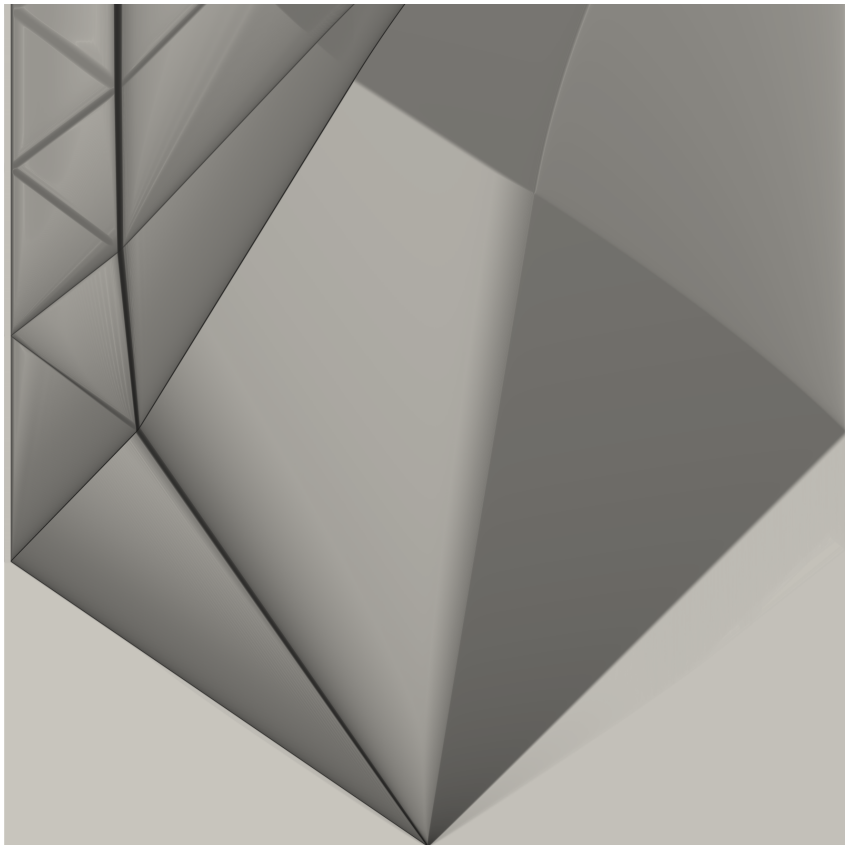


Figura 24 – Caso A - Explícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 4h = 1/8192$.

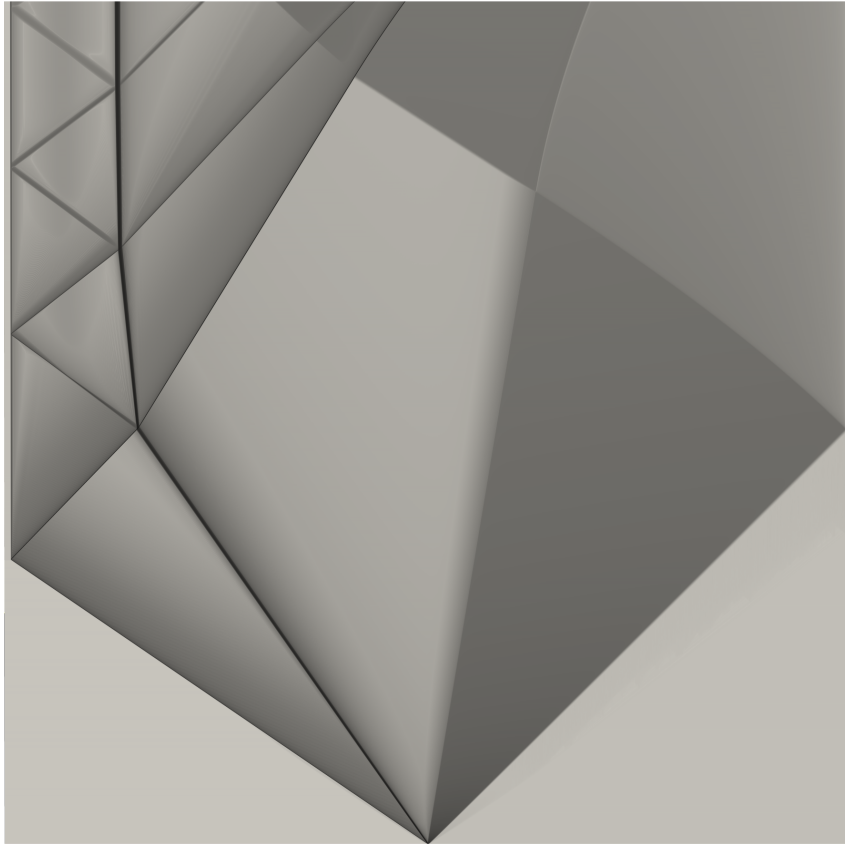


Figura 25 – Caso A - Explícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 2h = 1/16384$.

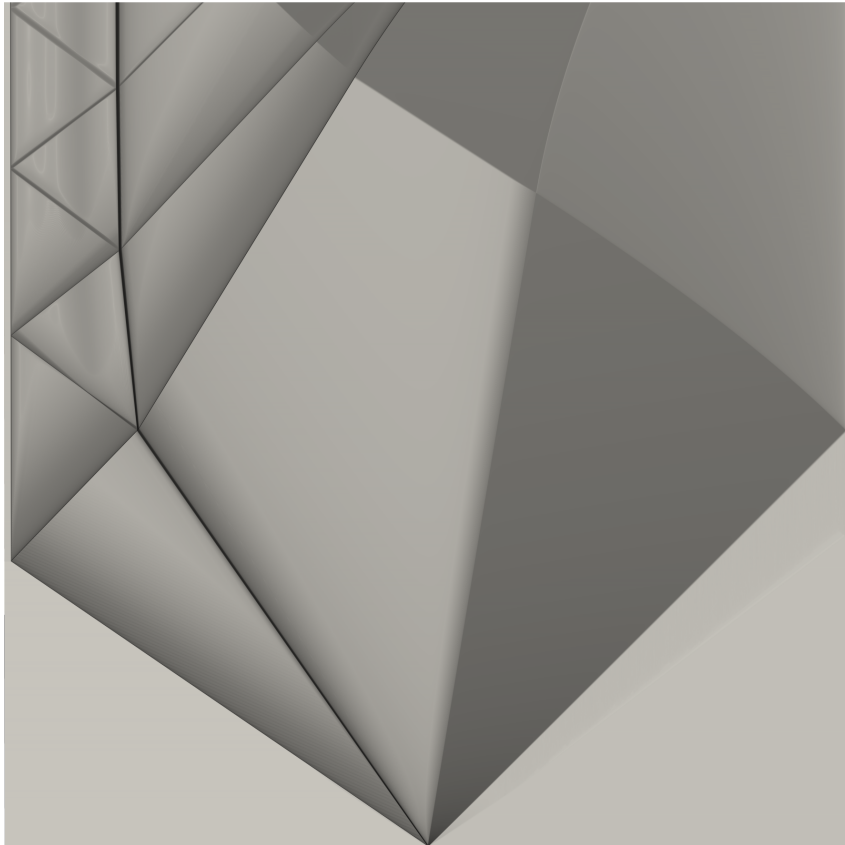


Figura 26 – Caso A - Explícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = h = 1/32768$.

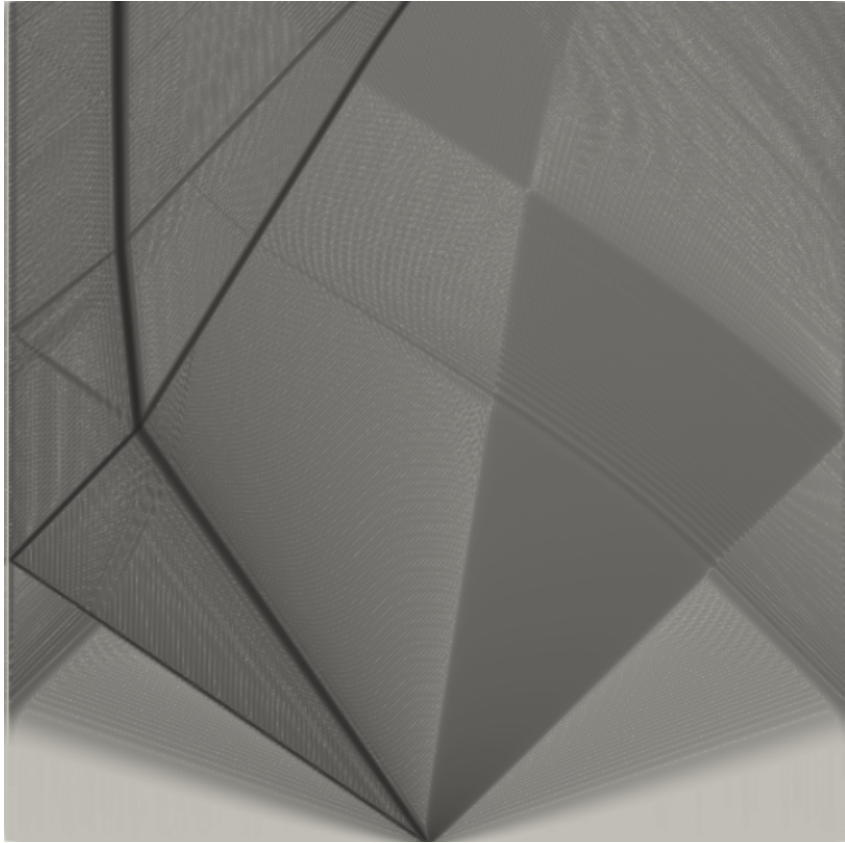


Figura 27 – Caso A - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 64h = 1/512$.

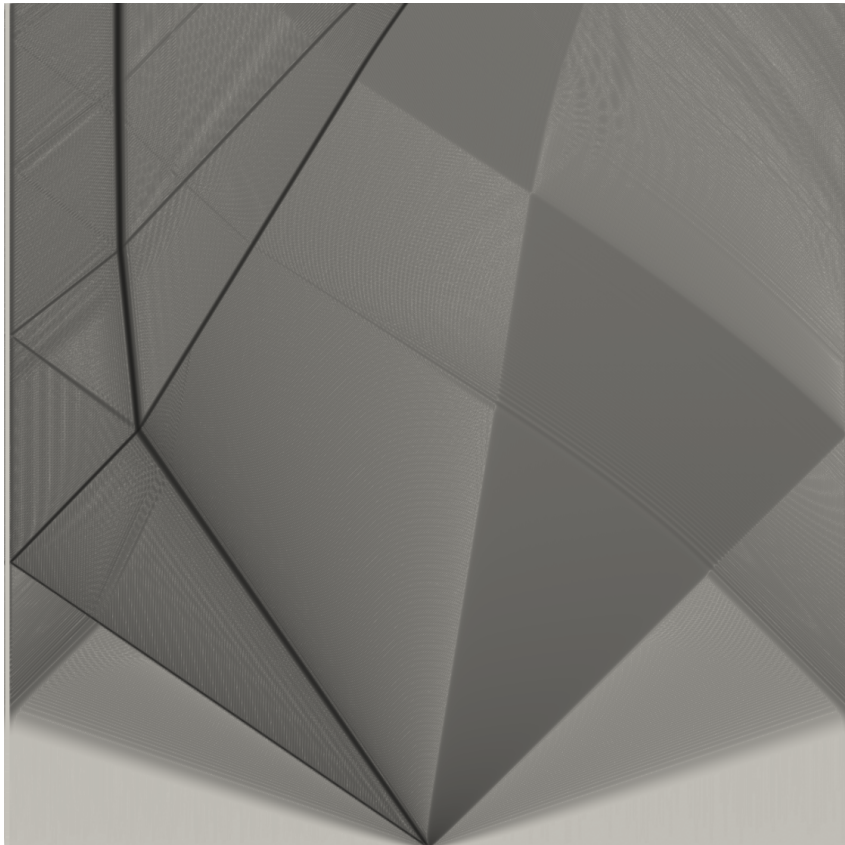


Figura 28 – Caso A - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.

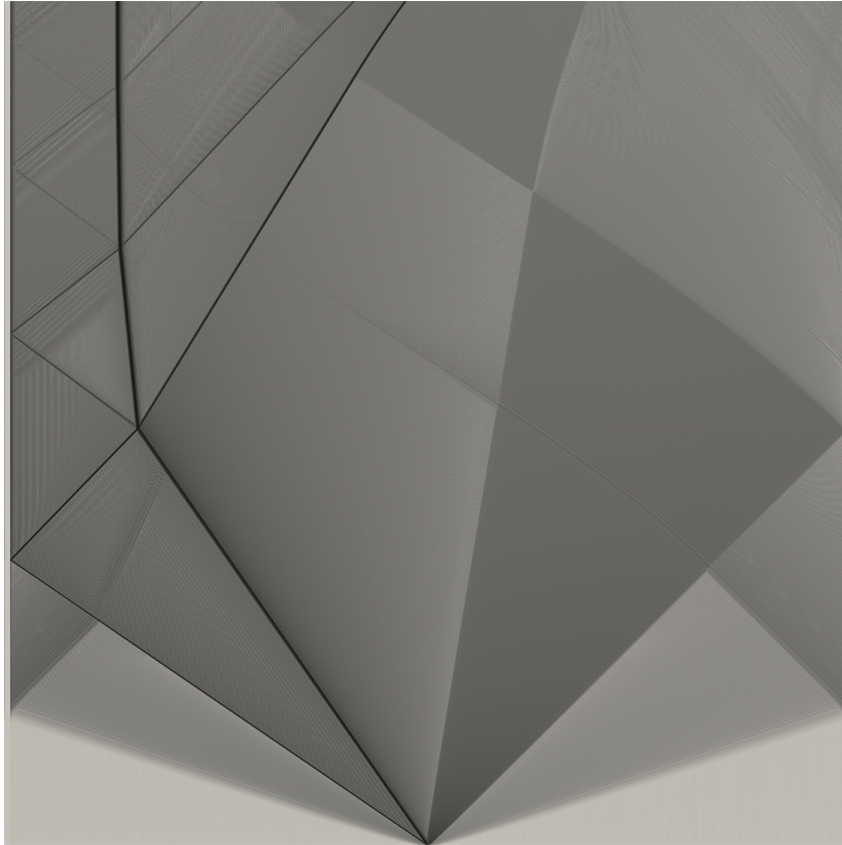


Figura 29 – Caso A - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.

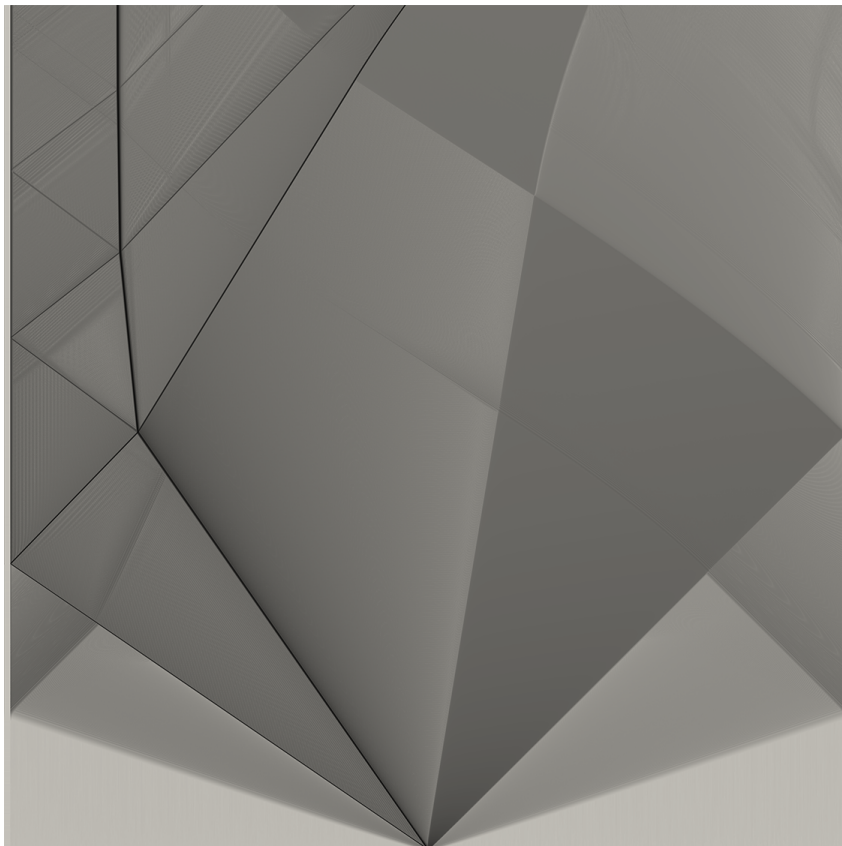


Figura 30 – Caso A - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.

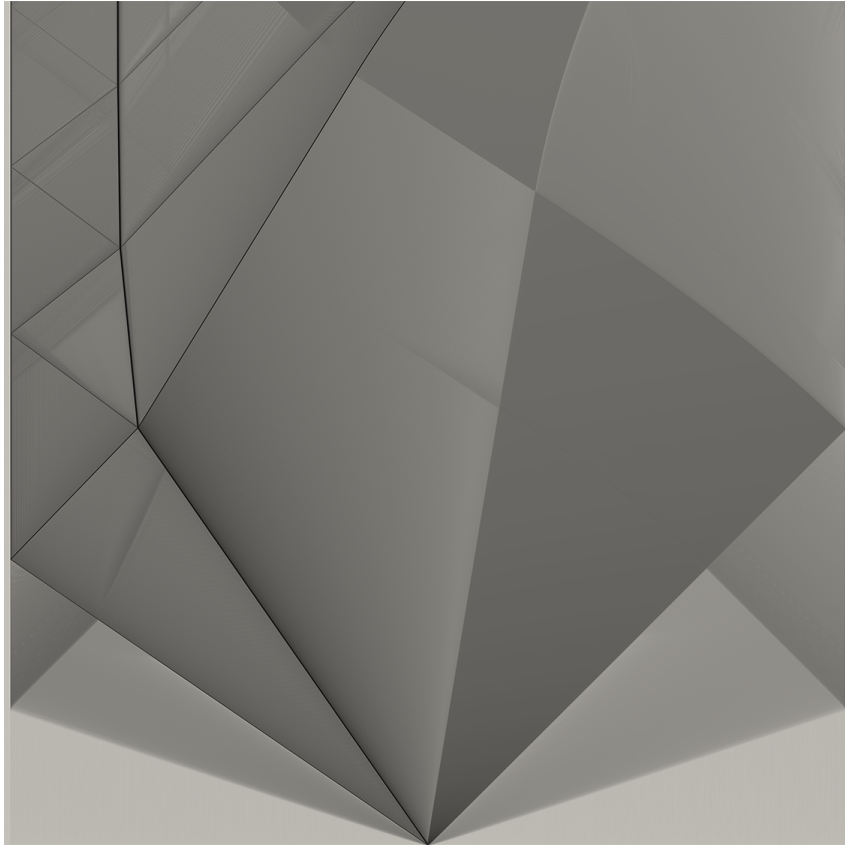


Figura 31 – Caso A - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 4h = 1/8192$.

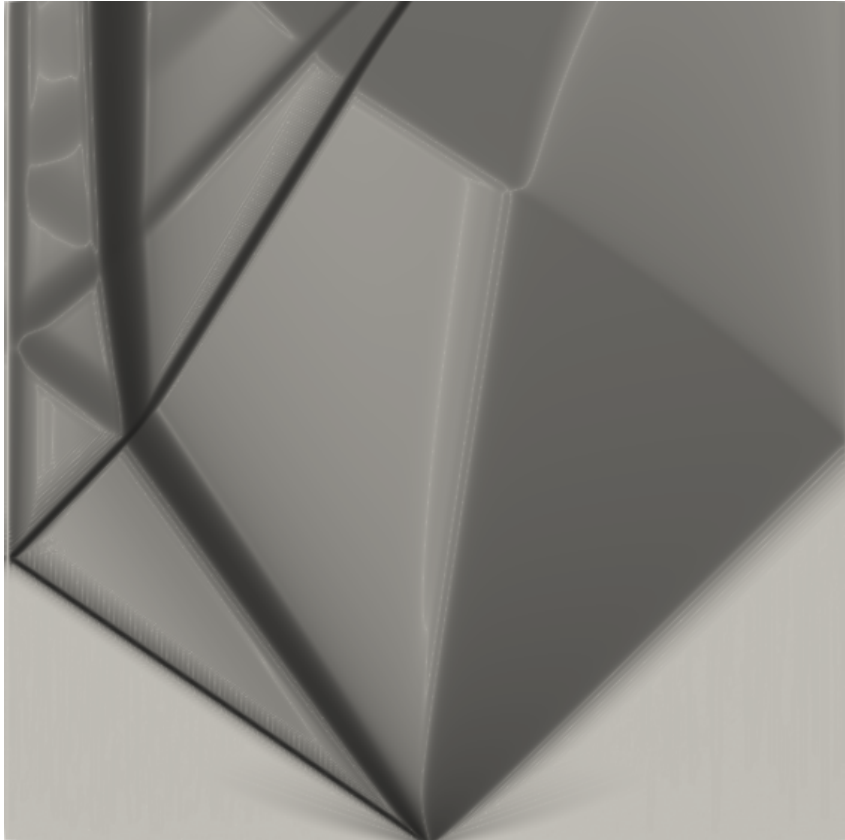


Figura 32 – Caso B - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 64h = 1/512$.

