

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

CARLOS EDUARDO AMÉRICO

PREVISÕES NUMÉRICAS DO ESCOAMENTO BIDIMENSIONAL COMPRESSÍVEL
TURBULENTO EM TUBEIRAS DE MOTOR-FOGUETE

CURITIBA

2021

CARLOS EDUARDO AMÉRICO

PREVISÕES NUMÉRICAS DO ESCOAMENTO BIDIMENSIONAL COMPRESSÍVEL
TURBULENTO EM TUBEIRAS DE MOTOR-FOGUETE

Dissertação apresentada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica do Curso de Mestrado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, na área de concentração Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos, na linha de pesquisa CFD, Propulsão e Aerodinâmica de foguetes.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi.

Coorientador: Prof. Dr. Guilherme Bertoldo.

CURITIBA

2021

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

A512p Américo, Carlos Eduardo
Previsões numéricas do escoamento bidimensional
compressível turbulento em tubeiras de motor-foguete [recurso
eletrônico] / Carlos Eduardo Américo – Curitiba, 2021.

Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de
Tecnologia, Programa de Pós-graduação em Engenharia
Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi
Coorientador: Prof. Dr. Guilherme Bertoldo

1. Tubeiras. 2. Veículos espaciais - motor-foguete. I.
Universidade Federal do Paraná. II. Marchi, Carlos Henrique. III.
Bertoldo, Guilherme. IV. Título.

CDD: 629.475

Bibliotecária: Roseny Rivelini Morciani CRB-9/1585

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em ENGENHARIA MECÂNICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **CARLOS EDUARDO AMÉRICO** intitulada: **PREVISÕES NUMÉRICAS DO ESCOAMENTO BIDIMENSIONAL COMPRESSÍVEL TURBULENTO EM TUBEIRAS DE MOTOR-FOGUETE**, sob orientação do Prof. Dr. CARLOS HENRIQUE MARCHI, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua aprovação no rito de defesa.

A outorga do título de mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 10 de Agosto de 2021.



CARLOS HENRIQUE MARCHI
Presidente da Banca Examinadora



ARISTEU DA SILVEIRA NETO
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA)



DIOGO BERTA PITZ
Avaliador Interno (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente ao meu orientador, prof. Dr. Carlos Henrique Marchi e meu coorientador prof. Dr. Guilherme Bertoldo pela orientação e pelos conhecimentos compartilhados.

Agradeço aos membros da banca, prof. Dr. Diogo Berta Pitz e prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto pela prontidão em participar da banca, pelo tempo destinado à leitura do trabalho e pelas sugestões oferecidas.

Agradeço à Subdivisão de Aerodinâmica do Instituto de Aeronáutica e Espaço, em especial ao Dr. Cayo Prado Fernandes Francisco, Me. Eng. Edson Basso e 1º Ten. Eng. Ruan Passos pelo apoio com a operação dos programas comerciais e pelo período que passei no instituto.

Agradeço ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Paraná e à CAPES pelo auxílio prestado e apoio financeiro concedido.

Agradeço aos membros do grupo de CFD da UFPR pelas discussões e debates de ideias. Também agradeço aos demais amigos que contribuíram de certa forma para a elaboração deste trabalho.

Por fim, agradeço aos meus pais pelo apoio e incentivo incondicional desde o primeiro dia da execução deste trabalho.

RESUMO

A compreensão de como o escoamento em uma tubeira de motor-foguete se desenvolve é de vital importância para que previsões e dimensionamentos tornem-se possíveis de serem realizados. No presente trabalho abordam-se previsões computacionais para uma tubeira de motor-foguete, que é o dispositivo por onde gases com elevada temperatura e velocidade, oriundos da queima do propelente são acelerados e expandidos, obtendo por este fenômeno o empuxo necessário para propulsar o veículo. Neste trabalho, módulos e sub-rotinas para modelos de fechamento são gerados e implementados a um código já existente, chamado de Mach2D. Tais módulos e sub-rotinas são programados em linguagem Fortran 2008, permitindo que o usuário escolha qual modelo computacional será habilitado ao iniciar cada simulação. Os procedimentos de verificação de código através do método das soluções fabricadas, verificação de solução por estimativas de erro e incertezas e validação de resultados computacionais são explorados, através de comparações realizadas entre resultados obtidos com o Mach2D, programas de *benchmark* ou comerciais, como o CFD++, e com resultados experimentais de uma tubeira instrumentada, submetida a diversas corridas de testes. Para as simulações computacionais foram considerados os modelos computacionais de Euler, explícito e implícitos com o modelo de fechamento Baldwin-Lomax e com o modelo Spalart-Allmaras, discretizados através do método de volumes finitos para o problema considerado bidimensional axissimétrico. As malhas utilizadas foram classificadas em duas classes, uma com distribuição uniforme de volumes nas duas direções e outra com distribuição uniforme na direção axial e para a direção radial, distribuição em progressão geométrica. A razão de refino de malha foi adotada como sendo constante e igual a dois, iniciando com malhas 20x20 e refinando-as até 640x640. As variáveis globais avaliadas, ou seja, o coeficiente de descarga e coeficiente de empuxo tiveram seus erros estimados com os estimadores GCI, convergente e MER, seus valores computacionais foram comparados aos valores experimentais e analíticos. Variáveis locais como pressão e temperatura na parede também tiveram seus valores avaliados e comparados com resultados experimentais e entre os programas utilizados. Os processos de mudança de coordenadas e de discretização da equação do modelo Spalart-Allmaras são apresentados e sua implementação, assim como as tratativas de problemas encontrados são discutidas. Foi constatado que ao se comparar os resultados computacionais com resultados experimentais, as simulações para o coeficiente de descarga tiveram maior representatividade quando calculados pelo Mach2D com variações de até 4,378%. Para o coeficiente de empuxo, a maior representatividade se deu com o CFD++, apresentando variações de até 0,490% em relação à solução quase-unidimensional. Para a distribuição de pressão nas paredes, as simulações tanto com o Mach2D, quanto com o CFD++ foram suficientemente representativas, o mesmo é válido para as distribuições de temperatura na parede ao se aplicar o modelo de Euler. Os desvios encontrados entre os valores computacionais para temperatura obtidos ao se empregar os modelos viscosos em relação aos valores experimentais também são discutidos.

Palavras-chave: Baldwin-Lomax. Spalart-Allmaras. Tubeira de motor-foguete. Mach2D.

ABSTRACT

Understanding how the flow develops inside a rocket nozzle is extremely important for predictions and sizing. This dissertation addresses computational predictions for rocket nozzles, which are the equipment responsible for lead gases from the propellant combustion, flowing with high velocity and temperature. Gases receive compression and expansion, thrust is generated due to this effect, which is the force responsible for moving the rocket against gravity and drag components. In this study, modules and subroutines are developed and were inserted into Mach2D code. These modules are written in Fortran 2008 language and the user will be able to select a specific computational method that may or not contain some closure model. The generated codes received code verification by the method of manufactured solutions, solution verification by computational uncertainty evaluations, and solution validation through benchmark programs results and experimental data. Four different computational models were used: Euler's model; explicit model; explicit model with the Baldwin-Lomax closure model, and the explicit model with the Spalart-Allmaras closure model. They were discretized by the finite volume method for the bidimensional axisymmetric nozzle problem. Two different grid classification were used, the first one has uniform elements distribution for both directions and, the second have geometric progression grid distribution at the radial direction and uniform distribution for axial direction. Grid refinement was considered constant and equal to two for both of them since the initial grid had 20x20 elements and the last, 640x640 elements. The evaluated global parameters, discharge coefficient, and thrust coefficient had their errors evaluated with three estimators, GCI, convergent, and RRE, extrapolated computational values were compared with experimental and analytical values and also, between programs. Pressure and temperature at the wall, as local variables, were evaluated and its values were compared with analytical, computational, and experimental results. The coordinate exchange process and discretization of each term that belongs to the Spalart-Allmaras closure model were presented. Problems related to code implementation and solutions approaches were also discussed. Comparisons between computational and experimental results suggest that for the discharge coefficient, simulations performed with Mach2D code were in better agreement with experimental and quasi-one-dimensional results than CFD++, having a variance up to 4.378%. For thrust coefficient, the picture changes and CFD++ computational results were in the best fit with quasi-one-dimensional results, having a variance up to 0.490%. Pressure distribution at the wall, for both CFD++ and Mach2D, was considered sufficiently representative of experimental measurements, the same occurs for the temperature at the wall for Euler's methods. Variations for computational results with viscous models for temperature distribution at the wall were also discussed.

Keywords: Baldwin-Lomax model. Spalart-Allmaras model. Rocket nozzle. Mach2D.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIGURA 1 – CAMADA LIMITE TURBULENTA SOBRE UMA PLACA PLANA.	28
FIGURA 2 – VISTA DA ATMOSFERA DE JÚPITER.	29
FIGURA 3 – TUBEIRAS E MOTORES FABRICADOS PELA NPO ENERGO-MASH.	31
FIGURA 4 – GEOMETRIA DO PROBLEMA.	33
FIGURA 5 – GEOMETRIA DO PROBLEMA COM COTAS E MEDIDAS.	87
FIGURA 6 – MALHA GENÉRICA NO SISTEMA DE COORDENADAS RETANGULARES.	88
FIGURA 7 – VOLUME DE CONTROLE GENÉRICO NO SISTEMA DE COORDENADAS CURVILÍNEAS.	89
FIGURA 8 – REPRESENTAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO.	90
FIGURA 9 – MALHAS BASE DE 20×20 VOLUMES.	92
FIGURA 10 – MALHAS INTERMEDIÁRIAS DE 80×80 VOLUMES.	92
FIGURA 11 – AVALIAÇÃO DE CONVERGÊNCIA DA SIMULAÇÃO E-6.	94
FIGURA 12 – CONTORNOS DO CFD++ PARA AS SIMULAÇÕES VISCOSAS.	95
FIGURA 13 – MALHA DO CFD++ PARA AS SIMULAÇÕES VISCOSAS.	97
FIGURA 14 – C_d E C_f CALCULADOS COMPUTACIONALMENTE COM O PROGRAMA MACH2D EM RELAÇÃO À h_m PARA OS QUATRO MODELOS COMPUTACIONAIS.	111
FIGURA 15 – pU^* PARA C_f E C_d OBTIDOS COM O MACH2D.	122
FIGURA 16 – U_{GCI} DE C_d E C_f PARA OS QUATRO MODELOS COMPUTACIONAIS DO MACH2D EM RELAÇÃO À h_m .	123
FIGURA 17 – U_c DE C_d E C_f PARA OS QUATRO MODELOS COMPUTACIONAIS DO MACH2D EM RELAÇÃO À h_m .	123
FIGURA 18 – U_{ψ^*} DE C_d E C_f PARA OS QUATRO MODELOS COMPUTACIONAIS DO MACH2D EM RELAÇÃO À h_m .	124
FIGURA 19 – ERROS ESTIMADOS E VALORES EXTRAPOLADOS PARA C_d OBTIDOS COM O MACH2D.	125
FIGURA 20 – ERROS ESTIMADOS E VALORES EXTRAPOLADOS PARA C_f OBTIDOS COM O MACH2D.	125
FIGURA 21 – DISTRIBUIÇÕES DE p_{wall} UTILIZANDO MODELOS COMPUTACIONAIS VISCOSOS E INVÍSCIDOS, OBTIDAS COM O MACH2D E CFD++ ACOMPANHADAS DA DISTRIBUIÇÃO DE PRESSÃO EXPERIMENTAL.	126

FIGURA 22 – DISTRIBUIÇÕES COMPUTACIONAIS DE p_{wall} OBTIDAS COM O MACH2D, ASSOCIADAS À DISTRIBUIÇÃO DE PRESSÃO ANALÍTICA E EXPERIMENTAL COM A BANDA DE INCERTEZA.	127
FIGURA 23 – DISTRIBUIÇÕES COMPUTACIONAIS E EXPERIMENTAIS DE p_{wall} .	128
FIGURA 24 – CAMPOS DE PRESSÃO [KPA] QUE APRESENTARAM MENORES DESVIOS PERCENTUAIS MÉDIOS DE p_{wall} EM RELAÇÃO AOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS TANTO COM O MACH2D QUANTO COM O CFD++.	129
FIGURA 25 – DISTRIBUIÇÃO DE T_{wall} UTILIZANDO MODELOS COMPUTACIONAIS VISCOSOS E INVÍSCIDOS COM O MACH2D E CFD++.	132
FIGURA 26 – DISTRIBUIÇÃO DE T_{wall} UTILIZANDO MODELOS COMPUTACIONAIS VISCOSOS COM O MACH2D E CFD++.	133
FIGURA 27 – CAMPOS DE TEMPERATURA [K] QUE APRESENTARAM MENORES DESVIOS PERCENTUAIS MÉDIOS DE T_{wall} EM RELAÇÃO AOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS TANTO COM O MACH2D QUANTO COM O CFD++.	135
FIGURA 28 – CAMPOS DE NÚMERO DE MACH E DE MASSA ESPECÍFICA PARA A SIMULAÇÃO E-6.	135
FIGURA 29 – CAMPOS DE NÚMERO DE MACH NA REGIÃO TRANSÔNICA PARA A SIMULAÇÃO E-6.	136
FIGURA 30 – CAMPO DE MASSA ESPECÍFICA EM CONJUNTO COM A VISUALIZAÇÃO SCHLIEREN OBTIDA COMPUTACIONALMENTE.	137
FIGURA B.1 – VOLUME DE CONTROLE GENÉRICO NO SISTEMA DE COORDENADAS CURVILÍNEAS.	157
FIGURA C.1 – CAMPOS DE PRESSÃO OBTIDOS COM O MODELO DE EULER.	165
FIGURA C.2 – CAMPOS DE PRESSÃO OBTIDOS COM O MODELO EXPLÍCITO.	165
FIGURA C.3 – CAMPOS DE PRESSÃO OBTIDOS COM O MODELO SA.	166
FIGURA C.4 – CAMPO DE PRESSÃO OBTIDO COM O MODELO BLM.	166
FIGURA C.5 – CAMPOS DE TEMPERATURA OBTIDOS COM O MODELO DE EULER.	167
FIGURA C.6 – CAMPOS DE TEMPERATURA OBTIDOS COM O MODELO EXPLÍCITO.	167
FIGURA C.7 – CAMPOS DE TEMPERATURA OBTIDOS COM O MODELO SA.	168
FIGURA C.8 – CAMPO DE TEMPERATURA OBTIDO COM O MODELO BLM.	168
FIGURA C.9 – CAMPOS DE DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURA COM MODELOS EXPLÍCITO E SA FORA DA TUBEIRA.	169
FIGURA C.10 – CAMPOS DE MACH OBTIDOS COM O MODELO DE EULER.	169

FIGURA C.11–CAMPOS DE MACH OBTIDOS COM O MODELO EXPLÍCITO.	170
FIGURA C.12–CAMPOS DE MACH OBTIDOS COM O MODELO SA.	170
FIGURA C.13–CAMPO DE MACH OBTIDO COM O MODELO BLM.	171
FIGURA C.14–CAMPOS DE DISTRIBUIÇÃO DE MACH PARA EXPLÍCITO E SA FORA DA TUBEIRA.	171
FIGURA C.15–CAMPOS DE VELOCIDADES COM O MODELO DE EULER. . .	172
FIGURA C.16–CAMPOS DE VELOCIDADES COM O MODELO EXPLÍCITO. .	173
FIGURA C.17–CAMPOS DE VELOCIDADES COM O MODELO SA.	174
FIGURA C.18–CAMPOS DE VELOCIDADES COM O MODELO BLM.	175
FIGURA C.19–CAMPOS DE VELOCIDADES PARA MODELO EXPLÍCITO E MODELO SA FORA DA TUBEIRA.	176
FIGURA C.20–CAMPOS DE MASSA ESPECÍFICA COM MODELO DE EULER.	177
FIGURA C.21–CAMPOS DE MASSA ESPECÍFICA COM MODELO EXPLÍCITO.	177
FIGURA C.22–CAMPOS DE MASSA ESPECÍFICA COM MODELO SA.	178
FIGURA C.23–CAMPO DE MASSA ESPECÍFICA COM MODELO BLM.	178
FIGURA C.24–CAMPOS DE VISCOSIDADE DINÂMICA E VISCOSIDADE TUR- BULENTA COM O CFD++ PARA O MODELO SA.	179
FIGURA C.25–CAMPOS DE VISCOSIDADE DINÂMICA CALCULADA PELO MACH2D PARA O MODELO EXPLÍCITO.	179
FIGURA C.26–CAMPOS DE VISCOSIDADE DINÂMICA MAIS VISCOSIDADE TURBULENTA CALCULADA PELO MACH2D PARA O MO- DELO BLM.	180
FIGURA C.27–CAMPOS DE VISCOSIDADE DINÂMICA MAIS TURBULENTA CALCULADA PELO MACH2D PARA O MODELO SA NEGATIVO.	180

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – SÍMBOLOS EMPREGADOS NA Eq. 4.1.	79
TABELA 2 – SÍMBOLOS EMPREGADOS NA Eq. 4.11.	81
TABELA 3 – CONSTANTE DO GÁS R_g , FRAÇÃO MOLAR F_m E MASSA MOLAR M_m DE CADA COMPONENTE DA MISTURA GASOSA.	84
TABELA 4 – SÍMBOLOS EMPREGADOS NA Eq. 4.25.	84
TABELA 5 – SÍMBOLOS EMPREGADOS NA Eq. 4.26.	84
TABELA 6 – SÍMBOLOS EMPREGADOS NA Eq. 4.27.	85
TABELA 7 – PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS CALCULADAS: c_p ; μ E κ	86
TABELA 8 – PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS CALCULADAS: Pr ; γ_m ; M_m E R_g	86
TABELA 9 – DIMENSÕES DA TUBEIRA.	87
TABELA 10 – VISÃO GERAL DAS SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS COM O MACH2D.	94
TABELA 11 – DADOS DAS SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS COM O MACH2D.	110
TABELA 12 – RESULTADOS COMPUTACIONAIS OBTIDOS ATRAVÉS DOS PROGRAMAS CFD++ E MACH2D PARA C_d E C_f NAS MALHAS MAIS REFINADAS.	112
TABELA 13 – VALORES ANALÍTICOS, QUASE-UNIDIMENSIONAIS E EXPERIMENTAIS PARA C_d E C_f	112
TABELA 14 – DIFERENÇA PERCENTUAL PARA C_d E C_f OBTIDOS COM O CFD++, EM RELAÇÃO ÀS SOLUÇÕES ANALÍTICAS, QUASE-UNIDIMENSIONAIS E EXPERIMENTAIS.	113
TABELA 15 – RESULTADOS COMPUTACIONAIS, OBTIDOS COM O MACH2D, EXTRAPOLADOS E ACOMPANHADOS DOS ERROS ESTIMADOS PARA C_d	113
TABELA 16 – RESULTADOS COMPUTACIONAIS, OBTIDOS COM O MACH2D, EXTRAPOLADOS E ACOMPANHADOS DOS ERROS ESTIMADOS PARA C_f	114
TABELA 17 – DIFERENÇAS PERCENTUAIS ENTRE VALORES EXTRAPOLADOS PARA C_d E C_f OBTIDOS COM O MACH2D, EM RELAÇÃO ÀS SOLUÇÕES ANALÍTICAS, QUASE-UNIDIMENSIONAIS E EXPERIMENTAIS.	115
TABELA 18 – RESULTADOS PARA C_d , OBTIDOS COM O MACH2D: pU^* ; ϕ_{ψ^*} ; ϕ_c ; $\phi_{\infty}(pU^*)$; $\phi_{\infty}(p_o)$ E ϕ_{num} PARA OS MODELOS COMPUTACIONAIS EXPLÍCITOS.	116

TABELA 19 – RESULTADOS PARA C_d , OBTIDOS COM O MACH2D: pU^* ; ϕ_{ψ^*} ; ϕ_c ; $\phi_{\infty}(pU^*)$; $\phi_{\infty}(p_o)$ E ϕ_{num} PARA OS MODELOS COMPUTACIONAIS COM MODELOS DE FECHAMENTO.	117
TABELA 20 – RESULTADOS PARA C_f , OBTIDOS COM O MACH2D: pU^* ; ϕ_{ψ^*} ; ϕ_c ; $\phi_{\infty}(pU^*)$; $\phi_{\infty}(p_o)$ E ϕ_{num} PARA OS MODELOS COMPUTACIONAIS EXPLÍCITOS.	118
TABELA 21 – RESULTADOS PARA C_f , OBTIDOS COM O MACH2D: pU^* ; ϕ_{ψ^*} ; ϕ_c ; $\phi_{\infty}(pU^*)$; $\phi_{\infty}(p_o)$ E ϕ_{num} PARA OS MODELOS COMPUTACIONAIS COM MODELOS DE FECHAMENTO.	119
TABELA 22 – ERROS ESTIMADOS PARA C_d E C_f , OBTIDOS COM O MACH2D: U_{gci} ; U_c E U_{ψ^*} PARA OS MODELOS COMPUTACIONAIS EXPLÍCITOS.	120
TABELA 23 – ERROS ESTIMADOS PARA C_d E C_f , OBTIDOS COM O MACH2D: U_{gci} ; U_c E U_{ψ^*} PARA OS MODELOS COMPUTACIONAIS COM MODELOS DE FECHAMENTO.	121
TABELA 24 – DIFERENÇAS PERCENTUAIS ENTRE OS VALORES COMPUTACIONAIS, CALCULADOS EXPLICITAMENTE PARA p_{wall} , OBTIDOS COM O MACH2D E CFD++, EM RELAÇÃO AOS VALORES EXPERIMENTAIS DE PRESSÃO.	130
TABELA 25 – DIFERENÇAS PERCENTUAIS ENTRE OS VALORES COMPUTACIONAIS, CALCULADOS COM MODELOS DE FECHAMENTO, E ANALÍTICOS PARA p_{wall} , OBTIDOS COM O MACH2D E CFD++, EM RELAÇÃO AOS VALORES EXPERIMENTAIS DE PRESSÃO.	131
TABELA 26 – DIFERENÇAS PERCENTUAIS PARA T_{wall} , OBTIDOS COM O CFD++ E MACH2D, EM RELAÇÃO AOS VALORES EXPERIMENTAIS.	134
TABELA 27 – DISTRIBUIÇÕES DE PRESSÃO (p/p_0)	148
TABELA 28 – DISTRIBUIÇÕES DE DIVERSAS PROPRIEDADES PARA O TESTE 317	149

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AIAA	<i>American Institute of Aeronautics and Astronautics</i>
ASME	<i>The American Society of Mechanical Engineers</i>
BLM	<i>Modelo de fechamento Baldwin-Lomax</i>
BSL	<i>Baseline Model</i>
CDS-2	<i>Central Differencing Scheme</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
EDP	Equação Diferencial Parcial
FANS	<i>Favre Averaged Navier-Stokes</i>
JAXA	<i>Japan Aerospace Exploration Agency</i>
JPL	<i>Jet Propulsion Laboratory</i>
k- ϵ	Modelo de energia cinética de turbulência e taxa de transformação
k- ω	Modelo de energia cinética de turbulência e taxa de transformação específica
MER	Multiextrapolação de Richardson
MSI	<i>Modified Strong Implicit Method</i>
NASA	<i>National Aeronautics and Space Administration</i>
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>
RNG	<i>Renormalization group</i>
SA	<i>Modelo de fechamento Spalart-Allmaras</i>
SACCARA	<i>Sandia Advanced Code for Compressible Aerothermodynamics Research and Analysis</i>
SST	<i>Shear-Stress Transport Model</i>
TDK	<i>Two-Dimensional Kinetic Reference Computer Program</i>
UDS	<i>Upper Differencing Scheme</i>
UFPR	Universidade Federal do Paraná

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Descrição
A	Variável auxiliar que corresponde à soma do componente temporal e termo advectivo na equação da energia cinética de turbulência
a	Componente genérica da matriz de coeficientes
A'_i	Constante auxiliar 1 para cálculo do calor específico a pressão constante de cada espécie
A''_i	Constante auxiliar 1 para cálculo da viscosidade dinâmica de cada espécie
A'''_i	Constante auxiliar 1 para cálculo da condutividade térmica de cada espécie
A_s	Área de saída da tubeira
A_{th}	Área da garganta da tubeira
A_0^+	Constante adimensional para o BLM
a_1	Constante auxiliar para o modelo SST
a_*	Velocidade do som
arg_1	Argumento auxiliar 1 para o modelo SST
arg_2	Argumento auxiliar 2 para o modelo SST
ag	Aceleração gravitacional
B	Taxa de transferência de energia cinética do escoamento médio à turbulência
B'_i	Constante auxiliar 2 para cálculo do calor específico a pressão constante de cada espécie
B''_i	Constante auxiliar 2 para cálculo da viscosidade dinâmica de cada espécie
B'''_i	Constante auxiliar 2 para cálculo da condutividade térmica de cada espécie
c	Velocidade efetiva de exaustão

C'_i	Constante auxiliar 3 para cálculo do calor específico a pressão constante de cada espécie
C''_i	Constante auxiliar 3 para cálculo da viscosidade dinâmica de cada espécie
C'''_i	Constante auxiliar 3 para cálculo da condutividade térmica de cada espécie
c^*	Velocidade de Ejeção dos gases
c_{b1}	Constante básica 1 do modelo SA
c_{b2}	Constante básica 2 do modelo SA
C_{CP}	Constante adimensional para BLM
C_d	Coefficiente de descarga
C_{ijk}	Tensor de transporte turbulento
C_{dexp}	Coefficiente de descarga experimental
C_{dHall}	Coefficiente de descarga de Hall
C_{dKL}	Coefficiente de descarga de Kliegel e Levine
C_{dTF}	Coefficiente de descarga de Tang e Fenm
C_f	Coefficiente de empuxo
C_{kleb}	Constante de Klebanoff
c_{n1}	Constante auxiliar do modelo SA Negativo
c_p	Calor específico a pressão constante
$(c_p)_i$	Calor específico a pressão constante de cada espécie
c_{t1}	Constante de transporte 1 do modelo SA
c_{t2}	Constante de transporte 2 do modelo SA
c_{t3}	Constante de transporte 3 do modelo SA
c_{t4}	Constante de transporte 4 do modelo SA
c_{w1}	Constante de parede 1 do modelo SA
c_{w2}	Constante de parede 2 do modelo SA

c_{w3}	Constante de parede 3 do modelo SA
c_{wk}	Constante da função <i>wake</i> auxiliar para o BLM
<i>Cap.</i>	Capítulo
$CD_{k\omega}$	Função limitante auxiliar para o modelo SST
CF	Coefficiente de fricção obtido a partir da solução de similaridade de Blasius para a placa plana
C^ϕ	Símbolo auxiliar para seleção de termos advectivos em diversas equações
\mathcal{C}	Constante experimental do modelo de comprimento de mistura
D	Função de transformação da variável de trabalho do SA
D'_i	Constante auxiliar 4 para cálculo do calor específico a pressão constante de cada espécie
D''_i	Constante auxiliar 4 para cálculo da viscosidade dinâmica de cada espécie
D'''_i	Constante auxiliar 4 para cálculo da condutividade térmica de cada espécie
d	Distância à parede mais próxima
D_n	Termo de transformação do SA Negativo
d_n	Distância normal à parede
d_t	Distância do campo até a posição de transição
E	Transformação da energia cinética de turbulência por unidade de massa
e	Energia interna específica
E'_i	Constante auxiliar 5 para cálculo do calor específico a pressão constante de cada espécie
E_{tot}	Energia interna total
E_{val}	Métrica de validação para a diferença de valores de uma solução computacional e experimental para grandeza
$E(\phi)$	Erro computacional para uma variável de interesse ϕ
<i>Eq.</i>	Equação

\vec{F}	Vetor auxiliar para diversas equações
F	Força de empuxo
f	Indicativo de simetria plana ou axissimétrica
F_d	Força de empuxo dinâmica
F_{kleb}	Função de intermitência de Klebanoff
F_m	Fração molar da mistura
$(F_m)_i$	Fração molar de cada espécie
F_{max}	Função auxiliar para o BLM
f_n	Função auxiliar do modelo SA Negativo
F_{pv}	Força de empuxo de pressão
F_s	Fator de segurança para o método GCI
f_{t1}	Função de transporte 1 do modelo SA
f_{t2}	Função de transporte 2 do modelo SA
F_v	Força de empuxo no vácuo
f_{v1}	Função viscosa 1 do modelo SA
f_{v2}	Função viscosa 2 do modelo SA
f_{wall}	Função de parede do modelo SA
F_{wake}	Função auxiliar para o BLM
F_x	Componente na direção i do vetor auxiliar \vec{F}
F_y	Componente na direção j do vetor auxiliar \vec{F}
F_η	Componente na direção η do vetor auxiliar \vec{F}
F_ξ	Componente na direção ξ do vetor auxiliar \vec{F}
F_1	Função auxiliar para o modelo SST, relacionada ao arg_1
F_2	Função auxiliar para o modelo SST, relacionada ao arg_2
$Fig.$	Figura
G	Malha mais refinada submetida a avaliação por MER

g	Função limitante auxiliar para f_{wall}
g_t	Constante auxiliar do modelo SA
g_z	Malha na qual a simulação computacional é avaliada, para MER
G^η	Componente na direção η do vetor auxiliar \vec{G}
G^ξ	Componente na direção ξ do vetor auxiliar \vec{G}
h	Coefficiente de transferência de calor
h_e	Entalpia específica
h_m	Tamanho característico de um elemento de malha
H_{ref}	Entalpia na corrente livre
H_{tot}	Entalpia Total
i	Valores inteiros auxiliares relacionados à lexicografia
I_s	Impulso específico
I_t	Impulso total
J	Jacobiano da transformação
j	Valores inteiros auxiliares relacionados à lexicografia
k	Energia cinética de turbulência
k_{VK}	Constante de Vón Kármán
l	Comprimento de mistura
l_{mix}	Comprimento de mistura para o BLM
L_t	Comprimento total da tubeira
\mathcal{M}	Massa molecular dos gases
M	Número de Mach
m	Número de extrapolações de Richardson
M_m	Massa molar da mistura
$(M_m)_i$	Massa molar de cada espécie
m_p	Massa de propelente

\dot{m}	Fluxo de massa
n	Número de elementos de volume em cada direção
N_{it}	Número de iterações até a convergência de uma dada simulação
$normtol$	Tolerância alvo para a solução do sistema linear
$norm0$	Resíduo do sistema linear da iteração anterior
$norm1$	Resíduo do sistema linear da iteração atual
$nitmax$	Máximo número de iterações para calcular \hat{v}
np	Identificador relacionado à ordem lexicográfica
nx	Número de elementos de volume na direção axial
ny	Número de elementos de volume na direção radial
P	Função de transformação da variável de trabalho do SA
p	Pressão
p_a	Pressão atmosférica
pE	Ordem efetiva do erro de discretização
$(p_{E,M})_{g_z}$	Ordem efetiva dos valores extrapolados com MER no nível máximo de extrapolação
p_m	Valor das ordens verdadeiras do erro de discretização
P_n	Termo de transformação do SA Negativo
p_o	Menor valor das ordens verdadeiras para o erro de truncamento
p_s	Pressão na saída da tubeira
$(p_{U,M})_{g_z}$	Ordem aparente dos valores extrapolados com MER no nível máximo de extrapolação
pU^*	Ordem aparente equivalente
Pr	Número de Prandtl
Pr_t	Número de Prandtl turbulento
$pt1$	Comprimento partindo da entrada da tubeira até a interseção entre o raio de curvatura da tubeira até o início da seção reta do convergente

$pt2$	Comprimento partindo da entrada da tubeira até a interseção entre o raio de curvatura da tubeira até o fim da seção reta do convergente
$pt3$	Comprimento partindo da entrada da tubeira até a interseção entre o raio de curvatura da tubeira até o início da seção reta do divergente
P^ϕ	Símbolo auxiliar para seleção de termos fonte de pressão de diversas equações
q	Razão de refino de malha
q_j	Vetor fluxo de energia térmica
q_{PG}	Razão de progressão geométrica para geração de malha
r	Função adimensional do modelo SA
r_c	Raio de curvatura da garganta da tubeira
R_g	Constante de uma mistura de gases ou gás monoespécie
$(R_g)_i$	Constante do gás de cada espécie
r_{lim}	Valor adimensional limite para r
Re	Número de Reynolds
re	Raio de entrada da tubeira
Re_D^*	Número de Reynolds modificado
Re_x	Número de Reynolds local
ri	Raio de curvatura da entrada da tubeira
rp	Distância perpendicular entre a linha de simetria da tubeira e o elemento de volume np
rs	Raio de saída da tubeira
rth	Raio da garganta da tubeira
S	Magnitude da vorticidade
s	Raio local da tubeira
S_{ij}	Tensor taxa de deformação
$Seç.$	Seção

St	Número de Stanton
\overrightarrow{STSA}	Vetor de termo fonte do sistema linear do SA
S^ϕ	Símbolo auxiliar para seleção de termos fonte de diversas equações
\tilde{S}	Vorticidade modificada, presente no modelo SA
T	Temperatura
t	Tempo
T_{cl}	Temperatura estática na corrente livre
t_{CPU}	Tempo de execução de uma simulação até o término das iterações
t_{ij}	Tensor de tensões de Reynolds
T_t	Função de transporte da variável de trabalho do SA
t_q	Taxa de queima do propelente sólido em função do tempo
T^b	Limite inferior auxiliar de temperatura para cálculo das propriedades termofísicas
T^e	Limite superior auxiliar de temperatura para cálculo das propriedades termofísicas
$Tab.$	Tabela
tq	Tempo de queima do propelente
U	Velocidade contravariante do vetor velocidade na direção ξ
u	Velocidade local do escoamento na direção axial
U_c	Erro estimado com o estimador convergente
U_{dif}	Máximo valor da velocidade dentro da camada limite
u_{exp}	Métrica de validação que representa a incerteza de resultados experimentais
U_{GCI}	Erro estimado através do método GCI
u_{input}	Métrica de validação que representa incerteza dos valores de entrada de uma solução computacional
u_{num}	Métrica de validação que representa estimativa de erro computacional

u_{val}	Métrica de validação para incerteza experimental
$U(\phi)$	Erro estimado da solução computacional para uma variável de interesse ϕ
u_{δ^*}	Velocidade local do escoamento na direção axial na fronteira da camada limite
u_{τ}	Velocidade de atrito
$U_{\psi^*}(\phi_{gz,m})$	Erro estimado calculado pelo estimador psi corrigido quando empregado MER
u^+	Velocidade adimensional
u_{∞}	Velocidade axial na corrente livre
V	Velocidade contravariante do vetor velocidade na direção η
v	Velocidade local do escoamento na direção radial
v_s	Velocidade de saída dos gases
V_{adm}	Velocidade local adimensional
v_{∞}	Velocidade radial na corrente livre
x	Componente dos eixos coordenados na direção axial
X_i	Quantidade de parâmetros para validação
X_{RAM}	Quantidade de memória RAM alocada ao longo de uma simulação computacional
x_{η}	Métrica de transformação inversa
x_{ξ}	Métrica de transformação inversa
y	Componente dos eixos coordenados na direção radial
ye	Métrica local calculada computacionalmente
y_H	Tamanho do primeiro elemento de malha nas proximidades da parede
y_m	Menor distância perpendicular à superfície em que $\nu_{ti}=\nu_{to}$
y_{max}	Comprimento auxiliar para o BLM
y_{η}	Métrica de transformação inversa

y_ξ	Métrica de transformação inversa
y^+	Distância adimensional à parede

Símbolos gregos

α	componente do tensor métrico bidimensional
α_{BLM}	Constante auxiliar do BLM
β	componente do tensor métrico bidimensional
β_2	Constante auxiliar do modelo SST
β^*	Constante auxiliar do modelo SST
Γ	Função auxiliar em diversas equações
γ	componente do tensor métrico bidimensional
γ_m	Razão entre calores específicos da mistura gasosa
γ_2	Função auxiliar adimensional do modelo SST
Γ^ϕ	Símbolo auxiliar para seleção de termos difusivos em diversas equações
Δt	Variação temporal
δ_{ij}	Delta de Kronecker
δ_{model}	Erro de modelagem
Δ_u	Diferença de velocidade entre um ponto do campo e a transição
Δ_x	Espaçamento de malha ao longo da parede na transição
$\Delta\eta$	Tamanho de um elemento de volume na direção η no domínio curvilíneo
$\Delta\xi$	Tamanho de um elemento de volume na direção ξ no domínio curvilíneo
δ^θ	Espessura de quantidade de movimento
δ^ϕ	Espessura de energia
δ^*	Espessura da camada limite
ϵ_{ij}	Tensor de transformação
ϵ_k	Transformação da energia cinética de turbulência
ϑ	<i>Bulk viscosity</i>

ζ	Função auxiliar para cálculo da viscosidade dinâmica e condutividade térmica da mistura
ζ_i	Função auxiliar para cálculo da viscosidade dinâmica e condutividade térmica de cada espécie
η	Componente do sistema de coordenadas curvilínea, análoga à direção y no sistema de coordenadas retangulares
η_x	Métrica de transformação
η_y	Métrica de transformação
θ	Efetividade de um estimador de erro computacional
κ	Condutividade térmica
κ_i	Condutividade térmica de cada espécie
μ	Viscosidade dinâmica
μ_i	Viscosidade dinâmica de cada espécie
μ_t	Viscosidade dinâmica turbulenta
ν	Viscosidade cinemática
ν_t	Viscosidade cinemática turbulenta
ν_{ti}	Viscosidade turbulenta na camada limite mais interna
ν_{to}	Viscosidade turbulenta na camada limite mais externa
$\hat{\nu}$	Variável auxiliar do modelo SA
Ξ_{ij}^{ζ}	Função auxiliar que integra-se ao cálculo da viscosidade dinâmica e condutividade térmica da mistura
ξ	Componente do sistema de coordenadas curvilínea, análoga à direção x no sistema de coordenadas retangulares
ξ_x	Métrica de transformação
ξ_y	Métrica de transformação
Π_{ij}	Tensor de correlação de pressão
ρ	Massa específica
ρ_{δ^*}	Massa específica na fronteira da camada limite

σ	Constante do modelo SA
σ_k	Coefficiente de fechamento presente na Eq. 3.45
σ_{k1}	Coefficiente de fechamento do modelo SST
$\sigma_{\omega 1}$	Coefficiente de fechamento do modelo SST
$\sigma_{\omega 2}$	Coefficiente de fechamento do modelo SST
τ_{ij}	Tensor das tensões de Reynolds obtido por meio de FANS
τ_{wall}	Tensão de cisalhamento na parede
Φ	Valor da solução analítica exata para uma grandeza ϕ
ϕ	Função auxiliar que representa uma variável qualquer
ϕ_c	Solução computacional extrapolada com o estimador de erro convergente
ϕ_{exp}	Valor experimental de uma grandeza ϕ
ϕ_f	Variável de interesse para a malha mais fina
ϕ_g	Variável de interesse para a malha mais grossa
ϕ_i	Variável de interesse para a malha intermediária
ϕ_{num}	Valor da solução computacional para uma grandeza ϕ
ϕ_∞	Solução analítica estimada para uma grandeza ϕ
χ	Razão entre variável de trabalho e viscosidade cinemática
ψ	Função auxiliar que representa uma variável qualquer, diferente de ϕ
ψ_{gz}	Função que relaciona a diferença entre soluções extrapoladas com MER
ω	Transformação da energia cinética de turbulência para o modelo SST
Ω_{ij}	Tensor de vorticidade
ω_t	Vorticidade na parede

Subscritos

adm	Variável adimensional
in	Variável avaliada na entrada
i, j, k	Notação indicial