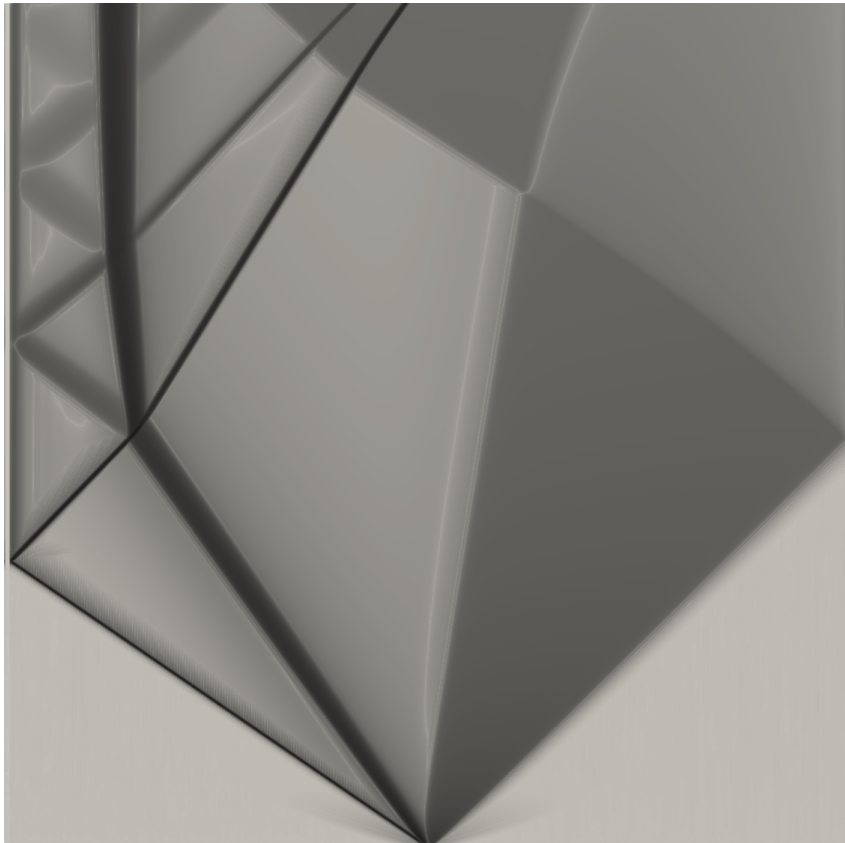


Figura 33 – Caso B - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.

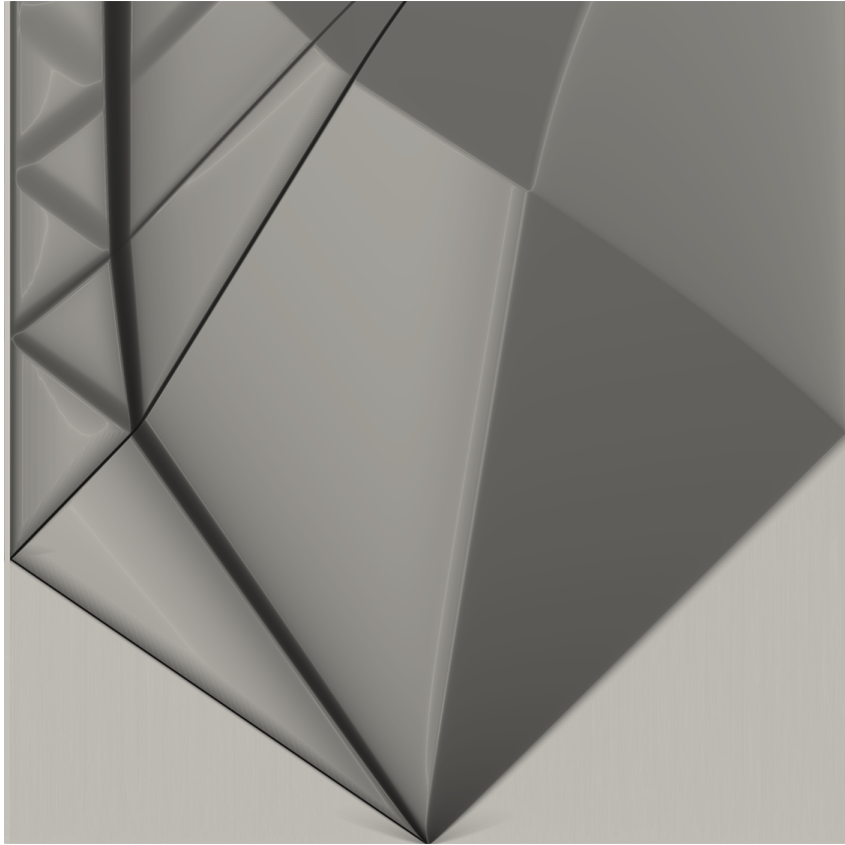


Figura 34 – Caso B - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.

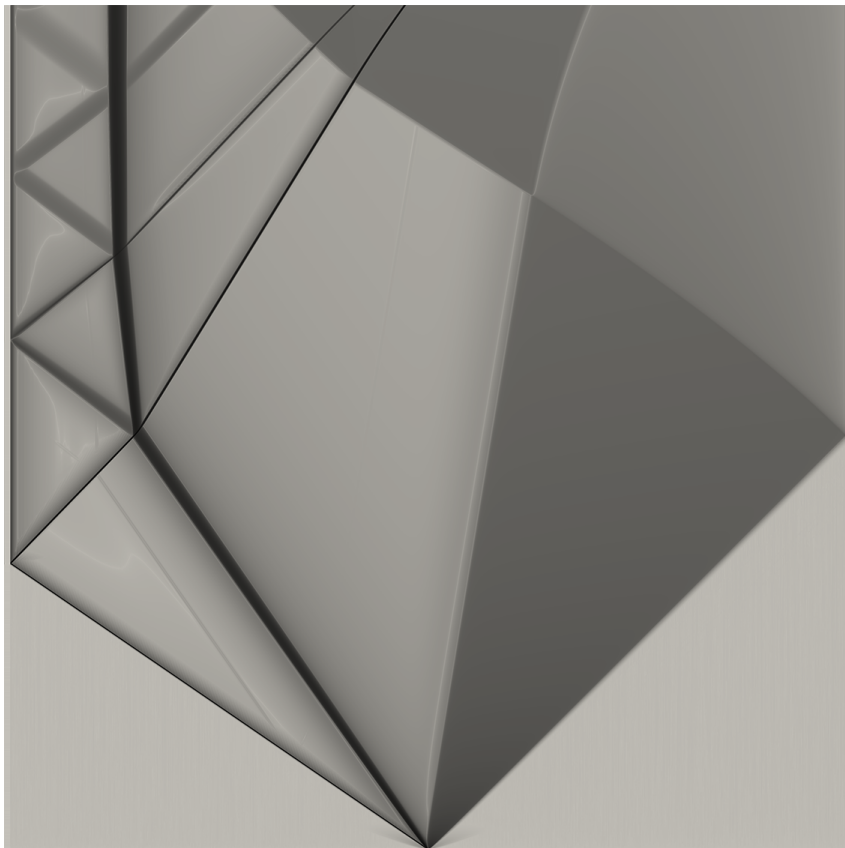


Figura 35 – Caso B - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.

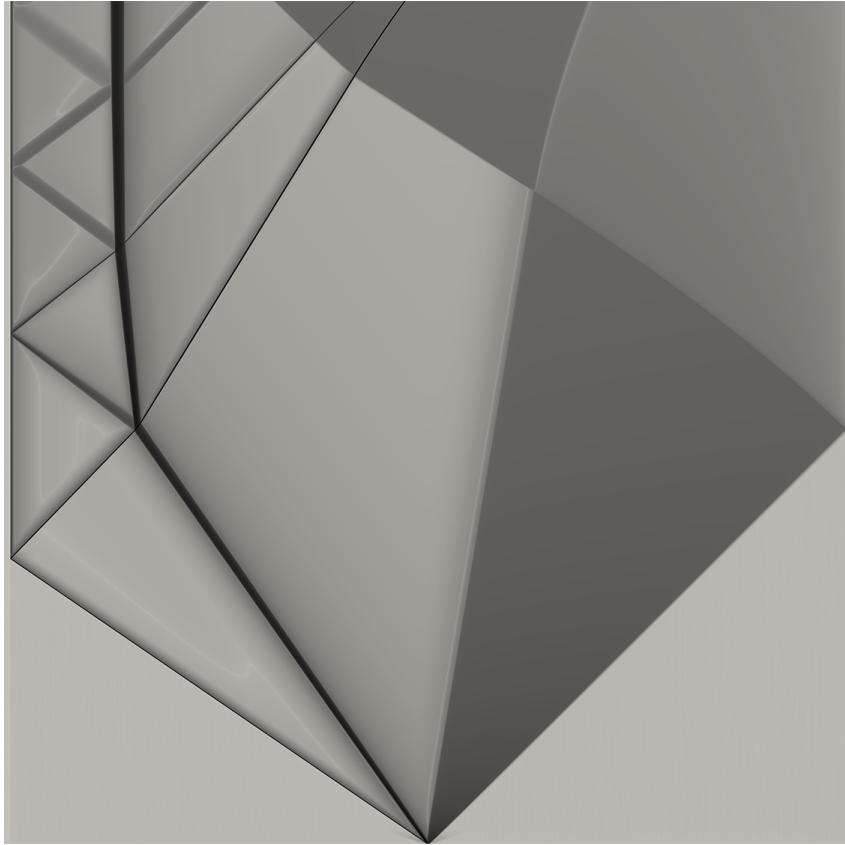


Figura 36 – Caso B - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 4h = 1/8192$.

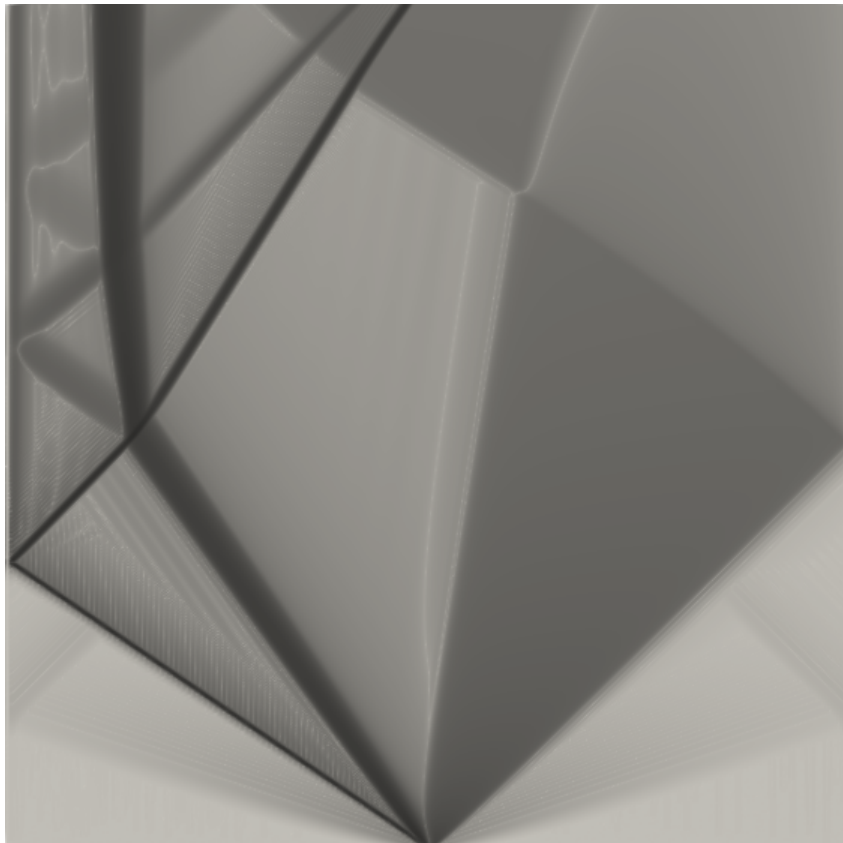


Figura 37 – Caso C - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 64h = 1/512$.

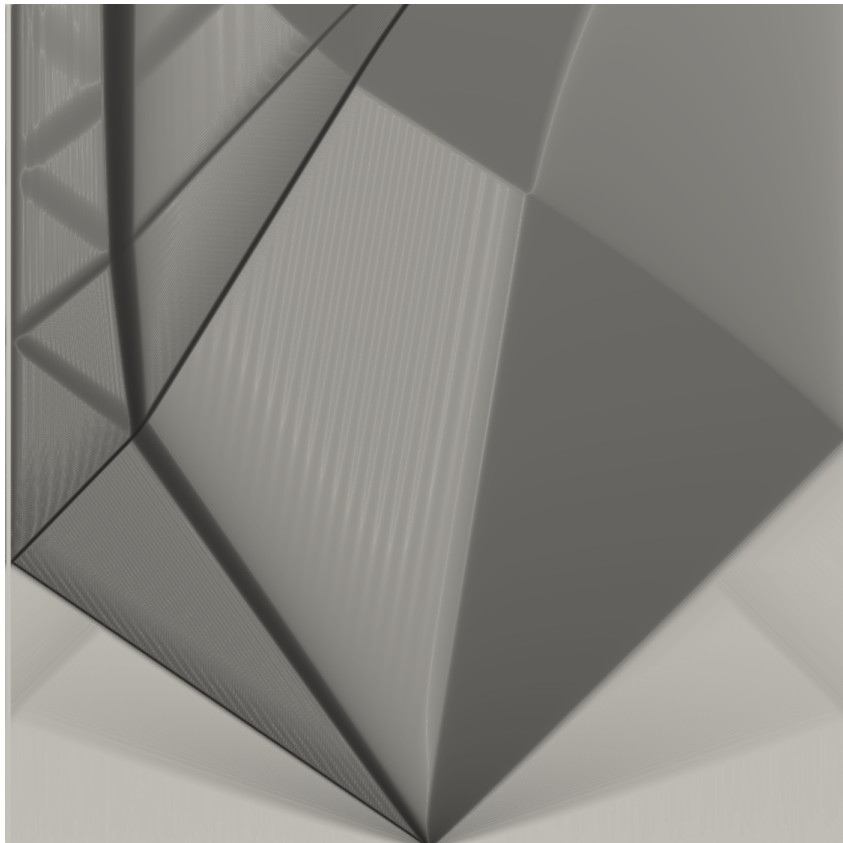


Figura 38 – Caso C - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.

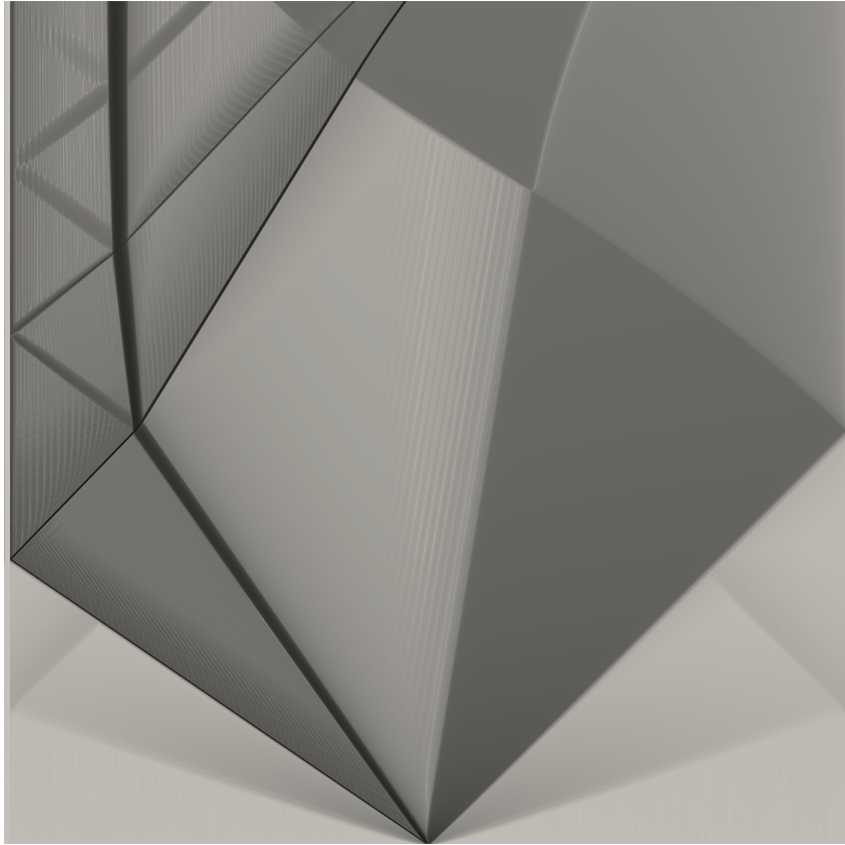


Figura 39 – Caso C - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.

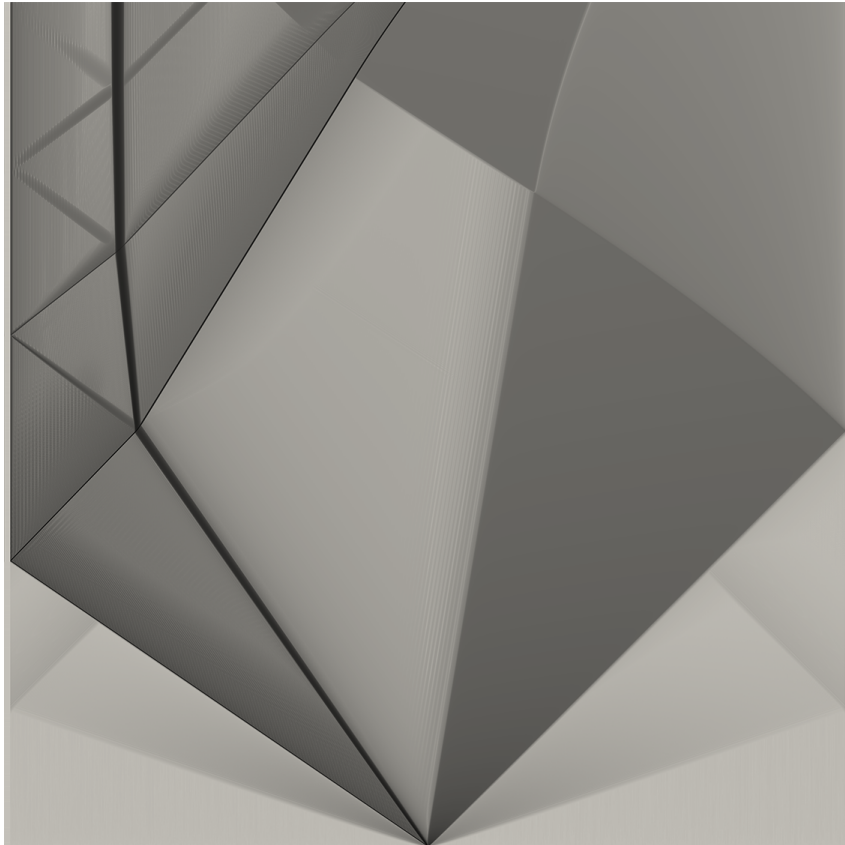


Figura 40 – Caso C - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.

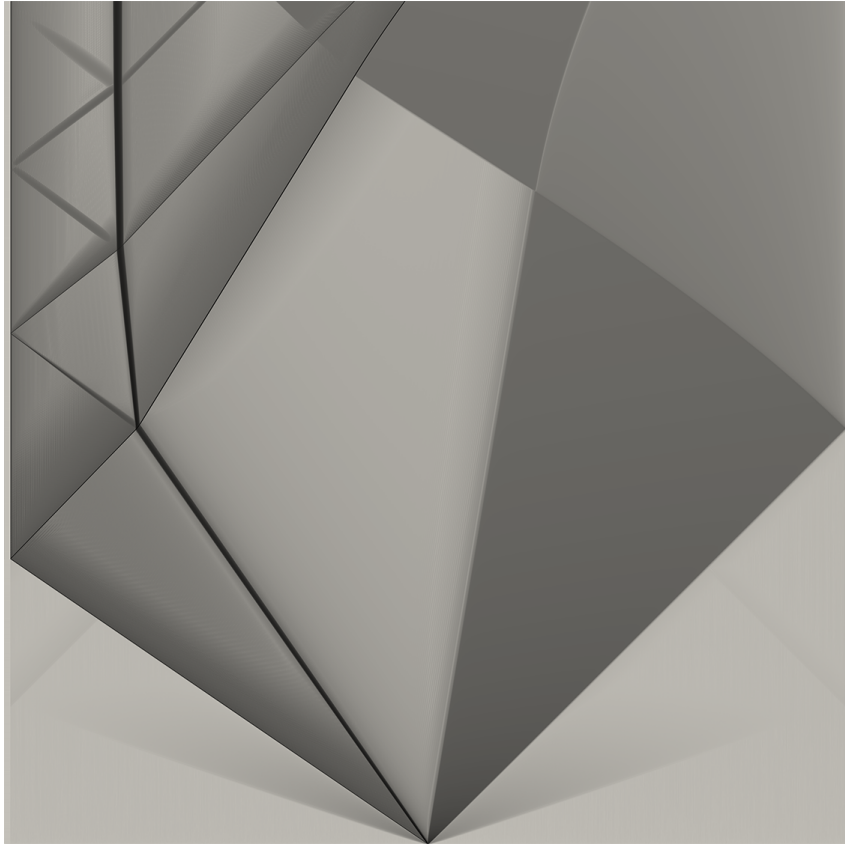
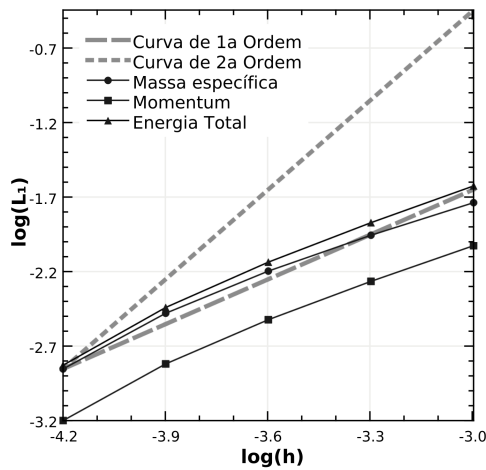


Figura 41 – Caso C - Implícito: Visualização do escoamento em um tubo de choque para o nível de refinamento de malha $\Delta x^* = 4h = 1/8192$.

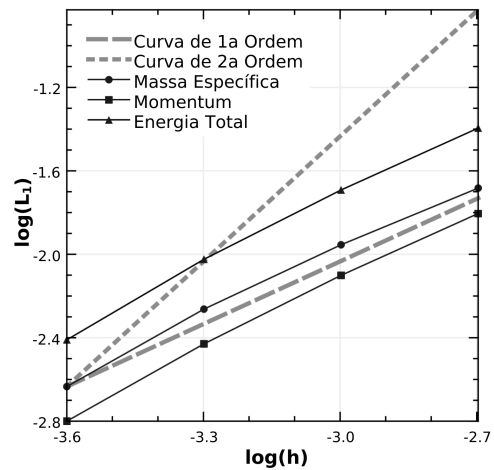
6.3.1 Ordem de Convergência do Método

Para o cálculo da norma global do erro L_1 foram contabilizados apenas os volumes de controle entre os volumes de fronteira, excluindo da norma as contribuições de erro das propriedades fora dos limites das paredes do tubo de choque. Esta norma possui três componentes associadas às variáveis conservativas massa específica, ρ ; quantidade de movimento em x , ρu ; e energia total, ρe_T .

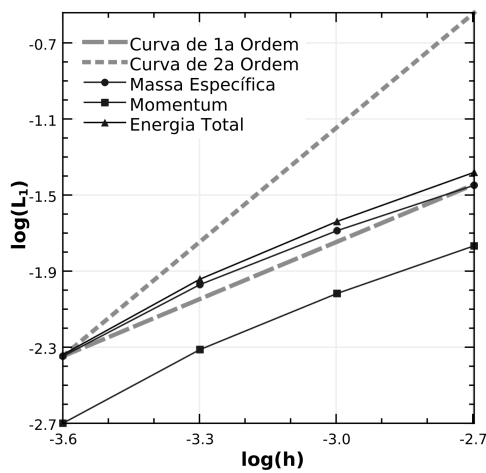
Na Figura 42a foi constada a ordem de convergência real do método explícito como de primeira ordem para todas as componentes de L_1 entre os níveis de refinamento $2h$ e $32h$. Tal resultado já havia sido encontrado por Pimenta e Miserda (2019) para o mesmo método numérico utilizando a mesma abordagem para a análise de convergência, porém em um domínio bidimensional no espaço, sem o conto do domínio temporal.



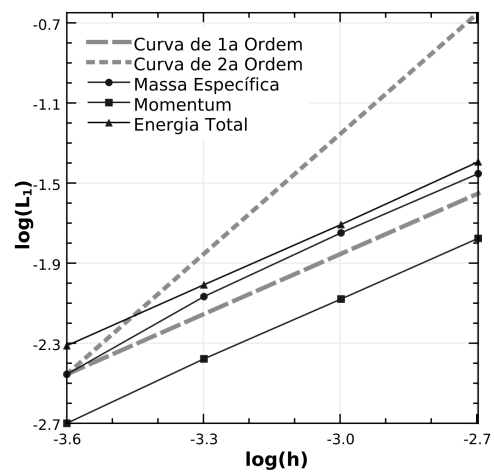
(a) Caso A - Explícito



(b) Caso A - Implícito



(c) Caso B - Implícito



(d) Caso C - Implícito

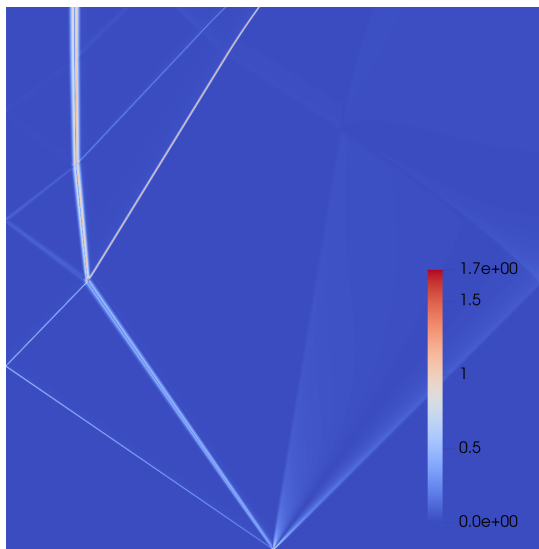
Figura 42 – Norma global do erro de discretização L_1 em função de h para o caso do tubo de choque.

Para o método implícito foram consideradas outros três casos. No caso A, as constantes de dissipação foram escolhidas da mesma maneira que para o Caso A -Explícito. Embora haja uma pequena melhora na inclinação da reta para os métodos implícitos, ainda não é alcançada a segunda ordem de convergência (Fig. 42b). Analisando então o erro local, a ser discutido na seção seguinte, notou-se um maior erro na região do choque incidente. Assim outros dois casos foram formulados: o Caso B, onde a simulação seria amortecida ao máximo, buscando eliminar o erro devido à oscilação numérica; e o Caso C, onde buscou-se utilizar constantes de calibração específicas para cada nível de refinamento de malha de forma a manter o erro ligado à oscilação numérica sempre em torno de 0,5%. No entanto, mesmo com o ajuste das constantes não é possível notar grande diferença entre os Casos A, B e C - Implícito (Fig. 42b, 42c e 42d, respectivamente).

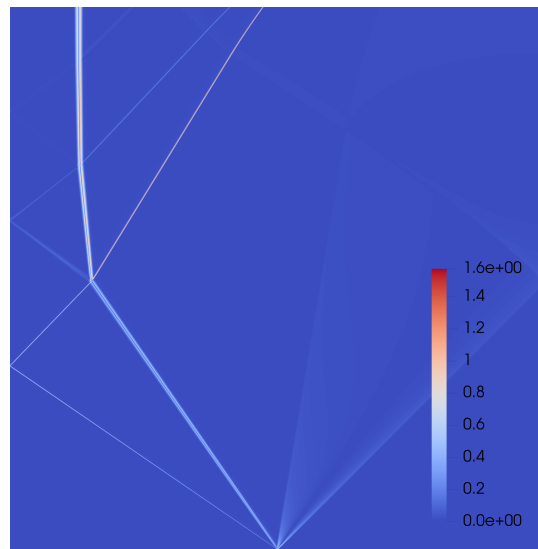
6.3.2 Erro Local

Para investigar as possíveis fontes de erro que levaram a uma convergência de primeira ordem dos métodos explícito e implícito, é analisado o erro local ϵ_{rh} para os níveis de refinamento de $2h$ a $32h$ no caso do método explícito (Fig. 43 a 48); e $8h$ a $64h$ no caso do método implícito (Fig. 49 a 57). As figuras indicam que para ambos os métodos as principais fontes de erros estão nas discontinuidades que se propagam pelo domínio. Embora o erro na região da superfície de contato tenha um maior espalhamento e portanto, seja mais visível, as maiores amplitudes do erro ainda são encontradas nas ondas de choque, onde se observa um leve traçado em vermelho mesmo para as malhas mais refinadas (Fig. 44, 46 e 48). Além disso, não foi observado qualquer erro considerável nas proximidades da fronteira, o que indica que de fato as discontinuidades apresentadas pela onda de choque são as maiores responsáveis pela discordância entre as ordens de convergência teórica e real do método.

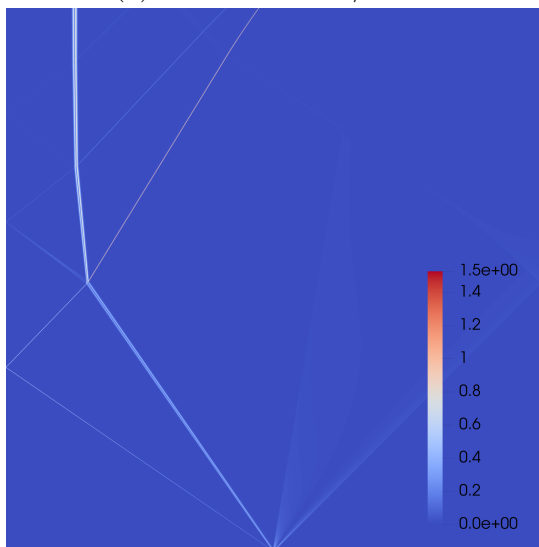
Comparando os métodos implícitos (Fig. 43 a 48) e explícitos (Fig. 49 a 57) se observa novamente que, mesmo possuindo a mesma ordem de convergência, as menores amplitudes de erro são encontradas nos métodos implícitos.



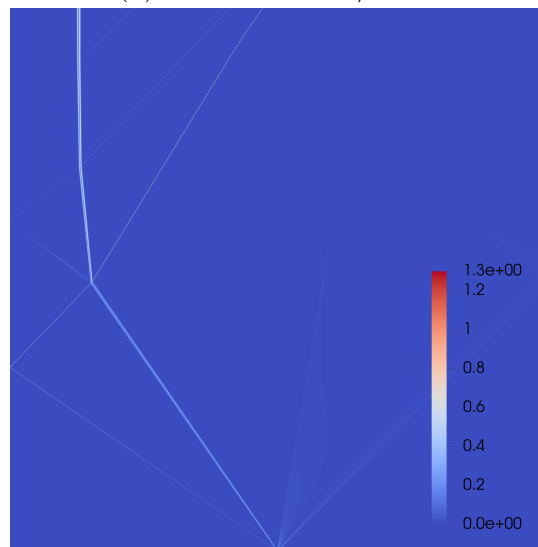
(a) $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.



(b) $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.



(c) $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.



(d) $\Delta x^* = 4h = 1/8192$.

Figura 43 – Caso A - Explícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a massa específica ρ .

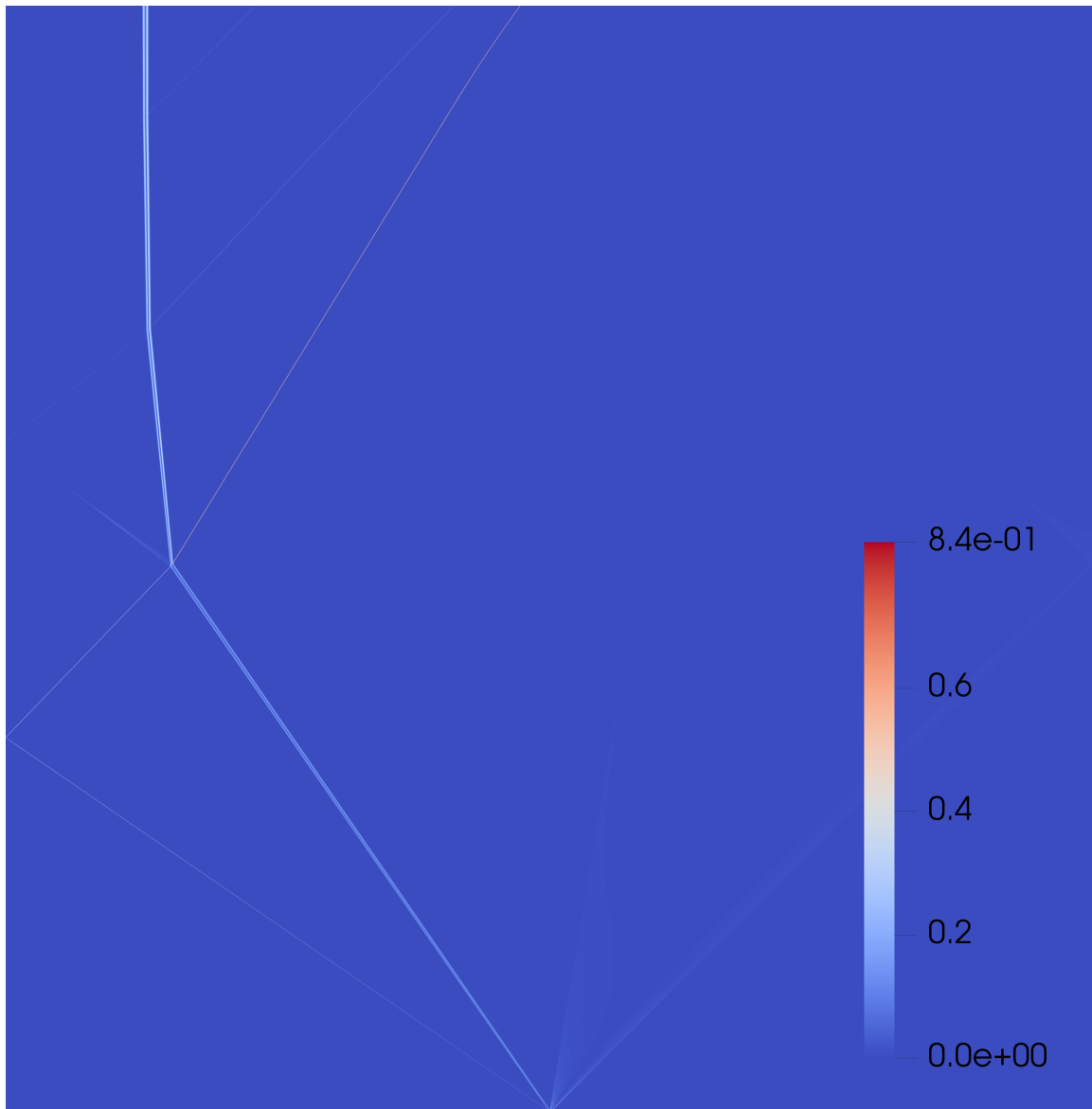
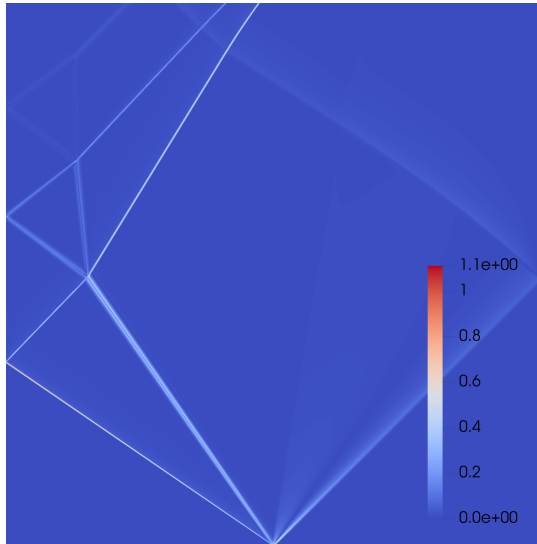
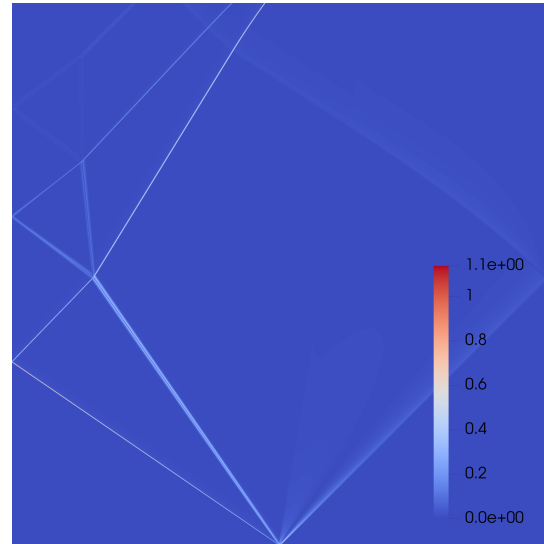


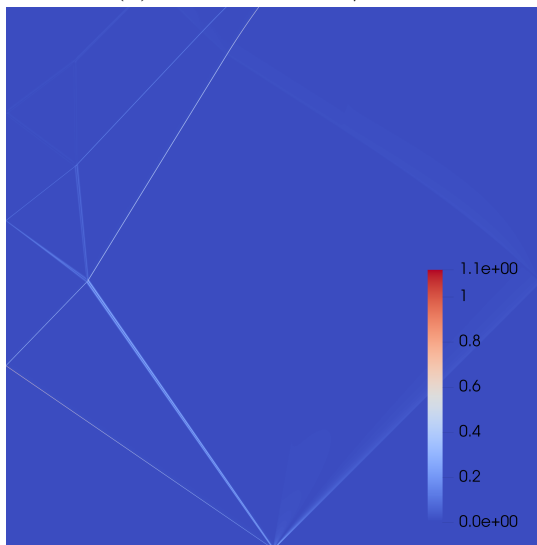
Figura 44 – Caso A - Explícito: Erro de discretização local ϵ_{2h} para a massa específica ρ .



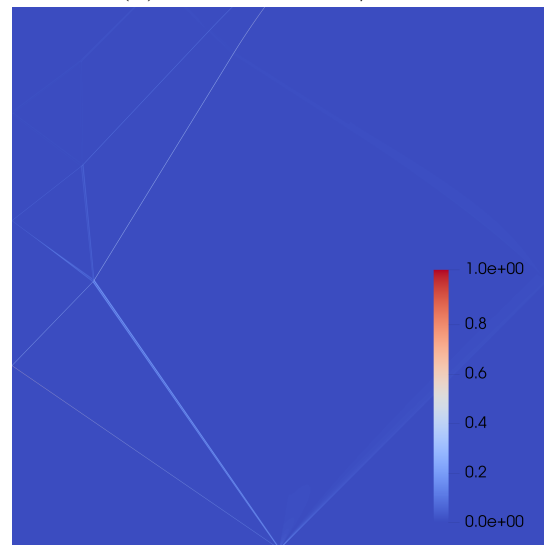
(a) $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.



(b) $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.



(c) $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.



(d) $\Delta x^* = 4h = 1/8192$.

Figura 45 – Caso A - Explícito: Erro local de discretização ε_{rh} para a quantidade de movimento ρu .