N, S, E, W	Volumes vizinhos adjacentes ao volume avaliado
P	Refere-se ao próprio volume avaliado
p	Posição conhecida da tubeira
NE, NW	Volumes vizinhos ao norte do volume avaliado
SE, SW	Volumes vizinhos ao sul do volume avaliado
n, s, e, w	Direção das faces do volume avaliado
max	Valor máximo de uma variável
$Q1D$	Propriedade quase-unidimensional
th	Propriedade avaliada na garganta da tubeira
$wall$	Propriedade avaliada na parede
0	Propriedade na condição de estagnação
$1D$	Propriedade unidimensional
η	Indica derivada parcial de certa propriedade em função de η
ξ	Indica derivada parcial de certa propriedade em função de ξ
δ^*	Propriedade avaliada na fronteira da camada limite

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	28
1.1	Definição do problema	32
1.2	Estrutura do trabalho	33
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	35
2.1	Primeiro grupo	35
2.1.1	Back, Massier e Gier (1965a)	35
2.1.2	Back, Massier e Gier (1965b)	38
2.2	Segundo grupo	41
2.3	Resumo do capítulo	46
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	47
3.1	Modelo matemático em coordenadas cartesianas	47
3.2	Médias temporais e médias mássicas do modelo matemático em coordenadas cartesianas	48
3.2.1	<i>Reynolds Average Navier-Stokes (RANS)</i>	48
3.2.2	<i>Favre-Averaged Navier-Stokes Equations (FANS)</i>	50
3.3	Modelos de fechamento	53
3.3.1	Energia cinética de turbulência	54
3.3.2	Modelos Algébricos	56
3.3.2.1	Baldwin-Lomax	57
3.3.3	Modelos de uma equação	59
3.3.3.1	Modelo Spalart-Allmaras	59
3.3.4	Modelos de duas equações	63
3.3.4.1	Modelo SST <i>Shear-Stress transport Model</i>	64
3.4	Aspectos teóricos relacionados às tubeiras	65
3.5	Verificação e Validação	69
3.5.1	Avaliações do erro estimado	69
3.5.1.1	Estimador GCI	72
3.5.1.2	Estimador Convergente	73
3.5.1.3	Multiextrapolação de Richardson	74
3.5.2	Validação	75
3.6	Resumo do capítulo	76
4	METODOLOGIA	78
4.1	Modelagem e simulação do escoamento	78
4.1.1	Modelo Físico	79

4.1.2	Modelo matemático diferencial no sistema coordenado plano ou axissimétrico	79
4.1.3	Modelo matemático diferencial no sistema coordenado curvilíneo	81
4.1.4	Estimativa das propriedades termofísicas	83
4.2	Dados geométricos, geração de malha e condições de contorno	86
4.3	Metodologia dos experimentos computacionais	92
4.3.1	Malha e condições de contorno para as simulações viscosas do CFD++ .	95
4.4	Cálculo numérico-computacional das variáveis de interesse: C_f e C_d.	96
4.5	Acoplamento dos modelos de fechamento às equações do modelo computacional no sistema coordenado transformado	100
4.5.1	Modelo Baldwin-Lomax - BLM	100
4.5.2	Modelo Spalart-Allmaras - SA	102
4.6	Algoritmo principal do Mach2D 5.10.2	107
4.7	Resumo do capítulo	107
5	RESULTADOS	109
5.1	Resultados para C_d e C_f	110
5.2	Resultados para p_{wall} e T_{wall}	126
5.3	Comentários sobre campos de número de Mach e campo de massa específica para o Mach2D	134
5.4	Resumo do capítulo	138
6	CONCLUSÃO	139
6.1	Conclusão geral	139
6.2	Contribuições	141
6.3	Recomendação de Trabalhos Futuros	141
	REFERÊNCIAS	143
	ANEXO A – RESULTADOS EXPERIMENTAIS PARA VALIDAÇÃO	148
	APÊNDICE A – MUDANÇA DE COORDENADAS DOS OPERADORES DA EQUAÇÃO DIFERENCIAL DO MODELO SPALART-ALLMARAS	150
A.1	Obtenção do operador difusivo	150
A.2	Obtenção do operador $\nabla\phi \cdot \nabla\psi$	153
A.3	Obtenção do operador advectivo	154

APÊNDICE B – DISCRETIZAÇÃO DOS OPERADORES DA EQUAÇÃO DIFERENCIAL DO MODELO SPALART-ALLMARAS EM VOLUMES FINITOS 157

B.1 Termo temporal 158
B.2 Termo difusivo 158
B.3 Termo advectivo 161
B.4 Operador $\nabla\psi \cdot \nabla\phi$ 162
B.5 Composição do sistema linear 162

APÊNDICE C – CAMPOS DE PROPRIEDADES DAS SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS COM O MACH2D E CFD++ 165

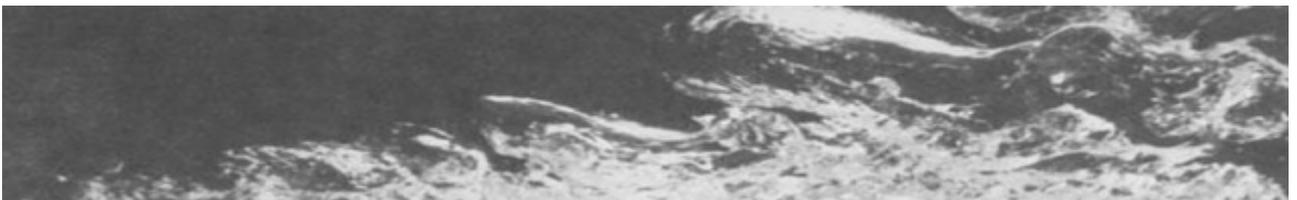
C.1 Campos de distribuição de pressão [kPa] 165
C.2 Campos de distribuição de temperatura [K] 167
C.3 Campos de distribuição de número de Mach 169
C.4 Campos de distribuição de velocidades [m/s] 172
C.5 Campos de distribuição de massa específica [kg/m³] 177
C.6 Campos de distribuição de viscosidade [Pa.s] 179

1 INTRODUÇÃO

Diversas aplicações em engenharia tornaram-se possíveis apenas através da compreensão e quantificação da maneira como os fenômenos físicos ou leis da natureza se comportam. Tal compreensão só é possível de ser atingida através da observação, experimentação e quantificação matemática. A quantificação do fenômeno da turbulência é um clássico exemplo que teve suas origens baseadas na observação da natureza. Tal fenômeno pode ser encontrado em escoamentos de diversas ordens de grandeza, tanto na superfície de uma placa plana aquecida, quanto na atmosfera de planetas ou no interior dos oceanos. Duas destas observações estão evidenciadas por meio das Fig. 1 e Fig. 2. Assim como nos exemplos anteriores, tal fenômeno está presente em aplicações relacionadas ao desenvolvimento de tecnologia aeroespacial e em escoamentos altamente energéticos. A compreensão da turbulência desenvolve um papel de extrema importância, tornando-se crucial que suas propriedades sejam quantificadas, devidamente avaliadas e que possuam estimativas de comportamento.

Para Cebeci (2013), a caracterização de turbulência pode ser apresentada como uma combinação das caracterizações dadas por von Kármán (1937) e por Hinze (1959), sendo compreendida como o movimento irregular do escoamento de fluido que possui diversas ordens de grandeza distintas, onde várias propriedades apresentam variações aleatórias em relação ao tempo e em relação ao deslocamento físico, onde médias estatísticas podem ser obtidas. Já para Markatos (1986) a turbulência é a mais complexa forma de escoamento de fluido, descrita como rotacional, intermitente, altamente desordenada, difusiva e dissipativa. Tais definições induzem à ideia de um escoamento completamente conturbado e irregular, relacionado à formação de diversas estruturas turbilhonares e de movimentos que aparentemente são totalmente aleatórios. Entretanto, mesmo em escoamentos turbulentos existem padrões que se repetem ao longo do tempo, passíveis de modelagem matemática.

FIGURA 1 – CAMADA LIMITE TURBULENTA SOBRE UMA PLACA PLANA.



FONTE: Bejan (2004).

FIGURA 2 – VISTA DA ATMOSFERA DE JÚPITER.



FONTE: NASA/JPL (2019).

Visto que o estudo e compreensão do fenômeno da turbulência é de vital importância, três tipos de abordagens podem ser utilizadas para quantificar o fenômeno, sendo possível empregar as abordagens experimental, computacional e analítica. Quando fenômenos físicos mais realistas estão envolvidos, assim como situações que envolvem geometrias complexas a abordagem analítica deixa de ser viável e outras formas de resolução do problema tornam-se necessárias ou mais viáveis. Pode ser citado como exemplo disto a abordagem experimental em túneis de vento, de forma que o dispêndio de muitas horas em ensaios, em determinados casos, torna-se a melhor alternativa para abordar o problema. Nestes ensaios são feitos experimentos em ambientes controlados e em diversas magnitudes, como simples simulações de escoamentos em esferas rugosas até casos onde partes inteiras de aviões são submetidas a testes para aquisição de dados experimentais.

Os sistemas propulsivos de foguetes e mísseis envolvem escoamentos altamente energéticos tanto na região interna por onde os gases são expandidos, quanto na região externa sujeita à aerodinâmica de voo. Este tipo de aplicação exige muito da abordagem experimental e da abordagem computacional, em especial pelo fato de que os fenômenos turbulentos estão presentes e possuem grande relevância nos critérios de desempenho e de projeto. O sistema propulsivo é de vital importância, visto que é literalmente o sistema de origem da força motriz que conduz o veículo a vencer as barreiras impostas pela gravidade e pelas componentes de atrito. Segundo a definição dada por Sutton e Biblarz (2017), a propulsão de foguetes é uma classe de propulsão a jato que produz empuxo através da ejeção de propelente ou fluido de trabalho, podendo ser classificado de acordo com a fonte de energia (química, nuclear e solar), funções básicas (seção de propulsão, controle de altitude, sessões orbitais), pelo tipo de veículo que é propelido (aviões, mísseis, veículos espaciais), pelo tamanho, tipo de propelente, tipo construtivo ou pela quantidade de propulsores utilizados.

A propulsão química caracteriza-se por fornecer energia através da combustão proporcionada pela interação entre o combustível e oxidante. Duas principais formas de operação de motores baseadas na propulsão química podem ser citadas, que são os motores

a propelente líquido e a propelente sólido.

Os motores de foguetes de propelente líquido utilizam o propelente armazenado como líquidos em tanques. Uma mistura bem conhecida é a de oxigênio e querosene. Seu sistema de operação é complexo e inclui várias válvulas de controle, turbobombas e sistemas de canais responsáveis pela refrigeração da tubeira. Este tipo de motor pode operar por períodos longos de tempo e entrar em operação diversas vezes, visto que o controle e automação presente no sistema permite variações no fluxo do propelente e até mesmo paradas abruptas. Os motores de foguetes de propelente sólido, como a própria definição descreve, utiliza o propelente armazenado na forma sólida. Quando o propelente já está confeccionado, pode ser chamado de grão-propelente e pode apresentar diversas geometrias ou perfis de frente de chama, onde cada um deles oferece uma área de queima inicial diferente. Entretanto, diferentemente do propelente líquido, uma vez que inicie sua queima não há como ser interrompida. Este tipo de propulsão é geralmente utilizado em veículos auto propelidos menores, como em mísseis e foguetes de sondagem, mas também, pode ser utilizado como a primeira fonte de geração de empuxo na decolagem de um foguete, sendo acionado o sistema de propulsão líquida geralmente durante o fim da queima do propelente sólido.

Cada uma das classificações dos sistemas propulsivos citadas anteriormente possui suas características construtivas próprias. Entretanto, compartilham uma característica em comum que é direcionar os gases para um bocal chamado *nozzle* (termo em inglês utilizado para nomear o bocal convergente-divergente presente na região de expansão dos gases oriundos da queima do propelente do veículo propulsado), que neste trabalho é tratado pelo termo “tubeira”. Ainda segundo Sutton e Biblarz (2017), a tubeira é onde a energia do propelente é convertida em outras fontes de energia, dentre elas a energia cinética, gerando empuxo. Para ilustrar, diversos exemplares deste equipamento fabricados pela empresa russa NPO Energomash podem ser vistos na Fig. 3.

Uma ferramenta que vem sendo objetivo de desenvolvimento tanto pelo corpo científico quanto pela indústria em geral são os programas de dinâmica de fluidos computacional (CFD, vindo do termo em inglês para *Computational Fluid Dynamics*). Atualmente existem programas comerciais que permitem fazer a modelagem dos complexos fenômenos que atuam em uma tubeira de motor-foguete, por consequência, consegue-se estimar a eficiência do motor e propriedades específicas dos fenômenos físicos lá presentes. Sabe-se que é possível estimar o desempenho de um motor-foguete do ponto de vista do impulso específico I_s , coeficiente de empuxo C_f , coeficiente de descarga C_d e da resistência do material que compõe a parede do motor em suportar os esforços mecânicos mesmo a elevadas temperaturas, por mais que a temperatura dos gases internos seja maior do que a máxima temperatura admissível do material da parede.

Aliados aos programas comerciais, existem os programas utilizados e gerados pelos

FIGURA 3 – TUBEIRAS E MOTORES FABRICADOS PELA NPO ENERGMASH.



FONTE: Energomash. (2021)

próprios grupos de pesquisa em universidades e em empresas. Sutton e Biblarz (2017) reforça que as organizações de pesquisa e desenvolvimento de motores de foguetes desenvolvem seus próprios programas de computador para realizar modelagens em novos projetos. Um exemplo disto é o programa TDK (*Two-Dimensional Kinetic Reference Computer Program*), utilizado pela NASA (*National Aeronautics and Space Administration*) e descrito por Nickerson, Dang e Coats (1985).

O grupo de CFD, Propulsão e Aerodinâmica de Foguetes da UFPR desenvolve e aprimora códigos próprios para previsões computacionais em escoamentos internos de tubeiras de foguetes, por exemplo as várias versões dos programas Mach1D e Mach2D. Por mais que diversos trabalhos tenham sido realizados ao longo dos anos, os fenômenos físicos relacionados à turbulência não foram muito estudados pelo grupo até o momento. Isso inclui a implementação de modelos de fechamento. O início da abordagem envolvendo turbulência foi dado por Marchi e Bertoldo (2012), implementando o modelo algébrico de fechamento Baldwin-Lomax (BLM) ao código Mach2D, resultando na versão Mach2D 5.8, que recebeu verificação de código para o cálculo da viscosidade turbulenta, tomando como referência um problema de duto circular proposto por Wilcox (2004). Entretanto, devido a problemas de convergência da solução computacional utilizando determinados tipos de malha, uma nova versão do código do programa Mach2D foi gerada e nomeada de Mach2D 5.10.2. Esta nova versão, ao longo da elaboração deste trabalho foi expandida, possuindo módulos para cálculo da viscosidade turbulenta, os quais empregam o modelo

de fechamento Baldwin-Lomax e o modelo de fechamento Spalart-Allmaras (SA).

Segundo Balabel *et al.* (2009), a solução computacional de escoamentos compressíveis turbulentos em tubeiras é um problema desafiador em aplicações de mecânica dos fluidos. Em particular, o campo de velocidade média, a distribuição de pressão axial e as características da turbulência possuem um impacto direto e significativo em diversos processos físicos atuantes nestes bocais. Por isso, é importante estudar e analisar diversos modelos matemáticos relacionados a este tipo de escoamento. Mais precisamente analisar diversos modelos matemáticos que possuem modelos de fechamento acoplados, o que resultaria em um modelo para turbulência.

É importante ressaltar que os termos “modelo de turbulência” e “modelo de fechamento” são intrinsecamente diferentes e não devem ser confundidos ou considerados como sinônimos. Pois modelos de fechamento correspondem à modelagem de equações adicionais para corrigir a disparidade entre o número de incógnitas com o de equações em um determinado modelo matemático. E modelos de turbulência equivale ao conjunto das equações utilizadas para realizar uma determinada modelagem matemática. Maiores detalhes são fornecidos nas seções posteriores.

1.1 Definição do problema

O objetivo central deste trabalho é realizar previsões em escoamentos bidimensionais compressíveis no interior de uma tubeira de motor-foguete empregando quatro modelos matemáticos distintos para a modelagem do escoamento turbulento. Para avaliar como a modelagem computacional relacionada à viscosidade dinâmica e viscosidade turbulenta impactam em variáveis globais e locais da tubeira.

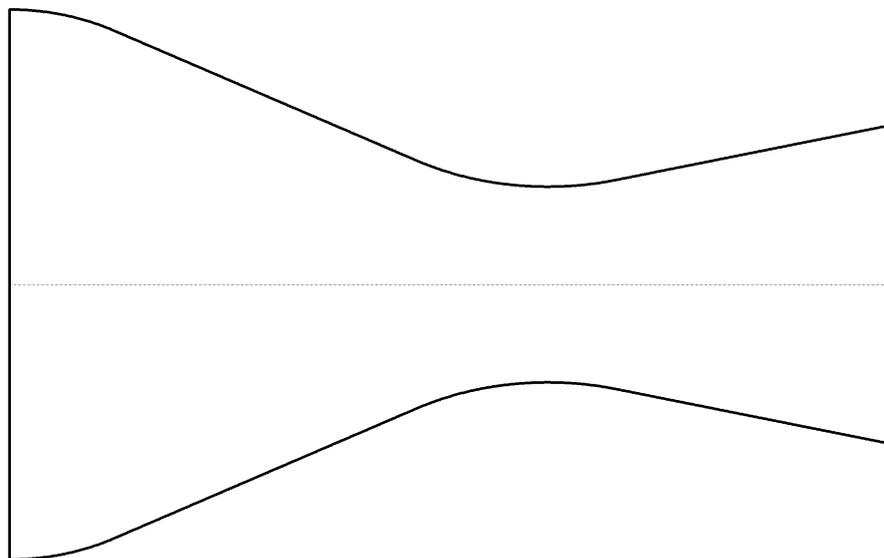
Tais previsões são geradas através de simulações computacionais obtidas principalmente pelo programa Mach2D na versão 5.10.2. Neste código, o modelo matemático de Euler e modelo Explícito já estavam implementados, isto é, antes do início da presente dissertação. Através das atividades elaboradas ao longo deste trabalho, dois novos modelos matemáticos são acrescentados aos dois previamente existentes. Gerando assim o modelo numérico-computacional que emprega o modelo de fechamento de zero equação, BLM, e o modelo numérico-computacional que emprega o modelo de fechamento de uma equação, SA.

Para a realização do objetivo central, etapas intermediárias são definidas, tais como: implementar o modelo de fechamento BLM e verificar o código computacional; realizar a transformação de coordenadas e discretizar o modelo de fechamento SA através do método dos volumes finitos; programar, implementar e verificar o código para solução computacional que emprega o modelo de fechamento SA; analisar a influência da inserção da viscosidade turbulenta nas previsões computacionais utilizando o programa Mach2D

5.10.2. Por meio de simulações que empregam em seus modelos computacionais o BLM e SA, explícito e Euler (invíscido); realizar simulações da mesma tubeira em programas comerciais que já possuam modelos de turbulência implementados. Comparar os resultados provenientes de tais programas, com os quais foram obtidos com o Mach2D 5.10.2 e também, comparar tais resultados com os dados experimentais de Back, Massier e Gier (1965b).

Para o problema avaliado, considerou-se como domínio de solução computacional o interior de uma tubeira. A geometria desta tubeira pode ser encontrada na primeira figura da terceira página do trabalho de Back, Massier e Gier (1965a), sendo chamada de tubeira 30-15 devido ao seu semiângulo aproximado das seções convergente e divergente, respectivamente. E aqui, esta geometria é apresentada na Fig. 4 e suas cotas são apresentadas posteriormente, na Seç. 4.2. O teste número 317 presente no mesmo trabalho é utilizado como referência nessa dissertação e diversos resultados experimentais deste teste estão no Anexo A.

FIGURA 4 – GEOMETRIA DO PROBLEMA.



FONTE: O autor (2021).