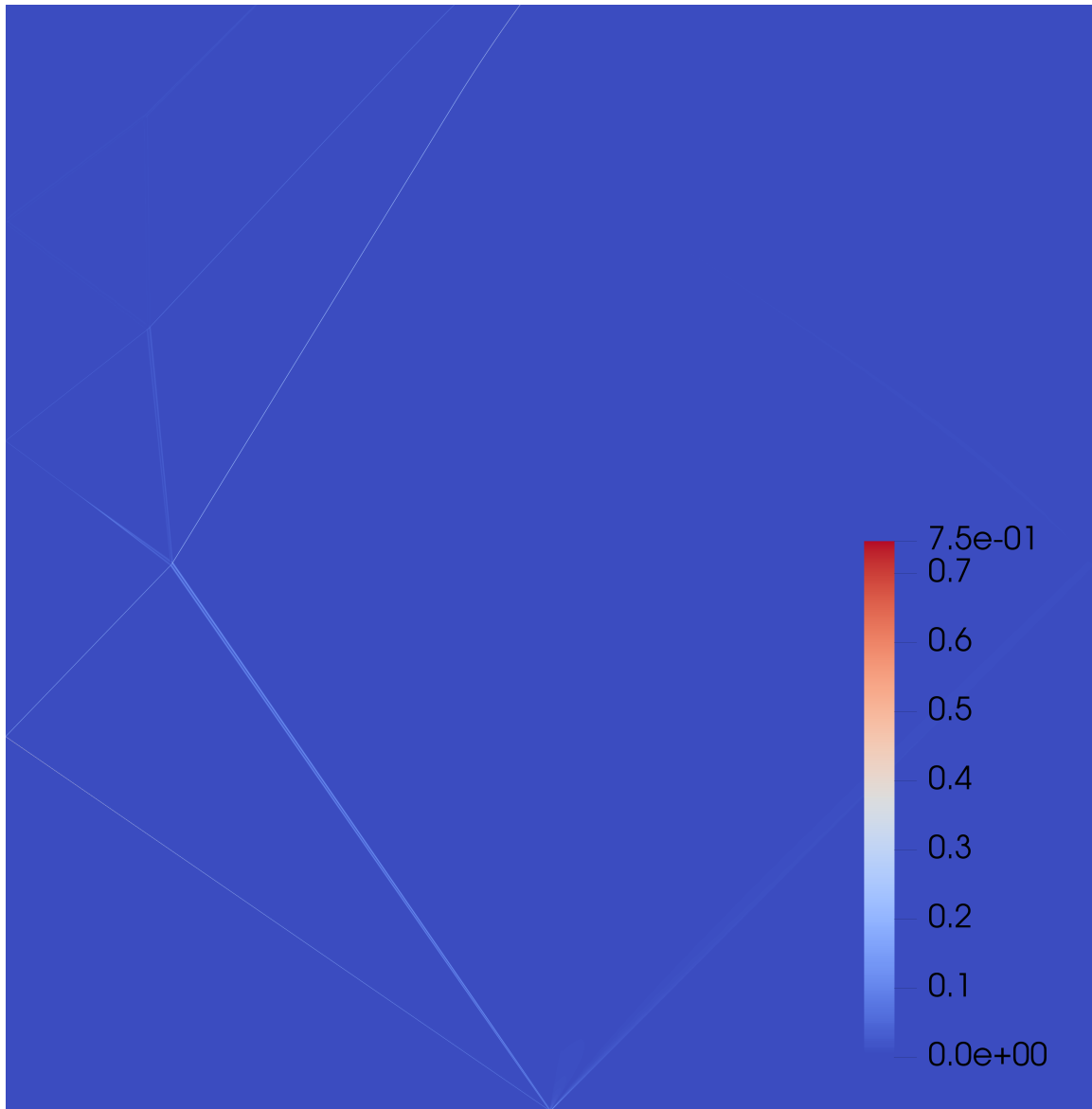
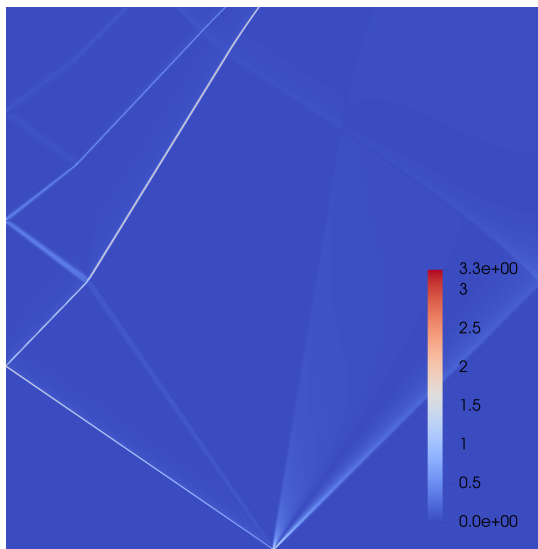
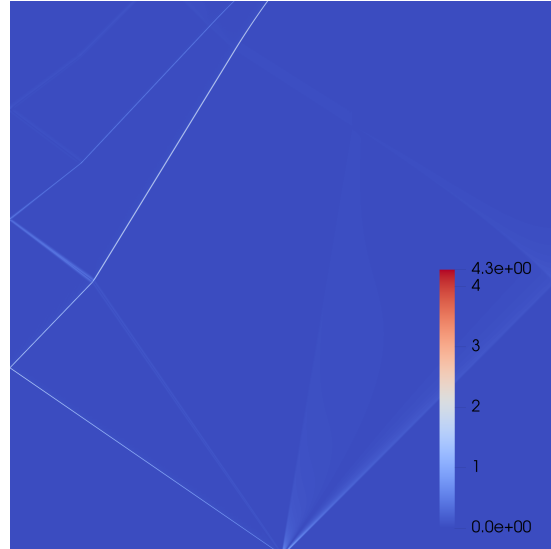


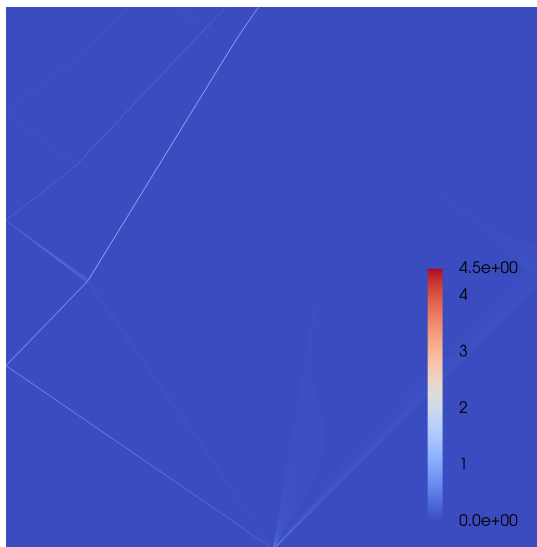
Figura 46 – Caso A - Explícito: Erro de discretização local ϵ_{2h} para a quantidade de movimento ρu .



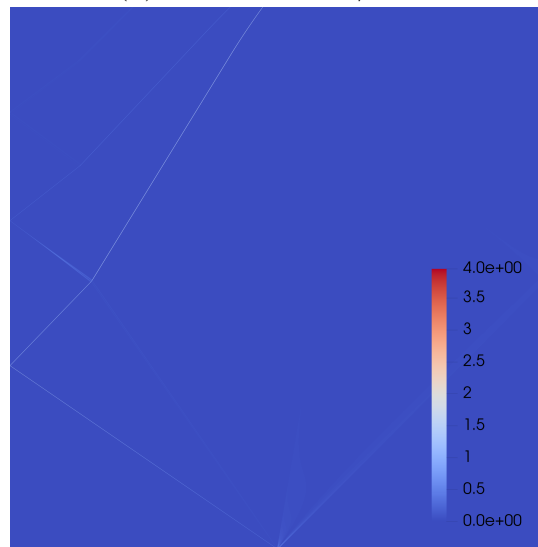
(a) $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.



(b) $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.



(c) $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.



(d) $\Delta x^* = 4h = 1/8192$.

Figura 47 – Caso A - Explícito: Erro local de discretização ε_{rh} para a energia total ρe_T .

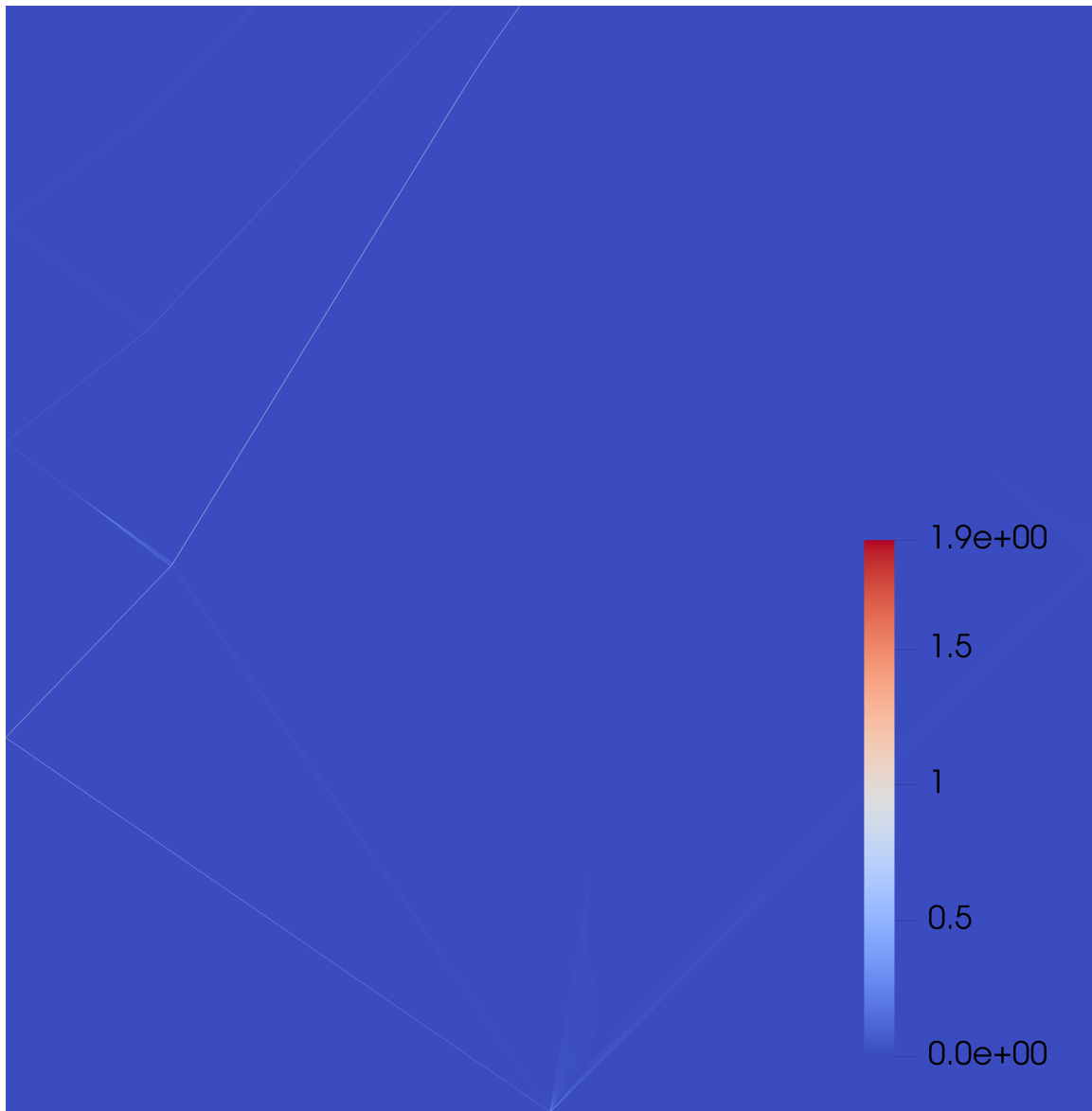
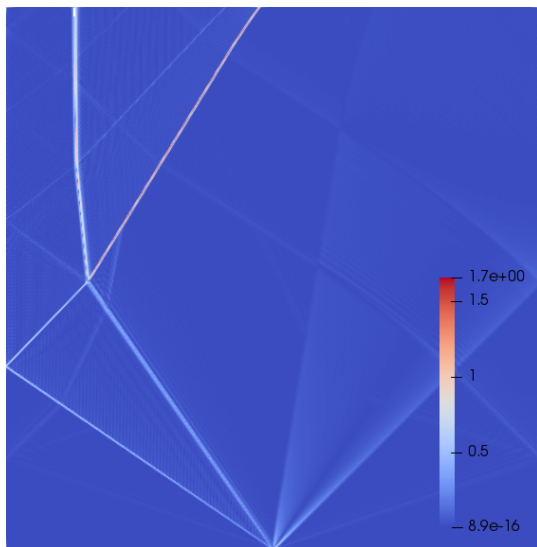
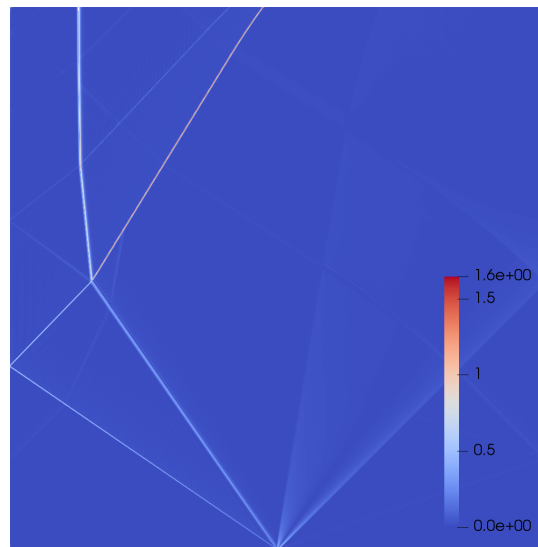


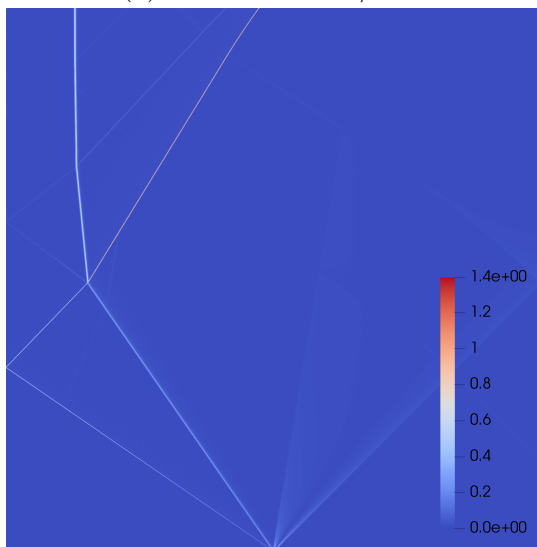
Figura 48 – Caso A - Explícito: Erro de discretização local ϵ_{2h} para a energia total ρe_T .



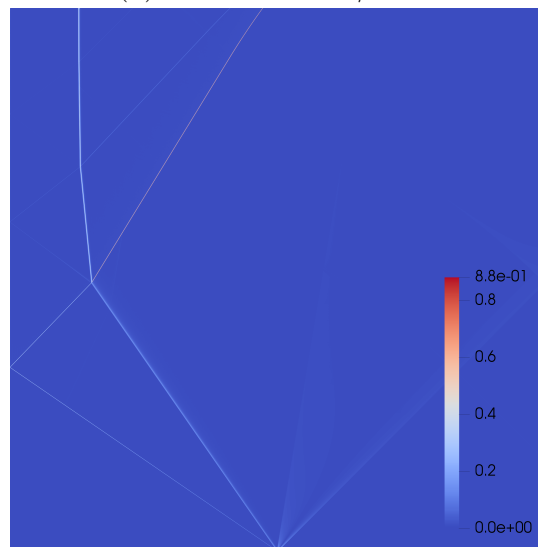
(a) $\Delta x^* = 64h = 1/512$.



(b) $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.

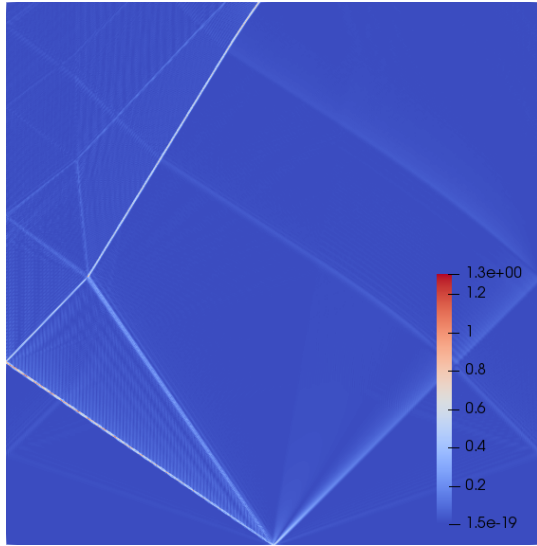


(c) $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.

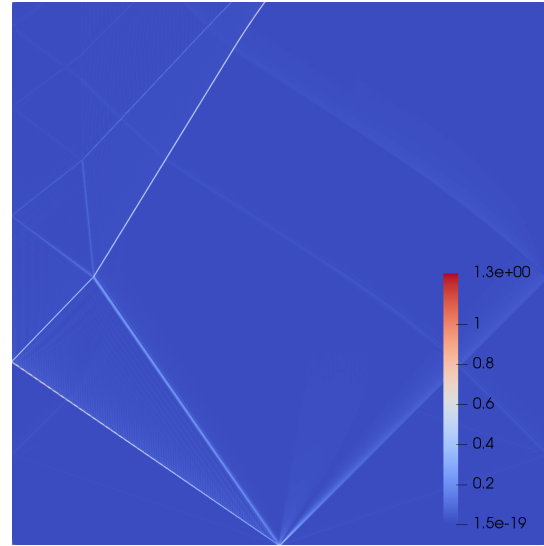


(d) $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.

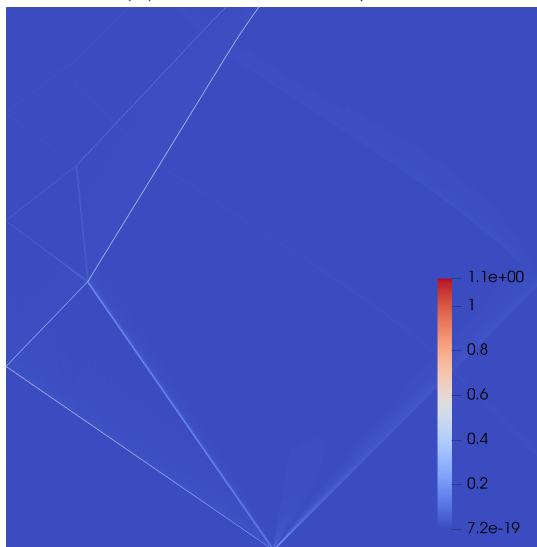
Figura 49 – Caso A - Implícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a massa específica ρ .



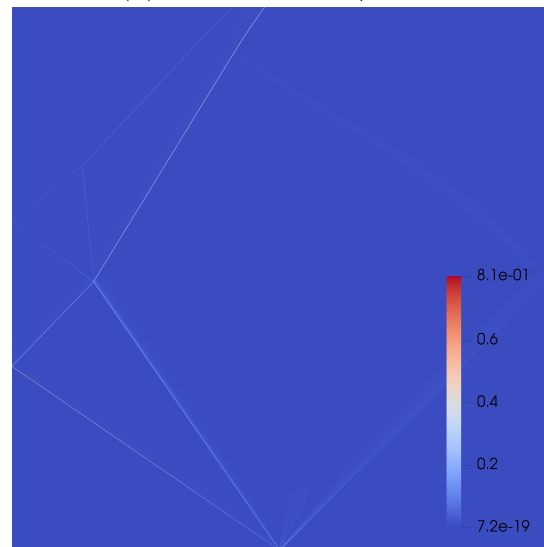
(a) $\Delta x^* = 64h = 1/512$.



(b) $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.

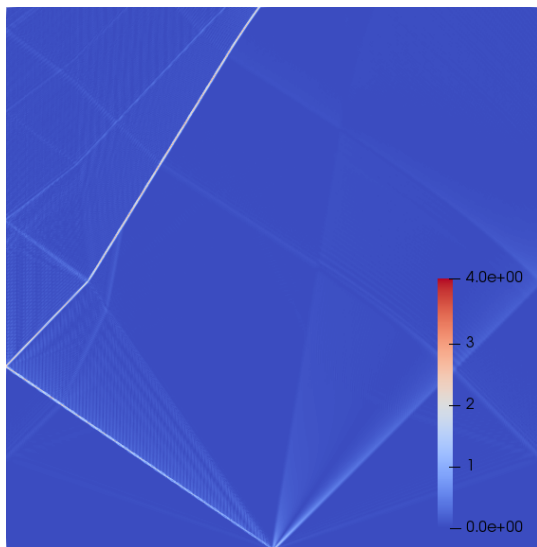


(c) $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.

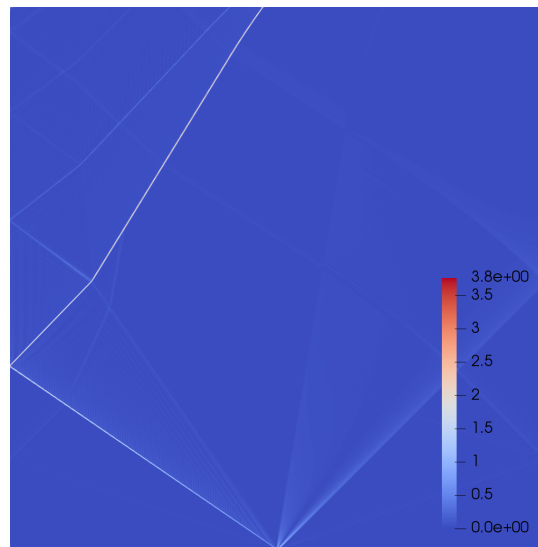


(d) $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.

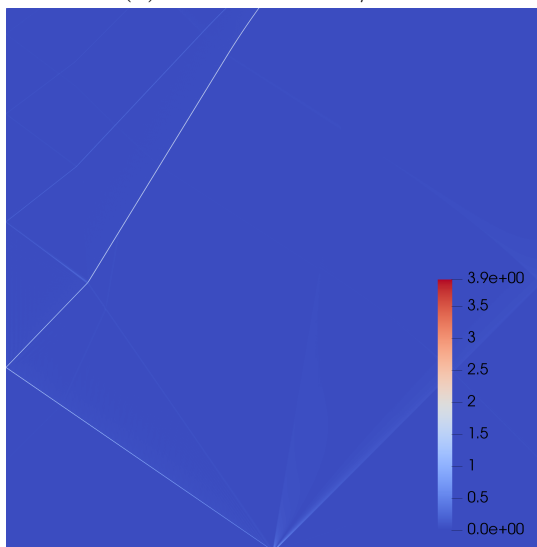
Figura 50 – Caso A - Implícito: Erro local de discretização ε_{rh} para a quantidade de movimento ρu .



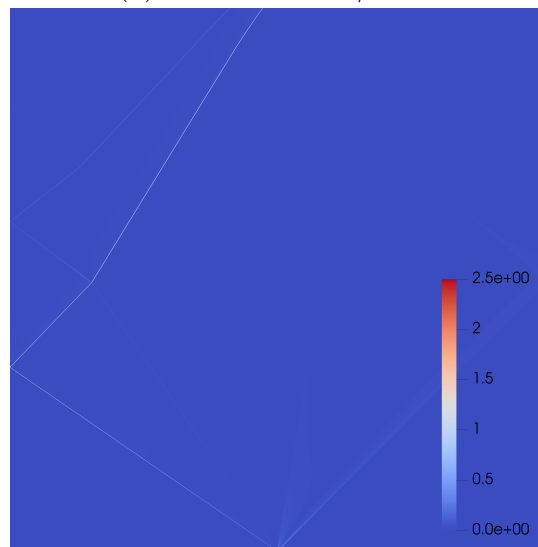
(a) $\Delta x^* = 64h = 1/512$.



(b) $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.

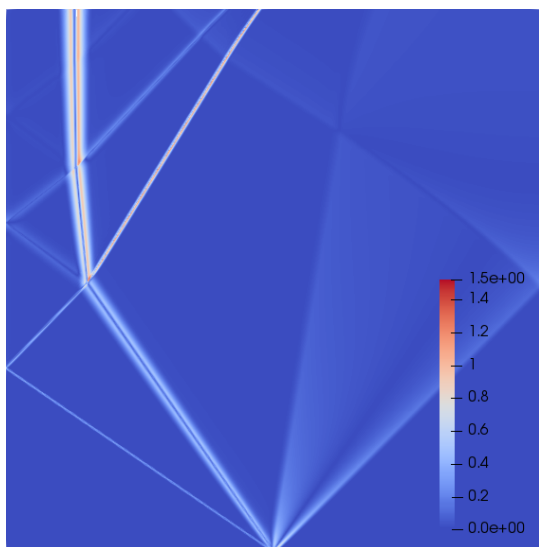


(c) $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.

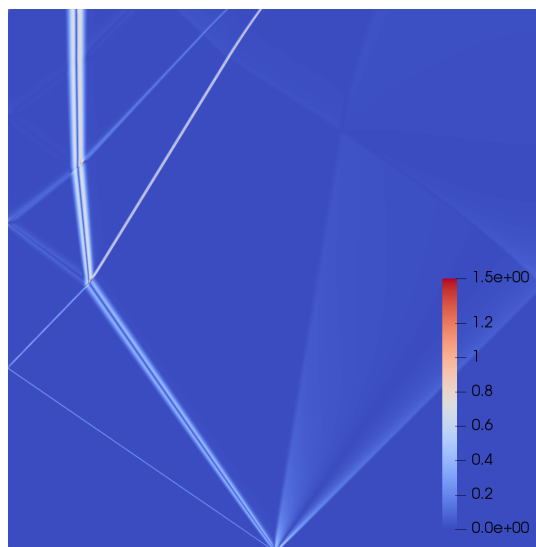


(d) $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.

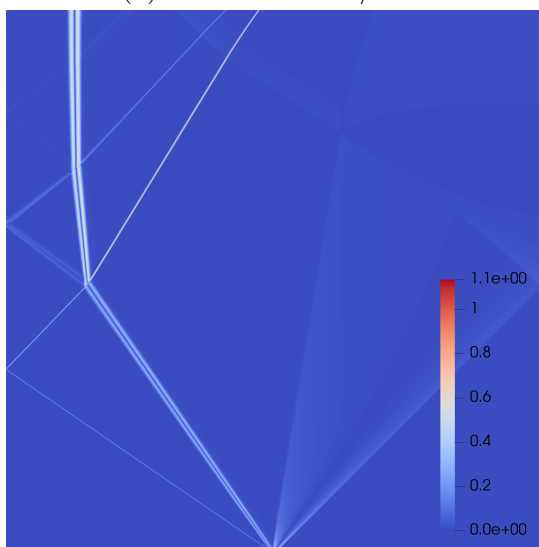
Figura 51 – Caso A - Implícito: Erro local de discretização ε_{rh} para a energia total ρe_T .



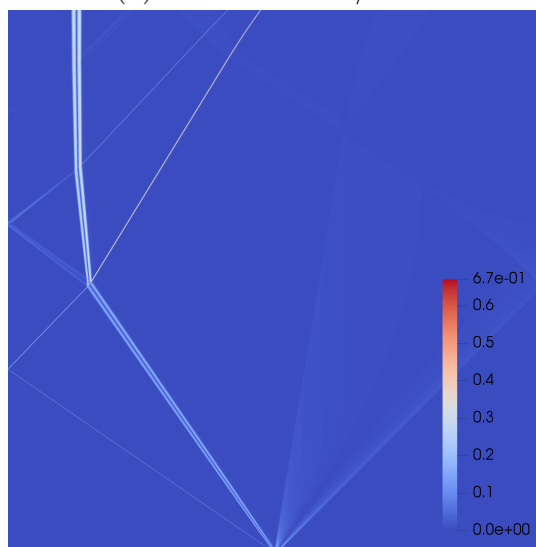
(a) $\Delta x^* = 64h = 1/512$.



(b) $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.

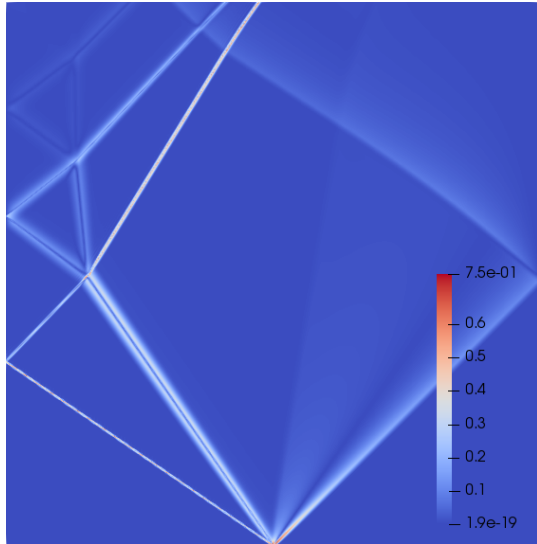


(c) $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.

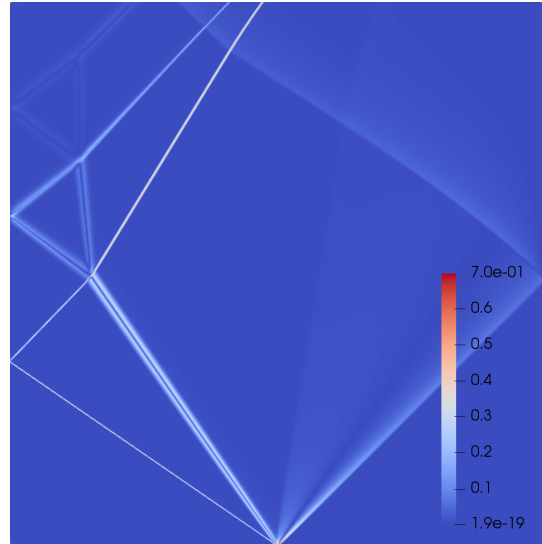


(d) $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.

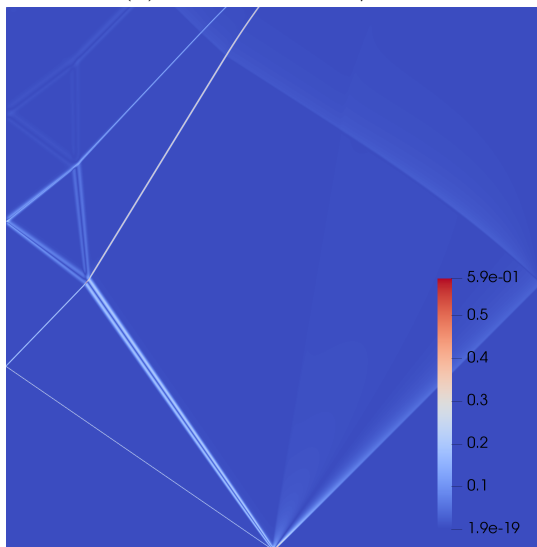
Figura 52 – Caso B - Implícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a massa específica ρ .



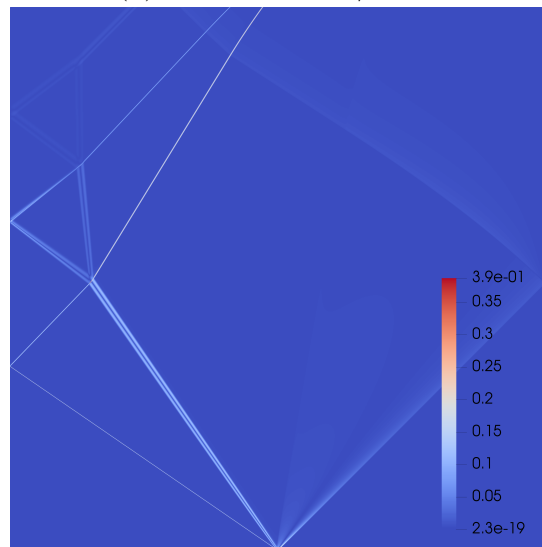
(a) $\Delta x^* = 64h = 1/512$.



(b) $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.

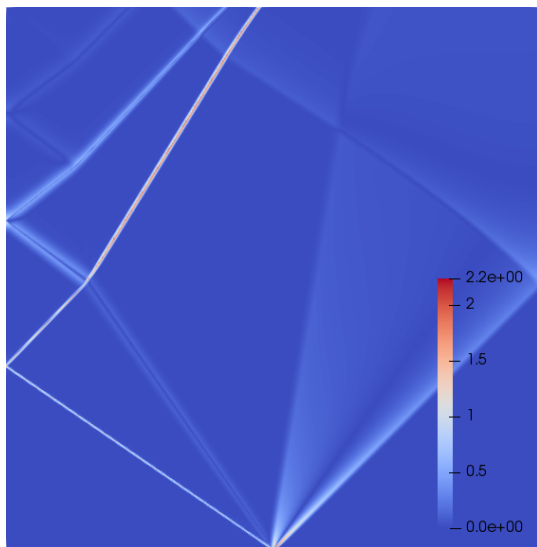


(c) $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.

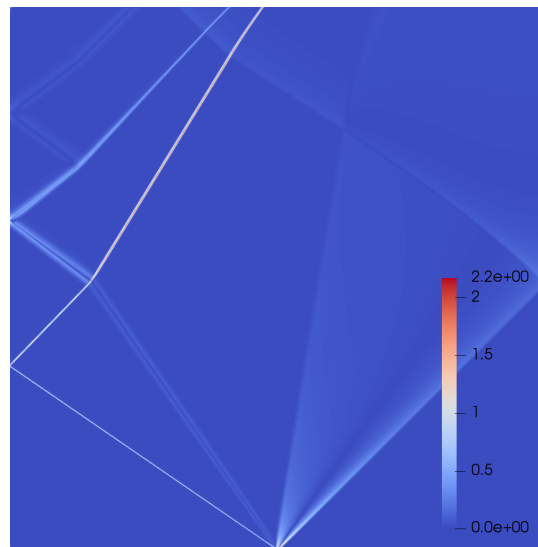


(d) $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.

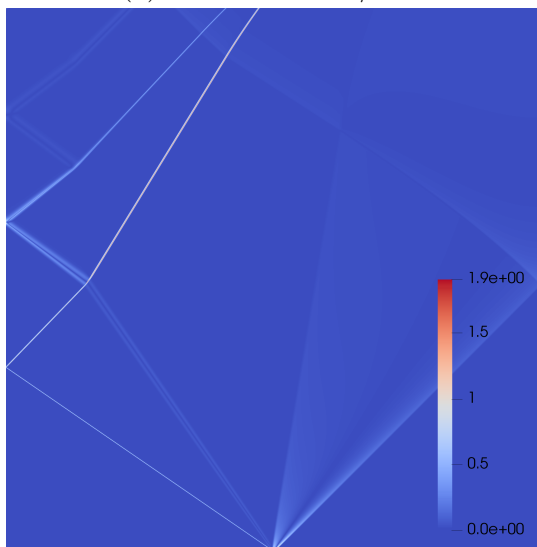
Figura 53 – Caso B - Implícito: Erro local de discretização ε_{rh} para a quantidade de movimento ρu .



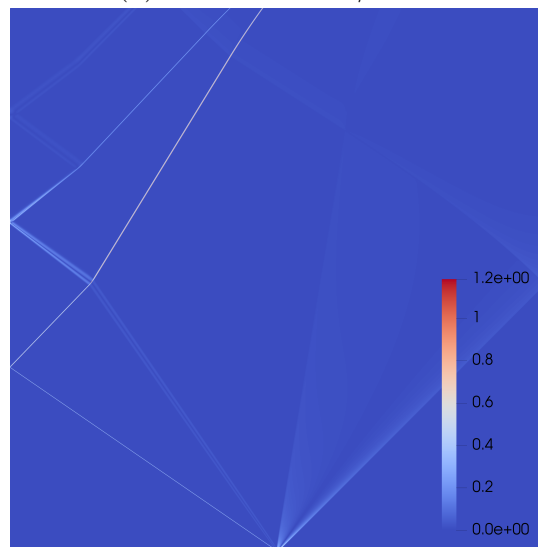
(a) $\Delta x^* = 64h = 1/512$.



(b) $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.

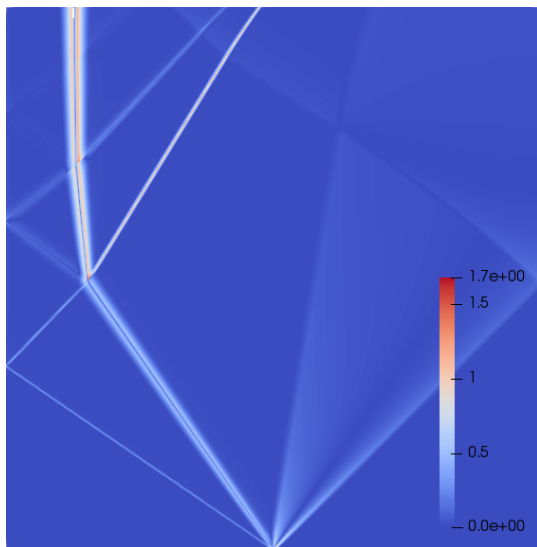


(c) $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.

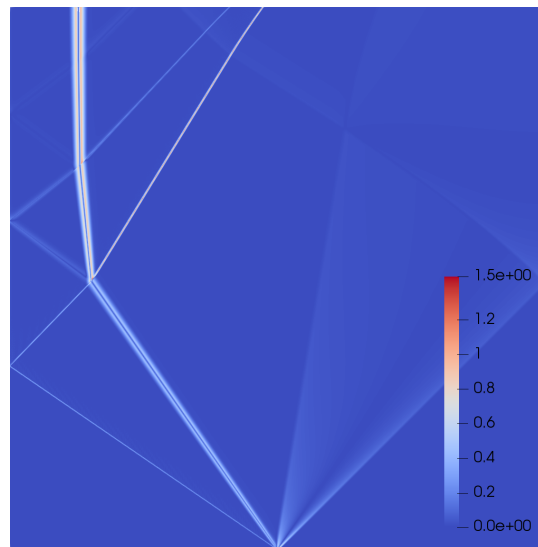


(d) $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.

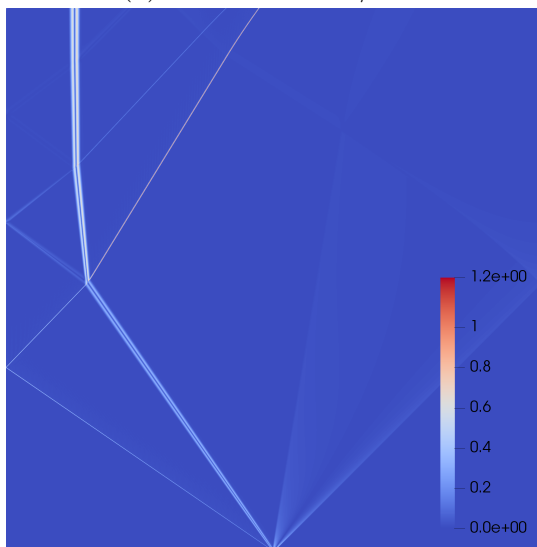
Figura 54 – Caso B - Implícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a energia total ρe_T .



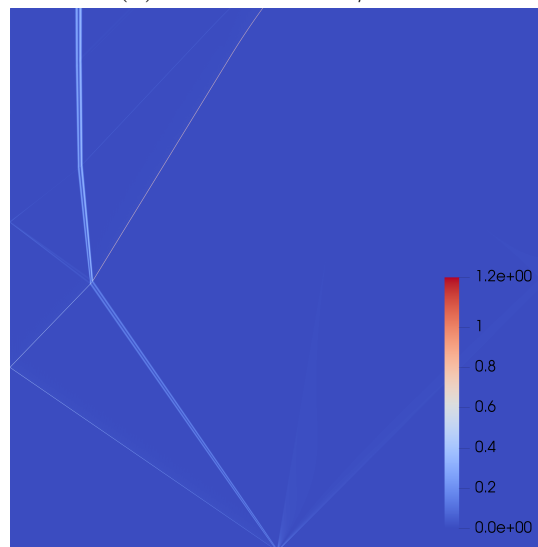
(a) $\Delta x^* = 64h = 1/512$.



(b) $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.

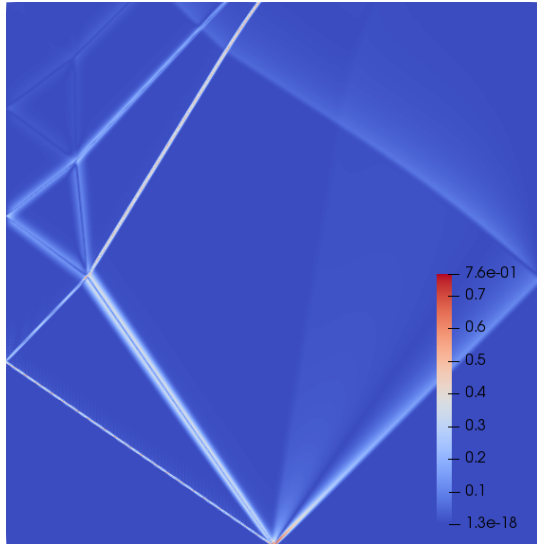


(c) $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.

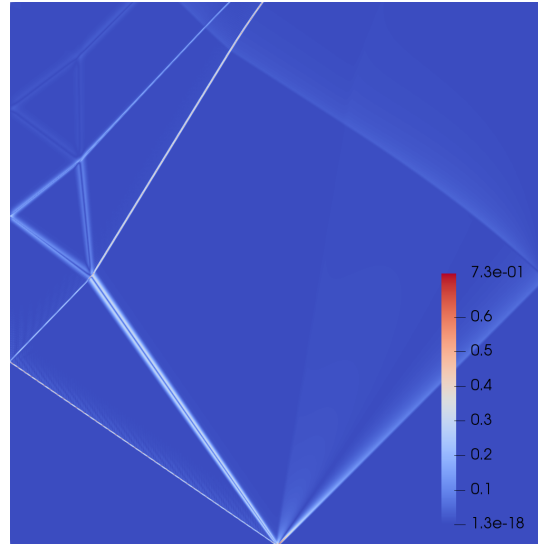


(d) $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.

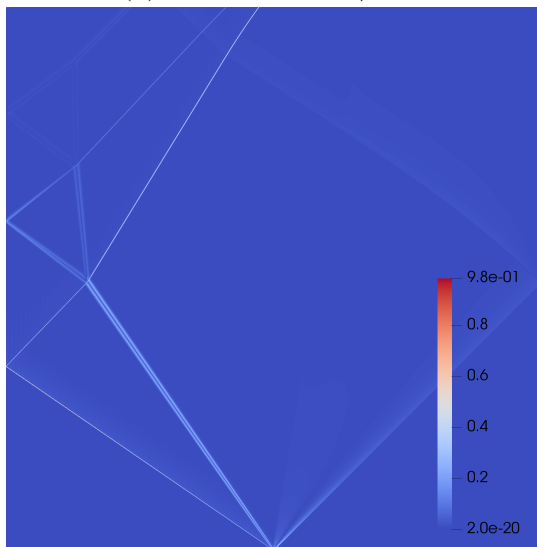
Figura 55 – Caso C - Implícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a massa específica ρ .



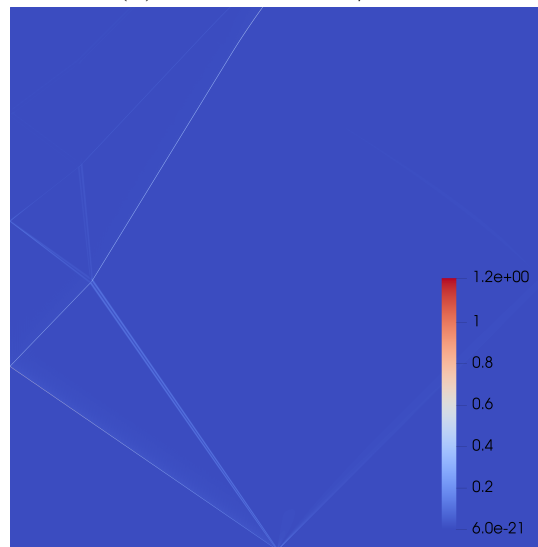
(a) $\Delta x^* = 64h = 1/512$.