1.2 Estrutura do trabalho

Este trabalho é constituído de seis capítulos, uma seção de anexos e três seções de apêndices, sendo eles descritos brevemente conforme:

- introdução, Cap. 1: apresenta o fenômeno físico alvo de estudo, mostra aplicações e

define o problema tratado ao longo da dissertação;

- revisão bibliográfica, Cap. 2: apresenta uma série de trabalhos que contextualizam o estudo feito na dissertação e também mostra as direções em que os demais autores costumam explorar;
- fundamentação teórica, Cap. 3: neste capítulo são descritos os modelos matemáticos, apresenta o conceito de modelo de fechamento e exemplos destes modelos são apresentados. Também traz aspectos teóricos relacionados a tubeiras, verificação e validação;
- metodologia, Cap. 4: descreve os modelos físicos, matemáticos e computacionais que foram empregados; define-se as propriedades termofísicas e de entrada; geração de malha e condições de contorno; descreve como são calculadas computacionalmente as variáveis de interesse; descreve-se a atualização de viscosidade e condutividade térmica, por fim, apresentam-se algoritmos;
- resultados, Cap. 5: neste capítulo são apresentados os resultados obtidos para cada modelo computacional, assim como discussões destes resultados;
- conclusão, Cap. 6: apresenta as conclusões do trabalho, sintetizando o produto das discussões feitas no capítulo de resultados, apresenta as contribuições geradas e sugestões de trabalhos futuros;
- anexo A: sintetiza os resultados experimentais utilizados como parâmetros de entrada e de comparação do problema avaliado;
- apêndice A: descreve o processo de mudança de coordenadas dos operadores da equação diferencial parcial (EDP) do modelo de fechamento SA;
- apêndice B: descreve o processo de discretização dos operadores que sofreram mudança de coordenadas no Apêndice A; e
- apêndice C: apresenta campos de diversas propriedades, obtidas tanto com o programa Mach2D 5.10.2 quanto com o programa CFD++.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Esta revisão apresenta resultados de diversos trabalhos disponíveis na literatura que tratam das abordagens analíticas, computacionais e experimentais relacionadas principalmente ao escoamento no interior de tubeiras de motor-foguete.

Por conveniência, a revisão bibliográfica é classificada em dois grupos. O primeiro grupo trata dos trabalhos que foram mais influentes para a elaboração da dissertação, sendo eles o Back, Massier e Gier (1965a) e o Back, Massier e Gier (1965b). Tais trabalhos trouxeram dados geométricos e de uma série de corridas experimentais, com pressões e temperaturas de estagnação diferentes para diversas tubeiras. Mas conforme dito anteriormente, o foco é a tubeira 30-15 e todos os resultados apresentados são relacionados a ela.

No capítulo de fundamentação teórica os modelos de zero e uma equação, presentes em Baldwin e Lomax (1978), Spalart e Allmaras (1992) e Allmaras, Johnson e Spalart (2012) são mostrados, comentados e explicados. Uma vez que tais trabalhos também tiveram um papel fundamental ao longo da dissertação e ao invés de comentar os mesmos artigos em duas seções (revisão bibliográfica e fundamentação teórica), optou-se por inseri-los naquela seção.

O segundo grupo é composto de uma maior quantidade de trabalhos, eles mostram o quão importante a modelagem computacional é para a definição de critérios de projeto de tubeiras de motor-foguete. Assim como os trabalhos do primeiro grupo, estes também trazem contribuições experimentais, que costumam servir como parâmetro de comparação com os resultados computacionais obtidos por cada autor. Em especial, dentro deste grupo, alguns trabalhos discutem sobre a seleção e importância do cálculo da viscosidade turbulenta para o aumento da acurácia de simulações computacionais e como elas alteram as variáveis de interesse adotadas por cada autor.

2.1 Primeiro grupo

2.1.1 Back, Massier e Gier (1965a)

O propósito principal do artigo de Back, Massier e Gier (1965a) foi de compreender melhor como os escoamentos supersônicos se comportam, em regime estacionário, quando a mistura de ar e produtos de combustão do metanol são escoados através de uma tubeira, que pode possuir ou não refrigeração de suas paredes. Para isso, foram feitas medições experimentais de: vazão mássica, medida imediatamente antes da seção de admissão da tubeira, com incerteza estimada de 1% do valor aferido; pressão, aferida com manômetros de mercúrio do tipo *Heise gages* com resolução de 0,25 psia e temperatura, aferida com termômetros blindados, calibrados por um circuito do tipo ponte de Kelvin.

Os testes foram feitos para temperaturas que variam entre aproximadamente 294 K e 833 K. E para uma amplitude de pressão experimental absoluta entre 310 kPa a 1724 kPa, aproximadamente. Diferentes ângulos de convergente foram avaliados pelos autores, variando entre 30° e 45° de semieixo. O divergente foi mantido fixo, tendo 15° de ângulo de semieixo.

As tomadas para as medições de pressão e de temperatura foram feitas através de pequenos furos na superfície da tubeira, para que os valores aferidos fossem o mais próximo possível ao real (uma vez que existe uma relação diretamente proporcional entre o aumento do diâmetro do furo com o aumento da pressão aferida). Isto foi feito de tal forma que o posicionamento dos sensores, mesmo em direto contato com o escoamento, não modificasse significativamente seu comportamento global. Desta forma, a razão entre profundidade de medição e o diâmetro do furo foi de aproximadamente 8.

As tomadas para medição da temperatura de estagnação T_0 foram posicionadas a aproximadamente 6,35 mm antes da entrada da tubeira e cerca de 25,4 mm da linha de centro da tubeira. Seu valor foi tomado como sendo a média entre a leitura de dois sensores, espaçados circunferencialmente por 180°. As aferições entre as tomadas de pressão e de temperatura mantiveram uma constância de espaçamento circunferencial de 90° ao longo de todo o comprimento da tubeira.

Infelizmente, não foi informado qual seria o erro estimado para a medição de temperatura em cada ponto ou mesmo qual seria a estimativa de incerteza do instrumento utilizado nas medições. Entretanto, os autores estimaram o erro total máximo para o coeficiente de transferência de calor e segundo eles, na região da garganta (onde tal coeficiente possui maior valor) para o ensaio de maior pressão e temperatura de estagnação, este erro seria de aproximadamente 8% e seriam compostos pela soma entre: 1% de erro devido ao posicionamento dos sensores; 1,5% devido a imprecisões de temperatura no interior da parede; 5% devido à incerteza entre a temperatura de estagnação e a temperatura na superfície de contato com o gás quente e por fim, 0,5% advindo de fontes diversas. Os autores ainda informam que para escoamentos com menores temperaturas e pressões de estagnação p_0 , o erro total máximo para o coeficiente de transferência de calor pode ser de até 21%.

As medições de pressão foram efetuadas em 32 pontos distribuídos circunferencialmente e axialmente ao longo do comprimento da tubeira, através de furos com aproximadamente 1,02 mm de diâmetro e com incerteza de posicionamento axial de 0,0508 mm, aproximadamente. O erro estimado na medida da pressão estática na região da garganta e divergente da tubeira foi estimado como sendo menor que 1%. Entretanto, para que se possa estabelecer um critério de comparação com os valores computacionais nas próximas seções, tal valor foi considerado como sendo 1% exato. Já para a região convergente, onde a diferença entre a pressão estática e a pressão de estagnação é menor,

o erro estimado é de 5%. Para fins de comparação, nas próximas seções considerou-se o valor de erro estimado de 5% até a sexta tomada de pressão e da sétima em diante, 1%.

Três formas diferentes de avaliação analítica para a distribuição da pressão na superfície da tubeira foram utilizadas. A primeira aplica a teoria isentrópica unidimensional para avaliação da pressão na seção divergente (originalmente proposta para divergentes cônicos), calculada através de:

$$\frac{p}{p_b} = \left\{ 1 - \frac{\gamma_m - 1}{2} M_b^2 \left[\frac{\left(\frac{s_b}{s}\right)^4}{\left(\frac{p}{p_b}\right)^{\frac{2}{\gamma_m}}} - 1 \right] \right\}^{\frac{\gamma_m}{\gamma_m - 1}} \quad (2.1)$$

onde o subscrito b representa o ponto ao longo da parede cônica em que determinada variável é conhecida; s representa o raio local da tubeira; p é a pressão; γ_m é a razão entre calores específicos e M é o número de Mach, definido como a velocidade local do escoamento em relação à velocidade do som, ou seja:

$$M = \frac{u}{\sqrt{\gamma_m R_g T}} \quad (2.2)$$

onde R_g é a constante do gás, T é a temperatura e u a velocidade local na direção axial.

A segunda forma já aplica previsões bidimensionais e delimita-se à região transônica, através da relação encontrada por Hall (1962), como sendo:

$$\frac{p}{p_0} = \left\{ 1 - \left[\frac{(\gamma_m - 1)}{(\gamma_m + 1)} \right] V_{adm\,wall}^2 \right\}^{\frac{\gamma_m}{\gamma_m - 1}} \quad (2.3)$$

onde o subscrito $wall$ representa que determinada grandeza é avaliada na parede, o subscrito 0 corresponde à propriedade avaliada na sua condição de estagnação e V_{adm} corresponde à velocidade local, escrita de forma adimensional com respeito a velocidade do som em condição sônica.

A terceira forma de se calcular o valor da pressão ao longo da tubeira, avaliada de forma bidimensional, é dada pela relação encontrada por Oswatitsch e Rothstein (1949) e corresponde a:

$$\frac{p}{p_{1D}} = \left[1 - \frac{\gamma_m - 1}{2} \left(M_{1D} \frac{a_{*1D}}{a_{*th}} \right)^2 \left(\frac{u}{u_{1D}} \right)^2 \right]^{\frac{\gamma_m}{\gamma_m - 1}} \quad (2.4)$$

sendo que o subscrito th corresponde à propriedade avaliada na garganta, ou seja, região geométrica da tubeira que possui o menor diâmetro. O subscrito $1D$ denota quantidades

médias para o escoamento unidimensional isentrópico quando o valor de γ_m é constante e a_* é a velocidade do som. A razão u/u_{1D} corresponde a:

$$\frac{u}{u_{1D}} = \sqrt{\left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[\frac{s}{2} \frac{d^2s}{dx^2} + \frac{1}{4} \frac{du_{1D}}{dx} s \frac{ds}{dx} - \left(\frac{ds}{dx} \right)^2 \right] \right\}^2 + \left(\frac{ds}{dx} \right)^2} \quad (2.5)$$

onde x é a direção axial da tubeira.

Adicionalmente, os autores apresentam formas para se estimar parâmetros de eficiência da tubeira, como por exemplo o coeficiente de descarga C_d . Este coeficiente é mostrado e explicado em maiores detalhes em duas subseções dedicadas para o cálculo dos coeficientes adimensionais (Seç. 3.4 e Seç. 4.4).

Por fim, os autores confrontam as previsões analíticas da posição da linha sônica com testes experimentais, para quando a tubeira possui e não possui refrigeração de suas paredes. Ao término do estudo, pôde ser concluído que: na região da garganta, as hipóteses de escoamento bidimensional isentrópico obtiveram forte correlação com os dados experimentais mensurados. Entretanto, quando os dados experimentais são comparados com a teoria unidimensional isentrópica, as variações são significativas e da ordem de 30%; quando a tubeira operou em condição superexpandida (condição em que o escoamento não preenche totalmente a seção divergente, levando a uma perda de eficiência pois o escoamento não expande de forma adequada, logo o empuxo esperado para tal tubeira não é obtido), os valores encontrados para a pressão apontam nenhuma relação significativa entre as pressões medidas com o fato das paredes serem refrigeradas ou não, exceto na região onde há descolamento do escoamento.

2.1.2 Back, Massier e Gier (1965b)

O trabalho de Back, Massier e Gier (1965b) corresponde a um relatório técnico desenvolvido no Laboratório de Propulsão a Jato (do inglês *Jet Propulsion Laboratory - JPL*), localizado na Califórnia, USA. São apresentados detalhes sobre o aparato experimental e da instrumentação utilizada tanto no relatório técnico, quanto no artigo Back, Massier e Gier (1965a), apresentado anteriormente. Também apresenta dados experimentais tabulados para: distribuição de pressão nas paredes; fluxo de massa na fronteira da camada limite; fluxo de energia térmica através da parede; coeficiente de transferência de calor; temperatura na corrente livre do escoamento; temperatura na parede; número de Reynolds (razão entre os efeitos inerciais, ou seja, produto entre a massa específica ρ , velocidade u e comprimento característico ou distância x com os efeitos viscosos, ou seja $Re = \rho u x / \mu$. Sendo μ a viscosidade dinâmica) em função do comprimento e número de Stanton (estimado através da razão entre o coeficiente de transferência de calor h e o produto entre o fluxo de massa na fronteira da camada limite $\rho_{\delta^*} u_{\delta^*}$ e o calor específico a

pressão constante c_p na fronteira da camada limite, ou seja, $St = h/(\rho_{\delta^*} u_{\delta^*} c_p)$). Também descreve procedimentos de cálculo de transferência de energia térmica, faz avaliações de camada limite e comparações dos resultados obtidos para transferência de energia térmica com estimativas analíticas.

A tubeira avaliada neste relatório técnico é a mesma tubeira 30-15 já descrita. As tabelas e dados experimentais obtidos pelos autores em questão são utilizadas como referência para comparação com resultados computacionais, ou seja, para fins de validação dos resultados computacionais.

O propósito principal do relatório técnico foi de prever a transferência de calor convectiva em escoamentos acelerados, por meio da associação entre dados experimentais sobre a transferência de energia térmica por convecção de um escoamento com camadas limite turbulenta, submetida a fortes gradientes de pressão em uma tubeira convergente-divergente cônica, com as teorias de camada limite turbulenta.

Uma das constatações vislumbradas pelos autores mostrou que o máximo valor para o fluxo de massa medido experimentalmente, ocorre na interseção da linha sônica com a parede da tubeira estando a montante da garganta da tubeira. Sabendo que existe uma variação significativa entre as estimativas unidimensionais com os valores aferidos experimentalmente é de interesse estimar o fluxo de massa na fronteira da camada limite para aquela seção. Back, Massier e Gier (1965b) citam as metodologias adotadas por Oswatitsch e Rothstein (1949) para cálculo da razão entre o fluxo de massa na parede da tubeira em relação ao fluxo unidimensional. Tal razão é dada por:

$$\frac{\rho_{\delta^*} u_{\delta^*}}{\rho_{1D} u_{1D}} = \frac{\left[1 - \frac{\gamma_m - 1}{2} \left(M_{1D} \frac{a_{*1D}}{a_{*th}} \right)^2 \left(\frac{u}{u_{1D}} \right)^2 \right]^{\frac{\gamma_m}{\gamma_m - 1}}}{\rho_{1D} \rho_0^{-1}} \frac{u}{u_{1D}} \quad (2.6)$$

onde o subscrito δ^* remete à propriedade avaliada na fronteira da camada limite. Lembrando que o termo u/u_{1D} é dado por meio da Eq. 2.5. Segundo os autores, a solução da Eq. 2.6 leva a uma boa previsibilidade quando confrontada com os dados experimentais.

De forma complementar, os autores também investigaram outras propriedades como a razão de velocidades u/u_{δ^*} e a distribuição da temperatura, visando compreender como a camada limite se desenvolve para tubeiras que possuem ou não refrigeração de suas paredes. Através da aplicação das equações para a distribuição da espessura da camada limite δ^* , espessura de quantidade de movimento δ^θ e de espessura de energia δ^ϕ para o escoamento em uma tubulação, ou seja, as Eq. 2.7 à Eq. 2.9, respectivamente. Os autores encontraram que estas espessuras foram cerca de 5% menores quando comparadas a um

escoamento em uma placa plana.

$$\delta^* \left(re - \frac{\delta^*}{2} \right) = \int_0^\infty \left(1 - \frac{\rho u}{\rho_{\delta^*} u_{\delta^*}} \right) (re - d_n) dy \quad (2.7)$$

$$\delta^\theta \left(re - \frac{\delta^\theta}{2} \right) = \int_0^\infty \frac{\rho u}{\rho_{\delta^*} u_{\delta^*}} \left(1 - \frac{u}{u_{\delta^*}} \right) (re - d_n) dy \quad (2.8)$$

$$\delta^\phi \left(re - \frac{\delta^\phi}{2} \right) = \int_0^\infty \frac{\rho u}{\rho_{\delta^*} u_{\delta^*}} \left[1 - \left(\frac{T_0 - T_{wall}}{T_{0\delta^*} - T_{wall}} \right) \right] (re - d_n) dy \quad (2.9)$$

sabendo que re é o raio de entrada da tubeira, d_n é a distância normal à parede.

O cálculo da velocidade e do comprimento adimensionais foram reescritos como $u^+ = u / (\sqrt{\tau_{wall} / \rho_{\delta^*}})$ e $y^+ = (d_n \sqrt{\tau_{wall} / \rho_{\delta^*}}) / \nu_{\delta^*}$. Sendo que y^+ é a distância adimensional à parede, ν é a viscosidade cinemática e τ_{wall} é a tensão de cisalhamento na parede. O perfil de velocidade nas proximidades da parede, para $y^+ > 30$, é calculada como:

$$u^+ = 5,5 + 2,5 \ln y^+ \quad (2.10)$$

Outro parâmetro calculado e confrontado com o valor analítico esperado, quando utilizada a lei da parede é o coeficiente de atrito CF , obtido a partir da solução de similaridade de Blasius para a placa plana:

$$\frac{CF}{2} = \frac{\tau_{wall}}{\rho u_{\delta^*}^2} = 0,0128 \left(\frac{\rho u_{\delta^*} \delta^\theta}{\mu} \right)^{-\frac{1}{4}} \quad (2.11)$$

Segundo os autores, quando o CF é calculado com os valores de ρ e μ na temperatura de corrente livre, ultrapassa em cerca de 20% o encontrado para quando se utilizam valores que ajustam-se à lei da parede. Quando esta comparação é feita aplicando os dados à temperatura de filme (média entre a temperatura na parede e temperatura na fronteira da camada limite), as previsões chegam a ser 55% maiores. Quando a mesma avaliação é feita, mas para o caso onde a tubeira não possui refrigeração em suas paredes, a camada limite se encontra em uma região de transição entre o regime turbulento e laminar, ou seja, entre a lei de potência 1/7 e a equação de Blasius para perfis de escoamento laminar.

Agora, tratando-se da avaliação dos resultados para o valor do coeficiente de transferência de energia térmica, verificou-se que para o caso onde a parede da tubeira não é refrigerada, a espessura estimada da camada limite em relação ao raio de entrada da tubeira é de cerca de 5% e o valor para o coeficiente de transferência de calor é maior quando comparado a uma camada limite mais espessa. Este comportamento se estende por toda a tubeira. Imediatamente antes da garganta, onde o fluxo de massa e o coeficiente

de transferência de calor são máximos, os resultados da camada mais fina ultrapassam os da mais espessa refrigerada em cerca de 10%. Levando a concluir que quando não há refrigeração, a transição da camada limite laminar para a turbulenta acontece antes da primeira tomada de medição do fluxo de energia térmica. Reforçando assim a hipótese sugerida pelos autores de que não há problema em considerar a camada limite no interior da tubeira completamente turbulenta.

Ao término do estudo pôde ser concluído que: os coeficientes de transferência de calor aumentam conforme o aumento da pressão de estagnação, como resultado do aumento do fluxo de massa. Este apontamento é válido para pressões que asseguram a presença de camada limite turbulenta; em baixas pressões de estagnação, os coeficientes de transferência de calor apresentam valores menores do que o esperado para uma camadas limites turbulentas, mesmo que na entrada da tubeira a camada limite seja turbulenta; os coeficientes de transferência de calor foram aproximadamente 10% maiores ao longo da tubeira que possuía uma camada limite mais delgada na região da entrada, quando comparado com os dados obtidos para a camada limite mais espessa na entrada; o máximo coeficiente de transferência de calor encontra-se na região onde o fluxo de massa (calculado baseado na distribuição da pressão ao longo da tubeira) é máximo; uma significativa redução no valor do coeficiente de transferência de calor foi encontrada a partir do ponto de separação do escoamento (este que aconteceu em alguns testes experimentais que tiveram pressões mais baixas nas proximidades do fim do divergente); é encontrado um parâmetro que relaciona a importância da aceleração do escoamento na redução da transferência de calor abaixo do comum para camadas limite turbulentas.