(b) $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.

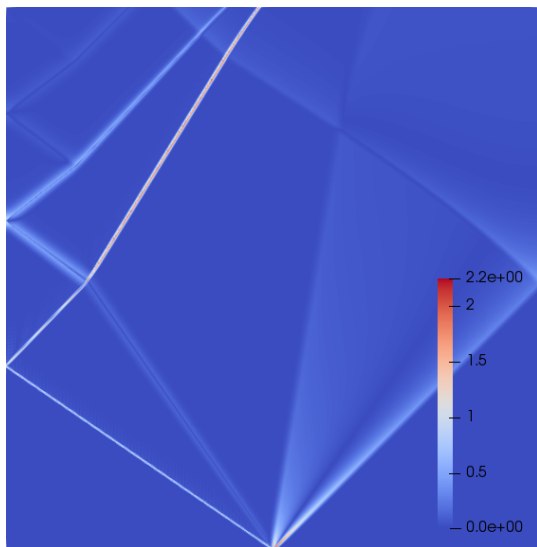


(c) $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.

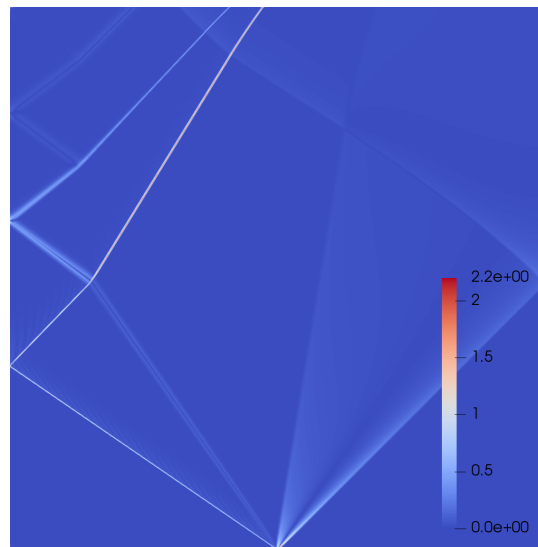


(d) $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.

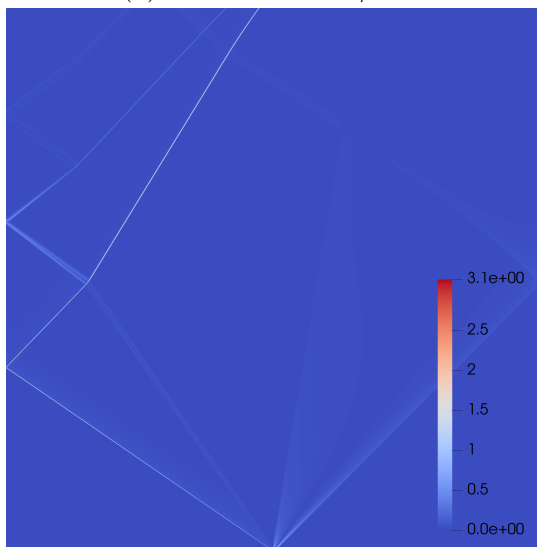
Figura 56 – Caso C - Implícito: Erro local de discretização ε_{rh} para a quantidade de movimento ρu .



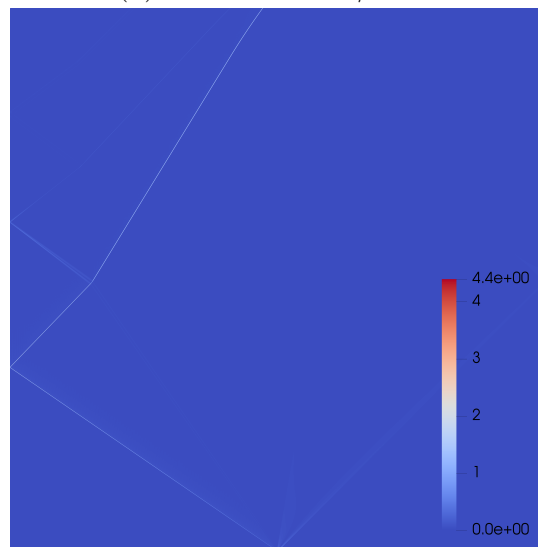
(a) $\Delta x^* = 64h = 1/512$.



(b) $\Delta x^* = 32h = 1/1024$.



(c) $\Delta x^* = 16h = 1/2048$.



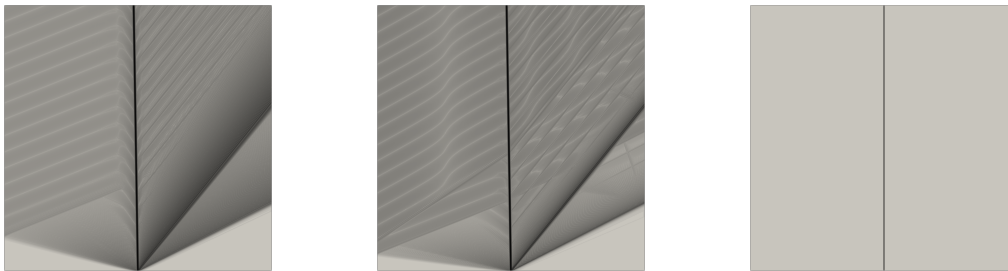
(d) $\Delta x^* = 8h = 1/4096$.

Figura 57 – Caso C - Implícito: Erro local de discretização ϵ_{rh} para a energia total ρe_T .

6.4 Análise de Convergência de Malha para o Choque Normal

Para fins de comparação, foram realizadas três simulações de um choque normal em regime permanente com os dados de entrada conforme a Tabela 4. Estes valores foram escolhidos de maneira a simular uma onda de choque de intensidade $M = 1,5$ tal qual a analisada no caso do tubo de choque.

A primeira simulação é realizada utilizando o método explícito de cálculo dos fluxos junto ao método de Runge-Kutta para a marcha temporal (Figura 58a). Enquanto que para as duas últimas simulações é utilizando o método implícito de cálculo dos fluxos, também junto ao método de Runge-Kutta para a marcha temporal (Figuras 58b e 58c). As constantes de calibração para as primeiras duas simulações são tais quais as constantes do Caso A - Explícito presentes na Tab. 3. Já na ultima simulação, utilizando o método implícito, foi possível zerar a dissipação numérica sem comprometer a estabilidade da simulação (Figura 58c). Dessa forma, foi feita a análise de convergência para este último, com o objetivo de analisar o que ocorre com a ordem de convergência do método na ausência de um transiente e sem a influência de dissipação numérica.



(a) Método Explícito com Dissipação Numérica (b) Método Implícito com Dissipação Numérica (c) Método Implícito sem Dissipação Numérica

Figura 58 – Visualização da variável β_T para um choque normal estacionário.

As simulações são iniciadas com o escoamento à velocidade V_∞ igual à velocidade de propagação da onda de choque, mantendo o escoamento em regime permanente. O domínio do espaço é dividido em duas regiões em $x = 0,5 \times L$. À primeira região é imposta uma pressão e temperatura P_1 e T_1 , respectivamente. À segunda região é imposta a pressão de P_2 e a temperatura de T_2 . O calor específico a volume constante foi atribuído como $c_v = 717,5 \text{ J/kg}$ e a constante dos gases como $R = 287,0 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$.

Assim como na análise de convergência anterior para os métodos implícitos, esta é realizada no domínio do espaço-tempo em 5 níveis de refinamento, sendo eles $64h$, $32h$, $16h$, $8h$ e $4h$, em que $4h = 1/8192 \times L$. É também adotado o passo temporal $\Delta t_{conv} = 70 \times \Delta t$ de maneira a compatibilizar o passo temporal com o passo no espaço, reduzindo-o à mesma ordem de grandeza.

Tabela 4 – Valores de entrada no código VAT para o choque normal estacionário com malha de resolução $\Delta x^* = 1/1024$.

| Símbolo | Valor | Descrição |
|-----------------|----------------------|-----------------------------------------------------------------------|
| n_L | 1 | Número de comprimentos característicos na direção x . |
| n_{unit} | 1024 | Número de volumes de controle ao longo do comprimento característico. |
| V_∞ | 521,20 | Velocidade do escoamento não perturbado (m/s). |
| $P_1 = P_{ref}$ | 101325,00 | Pressão na câmara de baixa pressão (Pa). |
| P_2 | 249178,51 | Pressão na câmara de alta pressão (Pa). |
| $T_1 = T_{ref}$ | 300,00 | Temperatura na câmara de baixa pressão (K). |
| T_2 | 396,50 | Temperatura na câmara de alta pressão (K). |
| x_0 | 0,0 | Posição da origem no eixo x (m). |
| L | 0,1 | Comprimento característico (m). |
| Δt | $0,4 \times 10^{-8}$ | Passo temporal (s). |
| n_{max} | 71680 | Número de iterações até o final da simulação. |

Na Figura 59, são mostrados os níveis de refinamento utilizados na análise de convergência através da variável de visualização $\beta_T = |\nabla T|^{1/10}$, em que a distância em x é exibida no eixo horizontal e o tempo, no eixo vertical. Como afirmado anteriormente, em todas estas simulações a dissipação artificial foi zerada e o resultado se manteve estável.

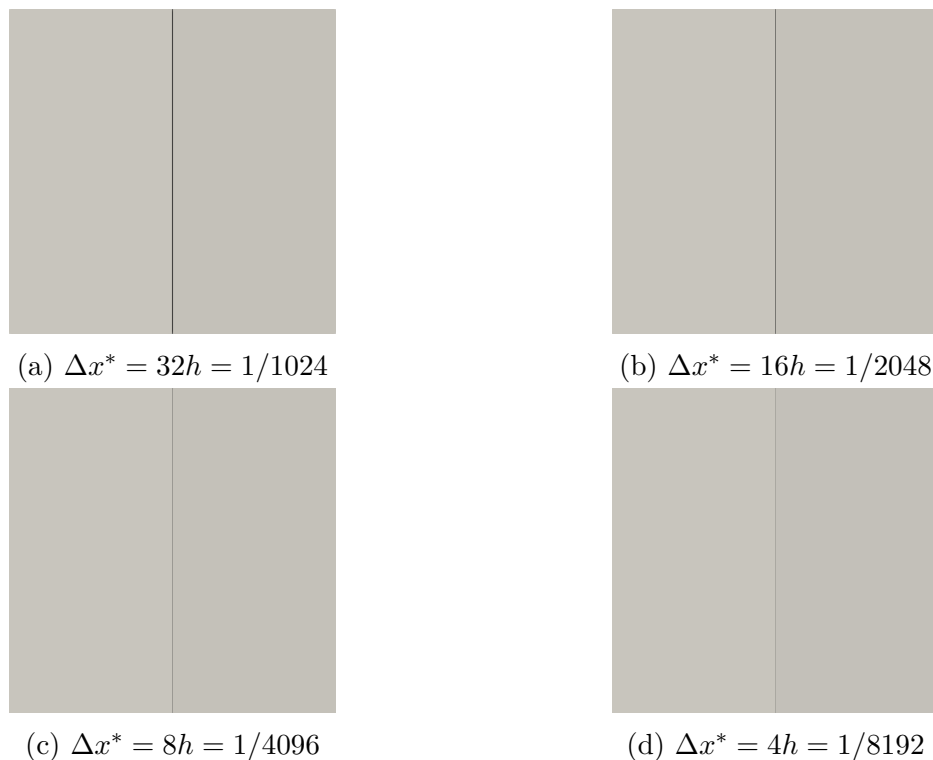


Figura 59 – Choque Normal: Visualização do escoamento permanente com a presença de uma onda de choque sem dissipação artificial.

Computada a norma global do erro L_1 , foi constada a ordem de convergência do método superior à segunda ordem entre os níveis de refinamento $64h$ e $16h$ (Fig. 60). Para os demais níveis de refinamento, as componentes de L_1 associadas às variáveis conservativas massa específica, ρ ; e energia total, ρe_T ; não puderam ser computadas pois foram inferiores ao limite de máquina resultando em valores de $L_1 = -\infty$. O mesmo ocorreu em todos os níveis de refinamento para a componente de L_1 associada à quantidade de movimento em x , ρu . Este resultado pode ser um indicativo de que a baixa ordem de convergência encontrada para o caso do tubo de choque se deva ao termo transiente da descontinuidade que por sua vez acarreta em oscilações numéricas que reduzem sensivelmente a ordem de convergência do método.

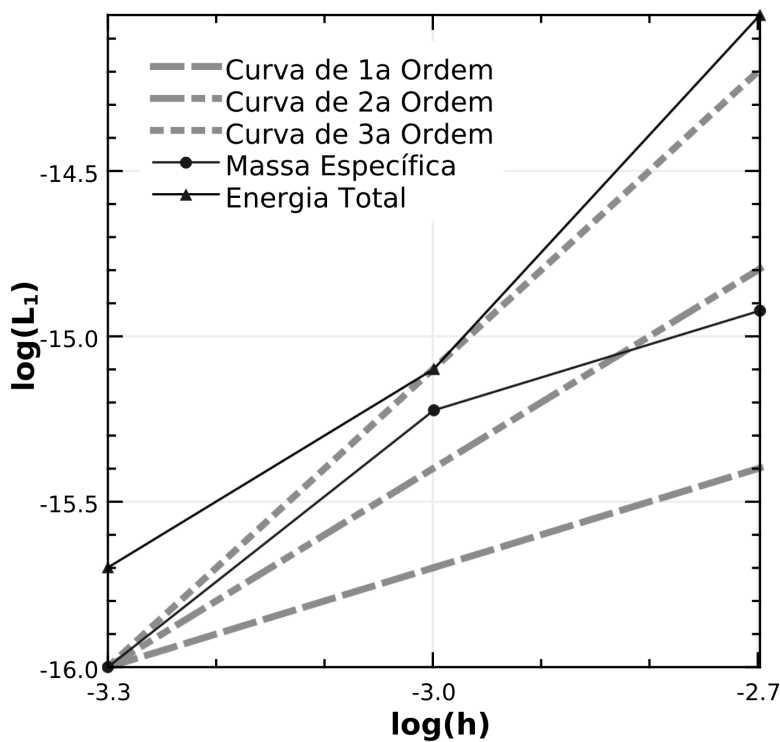


Figura 60 – Norma global do erro de discretização L_1 em função de h para o caso do choque normal estacionário.

6.5 Verificação dos Resultados

Para a verificação dos resultados da simulação, os valores não dimensionais das variáveis primitivas p , T e u são confrontadas com valores teóricos em certas regiões onde a resposta exata pode ser obtida (Seção 3). As simulações para verificação foram realizadas com a malha mais refinada h , onde $\Delta x = 1/32768 \times L$ e $\Delta t = 0,125 \times 10^{-10}$ s. Para a captura de 14 regiões foram necessárias duas simulações (Fig. 61 e 62), sendo a segunda com o diafragma deslocado do centro em $x = 0,875 \times L$ para a captura da região

após a reflexão do leque de expansão. As Fig. 61 e 62 mostra o diagrama espaço-temporal da variável de visualização $\beta_T = |\nabla T|^{1/10}$, em que a distância em x é exibida no eixo horizontal e o tempo, no eixo vertical. A variável β_T é um parâmetro baseado no valor adimensional do campo de temperatura e tem como característica a alta sensibilidade às menores perturbações do escoamento, possibilitando a visualização clara das regiões do mesmo. Ainda nas mesmas figuras, são mostrados os estados sob avaliação e alguns dos ângulos de propagação θ teóricos. Os ângulos θ estão diretamente ligados à velocidade de propagação das perturbações no escoamento, sendo calculados através da equação

$$\theta = \arctan\left(\frac{1}{M}\right) = \arctan\left(\frac{a_1}{W}\right), \quad (6.4)$$

onde a_1 é a velocidade de propagação do som no estado (1) igual a 347,19 m/s para o ar à temperatura de 300 K. Preferiu-se adotar estes ângulos como medida de velocidade de propagação por serem de fácil visualização no diagrama do espaço-tempo.

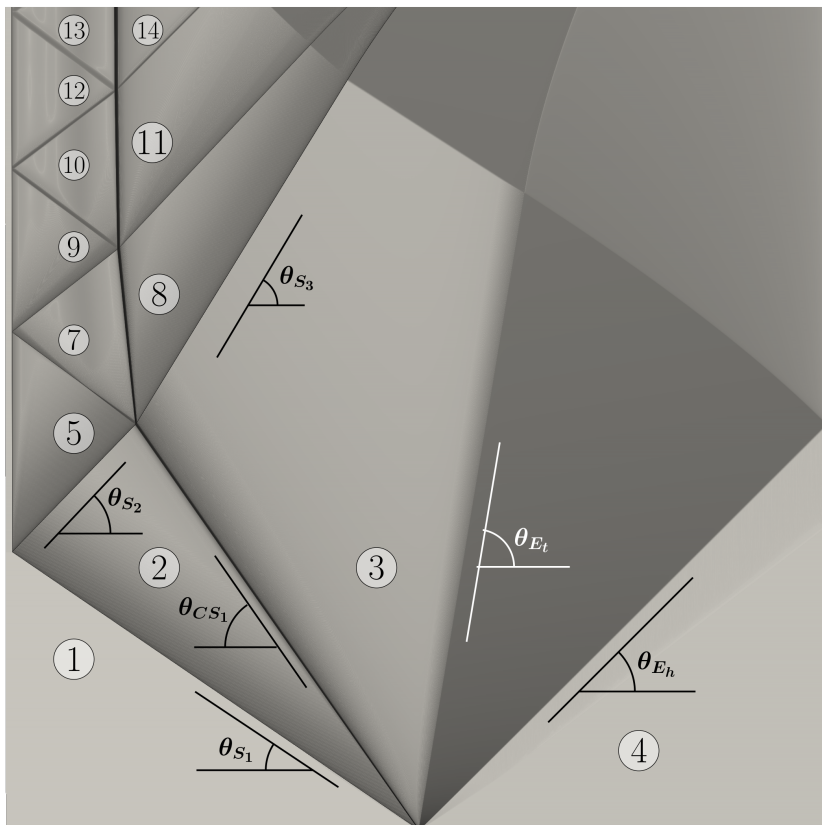


Figura 61 – Onda de choque com origem no centro do tubo de choque.

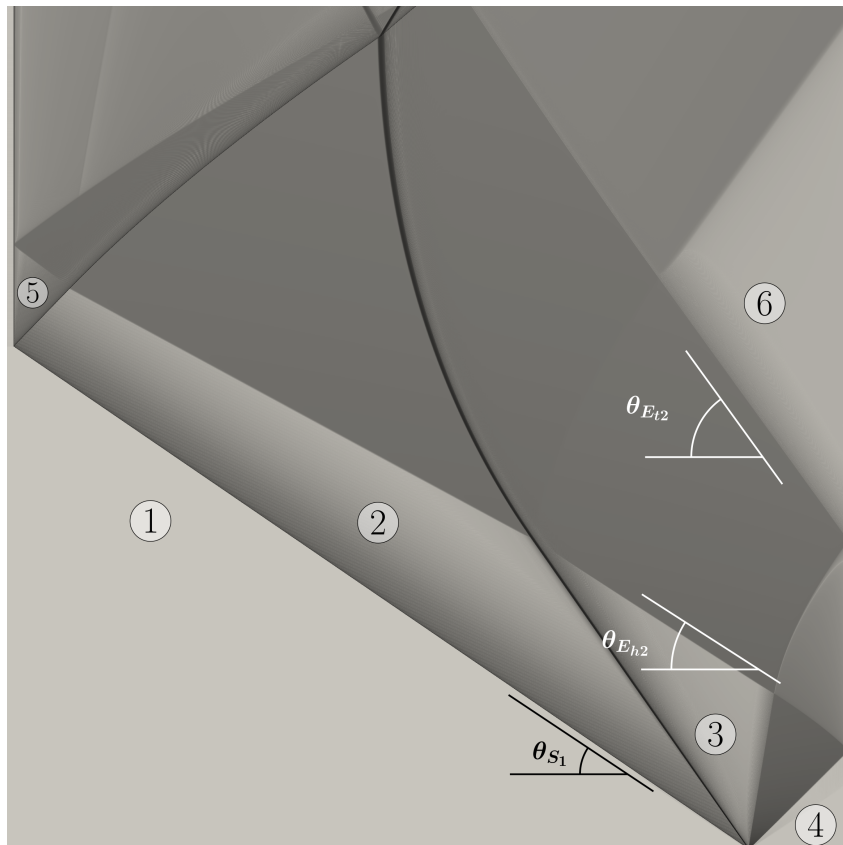


Figura 62 – Onda de choque com origem descentralizada no tubo de choque.

Os resultados obtidos para as propriedades primitivas em todas as regiões e os ângulos de propagação se encontram compilados nas Tab. 5, 6, 7, 8 e 9. Para auxiliar na compreensão da evolução do escoamento dentro do tubo de choque, foram plotados gráficos em quatro instantes distintos (Fig. 63), a serem explicados nas seções seguintes.