2.2 Segundo grupo

Diversos autores realizam estudos comparativos sobre qual seria a melhor forma de se empregar modelos de fechamento para solução de problemas computacionais em tubeiras. Parte deles afirma que os modelos de fechamento de uma equação não são suficientes para descrever completamente o fenômeno e que, em geral, os modelos de fechamento de duas equações chegam mais próximo dos resultados experimentais. Porém, outros autores afirmam que modelos de uma equação, em especial o modelo Spalart-Allmaras (SA), são de implementação mais simples e atingem resultados tão bons quanto os obtidos por modelos de duas ou mais equações. Este é um dos argumentos discutidos ao longo desta seção.

Segundo Bardina, Huang e Coakley (1997), a turbulência é um dos fenômenos principais em mecânica dos fluidos. A escolha do modelo de fechamento apropriado é de importância fundamental para a correta previsão do escoamento em um determinado problema, para uma determinada aplicação. O desenvolvimento de modelos de fechamento aumentou entre os anos 1980 e 2000 devido às necessidades em aplicações aerodinâmicas e ao aumento das capacidades de processamento dos computadores. O aumento de uso dos

modelos e a falta de informação sobre suas eficácias frente a gradientes de pressão adversos criam incertezas e riscos às simulações. Os riscos podem ser minimizados ao se definir corretamente qual modelo deve ser empregado, visto que há diversos modelos que podem ser aplicados em variadas situações. As validações e testes de modelos de turbulência são necessários ao entendimento de quais são as capacidades e as limitações dos modelos de fechamento.

Como exemplo disto, Balabel *et al.* (2011) realizaram simulações em uma tubeira superexpandida (situação que ocorre quando o escoamento chega ao fim do divergente, não sai perpendicular à parede e ao invés disso, gera vórtices dentro da tubeira, provoca o descolamento da camada limite e resulta em perda de eficiência da tubeira) a diferentes razões de pressão, comparando os resultados encontrados entre os modelos SST (*Shear-Stress Transport Model*) $k-\omega$, v^2 -f, $k-\epsilon$ padrão e *Extended* $k-\epsilon$. A conclusão alcançada pelos autores foi que os modelos SST $k-\omega$ e v^2 -f fornecem os melhores resultados quando comparadas aos outros modelos em relação à previsão da posição do choque e do ponto de descolamento.

Simulações computacionais realizadas por Haidinger (1997) em uma tubeira sujeita a escoamento bidimensional mostraram que o desempenho previsto é influenciado significativamente pelo modelo de fechamento empregado. Discrepâncias entre o modelo de Baldwin e Lomax (BLM) e modelos de duas equações foram encontradas para o coeficiente de atrito, empuxo, impulso específico I_s e para a distribuição de pressão nas paredes. O BLM forneceu resultados significativamente menores para o I_s e coeficiente de atrito, enquanto os modelos de duas equações chegaram a valores mais próximos à referência experimental.

De forma complementar, Hamed e Vogiatzis (1995) também realizaram simulações computacionais em uma tubeira sujeita a escoamento bidimensional. Foi empregado o BLM, modelo Baldwin-Barth, modelo $k-\epsilon$ padrão e o modelo $k-\omega$ de Chien e Wilcox. Como resultado, encontraram que os modelos de duas equações descreveram, de forma geral, a melhor distribuição de pressão em condições em que o escoamento é superexpandido. O modelo algébrico previu a formação do choque a jusante em relação ao experimental e o modelo de uma equação previu a montante. Ambos previram uma pressão maior na região antes da formação de choque.

Gusman, Housman e Kiris (2011) realizaram simulações nos programas comerciais StarCCM+ e Overflow-2 do escoamento externo relacionado ao foguete Saturno V, incluindo no domínio de cálculo a pluma formada após o término da tubeira. Foram empregados o modelo SA e modelos SST com e sem correções de temperatura e curvatura. As análises dos resultados em comparação com dados de voo apontam que o modelo SST sem termos de correção obteve desempenho superior quando comparado ao SA e SST com correção.

A obtenção de uma série de propriedades no interior de tubeiras, como por exemplo: impulso específico I_s ; coeficiente de empuxo C_f ; coeficiente de descarga C_d ; velocidade de ejeção dos gases c^* e taxa de queima estimada de seu propelente em função do tempo t_q , podem ser determinadas a priori dos testes experimentais, apenas utilizando abordagem analítica e computacional, da mesma forma que os autores supracitados fizeram. Entretanto, há uma série de eventos que podem ocorrer durante a ignição e operação do motor-foguete que somente podem ser avaliados através de testes experimentais em banco estático. Como por exemplo, a ocorrência de uma falha estrutural motivada por uma taxa de queima anômala do propelente, que pode ser causada por uma trinca (tratando-se de propelentes sólidos) conduzindo assim a um aumento significativo da área de queima e conseqüentemente, a um aumento de pressão que pode ser maior do que a pressão admissível para aquela montagem. Falhas também são presentes em motores que funcionam com propelente líquido, como exemplo disto, pode ser citada a falha do motor LE-7 da JAXA (*Japan Aerospace Exploration Agency*), causado por problemas de fadiga, induzidos por vibração.

Sabendo da importância dos testes experimentais para a estimativa de grandezas relacionadas a balística interna de motores-foguete, Živković *et al.* (2014) e Américo *et al.* (2020) fizeram testes experimentais em bancada estática e através das curvas de empuxo e de pressão, avaliaram C_d , C_f , I_s e t_q . Uma das diferenças entre os trabalhos é que Živković *et al.* (2014) consideram apenas avaliações médias para as grandezas de interesse, enquanto Américo *et al.* (2020) além de fazer avaliações médias, consideram avanços instantâneos para o cálculo da taxa de queima do propelente. Ambos os trabalhos constataram que as previsões analíticas para as grandezas de interesse foram satisfatoriamente concordantes com o obtido experimentalmente para a faixa de pressão de operação dos motores. Mesmo utilizando diferentes propelentes, os valores para a taxa de queima média para uma mesma pressão resultaram em valores próximos.

A abordagem experimental explorada por Thornock e Brown (1972) foi aplicada em três tubeiras convergente-cônica, ou seja, tubeiras que possuem apenas a seção convergente. Três ângulos de semieixo foram utilizados, sendo eles 15° , 25° e 40° . Uma tubeira de referência com convergente circular também foi utilizada como parâmetro de comparação ao término do estudo. O propósito principal do trabalho foi de investigar qual seria a influência da variação do semieixo na eficiência propulsiva e para isso, valores experimentais para a pressão nas paredes, pressão nas proximidades da garganta (na linha de simetria), fluxo de massa, empuxo, ângulo local do escoamento, temperatura e pressão de estagnação foram aferidos. O aparato experimental foi montado de tal forma que foi possível variar a razão entre a pressão na tubeira em relação a pressão atmosférica de 1,4 a 7 vezes, devido ao acionamento de válvulas acopladas a um reservatório de pressão. Também foram feitas estimativas analíticas para: C_d em condição de escoamento bloqueado (limite para quando

um dado valor para a razão entre a pressão no interior da tubeira e a atmosférica atinge uma constância no valor do coeficiente de descarga. Caso a pressão continue subindo no interior da tubeira, o valor de C_d e a posição da linha sônica não sofrerão alterações); posição da linha sônica; C_f e ângulo do escoamento local para a região de saída da tubeira.

Considerando uma relação fixa entre a pressão no interior da tubeira com a pressão atmosférica, constatou-se um aumento de C_f e diminuição do valor de C_d . Também se constatou que a linha sônica move-se a jusante com o aumento do ângulo de semieixo. Fixando um dado ângulo de semieixo, C_d aumenta e a linha sônica move-se a montante do escoamento com o aumento da pressão, até que a condição de escoamento bloqueado ocorra. Por fim, avaliando o comportamento de C_d , C_f e linha sônica com as previsões analíticas, considerou-se que os resultados experimentais satisfatoriamente concordam com o previsto analiticamente.

Spotts, Guzik e Gao (2013) utilizam os resultados experimentais e analíticos de Thornock e Brown (1972) como base para avaliações computacionais de CFD utilizando o programa CFD++, contribuindo com a expansão dos resultados para o mesmo problema base. Quando o C_d foi avaliado para cada ângulo de semieixo, constatou-se que a solução de CFD superestima os resultados analíticos em até 2%, por mais que a solução computacional tenha de fato convergido. Os autores reforçam que tal diferença pode ser motivada pelo desbalanço entre a vazão mássica na entrada e na saída da tubeira. Uma certa discrepância para os valores de C_f também foram encontrados, mais uma vez superestimando os resultados analíticos e computacionais. Os autores comentam que tal discrepância pode ocorrer por conta da forma que o C_f é calculado (não incluindo a influência causada pelo arrasto de base, captado pela abordagem experimental). A posição da linha sônica foi captada adequadamente, assim como a posição das ondas de expansão. Ao término do estudo constatou-se que os resultados de CFD para C_d e C_f estão de acordo com os resultados experimentais. Além do mais, os autores empregaram três modelos de fechamento em suas simulações que foram o *realizable* k- ϵ , modelo SST e o *realizable* q-L. Segundo eles, a variação dos modelos de fechamento não trouxeram grandes impactos na magnitude de C_d e C_f .

Tendo um enfoque maior nos conceitos de verificação e validação, o trabalho de Roy e Blottner (2003) trata de um problema de escoamento hipersônico sobre uma placa plana e sobre a superfície de um cone. O trabalho teve por finalidade avaliar a validade das simulações computacionais para a tensão de cisalhamento nas parede e transferência de calor naquelas aplicações, quando utilizado o programa SACCARA (*Sandia Advanced Code for Compressible Aerothermodynamics Research and Analysis*). Os autores empregaram quatro modelos de fechamento para compor as soluções computacionais, sendo eles o SA, k- ϵ para valores de baixo Reynolds, k- ω de Wilcox e k- ω de Menter e confrontaram os resultados computacionais com resultados analíticos de Van Driest. Também avaliaram a

influência da turbulência na corrente livre nas proximidades da parede e a sensibilidade das propriedades na superfície devido à variação do comprimento adimensional y^+ para o tamanho dos elementos de malha. De uma maneira geral, puderam concluir que quando empregado o modelo SA, melhores eram os resultados, em comparação aos demais modelos de fechamento, para: sensibilidade de turbulência na corrente livre; sensibilidade de y^+ na proximidade da parede; sensibilidade de resolução de malha e maior a concordância entre os dados computacionais em relação aos dados experimentais tanto para a placa plana quanto para o cone.

Ainda relacionado às investigações experimentais em tubeiras, Tang e Fenn (1978) avaliam o C_d de seis tubeiras convergente-divergentes que possuem pequenos diâmetros de garganta, variando entre 0,259 mm e 23,901 mm, diversos fluidos de trabalho (argônio, hélio, nitrogênio e hidrogênio), baixa pressão e baixos Reynolds. Os autores, através de uma série de considerações para os gradientes de pressão, fluido de trabalho (gás perfeito com calores específicos constantes), dependência linear da viscosidade com a temperatura e por um número de Reynolds modificado, chegam em uma equação analítica para o C_d que pode incluir, ou não, o número de Prandtl (parâmetro determinado pela razão entre difusividade de quantidade de movimento e difusividade de calor). As avaliações dos resultados experimentais puderam concluir que para número de Reynolds inferior a 200, a rarefação dos gases torna-se um parâmetro que proporciona grandes variações em relação ao previsto pela equação analítica e que para valores de Reynolds acima de 200, a concordância entre os resultados analíticos e experimentais é considerada satisfatória para todos os fluidos de trabalho.

Tian e Lu (2013) tendo o propósito de investigar a acurácia do posicionamento de ondas de choque, descolamentos e a correta reprodutibilidade de fortes gradientes de pressão no interior de tubeiras com vetorização de empuxo, ou seja, mudanças propositalmente na direção de exaustão do escoamento por injeção de fluido pela superfície da tubeira (a aplicação mais convencional deste tipo de sistema propulsivo destina-se a aeronaves de caça, contribuindo com uma maior manobrabilidade e versatilidade da aeronave), os autores empregaram diferentes modelos computacionais com nove modelos de fechamento diferentes para prever o posicionamento e comportamento de tais estruturas. Através da comparação entre resultados computacionais e resultados experimentais, concluiu-se que dentre os modelos de fechamento empregados, o modelo $k-\epsilon$ de Goldberg previu com maior precisão a posição da onda de choque, enquanto que para a distribuição de pressão nas paredes, o modelo SA mostrou-se mais acurado.

Verificou-se que existem poucos estudos relacionados à modelagem da turbulência em tubeiras que utilizam os perfis geométricos de Back, Massier e Gier (1965a). E também, da mesma forma, verificou-se que poucos trabalhos realizam simulações computacionais do escoamento interno com diferentes modelos de turbulência e aplicam aos resultados

computacionais os conceitos de verificação do modelo computacional, verificação de solução e validação do modelo matemático.

Um dos trabalhos que aplicaram muito bem os conceitos de verificação e validação para simulações computacionais utilizando os perfis geométricos de Back, Massier e Gier (1965a) foi o elaborado por Germer (2014), o qual teve por objetivo estudar efeitos de variação da seção convergente em tubeiras de baixa razão de expansão, em relação ao coeficiente de empuxo C_f , coeficiente de descarga C_d e impulso específico I_s . O processo de validação das soluções computacionais desenvolvido pelo autor resultou em uma boa concordância entre os resultados computacionais (obtidos com o programa Mach2D, mas uma versão diferente da qual é utilizada nesta dissertação) com resultados experimentais para os pontos de tomada de pressão. Uma das constatações observadas foi de que, dependendo de qual é o perfil de convergente escolhido, pode haver uma variação de até 2,5% para o valor do empuxo estimado. Constatação esta que permite comprovar de que a escolha do perfil convergente é sim significativa quando uma tubeira está sendo projetada ou é alvo de estudo.

2.3 Resumo do capítulo

Neste capítulo foi apresentada uma visão geral de uma série de trabalhos que exploraram abordagens analíticas, computacionais e experimentais em problemas relacionados à escoamentos internos em tubeiras. Algumas das principais grandezas avaliadas por eles foram C_d , I_s , C_f , empuxo, distribuição de pressão e temperatura nas paredes, posição da linha sônica e coeficiente de transferência de calor. Avaliações do emprego de diferentes modelos de fechamento para compor o equacionamento dos modelos computacionais também foram feitas, explorando modelos de zero, uma e duas equações utilizando tanto programas comerciais, quanto programas próprios. Pode-se perceber de forma bem evidente que diversas investigações relacionadas a tubeiras vêm sendo feitas ao longo dos anos e que, por mais que a tubeira seja uma geometria muito estudada por acadêmicos, empresas privadas e instituições de pesquisa, ainda há muito o que se descobrir, dimensionar e projetar.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A fundamentação teórica deste trabalho divide-se em seis partes, iniciando com uma breve descrição das equações de balanço que quantificam o escoamento, em seguida são apresentadas as médias temporais e médias mássicas que conduzem à necessidade de um modelo de fechamento, posteriormente, são dados maiores detalhes sobre os modelos de zero, uma e duas equações que surgiram para suprir a necessidade de equilibrar o número de incógnitas com o número de equações. Em seguida, são descritos alguns dos principais aspectos teóricos relacionados a tuberias, introduzindo seus conceitos e motivos de serem calculados. Por fim, são apresentados conceitos de verificação e validação, estimativas de incerteza e extrapolação de resultados computacionais. Encerrando o capítulo com um resumo geral do que foi apresentado.

3.1 Modelo matemático em coordenadas cartesianas

As equações de balanço são empregadas para a modelagem matemática de escoamentos em diversas aplicações na engenharia, tais como aerodinâmica de aeronaves e veículos automotores, projeto de embarcações, máquinas de fluxo em geral, dentre outras. Tais equações são um sistema de equações diferenciais parciais e representam princípios físicos. Juntamente com as equações de Navier-Stokes, para que se possa quantificar e avaliar determinadas características de um escoamento ainda são necessárias equações para o balanço da massa, energia térmica e uma equação de estado, para relacionar as propriedades de pressão, temperatura e massa específica.

Segundo Cebeci (2013), a equação de balanço da massa, equação da segunda lei de Newton (nas três componentes de posição do sistema de coordenadas retangulares), equação de balanço da energia e equação de estado podem ser representadas, respectivamente, da seguinte forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial t_{ij}}{\partial x_j} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial(\rho H_{tot})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j H_{tot})}{\partial x_j} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(u_j t_{ij})}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} \quad (3.3)$$

$$p = R_g \rho T \quad (3.4)$$

onde os subscritos i e j demonstram a notação indicial e podem assumir valores 1, 2 ou 3. Se o elemento analisado em questão é bidimensional, i ou j podem ser 1 ou 2, se tridimensional, i ou j podem ser 1, 2 ou 3. A massa específica do fluido corresponde a ρ , já R_g representa a constante do gás, T a temperatura, u_i e u_j são componentes do vetor velocidade, p a pressão, t o tempo, H_{tot} a entalpia total, x_i representa as componentes do vetor posição referentes aos eixos coordenados, t_{ij} representa o tensor de tensões de Reynolds e q_j representa o vetor fluxo de energia térmica. Os elementos t_{ij} , q_j e H_{tot} ainda podem ser escritos como:

$$t_{ij} = 2\mu S_{ij} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (3.5)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right); \quad q_j = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j}; \quad H_{tot} = h_e + \frac{1}{2} u_i u_i \quad (3.6)$$

o subscrito k também corresponde à uma componente da notação indicial e segue a mesma lógica que i e j , lembrando que estes índices não podem ser repetidos mais de duas vezes cada, por isso, em determinadas aplicações podem surgir ainda mais índices, também deve-se comentar que este tipo de notação obedece a determinadas regras conforme os subscritos são operados. μ é a viscosidade dinâmica do fluido, S_{ij} é o tensor taxa de deformação, δ_{ij} é o delta de Kronecker (sendo igual a um quando subscritos são iguais e zero quando os subscritos são diferentes entre si), κ é a condutividade térmica do fluido e h_e é a entalpia específica.

A Eq. 3.3 pode ser escrita de outras formas, em função da entalpia e energia interna específicas ou mesmo em função da temperatura. Segundo Landau e Lifshitz (1987), tal equação quando expressa em termos de temperatura pode ser dada através de:

$$c_p \left[\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_k T)}{\partial x_k} \right] = \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_i} + 2\mu S_{ij}^2 + \mu \left(\frac{\vartheta}{\mu} - \frac{2}{3} \right) \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right)^2 \quad (3.7)$$

onde c_p é o calor específico a pressão constante e ϑ é o segundo coeficiente de viscosidade (*bulk viscosity*) que não será considerado.