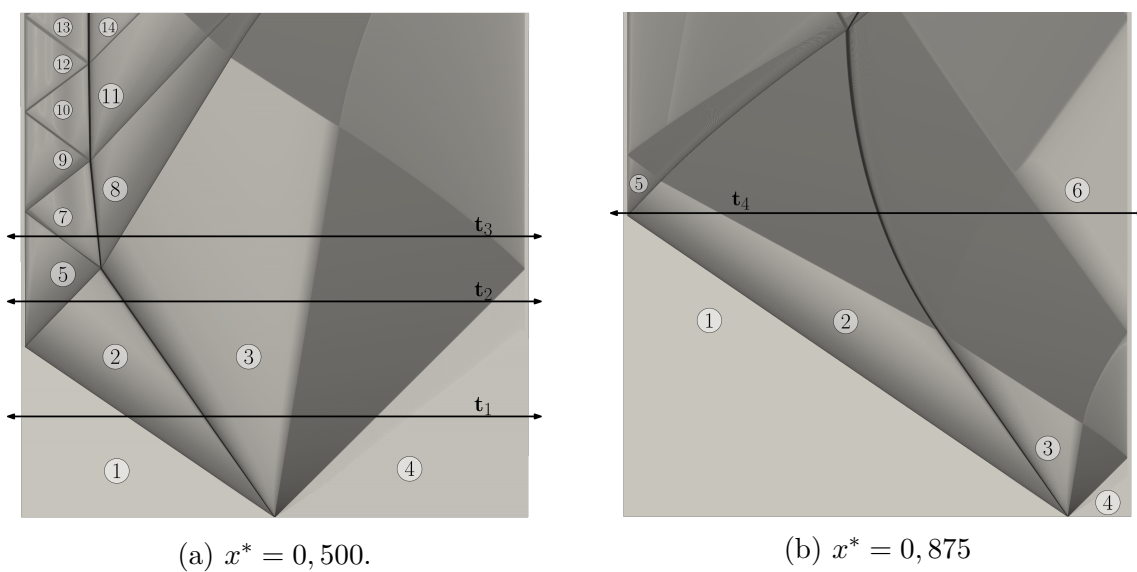
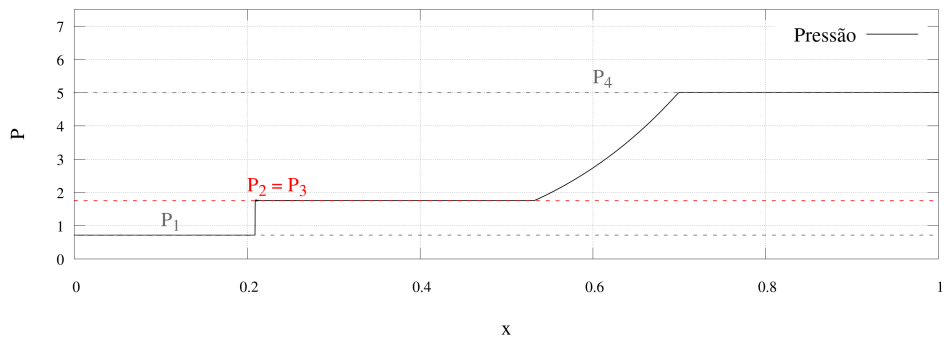


Figura 63 – Escoamento no tubo de choque para diafragma em diferentes posições.

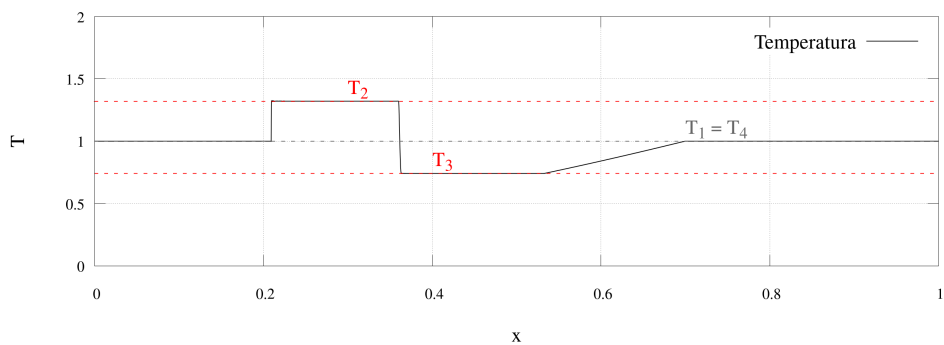
6.5.1 Resultados Obtidos antes da Reflexão da Onda de Choque

Seguindo a numeração presente na Fig. 61, com a ruptura do diafragma que separa as regiões (1) e (4), se forma uma onda de choque, movendo-se da região de mais alta pressão (4) para a região de mais baixa pressão (1), e um leque de expansão, que forma o estado (3) através da expansão isentrópica do gás anteriormente no estado (4) (Fig. 64a). A onda de choque aquece abruptamente a região percorrida por ela, o que causa uma descontinuidade no campo de temperatura (Fig. 64b). Esta descontinuidade também é observada na Fig. 61 através das linhas escuras que separam o estado (2) do estado (1), e o estado (2) do (3). A primeira linha, de inclinação θ_{S_1} , mostra o deslocamento da onda de choque em direção ao estado (1). É importante notar que a inclinação da reta com o eixo horizontal está diretamente relacionada à velocidade de propagação da descontinuidade, com ângulos menores indicando uma maior velocidade de propagação e vice-versa. Já a segunda linha, de inclinação θ_{CS_1} , mostra o deslocamento da superfície de contato. Descartando os efeitos de difusão, a superfície de contato pode ser entendida como uma superfície imaginária que marca a separação entre o fluido que estava inicialmente no estado (1) e o fluido que se encontrava inicialmente no estado (4). A inclinação desta reta deve corresponder à velocidade do escoamento induzido pela onda de choque, velocidade sob a qual a superfície de contato também se desloca.

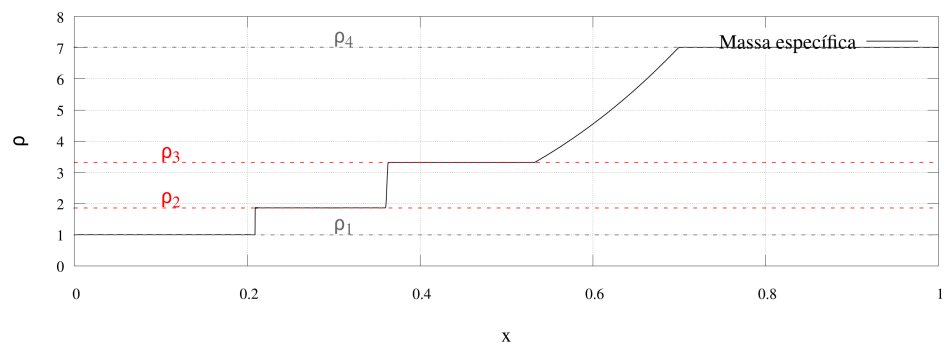
Partindo para a análise do leque de expansão, esta perturbação é observada na Fig. 61 e 62 como um gradiente contínuo entre os estados (3) e (4), limitado pelas retas de inclinação $\theta_{E_{h1}}$ e $\theta_{E_{t1}}$. Esta curva suave que leva o escoamento do estado (4) ao estado (3) também é observada nos gráficos presentes na Fig. 64. O leque de expansão é responsável pela expansão isentrópica do escoamento, como dito anteriormente, resfriando o fluido até uma temperatura T_3 inferior à T_4 (Fig. 64b). Uma vez que o estado (4) se encontra em repouso, o fronte do leque de expansão se propaga em (4) com a velocidade de propagação do som no meio, a_4 . Seguindo a mesma lógica, a cauda do leque deve se propagar com a velocidade de propagação do som em (3) menos a velocidade do escoamento induzido pela onda de choque em (2) e (3), uma vez que o escoamento induzido e o leque de expansão se propagam em sentidos opostos. Estes valores são verificados na Tab. 9.



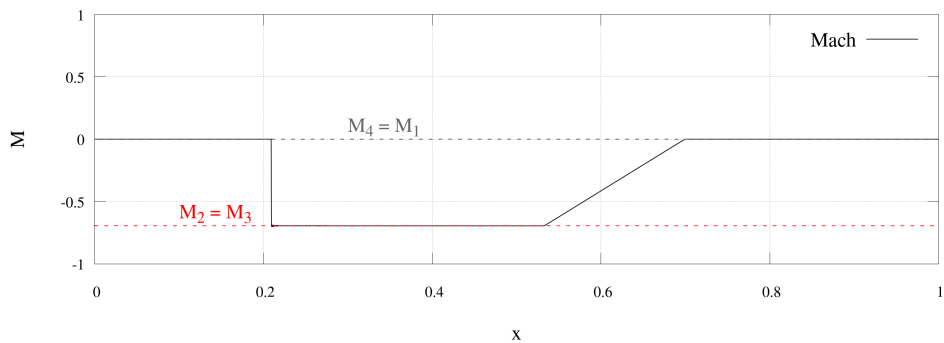
(a)



(b)



(c)

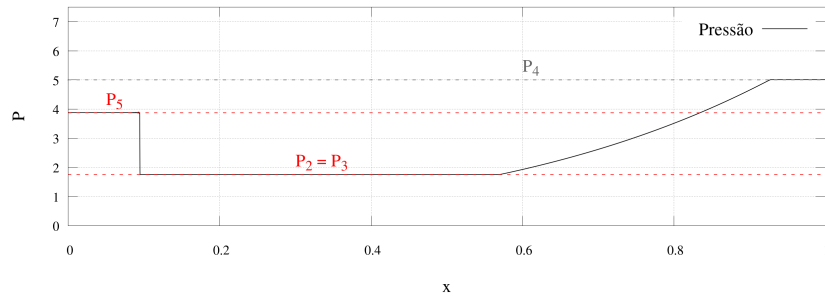


(d)

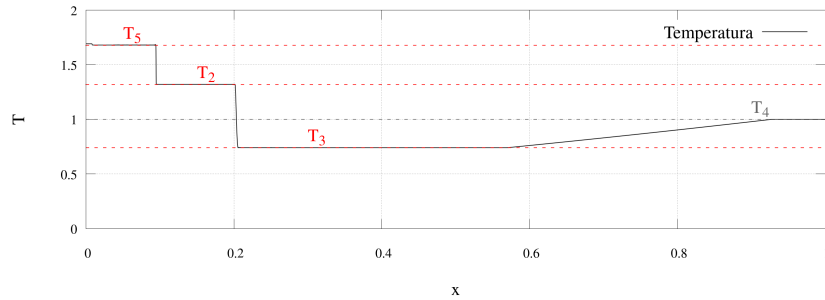
Figura 64 – Comparação entre valores adimensionais teóricos (linha tracejada) e numéricos (linha contínua) para as propriedades do escoamento em $t_1^* = 0,19909189$.

6.5.2 Resultados Obtidos após a Reflexão da Onda de Choque

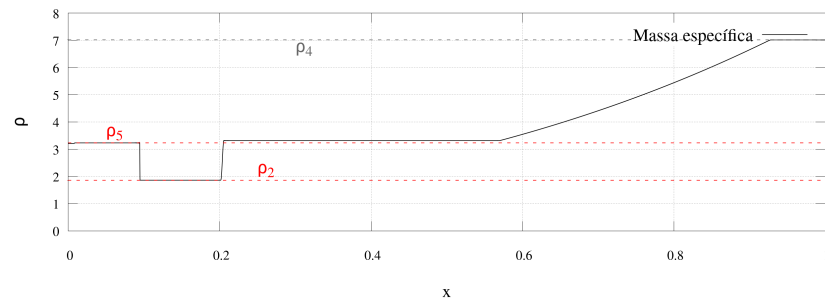
Como ambas extremidades do tubo de choque são fechadas, o choque é refletido quando alcança a parede à esquerda (Fig. 61) e reaquece o fluido até uma temperatura T_5 (Fig. 65b). Pelas condições de parede fixa, o escoamento subsequente à onda de choque refletida, no estado (5), é levado ao repouso (Fig. 65d).



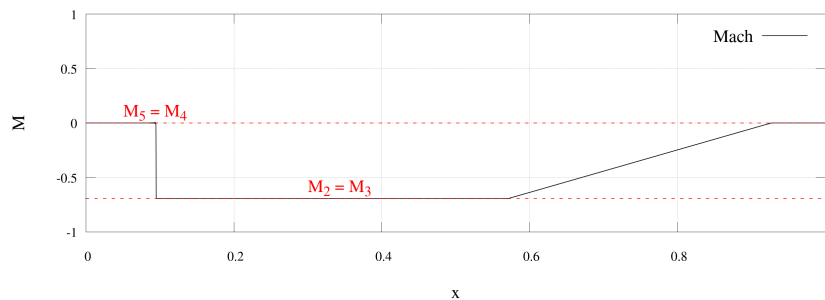
(a)



(b)



(c)



(d)

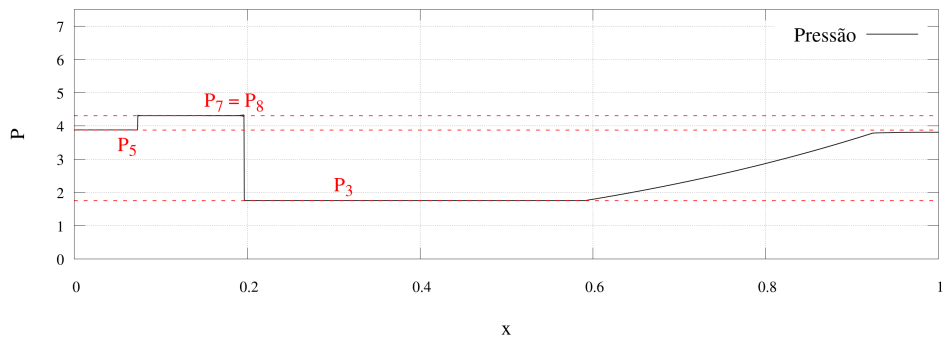
Figura 65 – Comparação entre valores adimensionais teóricos (linha tracejada) e numéricos (linha contínua) para as propriedades do escoamento em $t_2^* = 0,42662547$.

6.5.3 Resultados Obtidos após a Interação entre Onda de Choque e Superfície de Contato

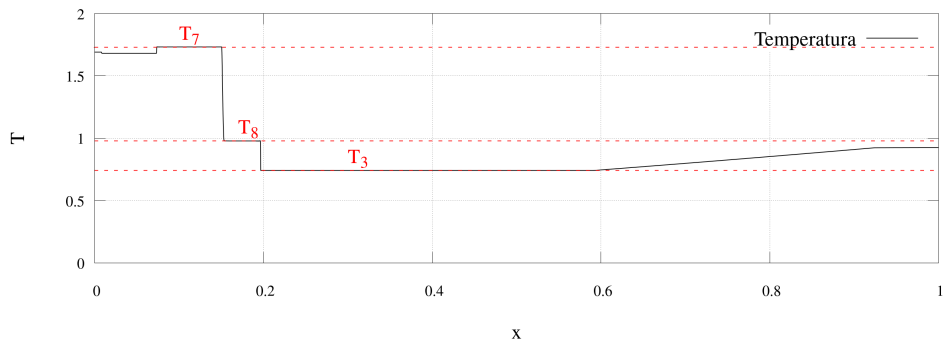
Por fim, o último fenômeno analisado, no que concerne ondas de choque, foi sua interação com a superfície de contato. A onda de choque refletida se refrata no ponto onde se encontra com a superfície de contato. Como dito no Cap. 3, após a ocorrência deste fenômeno, parte da onda de choque é transmitida e outra parte é refletida também na forma de onda de choque. A onda de choque refratada é notada como a reta de inclinação θ_{S_3} que separa o novo estado (8) do estado (3), e a nova onda de choque refletida é percebida como a reta que separa o estado (7) do estado (5) (Fig. 61). Nota-se que os novos estados (7) e (8) são separados pela superfície de contato. Através de uma superfície de contato, os valores de pressão estática e velocidade do escoamento devem se manter iguais (Fig. 66a e 66d), porém as condições de temperatura e massa específica não necessariamente (Fig. 66b e 66c). Quando a onda de choque alcança a superfície de contato, ela passa de uma região muito mais quente e pouco densa, o estado (2), para uma região mais fria e densa resultante da expansão isentrópica anterior do fluido, estado (3). Por isso é observada uma grande desaceleração do choque, dado por θ_{S_3} na Fig. 61. As regiões (9) em diante podem ser analisadas da mesma forma, como sucessiva reflexões e refrações da onda de choque.

6.5.4 Resultados Obtidos após a Reflexão do Leque de Expansão

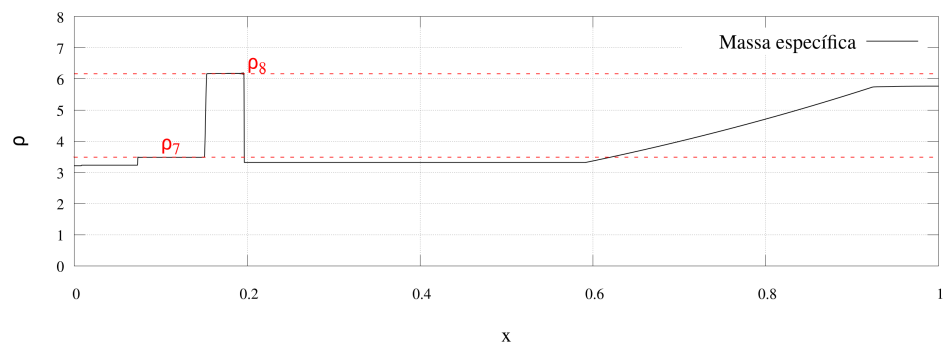
Da mesma maneira que ocorre na reflexão da onda de choque, o escoamento é levado à estagnação após a reflexão completa do leque de expansão, como mostrado na Fig. 67d. Agora, o leque de expansão refletido é observado na Fig. 62 como o gradiente contínuo entre os estados (3) e (6), limitado pelas retas de inclinação $\theta_{E_{h2}}$ e $\theta_{E_{t2}}$. Na reflexão, o fronte do leque passa a se propagar com a velocidade de propagação do som em (3) mais a velocidade do escoamento induzido pela onda de choque em (2) e (3), dado que ambas se propagam no mesmo sentido. Uma vez que o estado (6) se encontra em repouso, a cauda do leque de expansão se propaga com a velocidade de propagação do som no meio, a_6 . Novamente, estes valores obtidos na simulação são verificados com valores teóricos, na Tab. 9. Também se observa a queda de pressão, temperatura e densidade para valores ainda inferiores aos do estado (1) (Fig. 67a, 67b e 67c).



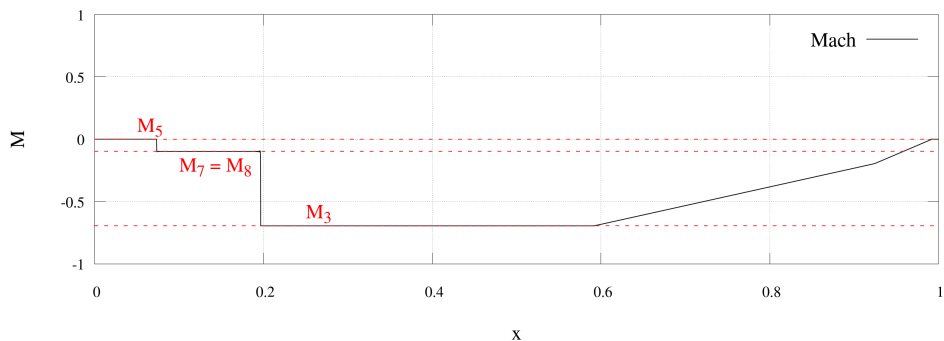
(a)



(b)

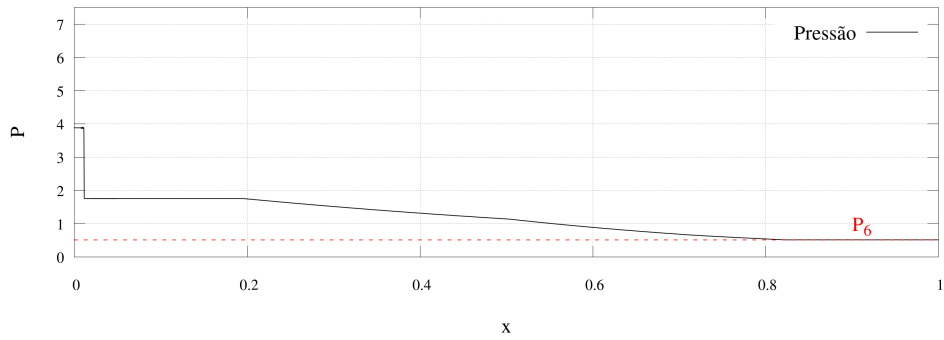


(c)

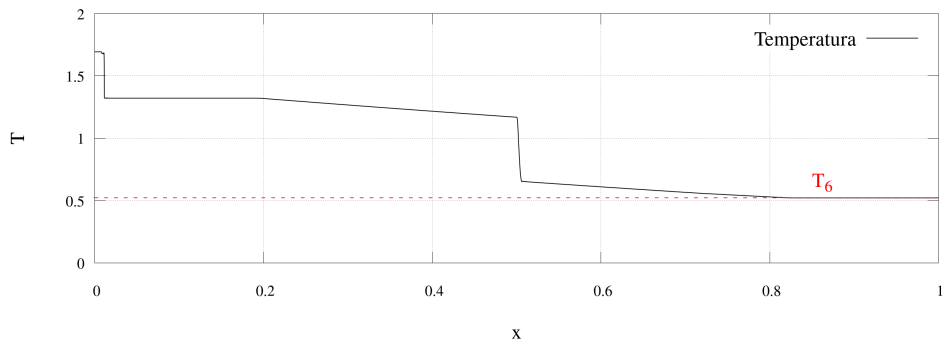


(d)

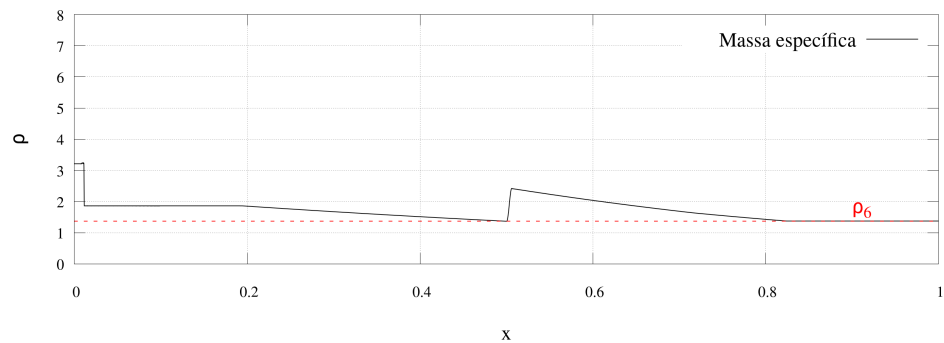
Figura 66 – Comparação entre valores adimensionais teóricos (linha tracejada) e numéricos (linha contínua) para as propriedades do escoamento em $t_3^* = 0,55461312$.