3.2 Médias temporais e médias mássicas do modelo matemático em coordenadas cartesianas

3.2.1 Reynolds Average Navier-Stokes (RANS)

Para aplicar as médias temporais faz-se a decomposição das propriedades do escoamento em duas parcelas, seu valor médio e sua flutuação. Considerando pressão,

velocidade e massa específica tem-se:

$$p(x_i, t) = \overline{p(x_i)} + p'(x_i, t) \quad (3.8)$$

$$u_i(x_i, t) = \overline{u_i(x_i)} + u'_i(x_i, t) \quad (3.9)$$

$$\rho(x_i, t) = \overline{\rho(x_i)} + \rho'(x_i, t) \quad (3.10)$$

As variáveis com uma barra indicam valores médios da propriedade para a ponderação temporal e valores com aspas simples representam a flutuação da ponderação temporal, de forma que a sobreposição destas funções corresponda ao valor instantâneo da propriedade. As definições de propriedades médias e de flutuação para uma grandeza ϕ qualquer (podendo ser grandezas escalares, vetores e tensores) são dadas por Eq. 3.11 e Eq. 3.12, respectivamente.

$$\overline{\phi} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \phi(t) dt \quad (3.11)$$

$$\overline{\phi'} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \phi'(t) dt = 0 \quad (3.12)$$

de forma que Δt indica uma variação temporal e ϕ uma grandeza qualquer, diferente de ϕ . Com base nas Eq. 3.8 à Eq. 3.12, obtêm-se as seguintes relações:

$$\overline{\phi + \psi} = \overline{\phi} + \overline{\psi} \quad (3.13)$$

$$\overline{\phi\phi'} = 0 \quad (3.14)$$

$$\overline{\phi\psi} = \overline{\phi}\overline{\psi} + \overline{\phi'\psi'} \quad (3.15)$$

$$\overline{\phi^2} = (\overline{\phi})^2 + \overline{(\phi')^2} \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial \overline{\phi}}{\partial x} = \overline{\frac{\partial \phi}{\partial x}} \quad (3.17)$$

Reescrevendo as Eq. 3.1 e Eq. 3.2 na forma das Médias Temporais de Reynolds, segundo Cebeci (2013) obtêm-se:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho u_j} + \overline{\rho' u'_j})}{\partial x_j} = 0 \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial (\overline{\rho u_i} + \overline{\rho' u'_i})}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho u_i u_j} + \overline{u_i \rho' u'_j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{t_{ij}} - \overline{u_j \rho' u'_i} - \overline{\rho' u'_i u'_j} - \overline{\rho u'_i u'_j}) \quad (3.19)$$

3.2.2 Favre-Averaged Navier-Stokes Equations (FANS)

Conforme Wilcox (2004), tratando-se de escoamentos compressíveis não apenas as flutuações de velocidade, de pressão e de massa específica devem ser levadas em conta mas também, devem ser incluídas flutuações de temperatura, fluxo de energia térmica, entalpia específica e energia interna específica. Nesta seção, os termos com a ênfase til correspondem à média mássica e os com aspas duplas, flutuações da média mássica. Para a ênfase de barra e aspas simples, média temporal. A média para as componentes da velocidade sofrem alterações, mas para pressão e massa específica continuam as mesmas das encontradas para RANS.

Motivado pela necessidade de se obter uma relação para cálculo do termo adicional $\overline{\rho' u'_j}$, presente na equação de balanço da massa para escoamentos compressíveis após a ponderação temporal, Eq. 3.18, Favre (1965) introduziu um novo conceito para simplificação das equações ponderadas no tempo, usando a média ponderada na massa específica. O valor admitido para a soma entre a média mássica e a flutuação baseada na média mássica é conhecida como Médias de Favre, conforme mencionado por Wilcox (2004), também é conhecida como RANS compressível ou FANS (*Favre-averaged Navier-Stokes equations*), conforme Rumsey (2017). Portanto, introduzindo o conceito de velocidade ponderada na massa:

$$\tilde{u}_i = \frac{1}{\bar{\rho}} \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \rho(x, t) u_i(x, t) dt \quad (3.20)$$

As propriedades do escoamento devem ser decompostas conforme:

$$\begin{aligned}
u_i &= \tilde{u}_i + u'' \\
\rho &= \bar{\rho} + \rho' \\
p &= \bar{p} + p' \\
h_e &= \tilde{h}_e + h_e'' \\
e &= \tilde{e} + e'' \\
q_j &= \tilde{q}_j + q_j'' \\
\overline{\rho \tilde{u}_i} &= \overline{\rho u_i} \\
\overline{\rho u_i''} &= 0 \\
\overline{u_i''} &= -\frac{\overline{\rho' u_i'}}{\bar{\rho}}
\end{aligned} \tag{3.21}$$

Ao substituir a Eq. 3.21 nas equações de balanço e realizando as operações de média mássica, são obtidas as equações de balanço ponderadas na média mássica de Favre, Eq. 3.22 à Eq. 3.25.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \tag{3.22}$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{t_{ji}} - \overline{\rho u_j'' u_i''} \right] \tag{3.23}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t} \left[\bar{\rho} \left(\tilde{e} + \frac{\tilde{u}_i \tilde{u}_i}{2} \right) + \frac{\overline{\rho u_i'' u_i''}}{2} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{u}_j \left(\tilde{h}_e + \frac{\tilde{u}_i \tilde{u}_i}{2} \right) + \tilde{u}_j \frac{\overline{\rho u_i'' u_i''}}{2} \right] = \\
&\frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\tilde{q}_j - \overline{\rho u_j'' h_e''} + \overline{t_{ji} u_i''} - \overline{\rho u_j'' \frac{1}{2} u_i'' u_i''} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\tilde{u}_i \left(\overline{t_{ij}} - \overline{\rho u_i'' u_j''} \right) \right]
\end{aligned} \tag{3.24}$$

$$\bar{p} = R_g \bar{\rho} \tilde{T} \tag{3.25}$$

Durante o processo de decomposição das grandezas em médias e flutuações um termo em especial aparece, tanto para RANS ($\overline{\rho u_i'' u_j''}$) quando para FANS ($\overline{\rho u_i'' u_j''}$), um tensor de tensões fictícias ou seja, um fluxo de quantidade de movimento associado às flutuações de velocidade, denominado tensor de tensões de Reynolds. As tentativas de se obter uma solução exata para este tensor resultam em consecutivas correlações de ordens superiores, o que conduz à necessidade de modelar este termo, encontrar uma equação que represente tal tensor. Na Seq. 3.3 são apresentadas discussões adicionais sobre este termo.

A equação para as tensões de Reynolds quando submetida às avaliações FANS, $\bar{\rho} \tau_{ij}$, pode ser dada como:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tau_{ij}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tau_{ij}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} C_{ijk} - \overline{t_{kj} u_i''} + \overline{t_{ki} u_j''} \right] \\
&- \bar{\rho} \tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} + \bar{\rho} \epsilon_{ij} - \bar{\rho} \Pi_{ij} + \overline{u_i'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}} + \overline{u_j'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}} - \bar{\rho} \tau_{jk} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k}
\end{aligned} \tag{3.26}$$

onde

$$\bar{\rho}\Pi_{ij} = \overline{p' \left(\frac{\partial u''_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u''_j}{\partial x_i} \right)} \quad (3.27)$$

$$\bar{\rho}\epsilon_{ij} = \overline{t_{kj} \frac{\partial u''_i}{\partial x_k} + t_{ki} \frac{\partial u''_j}{\partial x_k}} \quad (3.28)$$

$$\bar{\rho}C_{ijk} = \overline{\rho u''_i u''_j u''_k} + \overline{p' u''_i \delta_{jk}} + \overline{p' u''_j \delta_{ik}} \quad (3.29)$$

Considerando as equações para o tensor de tensões de Reynolds sujeito à média mássica, energia cinética por unidade de volume das flutuações turbulentas, transporte turbulento de energia térmica e para a taxa de transformação da média mássica de Favre, pode-se escrever as equações de Favre juntamente com a energia cinética de turbulência k (maiores detalhes sobre k são apresentados na Seç. 3.3.1. O processo de obtenção desta equação é longo e relevante, portanto, recomenda-se a leitura da Seç. 5.3 de Wilcox (2004)), na forma conservativa através das Eq. 3.30 à Eq. 3.36. Lembrando que $\bar{\rho}\tau_{ij} \equiv -\overline{\rho u''_i u''_j}$.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{t}_{ji} + \bar{\rho}\tau_{ji}] \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} E_{tot}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j H_{tot}) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\tilde{q}_j - \overline{\rho u''_j h''_e} + \overline{t_{ji} u''_i} - \overline{\rho u''_j \frac{1}{2} u''_i u''_i} \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} [\tilde{u}_i (\bar{t}_{ij} + \bar{\rho}\tau_{ij})] \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j k) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{t_{ji} u''_i} - \overline{p' u''_j} - \overline{\rho u''_j \frac{1}{2} u''_i u''_i} \right] \\ &+ \bar{\rho}\tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \bar{\rho}\epsilon - \overline{u''_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}} + p' \frac{\partial u''_i}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\bar{p} = R_g \bar{\rho} \tilde{T} \quad (3.34)$$

$$E_{tot} = \tilde{e} + \frac{\tilde{u}_i \tilde{u}_i}{2} + k \quad (3.35)$$

$$H_{tot} = \tilde{h}_e + \frac{\tilde{u}_i \tilde{u}_i}{2} + k \quad (3.36)$$

3.3 Modelos de fechamento

Conforme introduzido na Sec. 3.2.2, quando as aproximações por médias temporais ou mássicas são aplicadas, novos termos aparecem nas equações de balanço. Para que as mesmas possam ser solucionadas, é necessário buscar meios de se quantificar tais termos adicionais, buscando assim o equilíbrio entre o número de incógnitas com o número de equações. Desta forma surge o problema de fechamento. Cebeci (2013) comenta que fechamento é interpretado como o procedimento de encontrar equações adicionais para os novos termos que surgem em versões modificadas, ponderadas na massa ou tempo, das equações de balanço. A solução para o fechamento são equações complementares às equações de balanço e estabelecem um equilíbrio entre o número de equações e número de incógnitas.

Segundo Bardina, Huang e Coakley (1997), o fechamento das equações de balanço demandam a definição das tensões turbulentas de Reynolds e do fluxo térmico turbulento. As tensões de Reynolds ou tensões turbulentas de Reynolds podem ser modeladas com base na hipótese de Boussinesq em termos da viscosidade cinemática turbulenta ν_t em determinados modelos de fechamento. As tensões de Reynolds atuam como um mecanismo de transformação de energia do campo médio para as flutuações turbulentas. Cebeci (2013) ressalta que Boussinesq (1877) foi o primeiro autor a sugerir o termo viscosidade turbulenta com o objetivo de estimar as tensões de Reynolds através de uma analogia que estipula que as tensões turbulentas agem de forma análoga a tensões viscosas, sendo assim, proporcional aos gradientes de velocidades. Tomando uma analogia com a teoria cinética dos gases, deveria ser da ordem do produto entre comprimento e velocidade. Em um ponto de vista unidimensional:

$$\overline{\rho u'v'} = \rho \nu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \quad (3.37)$$

A hipótese de comprimento de mistura foi pela primeira vez introduzida por Prandtl (1926) e corresponde a uma abordagem simplificada do movimento da turbulência onde as partículas se unem e movem-se juntas como se fossem um único corpo, comprimento em que as estruturas turbilhonares mantêm suas identidades. Os valores para o comprimento de mistura variam conforme o tipo de escoamento a ser avaliado. Outros autores, ao longo dos anos, foram efetuando modificações na forma de cálculo do comprimento de mistura l . Aplicando o comprimento de mistura de Prandtl chega-se em:

$$\nu_t = l^2 \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right| \quad (3.38)$$

Segundo Wilcox (2004) a hipótese de Boussinesq estabelece que as diagonais principais do tensor de tensões de Reynolds são coincidentes aos do tensor taxa de deformação

média. De outra forma, para McDonough (2007), a hipótese de Boussinesq estabelece que as pequenas tensões turbulentas associadas às pequenas estruturas turbilhonares, devem ser linearmente proporcionais às taxas de deformação médias (das grandes estruturas turbilhonares). As tensões de Reynolds somadas às tensões viscosas podem ser calculadas com a Eq. 3.39 e o fluxo térmico turbulento acrescido ao fluxo difusivo, calculado com a Eq. 3.40.

$$\overline{\tau_{ij}} = 2\mu \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{S_{jj}\delta_{ij}}{3} \right] + 2\mu_t \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{S_{jj}\delta_{ij}}{3} \right] - \frac{2\rho k\delta_{ij}}{3} \quad (3.39)$$

$$q_j = -(\kappa + \kappa_t) \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (3.40)$$

onde κ_t é a condutividade térmica turbulenta.

O fechamento utilizando modelo de viscosidade turbulenta define o valor de μ_t (é importante ressaltar que μ_t não é uma grandeza física, mas sim um artifício matemático que obedece à hipótese de Boussinesq), termos médios conhecidos e grandezas turbulentas com sua respectiva equação de balanço, tais como energia cinética de turbulência e sua equação de transformação de energia. Quando aplicado em modelos de zero equação a difusão molecular (primeiro termo da Eq. 3.41) e o transporte turbulento costumam ser ignorados. Isso é considerado uma simplificação válida para velocidades supersônicas, entretanto, em certos casos o termo ρk é da mesma ordem do termo de pressão, como em situações hipersônicas, outras condições devem ser aplicadas para garantir o balanço da energia. É uma prática comum generalizar o fechamento em baixas velocidades para a difusão molecular e transporte turbulento. A aproximação mais comum é dada por Wilcox (2004) através da Eq. 3.41.

$$\overline{2\mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) u_i''} - \overline{\rho u_j'' \frac{1}{2} u_i'' u_i''} = \left(\mu + \frac{\mu_t}{k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \quad (3.41)$$

3.3.1 Energia cinética de turbulência

Segundo Wilcox (2004), Prandtl escolheu a energia cinética das flutuações turbulentas por unidade de massa para determinar a base do modelo de velocidade característica para a velocidade das menores estruturas turbilhonares.

Conforme McDonough (2007), k é a energia cinética calculada com flutuações turbulentas da velocidade. O termo “flutuação turbulenta” depende de qual média está sendo utilizada para a simplificação das equações de Navier-Stokes (média mássica ou média temporal), caso não seja especificado, entende-se que o termo em questão se refere às flutuações de velocidade, logo média temporal.

A viscosidade dinâmica turbulenta é dada em função do comprimento característico e de mistura, energia cinética de turbulência k , e uma constante experimental ζ , calculada por meio da Eq. 3.42.

$$\mu_t = \zeta l \sqrt{k} \quad (3.42)$$

A equação de balanço para a energia cinética de turbulência é calculada através da Eq. 3.43.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = t_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \left(\mu \frac{\partial \bar{u}'_i}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{u}'_i}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \frac{\partial k}{\partial x_j} - \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i u'_j} - \frac{1}{\rho} \overline{p' u'_j} \right] \quad (3.43)$$

Cada um dos termos da Eq. 3.43 representa fenômenos físicos que ocorrem no movimento turbulento. Para realizar uma melhor descrição, a Eq. 3.43 pode ser reescrita como Eq. 3.44.

$$A = B - E + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \frac{\partial k}{\partial x_j} - \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i u'_j} - \frac{1}{\rho} \overline{p' u'_j} \right] \quad (3.44)$$

onde A corresponde à soma dos dois primeiros termos da Eq. 3.43, soma do termo temporal e de advecção. B representa a taxa que a energia cinética é transferida do escoamento médio à turbulência. E corresponde à transformação por unidade de massa, lembrando que esta transformação corresponde à taxa na qual a energia cinética de turbulência é convertida em energia interna. O termo com $\mu \frac{\partial k}{\partial x_j}$ é a difusão molecular (difusão da energia cinética causada pelo transporte molecular natural do fluido), a correlação tripla de velocidade é referenciada como transporte turbulento (taxa na qual a energia turbulenta é transportada através do escoamento pelas flutuações turbulentas), o último termo da Eq. 3.44 é chamado de difusão de pressão, outra forma do transporte turbulento resultando da correlação entre as flutuações de pressão e de velocidade. Para fechar a Eq. 3.43 é necessário determinar a difusão de pressão, o transporte turbulento, termo de transformação e o tensor de tensões de Reynolds.

O termo difusão de pressão é agrupado com o termo de transporte turbulento e é considerado um “coeficiente de fechamento” σ_k , calculado por meio da Eq. 3.45.

$$\frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i u'_j} + \frac{1}{\rho} \overline{p' u'_j} = - \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \quad (3.45)$$

A forma com a qual a transformação de energia cinética em energia térmica é calculada não é única, depende do modelo de fechamento a ser empregado. Entretanto, é importante saber que há parâmetros desconhecidos a serem calculados, que é o comprimento

de mistura e o termo da transformação de energia. Se ambas as propriedades forem determinadas de maneira independentemente ao fluido, mostra-se que a transformação de energia cinética em energia interna, ϵ_k , é da ordem da razão da energia cinética de turbulência dividida pelo comprimento de mistura, calculada através da Eq. 3.46.

$$\epsilon_k \approx \frac{\sqrt{k^3}}{l} \quad (3.46)$$

Combinando as equações anteriores, encontra-se a equação para a energia cinética de turbulência, empregada em vários modelos de turbulência, resultando na Eq. 3.47.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = t_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \epsilon_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (3.47)$$

A Eq. 3.47 pode ser modificada para a energia cinética de turbulência de Favre, visto que é parte da equação da energia quando esta é submetida à média mássica, sendo reescrita como Eq. 3.48.

$$\bar{\rho} \frac{\partial k}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \bar{\rho} \tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \overline{t_{ji} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{t_{ji} u_i''} - \overline{p' u_j''} - \frac{\overline{\rho u_i'' u_j'' u_i''}}{2} \right] - \overline{u_i''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \overline{p' \frac{\partial u_i''}{\partial x_i}} \quad (3.48)$$

Na Eq. 3.48, o segundo termo do lado direito da igualdade representa a taxa de transformação submetida à média mássica de Favre. Este termo pode ser mostrado com mais detalhes através da Eq. 3.49.

$$\bar{\rho} \epsilon_k = \overline{t_{ji} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}} = \frac{1}{2} \overline{t_{ji} \left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right)} \quad (3.49)$$

3.3.2 Modelos Algébricos

Conforme Wilcox (2004), van Driest (1956) propôs correções para o modelo de comprimento de mistura, introduzindo o conceito de *viscous damping correction* ou correção amortecida para a viscosidade. Posteriormente, em 1974, Cebeci e Smith modificaram as equações de viscosidade turbulenta e do modelo de comprimento de mistura para que pudessem ser aplicadas em uma vasta quantidade de situações, onde a camada limite ainda está nas proximidades da parede. Já Baldwin e Lomax (1978) propuseram um modelo de turbulência alternativo modificando o modelo de Cebeci e Smith, que ao invés em se conhecer a fronteira da camada limite, aplicou conceitos de vorticidade na camada externa da camada limite para cálculo do comprimento característico.

Os modelos algébricos são a forma mais simples dentre os modelos de fechamento, onde as tensões de Reynolds são calculadas baseadas no comprimento de mistura de

Prandtl ou nos conceitos de difusividade turbulenta de Boussinesq. Em geral, a forma de cálculo empregando modelos algébricos é mais geral em comparação aos demais modelos de uma ou duas equações, visto que atende uma maior quantidade de escoamentos.

Segundo Markatos (1986), a classificação das duas formas mais convencionais de se calcular a viscosidade turbulenta se dá pelo modelo de viscosidade turbulenta constante e pelo modelo de comprimento de mistura de Prandtl.

Para diversos tipos de escoamentos o modelo de comprimento de mistura funciona bem, assim como a previsão dos perfis de velocidade e temperatura. Entretanto, as constantes empregadas variam de situação para situação. Esta ausência de generalidade mostra que para este tipo de modelo, informações importantes do fenômeno físico real não são levadas em consideração. Portanto, o modelo de comprimento de mistura considera que a transformação de energia turbulenta está em balanço em todos os lugares, implicando que a advecção e difusão de energia turbulenta é ignorada. Com o emprego de equações diferenciais para os termos turbulentos, estas restrições podem ser contornadas, através da qual, a viscosidade turbulenta ou as grandezas características da turbulência são calculadas com equações de balanço.

3.3.2.1 Baldwin-Lomax

Conforme descrito em Wilcox (2004), o modelo Baldwin-Lomax é um modelo de duas camadas, isto é, considera apenas duas regiões na camada limite, sendo uma nas proximidades da parede (*inner boundary layer*) e outra na fronteira entre a *inner boundary layer* e o escoamento livre. Sabe-se que este tipo de modelo quando comparado aos mais modernos, compostos de duas ou mais equações, não apresenta as mesmas acurácias por tratar a camada limite como sendo composta de apenas duas regiões. Entretanto, sua aplicação continua trazendo resultados razoavelmente fidedignos em determinadas situações e é um bom modelo para ser adotado como passo inicial na modelagem do fenômeno da turbulência, por ser um modelo de implementação mais simples.