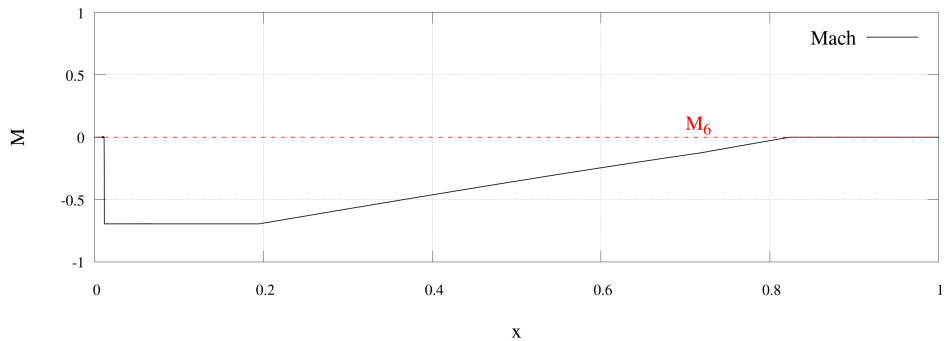
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 67 – Comparação entre valores adimensionais teóricos (linha tracejada) e numéricos (linha contínua) para as propriedades do escoamento em $t_4^* = 0,59727566$.

6.5.5 Análise de resultados

Após a compreensão do regime de escoamento que se dá no interior de um tubo de choque, prossegue-se para a verificação dos resultados obtidos. Nas Tabelas 5, 6, 7 e 8 são apresentados os valores numéricos adimensionais para a pressão P , a temperatura T , a massa específica ρ e o número de Mach $M = u/a_1$ em diferentes estados em contraste com os respectivos resultados teóricos. Na quarta coluna das Tab. 5, 6 e 7 é apresentado o erro relativo ao valor exato das propriedades, constatando-se que mesmo no estado onde foi encontrado o maior erro, o mesmo não ultrapassou 0,1%. Na quarta coluna da Tab. 8 foi apresentada a diferença entre o valor esperado e o valor numérico do número de Mach local do escoamento, ΔM . Para os estados onde era esperado o escoamento em repouso, os estados (5), (9) e (12), obteve-se a resposta precisa até a quinta casa decimal no pior dos casos. Para os outros estados, o maior erro com relação ao valor teórico ocorreu na região (14), inferior à 0,6%.

Como discutido anteriormente, é possível observar a velocidade de propagação das perturbações (ondas de choque, leque de expansão e superfície de contato) pela inclinação das linhas que se formam no diagrama à medida que estas se movem no espaço e no tempo. Os ângulos obtidos em simulações (Fig. 61 e 62) foram computados através do software de processamento de imagens *ImageJ*. Com isso, foi possível contrastar os valores teóricos aos numéricos (Tab. 9). Houve grande concordância entre os resultados, visto que o erro de maior magnitude encontrado foi inferior a 2%, na velocidade de propagação da onda de choque primária, relacionada a θ_{S_1} .

Tabela 5 – Valores adimensionais teóricos e numéricos para a pressão em um tubo de choque.

| Estado | Teórico | Numérico | Erro (%) |
|--------|------------|------------|----------|
| 1 | 0,71428571 | 0,71428571 | 0,000 |
| 2 | 1,75595238 | 1,75673640 | 0,045 |
| 3 | 1,75595238 | 1,75675090 | 0,045 |
| 4 | 5,00807608 | 5,00807610 | 0,000 |
| 5 | 3,87520525 | 3,87818250 | 0,077 |
| 6 | 0,51168348 | 0,51223894 | 0,109 |
| 7 | 4,30615226 | 4,31010710 | 0,092 |
| 8 | 4,30615226 | 4,31008910 | 0,091 |
| 9 | 4,77753460 | 4,78256680 | 0,105 |
| 10 | 4,84780249 | 4,85307450 | 0,109 |
| 11 | 4,84780249 | 4,85312930 | 0,110 |
| 12 | 4,91895438 | 4,92446550 | 0,112 |
| 13 | 4,92913186 | 4,93467720 | 0,113 |
| 14 | 4,92913186 | 4,93467450 | 0,112 |

Tabela 6 – Valores adimensionais teóricos e numéricos para a temperatura em um tubo de choque.

| Estado | Teórico | Numérico | Erro (%) |
|--------|------------|------------|----------|
| 1 | 1,00000000 | 1,00000000 | 0,000 |
| 2 | 1,32021605 | 1,32110240 | 0,067 |
| 3 | 0,74123310 | 0,74133085 | 0,013 |
| 4 | 1,00000000 | 1,00000000 | 0,000 |
| 5 | 1,67901235 | 1,68021550 | 0,072 |
| 6 | 0,52113659 | 0,52129827 | 0,031 |
| 7 | 1,73042556 | 1,73168180 | 0,073 |
| 8 | 0,97773951 | 0,97791037 | 0,017 |
| 9 | 1,78261254 | 1,78403470 | 0,080 |
| 10 | 1,79006472 | 1,79145140 | 0,077 |
| 11 | 1,01145321 | 1,01168500 | 0,023 |
| 12 | 1,79753244 | 1,79900060 | 0,082 |
| 13 | 1,79859427 | 1,80000700 | 0,079 |
| 14 | 1,01627277 | 1,01651360 | 0,024 |

Tabela 7 – Valores adimensionais teóricos e numéricos para a massa específica em um tubo de choque.

| Estado | Teórico | Numérico | Erro (%) |
|--------|------------|------------|----------|
| 1 | 1,00000000 | 1,00000000 | 0,000 |
| 2 | 1,86206897 | 1,86165050 | 0,022 |
| 3 | 3,31654554 | 3,31761630 | 0,032 |
| 4 | 7,01130651 | 7,01130650 | 0,000 |
| 5 | 3,23123732 | 3,23140430 | 0,005 |
| 6 | 1,37460483 | 1,37567020 | 0,078 |
| 7 | 3,48389049 | 3,48456040 | 0,019 |
| 8 | 6,16586844 | 6,17042720 | 0,074 |
| 9 | 3,75210444 | 3,75306250 | 0,026 |
| 10 | 3,79144028 | 3,79262540 | 0,031 |
| 11 | 6,71007163 | 6,71590560 | 0,087 |
| 12 | 3,83110534 | 3,83226770 | 0,030 |
| 13 | 3,83676558 | 3,83806720 | 0,034 |
| 14 | 6,79028781 | 6,79631260 | 0,089 |

Tabela 8 – Valores teóricos e numéricos para o número de Mach local em um tubo de choque.

| Estado | Teórico | Numérico | Erro (ΔM) |
|--------|------------|------------|---------------------|
| 1 | 0,00000000 | 0,00000000 | 0,00000000 |
| 2 | 0,69444444 | 0,69496879 | 0,00052435 |
| 3 | 0,69444444 | 0,69497565 | 0,00053121 |
| 4 | 0,00000000 | 0,00000000 | 0,00000000 |
| 5 | 0,00000000 | 0,00000511 | 0,00000511 |
| 6 | 0,00000000 | 0,00000002 | 0,00000002 |
| 7 | 0,09834621 | 0,09851073 | 0,00016452 |
| 8 | 0,09834621 | 0,09851653 | 0,00017032 |
| 9 | 0,00000000 | 0,00000068 | 0,00000068 |
| 10 | 0,01393905 | 0,01397702 | 0,00003797 |
| 11 | 0,01393905 | 0,01396944 | 0,00003039 |
| 12 | 0,00000000 | 0,00000141 | 0,00000141 |
| 13 | 0,00197967 | 0,00198345 | 0,00000378 |
| 14 | 0,00197310 | 0,00198397 | 0,00001087 |

Tabela 9 – Valores teóricos e numéricos para o ângulo de propagação das perturbações em um tubo de choque.

| Ângulo | Teórico (°) | Numérico (°) | Erro (%) |
|-------------------|-------------|--------------|----------|
| θ_{S_1} | 33,69 | 34,35 | 1,97 |
| θ_{S_2} | 46,64 | 45,94 | 1,49 |
| θ_{S_3} | 59,23 | 58,43 | 1,35 |
| θ_{S_5} | 36,41 | 36,40 | 0,02 |
| θ_{S_7} | 38,05 | 38,06 | 0,01 |
| θ_{S_8} | 46,70 | 46,73 | 0,06 |
| θ_{S_9} | 36,66 | 36,75 | 0,25 |
| $\theta_{S_{10}}$ | 36,89 | 36,82 | 0,18 |
| $\theta_{S_{11}}$ | 45,03 | 45,07 | 0,08 |
| $\theta_{S_{12}}$ | 36,69 | 36,42 | 0,75 |
| θ_{CS_1} | 55,22 | 55,03 | 0,35 |
| θ_{CS_2} | 84,38 | 84,47 | 0,11 |
| θ_{CS_3} | 89,20 | 89,01 | 0,22 |
| θ_{CS_4} | 89,89 | 89,73 | 0,17 |
| $\theta_{E_{h1}}$ | 45,00 | 44,90 | 0,22 |
| $\theta_{E_{t1}}$ | 80,55 | 80,61 | 0,07 |
| $\theta_{E_{h2}}$ | 32,74 | 32,60 | 0,42 |
| $\theta_{E_{t2}}$ | 54,17 | 54,19 | 0,03 |

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

7.1 Conclusões

Foram implementados com êxito os métodos de cálculo explícito e implícito dos fluxos das variáveis dependentes F para as Equações de Euler, assim como a marcha temporal através dos métodos de Runge-Kutta e *multistep*. Realizou-se a verificação dos resultados gerados pelas duas metodologias, cálculo implícito dos fluxos e método de *multistep* para a marcha temporal; e foi feita a avaliação dos custos computacionais envolvidos. Com isso, observou-se que o método implícito gera respostas mais precisas sem a necessidade de amortecimento demasiado da resposta e que o método *multistep* adiciona grande vantagem com relação ao tempo de execução do código quando o espaço para armazenamento das matrizes não é uma questão. Assim, pode-se implementar estas metodologias ao código VAT conforme forem convenientes.

Utilizando o caso do tubo de choque, foi realizado um estudo de convergência de malha. Deste, obteve-se a ordem de convergência real do código como de primeira ordem, tanto com o uso de métodos explícitos quanto implícitos; embora o último apresente uma ordem ligeiramente maior. Nenhum dos dois métodos alcançaram a quarta ordem de convergência formal na presença de um choque em movimento. Porém, através da avaliação do erro local, observou-se que o mesmo se localiza principalmente nas regiões de descontinuidade geradas pelas ondas de choque presentes. O que pode indicar a oscilação numérica, que se originam nesta região, e o espalhamento do choque como fatores relevantes. Considerando esta hipótese, tentou-se escolher coeficientes de dissipação de forma a manter a oscilação numérica contida numa faixa restrita, ou o menor possível, com o objetivo de manipular essas características e melhorar a ordem de convergência. Entretanto, tal medida se mostrou ineficiente.

Foram ainda realizadas duas simulações de choque normal utilizando o método Runge-Kutta para a marcha no tempo e os métodos explícito e implícito para cálculo dos fluxos. Neste cenário observou-se que, na ausência de uma derivada temporal, o método implícito não diverge, mesmo sem o uso de dissipação artificial; e a ordem de convergência para este caso explode em níveis de refinamento superiores. Este pode ser um indicativo de que origem da baixa ordem de convergência do método esteja no transiente do choque, ou seja, como é realizada a marcha temporal.

Na etapa de verificação, foram escolhidas 14 regiões, onde ocorrem diversos fenômenos de escoamentos compressíveis, como propagação, reflexão e refração de ondas de choque e leques de expansão. Comparando os valores obtidos em simulação a valores teóricos, seguindo a teoria clássica de tubos de choque, obteve-se grande concordância entre ambos. Para as variáveis primitivas de pressão, temperatura, massa específica e número de Mach local, foram encontrados erros inferiores a 1%. Com relação às velocidades de propagação de ondas de choque, superfície de contato e leque de expansão, os erros encontrados foram inferiores a 2%.

Tendo estabelecido uma metodologia consistente para análise de convergência e verificação de resultados, valendo-se do caso teste do tubo de choque, esta pode ser aplicada para quaisquer novos métodos que se deseje implementar futuramente ao código VAT.

7.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Como proposta de aprofundamento deste trabalho, pode-se realizar uma investigação mais profunda de casos de solução permanente. Como foi visto na seção de resultados, um caso de choque normal estacionário obteve uma ordem de convergência muito superior ao caso onde a resposta era transiente. Assim, pode-se realizar a análise de convergência do método implícito para um caso de escoamento permanente bidimensional, por exemplo, e comparar sua ordem de convergência à mesma encontrada para aquele caso unidimensional do choque normal.

Outra sugestão, seria o estudo da influência das constantes de calibração utilizando o caso unidimensional do choque normal. Este é um caso extremamente conveniente uma vez que é de simples verificação e visualização. Além disso, pode-se desenvolver um parâmetro para calibração da dissipação para diversos outros problemas mais complexos utilizando o que é observado neste caso mais trivial.

Por fim, este trabalho também revela a necessidade de se investigar maneiras mais efetivas de controle da oscilação numérica para problemas em que a solução não é suave.

Referências

- ABANTO, J. et al. Verification of some commercial cfd codes on atypical cfd problems. In: _____. *43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. [S.l.: s.n.], 2005. Citado na página 1.
- AIAA. *Guide for the verification and validation of computational fluid dynamics simulations*. Reston, VA, 1998. Citado na página 1.
- ANDERSON, J. D. *Computational Fluid Dynamics: The basics with applications*. 1. ed. [S.l.]: McGraw Hill, 1995. Citado 3 vezes nas páginas 4, 24 e 38.
- ANDERSON, J. D. *Modern Compressible Flow: With historical perspective*. 3. ed. [S.l.]: McGraw Hill, 2003. Citado na página 12.
- ANDERSON, J. D.; TANNEHILL, J. C.; PLETCHER, R. H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. 2. ed. [S.l.]: Taylor and Francis, 1997. Citado 3 vezes nas páginas 23, 28 e 32.
- BANKS, J.; ASLAM, T.; RIDER, W. On sub-linear convergence for linearly degenerate waves in capturing schemes. *Journal of Computational Physics*, v. 227, n. 14, p. 6985 – 7002, 2008. Citado na página 5.
- BOIXO, S. et al. Characterizing quantum supremacy in near-term devices. *Nature Physics*, v. 14, n. 6, p. 595–600, 2018. Citado na página 2.
- BONFIGLIOLI, A.; PACIORRI, R. Convergence analysis of shock-capturing and shock-fitting solutions on unstructured grids. *AIAA Journal*, v. 52, n. 7, p. 1404–1416, 2014. Citado 4 vezes nas páginas vi, 4, 5 e 35.
- CARPENTER, M. H.; CASPER, J. H. Accuracy of shock capturing in two spatial dimensions. *AIAA Journal*, v. 37, n. 9, p. 1072–1079, 1999. Citado na página 2.
- FLOW-3D. *Implicit vs. Explicit Numerical Methods*. 2020. Flow-3D. Acesso em: 9 de dez. de 2020. Disponível em: <<https://www.flow3d.com/resources/cfd-101/numerical-issues/implicit-versus-explicit-numerical-methods/>>. Citado na página 2.
- GLASS, I. I.; MERTIN, W.; PATTERSON, G. N. *A Theoretical and Experimental Study of the Shock Tube*. 1953. Citado na página 21.
- GLASS, I. I.; PATTERSON, G. N. Theoretical and experimental study of shock-tube flows. *Journal of the Aeronautical Sciences*, v. 22, n. 2, p. 73–100, 1955. Citado na página 13.
- HARROW, A.; HASSIDIM, A.; LLOYD, S. Quantum algorithm for linear systems of equations. *Physical review letters*, v. 103, p. 150502, 10 2009. Citado na página 2.

- HIRSCH, C. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. 2. ed. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 2007. v. 1. Citado na página 29.
- HOLDER, D. W.; SCHULTZ, D. L. On the flow in a reflected-shock tunnel. *Aerodynamics Division, N.P.L.*, Agosto 1960. Citado na página 13.
- JAMESON, A.; SCHMIDT, W.; TURKEL, E. Numerical solutions of the euler equations by finite-volume methods using runge-kutta time-stepping schemes. In: *14th AIAA Fluid and Plasma Dynamics Conference*. [S.l.: s.n.], 1981. Citado na página 29.
- KAMM, J.; RIDER, W.; BROCK, J. Combined space and time convergence analysis of a compressible flow algorithm. In: _____. *16th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*. [S.l.]: AIAA, 2003. Citado na página 5.
- MENDONÇA, A. F. *Simulação Numérica do escoamento Transônico Laminar em uma Base Bidimensional*. Dissertação — Universidade de Brasília, Brasília, 2004. Citado na página 29.
- MISERDA, R. F. B.; PIMENTA, B. G.; ROCHA, L. S. da. Numerical simulation of rotor-stator interaction noise in transonic cascades. *Journal of Propulsion and Power*, v. 36, n. 3, p. 363–380, 2020. Citado 2 vezes nas páginas vi e 4.
- NASEM. *Quantum Computing: Progress and Prospects*. Washington, DC: The National Academies Press, 2019. ISBN 978-0-309-47969-1. Citado na página 2.
- OBERKAMPF, W. L.; ROY, C. J. *Verification and Validation in Scientific Computing*. 2. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010. Citado 3 vezes nas páginas 1, 2 e 5.
- OBERKAMPF, W. L.; TRUCANO, T. G. Verification and validation in computational fluid dynamics. *Progress in Aerospace Sciences*, v. 38, n. 3, p. 209 – 272, 2002. Citado na página 1.
- PIMENTA, B. G. *Simulação numérica de ondas não-lineares em dinâmica dos gases e ruído de interação rotor-estator em turbofans aeronáuticos*. Tese — Universidade de Brasília, Brasília, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 29.
- PIMENTA, B. G.; MISERDA, R. F. B. Numerical simulation of multiple pure tone noise generated by supersonic rotor-stator interaction. *Journal of Propulsion and Power*, AIAA, v. 35, n. 3, p. 530–543, 2019. Citado 5 vezes nas páginas vi, 2, 3, 4 e 61.
- ROY, C. Strategies for driving mesh adaptation in cfd (invited). *47th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, 2009. Citado na página 5.
- ROY, C. J. Grid convergence error analysis for mixed-order numerical schemes. *AIAA Journal*, v. 41, n. 4, p. 595–604, 2003. Citado na página 2.
- RUUTH, S. J.; HUNSDORFER, W. High-order linear multistep methods with general monotonicity and boundedness properties. *J. Comput. Phys.*, Academic Press Professional, Inc., USA, v. 209, n. 1, p. 226–248, out. 2005. ISSN 0021-9991. Citado 3 vezes nas páginas x, 33 e 34.
- SALKUYEH, D. K. Positive integer powers of the tridiagonal toeplitz matrices. *International Mathematical Forum*, v. 1, 01 2006. Citado na página 28.

YEE, H. C. Explicit and implicit multidimensional compact high-resolution shock-capturing methods: Formulation. *Journal of Computational Physics*, v. 131, p. 216–232, 1997. Citado na página [33](#).