Este modelo foi formulado para situações onde é difícil determinar valores para a velocidade no limite mais externo da camada limite e para a espessura da própria camada limite, o que se torna uma das vantagens da aplicação deste modelo, uma vez que a vorticidade é usada para determinar o comprimento de mistura (*length scale*). A necessidade em se conhecer a espessura da camada limite deixa de ser requerida.

Situações desta forma aparecem em simulações computacionais e em dados experimentais ao longo do trabalho Baldwin e Lomax (1978), assim como em aplicações como separação e recolamento de escoamento compressível causados por ondas de choque em uma placa plana e também no escoamento transônico ao redor de um perfil de asa.

A aplicação do modelo traz resultados para o cálculo da viscosidade cinemática

turbulenta, que é dada por:

$$\nu_t = \begin{cases} \nu_{ti}, & y \leq y_m \\ \nu_{to}, & y > y_m \end{cases} \quad (3.50)$$

onde y_m é o menor valor da distância perpendicular à superfície da parede para $\nu_{ti} = \nu_{to}$. Já ν_{ti} corresponde à viscosidade turbulenta na camada interna, dada para escoamentos bidimensionais pela Eq. 3.51 e ν_{to} é a viscosidade turbulenta na camada externa, dada pela Eq. 3.55. Na Eq. 3.51, o termo em módulo representa a vorticidade escrita de forma bidimensional e l_{mix} representa o comprimento de mistura para o BLM.

$$\nu_{ti} = l_{mix}^2 \left| \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right| \quad (3.51)$$

$$l_{mix} = k_{VK} y \left(1 - e^{-\frac{y^+}{A_0^+}} \right) \quad (3.52)$$

$$F_{wake} = \min \left[y_{max} F_{max}; \frac{c_{wk} y_{max} U_{dif}^2}{F_{max}} \right] \quad (3.53)$$

$$F_{max} = \frac{1}{k} \max_y \left(l_{mix} \left| \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right| \right) \quad (3.54)$$

$$\nu_{to} = \alpha_{BLM} C_{CP} F_{wake} F_{kleb} (y; y_{max}/C_{kleb}) \quad (3.55)$$

onde y_{max} é o máximo valor de y no qual $l_{mix} \left| \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right|$ atinge o valor máximo e y^+ é a distância adimensional à parede. $F_{kleb} (y; y_{max}/C_{kleb})$ é a função de intermitência de Klebanoff dada por:

$$F_{kleb} (y; y_{max}/C_{kleb}) = \left[1 + 5,5 \left(\frac{y}{y_{max}/C_{kleb}} \right)^6 \right]^{-1} \quad (3.56)$$

Já U_{dif} pode ser o máximo valor da velocidade u no interior da camada limite ou pode ser a diferença entre a velocidade máxima na camada limite e o valor da velocidade u em $y = y_{max}$ para escoamento livre, ou ainda, para casos mais genéricos, pode ser dado por:

$$U_{dif} = \max_y \left(\sqrt{[u(y)]^2 + [v(y)]^2} \right) \quad (3.57)$$

Existem constantes que multiplicam as equações anteriores, como A_o^+ , C_{CP} , C_{kleb} , C_{wk} , k_{VK} e α_{BLM} , seus valores são:

$$A_o^+ = 26; C_{CP} = 1,6; C_{kleb} = 0,3; C_{wk} = 1; k_{VK} = 0,40; \alpha_{BLM} = 0,0168 \quad (3.58)$$

3.3.3 Modelos de uma equação

Segundo Wilcox (2004), os modelos de fechamento de uma equação mais recentes (Baldwin-Barth e Spalart-Allmaras), baseados no cálculo da viscosidade turbulenta são “completos” (que possuem equações diferenciais de fechamento para o termo adicional). O modelo Baldwin-Barth mostrou-se impreciso para situações onde a camada limite está colada à superfície, estimando valores abaixo do obtido experimentalmente para o coeficiente de atrito. E suas equações geralmente apresentam dificuldades computacionais. Portanto, sua aplicação possui pouco valor para aplicações em escoamentos turbulentos.

Já o modelo Spalart-Allmaras prevê valores para o coeficiente de atrito que são próximos dos obtidos experimentalmente, de forma semelhante aos modelos algébricos. Para escoamentos descolados, oferece resultados muito superiores aos encontrados com modelos algébricos e as equações que devem ser implementadas não devem gerar grandes dificuldades computacionais. Em geral, os resultados das aplicações deste modelo mostram que é uma boa ferramenta para aplicações em engenharia relacionadas às previsões de propriedades dos escoamentos turbulentos.

Diferentemente dos modelos algébricos que utilizam expressões algébricas para o cálculo da viscosidade turbulenta, os modelos de uma equação utilizam uma equação de balanço, EDP, para determinar seu valor, ou, para encontrar valores para uma variável de trabalho que posteriormente é relacionada com outras equações, resultando na viscosidade turbulenta.

3.3.3.1 Modelo Spalart-Allmaras

Ao longo do trabalho de Spalart e Allmaras (1992), um novo método para avaliação da viscosidade turbulenta baseado em uma única equação de balanço é apresentado. Inicialmente, foi desenvolvido para aplicações aerodinâmicas e foi concebido a partir de observações empíricas, tomando como base no modelo de Nee e Kovasznay (1969). Entretanto, modificações significativas foram realizadas no termo de transformação de energia cinética em energia interna, muito efetivo nas proximidades de uma parede. Visando captar com maior precisão os fenômenos localizados em uma região da camada limite conhecida como *log layer*. Sabe-se que o termo descrito na literatura como destruição não é fisicamente adequado, uma vez que nenhuma informação do escoamento é destruída e sim transformada.

Uma vantagem significativa deste modelo é que ele é local, sua solução em cada ponto do escoamento é independente das soluções obtidas nos pontos anteriores, podendo assim ser compatível tanto com malhas estruturadas quanto não estruturadas. Além disso, sua transição laminar-turbulenta é considerada relativamente suave e também, compatível com *solvers* de Navier-Stokes para duas e três dimensões.

Quatro versões para o cálculo da equação de balanço são apresentadas no trabalho de Spalart e Allmaras (1992). A aplicação de cada uma delas está relacionada ao escoamento em questão, sendo aplicadas aos escoamentos livres (*Free shear flows*), escoamentos próximos à parede com grande número de Reynolds (*Near-wall Region, high Reynolds Number*), escoamentos próximos à parede com baixo número de Reynolds (*Near-wall Region, finite Reynolds Number*) e por fim, para regiões laminares e com transição de camada limite laminar para turbulenta (*Laminar region and tripping*).

Para a obtenção da equação escrita em sua forma mais completa, a cada situação investigada pelos autores, novos termos e novas constantes experimentais são adicionadas e gradativamente calibradas. O subscrito destas funções e constantes indicam seu propósito ou relação com cada termo da equação de balanço. Segundo os autores, *b* corresponde a básico (*basic*), *w* corresponde a parede (*wall*) e *v* para viscoso (*viscous*). Esta notação só se aplica para as constantes do modelo SA e seus derivados.

As Eq. 3.61 e Eq. 3.77 não são as únicas formas de expressar o modelo de Spalart-Allmaras. Diversas modificações foram surgindo ao longo dos anos, desde que o modelo foi inicialmente sugerido em 1992. De forma concisa e bem feita, Rumsey (2021b) apresenta uma série de modificações e versões do modelo SA. Recomenda-se a avaliação desta fonte para leitores que pretendem utilizar alguma versão deste modelo.

As equações para o modelo completo propostas por Spalart e Allmaras (1992) são apresentadas a seguir. As tensões de Boussinesq-Reynolds são estimadas através da consideração da viscosidade turbulenta de Boussinesq e são dadas através da Eq. 3.59, a viscosidade cinemática turbulenta pela Eq. 3.60 e a equação de balanço dada pela Eq. 3.61. No artigo original, a notação utilizada para os elementos corrigidos nos termos de transformação, difusão, advecção e na derivada material possuem a ênfase til. Optou-se por fazer a substituição desta ênfase pelo de acento circunflexo. Assim as terminologias destruição e produção não são fisicamente adequadas, uma vez que correspondem a uma transferência de energia do campo médio para o flutuante, e vice-versa.

$$-\overline{u_i u_j} = \nu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.59)$$

$$\nu_t = \hat{\nu} f_{v1} \quad (3.60)$$

$$\frac{D\hat{\nu}}{Dt} = P - D + T_t + \frac{1}{\sigma} \left[\nabla \cdot (\nu + \hat{\nu}) \nabla \hat{\nu} + c_{b2} (\nabla \hat{\nu})^2 \right] \quad (3.61)$$

de forma que P e D representam os processos transformativos e T_t o de transporte; $\hat{\nu}$ é a variável de trabalho; ν é a viscosidade cinemática; ν_t é a viscosidade cinemática turbulenta; f_{v1} é uma função limitante para a viscosidade ou *damping function*, responsável por levar o efeito da viscosidade até a parede. As funções e constantes experimentais presentes no modelo apresentado por Spalart e Allmaras (1992) são compreendidos como:

$$P = c_{b1} (1 - f_{t2}) \tilde{S} \hat{\nu}; \quad D = \left(c_{w1} f_{wall} - \frac{c_{b1}}{k_{VK}^2} f_{t2} \right) \left[\frac{\hat{\nu}}{d} \right]^2; \quad T_t = f_{t1} (\Delta u)^2 \quad (3.62)$$

$$f_{v1} = \frac{\chi^3}{\chi^3 + c_{v1}^3}; \quad \chi = \frac{\hat{\nu}}{\nu}; \quad \tilde{S} = S + \frac{\hat{\nu}}{k_{VK}^2 d^2} f_{v2}; \quad f_{v2} = 1 - \frac{\chi}{1 + \chi f_{v1}} \quad (3.63)$$

$$f_w = g \left[\frac{1 + c_{w3}^6}{g^6 + c_{w3}^6} \right]^{\frac{1}{6}}; \quad g = r + c_{w2} (r^6 - r); \quad r = \min \left(\frac{\hat{\nu}}{\tilde{S} k_{VK}^2 d^2}, r_{lim} \right) \quad (3.64)$$

$$f_{t1} = c_{t1} g_t \exp \left(-c_{t2} \frac{\omega_t}{\Delta u^2} [d^2 + g_t^2 d_t^2] \right); \quad f_{t2} = c_{t3} \exp \left(-c_{t4} \chi^2 \right) \quad (3.65)$$

$$g_t = \min \left(0, 1, \frac{\Delta u}{\omega_t \Delta x} \right); \quad S = \sqrt{\Omega_{ij} \Omega_{ij}}; \quad c_{w1} = \frac{c_{b1}}{k_{VK}^2} + \frac{(1 + c_{b2})}{\sigma} \quad (3.66)$$

$$r_{lim} = 10; \quad c_{v1} = 7,1; \quad c_{b1} = 0,1355; \quad c_{b2} = 0,622; \quad c_{w2} = 0,3 \\ c_{w3} = 2; \quad c_{t1} = 1; \quad c_{t2} = 1; \quad c_{t3} = 1,1; \quad c_{t4} = 2; \quad \sigma = 2/3 \quad (3.67)$$

onde c_{b1} , c_{b2} , σ , c_{w1} , c_{w2} , c_{t1} , c_{t2} , c_{t3} , c_{t4} e g_t são constantes experimentais; f_{t2} é uma função auxiliar; k_{VK} é a constante de Von Kármán; \tilde{S} é a vorticidade modificada; f_{wall} é uma função adimensional para melhorar a previsão do coeficiente de atrito; d é a distância até a parede mais próxima; ω_t é a vorticidade na parede; Δu é a diferença de velocidade entre um ponto do campo e o da distância percorrida da transição; d_t é a distância do campo até o ponto de transição, que é na parede; Δx é o espaçamento de malha ao longo da parede na transição; S é a norma escalar do termo da magnitude da vorticidade; χ é uma função limitante para a log layer, razão entre a variável de trabalho e a viscosidade cinemática; f_{t1} é a função de deslocamento ou *trip function*; f_{v2} é uma função para controle do comportamento de \tilde{S} ; g é uma função que atua como limitante do valor de r ; Ω_{ij} é o tensor de vorticidade e r_{lim} é um valor limitante para a função r .

Segundo Allmaras, Johnson e Spalart (2012), há confusões na literatura a respeito das formulações do modelo SA para escoamentos compressíveis. Os autores voltam a afirmar

que o modelo SA pode ser utilizado tanto para aplicações em escoamentos incompressíveis quanto compressíveis. Uma equação de balanço equivalente pode ser gerada através da combinação da Eq. 3.61 com a equação da balanço da massa Eq. 3.68, resultando na forma compressível do modelo SA, ou seja, Eq. 3.69.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.68)$$

$$\rho (Eq.3.61) + \hat{\nu} (Eq.3.68) = 0 \quad (3.69)$$

Efetuando as substituições dos termos e as multiplicações distributivas na Eq. 3.69, chega-se em:

$$\rho \frac{D\hat{\nu}}{Dt} - \rho P + \rho D - \rho T_t - \frac{\rho}{\sigma} [\nabla \cdot (\nu + \hat{\nu}) \nabla \hat{\nu} + c_{b2} (\nabla \hat{\nu})^2] + \hat{\nu} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \hat{\nu} \frac{\partial (\rho \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.70)$$

O termo da derivada material, primeiro no lado esquerdo da equação, pode ser decomposto em um termo temporal que representa a taxa de acúmulo da grandeza escalar $\hat{\nu}$ e em um termo advectivo desta mesma grandeza. Efetuando esta decomposição e juntando os termos P , D e T_t , obtém-se:

$$\rho \frac{\partial \hat{\nu}}{\partial t} + \rho \tilde{u}_i \frac{\partial \hat{\nu}}{\partial x_i} - \rho (P - D + T_t) - \frac{\rho}{\sigma} [\nabla \cdot (\nu + \hat{\nu}) \nabla \hat{\nu} + c_{b2} (\nabla \hat{\nu})^2] + \hat{\nu} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \hat{\nu} \frac{\partial (\rho \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.71)$$

Sabendo que as derivadas podem ser escritas conforme:

$$\rho \frac{\partial \hat{\nu}}{\partial t} + \hat{\nu} \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial (\rho \hat{\nu})}{\partial t} \quad (3.72)$$

$$\rho \tilde{u}_i \frac{\partial \hat{\nu}}{\partial x_i} = \frac{\partial (\rho \tilde{u}_i \hat{\nu})}{\partial x_i} - \hat{\nu} \frac{\partial (\rho \tilde{u}_i)}{\partial x_i} \quad (3.73)$$

e que, o divergente do produto entre uma grandeza escalar qualquer ϕ e um vetor \vec{F} qualquer pode ser expresso como:

$$\nabla \cdot (\phi \vec{F}) = \nabla \phi \cdot \vec{F} + \phi \nabla \cdot \vec{F} \quad (3.74)$$

$$\rho \nabla \cdot [(\hat{\nu} + \nu) \nabla \hat{\nu}] = \nabla \cdot [\rho (\hat{\nu} + \nu) \nabla \hat{\nu}] - (\nu + \hat{\nu}) \nabla \rho \cdot \nabla \hat{\nu} \quad (3.75)$$

as Eq. 3.72. à Eq. 3.75 podem ser aplicadas na Eq. 3.71, para que se possa chegar na forma alternativa compressível da equação diferencial para o cálculo da variável de trabalho $\hat{\nu}$, a qual, finalmente pode ser dada por:

$$\frac{\partial(\rho\hat{\nu})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u}\hat{\nu}) - \rho(P - D + T_t) - \frac{1}{\sigma} \nabla \cdot [\rho(\nu + \hat{\nu}) \nabla \hat{\nu}] - \frac{c_{b2}}{\sigma} \rho (\nabla \hat{\nu})^2 + \frac{1}{\sigma} (\nu + \hat{\nu}) \nabla \rho \cdot \nabla \hat{\nu} = 0 \quad (3.76)$$

Os autores do trabalho Rajee e Sinha (2015) afirmam que o último termo do lado esquerdo da Eq. 3.76, o qual não está presente na versão padrão do modelo, é o termo responsável por trazer os efeitos de compressibilidade. Os termos de P , D e T_t utilizados até então na versão equivalente da equação diferencial continuam sendo os mesmos da versão padrão do modelo. Por outro lado, existem comentários interessantes sobre o termo de transporte T_t . Diversos autores utilizam a Eq. 3.76 sem incluir o termo T_t , isso acontece por considerarem que o escoamento de interesse não possui ponto de transição no interior da camada limite entre o regime laminar e o regime turbulento. Passando a considerar que no interior da camada limite, o escoamento turbulento é dominante desde o início. Desconsiderando assim a necessidade de incluir o termo T_t no equacionamento. Resultados experimentais para a distribuição do perfil de velocidades, sem refrigeração nas paredes, encontrados por Back, Massier e Gier (1965b) reforçam esta consideração por constatar que para a geometria de interesse tal transição ocorre antes da primeira tomada de temperatura, localizada a 13,3% do comprimento total da tubeira, ou seja $x/L_t = 0,133$, aqui x é a posição da primeira tomada de temperatura e L_t o comprimento total da tubeira.

Tomando a consideração anteriormente levantada como válida, a equação submetida à mudança de coordenadas espaciais e subsequentemente a discretização e implementação computacional é:

$$\frac{\partial(\rho\hat{\nu})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u}\hat{\nu}) - \rho(P - D) - \frac{1}{\sigma} \nabla \cdot [\rho(\nu + \hat{\nu}) \nabla \hat{\nu}] - \frac{c_{b2}}{\sigma} \rho (\nabla \hat{\nu})^2 + \frac{1}{\sigma} (\nu + \hat{\nu}) \nabla \rho \cdot \nabla \hat{\nu} = 0 \quad (3.77)$$

3.3.4 Modelos de duas equações

Os modelos de fechamento desta classe também são definidos como “completos” pois são capazes de prever propriedades do escoamento sem conhecer a estrutura da turbulência. Diferentemente dos modelos de uma equação, são modelos mais gerais. Os métodos mais tradicionais e mais utilizados empregam equações de transporte para duas variáveis. A primeira seria a equação para energia cinética de fechamento e a segunda, taxa de transformação específica ou taxa de transformação.

Ao longo do texto deste trabalho, são citados três modelos, sendo eles o $k-\epsilon$ de Launder e Sharma, também conhecido como standard $k-\epsilon$ model, $k-\omega$ de Wilcox e o SST de Menter que é uma fusão dos dois anteriores com modificações na definição da viscosidade turbulenta, utilizando o modelo $k-\omega$ para as fronteiras do domínio físico e gradualmente torna-se o modelo $k-\epsilon$ quando progride ao escoamento livre.

Por mais que o modelo $k-\epsilon$ de Launder e Sharma seja o mais comum desta classe, não é o mais adequado para se trabalhar em situações que envolvem grandes gradientes de pressão. Diferentemente do $k-\omega$ que possui melhor comportamento a grandes variações de pressão, apresentando certa superioridade, em determinadas situações, quando comparado ao $k-\epsilon$ clássico.

3.3.4.1 Modelo SST Shear-Stress transport Model

Menter (1994) apresenta dois novos modelos de fechamento baseados na viscosidade turbulenta. O primeiro é chamado de *baseline model* BSL, no qual emprega-se o modelo tradicional $k-\omega$ de Wilcox na região mais próxima à parede e transaciona para o modelo tradicional $k-\epsilon$ nas camadas externas da camada limite e escoamento livre. O segundo modelo, chamado de Modelo SST, resulta de uma modificação da definição da viscosidade turbulenta do primeiro modelo, o qual considera os efeitos principais da tensão de cisalhamento turbulenta, elemento importante para previsão de gradientes de pressão adversos. Forçando as tensões de cisalhamento turbulentas a se limitar em uma constante multiplicada pela energia cinética de turbulência dentro da camada limite.

O modelo SST apresenta melhorias significativas em previsões em que se tem um escoamento sujeito a elevados gradientes de pressão. Diversos autores dos trabalhos utilizados na revisão bibliográfica chegam nesta conclusão. Podem ser citados Gusman, Housman e Kiris (2011), Wilde (2010) e Balabel *et al.* (2011).

A transição entre os modelos se dá através de uma função de acoplamento relacionada aos coeficientes de cada modelo e aparece na região específica da camada limite chamada *wake region*. O aparecimento de termos de difusão cruzada na equação ω e o fato de que diferentes constantes são utilizadas é o que diferencia o modelo tradicional $k-\omega$ de Wilcox em relação ao Modelo SST. Além do mais, o modelo SST modifica a função de viscosidade turbulenta para melhorar a previsão de descolamentos.

Parte da justificativa de porquê o modelo SST alcança melhores resultados comparados aos demais modelos de duas equações justifica-se pelas modificações na formulação da viscosidade turbulenta. Os modelos clássicos ($k-\omega$ e $k-\epsilon$) geralmente fornecem previsões menos precisas sobre a separação da camada limite quando o escoamento é submetido a altos gradientes de pressão. Esse é um problema significativo, levando a uma subestimativa dos efeitos viscosos, resultando, geralmente, a resultados demasiadamente otimistas na

eficiência de corpos aerodinâmicos.

No modelo SST, a equação para a viscosidade cinemática turbulenta é diferente da que é empregada para o modelo $k-\omega$, calculada através da Eq. 3.78. Já as componentes da energia cinética de turbulência k e a transformação da energia cinética de turbulência ω , são calculadas por meio da Eq. 3.79 e Eq. 3.80, respectivamente.

$$\nu_t = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega; S F_2)} \quad (3.78)$$

$$\frac{D(\rho k)}{Dt} = t_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta^* \rho \omega k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_{k1} \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (3.79)$$

$$\frac{D(\rho \omega)}{Dt} = \frac{\gamma_2}{\mu_t} t_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta_2 \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_{k1} \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2(1 - F_1) \rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (3.80)$$

$$F_1 = \tanh(\arg_1^4); F_2 = \tanh(\arg_2^2) \quad (3.81)$$

$$\arg_1 = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{0,09 \omega y}; \frac{500 \nu}{y^2 \omega} \right); \frac{4 \rho \sigma_{\omega 2} k}{C D_{k\omega} y^2} \right] \quad (3.82)$$

$$\arg_2 = \max \left(\frac{2\sqrt{k}}{0,09 \omega y}; \frac{500 \nu}{y^2 \omega} \right) \quad (3.83)$$

$$C D_{k\omega} = \max \left(2 \rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}; 10^{-20} \right) \quad (3.84)$$

$$t_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (3.85)$$

Assim como o BLM e SA, o SST também possui constantes calibradas inerentes ao modelo e são apresentadas como sendo:

$$\begin{aligned} \gamma_2 &= \frac{\beta_2}{\beta^*} - \frac{\sigma_{\omega 1} k_{VK}}{\sqrt{\beta^*}}; k_{VK} = 0,41; \beta^* = 0,09; a_1 = 0,31; \\ \beta_2 &= 0,075; \sigma_{\omega 1} = 0,5; \sigma_{k1} = 0,85; \sigma_{\omega 2} = 0,856 \end{aligned} \quad (3.86)$$

3.4 Aspectos teóricos relacionados às tubeiras

Para que se possa fazer uma análise do desempenho teórico de um motor-foguete, Sutton e Biblarz (2017) citam algumas condições conhecidas como condições de foguete ideal, sendo elas: o fluido que deixa a tubeira é um gás homogêneo que segue o modelo de

gás perfeito, não levando em conta partes condensadas; não há fricção nem transferência de energia térmica nas paredes da tubeira e também não há camada limite; o escoamento em regime permanente acontece apenas na direção axial; não há ondas de choque ou descontinuidades no escoamento; considera-se que o equilíbrio químico se estabelece dentro da câmara e também que a composição dos gases não muda ao longo da queima.

A aplicação das considerações anteriores permite tanto o uso da teoria quase-unidimensional do escoamento compressível, quanto das relações de expansão isentrópicas. De forma que a energia interna adicionada aos gases do volume de controle pelo processo de combustão é transformada em energia cinética. Também, levam a considerar escoamento ideal em qualquer seção da tubeira. A diferença entre o desenvolvimento quase-unidimensional e o unidimensional é que a área não é mais constante, mas função de sua posição axial.

Sendo assim, diversas propriedades e grandezas podem ser estimadas. Uma das principais variáveis de interesse nos estudos relacionados a tubeiras é a força de empuxo F . Segundo Humble, Henry e Larson (1995), partindo-se da segunda lei de Newton, a soma das forças externas agindo sobre um corpo é igual a taxa da variação temporal da quantidade de movimento de tal corpo. A força resultante total aferida, por exemplo, em um banco estático para medição e testes em solo de motores-foguete, corresponderá a combinação das forças geradas pela variação na quantidade de movimento e pela variação entre a pressão de saída do escoamento e a pressão ambiente, portanto, segundo Sutton e Biblarz (2017) tem-se:

$$F = \dot{m}v_s + (p_s - p_a) A_s \quad (3.87)$$

onde A_s é a área na saída da tubeira; p_a e p_s são as pressões atmosférica e na saída da tubeira, respectivamente; v_s é a velocidade de saída do escoamento e \dot{m} é o fluxo de massa, calculados por meio da Eq. 3.88 e Eq. 3.89, respectivamente.

$$v_s = \sqrt{\frac{2\gamma_m R_g T_0}{(\gamma_m - 1) \mathcal{M}} \left[1 - \left(\frac{p_s}{p_0} \right)^{\frac{\gamma_m - 1}{\gamma_m}} \right]} \quad (3.88)$$

$$\dot{m} = p_0 A_{th} \sqrt{\left(\frac{2}{\gamma_m + 1} \right)^{\frac{\gamma_m + 1}{\gamma_m - 1}} \frac{\gamma_m}{R_g T_0}} \quad (3.89)$$

onde A_{th} é a área de menor seção transversal da tubeira ou seja, a garganta; γ_m é a razão entre calores específicos; R_g é a constante dos gases; T_0 é a temperatura de estagnação na câmara de combustão; p_0 é a pressão de estagnação e \mathcal{M} é a massa molecular da mistura

gasosa. Sendo assim, a Eq. 3.87 ainda pode ser reescrita, obtendo a equação do empuxo ideal dada por Sutton e Biblarz (2017) como:

$$F = p_0 A_{th} \sqrt{\left(\frac{2}{\gamma_m + 1}\right)^{\frac{\gamma_m + 1}{\gamma_m - 1}} \frac{2\gamma_m^2}{\gamma_m - 1} \left[1 - \left(\frac{p_s}{p_0}\right)^{\frac{\gamma_m - 1}{\gamma_m}}\right]} + (p_s - p_a) A_s \quad (3.90)$$

Não é só a força de empuxo que pode ser avaliada neste contexto. Também existem parâmetros que proporcionam a comparação entre diferentes sistemas propulsivos e que permitem avaliar a eficiência das tubeiras. Quatro parâmetros de eficiência são apresentados, sendo eles: impulso específico, I_s ; velocidade efetiva de exaustão, c ; coeficiente de empuxo, C_f e coeficiente de descarga C_d .

Segundo Sutton e Biblarz (2017), o impulso total fornecido pelo motor-foguete I_t é interpretado como o somatório da força de empuxo gerada pelo motor ao longo do tempo de queima do propelente tq , ou seja:

$$I_t = \int_0^{tq} F dt \quad (3.91)$$

Através do I_t , pode-se definir um parâmetro de eficiência do sistema propulsivo, denominado impulso específico I_s . Compreendido como a quantidade de impulso gerado pelo peso total do propelente, quanto maior seu valor, melhor é o desempenho do sistema propulsivo, calculado através de:

$$I_s = \frac{I_t}{ag m_p} \quad (3.92)$$

onde ag corresponde à aceleração gravitacional e m_p é a massa de propelente utilizada para queima.

Sabe-se que a velocidade na saída do bocal não é constante. Para os cálculos unidimensionais pode ser definida uma velocidade média chamada de velocidade efetiva de exaustão. Considerada um indicador de desempenho do motor, pois quanto maior for seu valor, maior será a velocidade em que o mesmo fluxo de massa será ejetado. Caso sejam comparados dois motores iguais, com a mesma massa embarcada. Seu valor é obtido através de:

$$c = \frac{A_{th}}{m_p} \int_0^{tq} p_0 dt \quad (3.93)$$

Segundo Sutton e Biblarz (2017), o coeficiente de empuxo C_f é um parâmetro adimensional utilizado para verificar o desempenho da tubeira e é representado como sendo a relação entre a força de empuxo gerada e o produto entre a pressão de estagnação

e a área da garganta. Seu valor máximo é obtido no vácuo quando p_a é nulo. Quando p_s é igual a p_a , tem-se o coeficiente de empuxo ótimo, relacionado à expansão ótima do escoamento na tubeira. Tal coeficiente é dado por:

$$C_f = \frac{F}{p_0 A_{th}} \quad (3.94)$$

Outro parâmetro de avaliação de desempenho que pode ser utilizado é o coeficiente de descarga C_d . Tal coeficiente é determinado como sendo a razão entre a vazão mássica encontrada pela solução computacional \dot{m} e a vazão mássica quase-unidimensional isentrópica, \dot{m}_{Q1D} .

$$C_d = \frac{\dot{m}}{\dot{m}_{Q1D}} \quad (3.95)$$

O trabalho de Back, Massier e Gier (1965a) ainda traz o valor de C_d quando é empregada a previsão de Hall, dada pela Eq. 3.96 e nomeado de C_{dHall} . Os testes experimentais efetuados pelos autores mostram que para a faixa de pressão utilizada neste relatório, o valor de C_{dHall} varia entre 0,960 e 0,995, aproximadamente.

$$C_{dHall} = 1 - (\gamma_m + 1) \left(\frac{r_{th}}{r_c} \right)^2 \left[96 - \frac{8\gamma_m + 21}{4608} \left(\frac{r_{th}}{r_c} \right) + \frac{754\gamma_m^2 + 1971\gamma_m + 2007}{552960} \left(\frac{r_{th}}{r_c} \right)^2 - \dots \right] \quad (3.96)$$

onde r_{th} é o raio da garganta e r_c é o raio de curvatura da garganta.

Já no trabalho de Kliegel e Levine (1969) é desenvolvida a solução analítica para o mesmo coeficiente, sendo este é apresentado na Eq. 3.97 e nomeado de C_{dKL} . Considerando os dados de geometria e também, a razão entre calores específicos como sendo $\gamma_m = 1,4$, a Eq. 3.97 resulta em 9.961649849241700E-01.

$$C_{dKL} = 1 - \frac{\gamma_m + 1}{\left(1 + \frac{r_c}{r_{th}}\right)^2} \left(\frac{1}{96} - \frac{8\gamma_m - 27}{2304 \left(1 + \frac{r_c}{r_{th}}\right)} + \frac{754\gamma_m^2 - 757\gamma_m + 3633}{276480 \left(1 + \frac{r_c}{r_{th}}\right)^2} \right) \quad (3.97)$$

No trabalho de Tang e Fenn (1978), é apresentado uma maneira de calcular o C_d para valores de baixo número de Reynolds, considerando diversos gases. A equação sugerida por eles será chamada de C_{dTF} e é calculada por:

$$C_{dTF} = 1 - \left(\frac{\gamma_m + 1}{2} \right)^{\frac{3}{4}} \left\{ \frac{8 \left[9 - 4\sqrt{6} \right]}{3(\gamma_m + 1)} + \frac{4\sqrt{6}}{3} \right\} \frac{1}{\sqrt{Re_D^*}} + \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{(\gamma_m - 1)(\gamma_m + 2)}{\sqrt{\gamma_m + 1}} \frac{1}{Re_D^*} \quad (3.98)$$

os autores utilizam uma versão modificada do número de Reynolds, Re_D^* , sendo:

$$Re_D^* = \left(\frac{r_c}{r_{th}} \right)^{-\frac{1}{2}} (2\rho_{\delta^*} u_{\delta^*} r_{th})_{M=1} \quad (3.99)$$

o subscrito δ^* indica que a propriedade é avaliada na fronteira da camada limite e $M = 1$ representa que as variáveis dentro do parêntesis estão sendo calculadas para a condição sônica, ou seja, número de Mach unitário.

3.5 Verificação e Validação

Conforme ASME (2009), a verificação de código computacional tem por objetivo avaliar se o código foi implementado corretamente. Esta análise é independente da modelagem física do problema, visto que isso é objeto de estudo da validação.

O presente trabalho utiliza os resultados reportados por Back, Massier e Gier (1965b) (reproduzidos parcialmente no Anexo A) para validação de modelos numérico-computacionais. Tal processo é realizado por meio de comparações entre estes resultados experimentais com as distribuições de pressão e temperatura na superfície interna da tubeira obtidas computacionalmente. Esta avaliação é feita também para variáveis globais, que medem a eficiência da tubeira.

A verificação de código precede a verificação da solução, visto que é responsável por estabelecer que o código está de fato correto, podendo ser feita pela avaliação de convergência da solução computacional para um problema *benchmark*. Neste tipo de problema, a solução é considerada suficientemente acurada (soluções do tipo *Direct Numerical Simulation* DNS, solução analítica e solução em malhas bem refinadas desde que tenham sido verificadas). Entretanto, conhecer a solução do problema *benchmark* não é suficiente, é necessário que a estrutura seja complexa o suficiente para que todas as funcionalidades sejam “exercitadas”. No caso da avaliação de problemas relacionados à turbulência, podem ser utilizados modelos matemáticos para escoamentos em tubulações, esteiras, jatos e escoamentos livres, chamados por Wilcox (2004) de *building-block cases*.

3.5.1 Avaliações do erro estimado

Existem três tipos de métodos de solução de problemas na engenharia e nas ciências exatas, que são: os métodos analíticos; experimentais e numérico-computacionais. Os métodos analíticos tratam da representação matemática de um fenômeno real através de um modelo matemático contínuo. Geralmente são limitados a problemas mais simplificados com geometrias e condições de contorno mais simples, quando comparados aos outros métodos. Já os métodos experimentais atuam diretamente no fenômeno físico estudado, possuem suas grandezas físicas quantificadas através de instrumentos de medição que são

devidamente calibrados e selecionados para os experimentos desejados, sendo realizados em ambiente monitorado ou mesmo, ambiente controlado. Por fim, os modelos numérico-computacionais requerem a modelagem computacional para a solução de problemas formulados com modelos matemáticos diferenciais. Sua aplicação resulta em soluções discretas ao longo do domínio e são empregados para uma vasta classe de problemas.

Quando um modelo matemático composto por equações diferenciais é submetido à solução computacional, a presença de erros computacionais associados a ele é inevitável. Avaliar a magnitude destes erros é imprescindível para assegurar que o problema físico está sendo resolvido corretamente. Tanto que o processo matemático conhecido como verificação, conforme descrito por Marchi (2001), tem por objetivo principal determinar em que medida um modelo numérico-computacionais é resolvido adequadamente através de um determinado método computacional. Associado a isto, existe também o processo para quantificação dos erros de modelagem que é a validação, processo este que é utilizado para determinar o quão bem um modelo matemático representa certo fenômeno físico real. Segundo ASME (2009), não pode haver validação da solução numérico-computacional sem resultados experimentais que possam ser comparados com os resultados obtidos pelas soluções computacionais.

Ainda segundo Marchi (2001), o erro computacional pode ser composto por diversas fontes de erro, de forma que as principais são: erros de arredondamento; erros de iteração e erros de truncamento. Tais erros são interpretados como a parcela do erro computacional causado pelas aproximações durante a discretização do modelo matemático que resulta no modelo discreto.

Os erros de arredondamento são causados pela limitação da representatividade intrínseca aos números reais, sua magnitude varia conforme o grau de precisão adotada (simples, dupla ou quádrupla) e surgem quando há cancelamento subtrativo de números muito próximos ou quando o número de cálculos matemáticos é muito elevado. Os erros de iteração são compreendidos como a diferença entre o valor de uma variável de interesse em uma dada iteração computacional e o valor da solução matemática exata; sua magnitude reduz conforme o número de iterações aumenta. Quando o erro de truncamento é a principal fonte de erro, o erro computacional passa a ser chamado de erro de discretização.

Existem dois tipos de estimativas de erro de erro de discretização, a estimativa a *priori* e a *posteriori* da solução computacional. As avaliações a *priori* podem ser realizadas sem a necessidade de se possuir resultados computacionais e servem para avaliar a ordem assintótica e ordem verdadeira do erro de discretização e também, para verificar qual é o efeito da redução do tamanho dos elementos de malha em relação ao erro de discretização da solução computacional. As avaliações realizadas a *posteriori* são avaliações que confirmam as análises a *priori*, e através delas, por exemplo, calcular de fato o erro estimado, ordens efetivas e aparentes.

Segundo Marchi (2001) existem cinco tipos de análises de erro que podem ser feitas: a *priori* e sem solução analítica exata (permite obter apenas a ordem assintótica e as ordens verdadeiras do erro de truncamento, quando este é obtido através de expansões da série de Taylor, também permite calcular a razão de redução do erro de truncamento Ψ_E , ou seja, razão entre o erro de truncamento em uma malha mais grossa e uma mais refinada); a *priori* com a solução analítica, obtém-se o primeiro tipo mais a equação geral do erro de truncamento, também se pode obter uma expressão analítica para a ordem efetiva p_E do erro de truncamento baseada em uma única malha; a *posteriori* das soluções computacionais sem solução analítica, permite a avaliação das mesmas grandezas da primeira análise incluindo a obtenção de erros estimados através de qualquer estimador de erro computacional. Também é possível obter o valor da ordem aparente p_U do erro estimado e a razão de convergência da solução computacional para a solução analítica Ψ_U ; a *posteriori* com solução analítica exata, além da primeira à terceira análise, permite-se obter o erro de discretização, valor da ordem efetiva do erro de discretização com base em duas malhas e ainda, a efetividade do erro estimado; Por fim, a *posteriori* das soluções computacionais com solução analítica exata da variável de interesse que possui uma equação contínua. O uso deste tipo de análise de erro permite obter todas as grandezas mencionadas anteriormente e ainda, pode-se obter a equação geral do erro de discretização, ordens verdadeiras e ordens assintóticas do erro de discretização a partir da sua equação geral e também, permite encontrar a expressão analítica para p_E do erro de discretização baseada em uma única malha.

Apresentando de uma forma geral, o erro computacional para uma variável de interesse é interpretado como a diferença entre o valor da solução analítica exata Φ e o valor da solução computacional ϕ_{num} , resultando em:

$$E(\phi) = \Phi - \phi_{num} \quad (3.100)$$

Entretanto, como citado anteriormente, existem diversos tipos de problemas onde o valor da solução analítica exata não é conhecido. Quando este é o caso, o valor da solução analítica deve ser estimado, permitindo assim o cálculo da incerteza numérica U da solução computacional, grandeza que representa um intervalo onde a solução analítica exata deve estar contida. De forma geral, pode ser calculada como a diferença entre o valor da solução analítica estimada ϕ_∞ e o valor da própria solução computacional ϕ_{num} , ou seja:

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi_{num} \quad (3.101)$$

Existem diversos procedimentos disponíveis na literatura sobre como avaliar a incerteza numérica. Seu valor é encontrado através de estimadores de erro, três deles podem ser citados como exemplo: estimador GCI; estimador convergente e estimadores

de Richardson. Os três exemplos são apresentados em maiores detalhes nas próximas subseções.

Quando são feitas avaliações de estimadores de erro, independentemente de qual, espera-se que os resultados obtidos pelas suas aplicações sejam confiáveis e acurados. Para quantificar estas definições existe uma grandeza conhecida como efetividade θ , que é calculada pela razão entre o erro estimado e o valor do erro.

$$\theta = \frac{U(\phi)}{E(\phi)} \quad (3.102)$$

Quanto mais próximo da unidade for a efetividade, mais confiável e acurada é a estimativa de erro. De forma que a estimativa é considerada confiável quando o valor do erro estimado é maior do que o erro de discretização, ou seja, $\theta \geq 1$. Entretanto, não deve ser muito maior do que a unidade, pois além de confiáveis, as estimativas de erro devem ser acuradas, de forma que a magnitude do erro estimado é aproximadamente igual à magnitude do erro de discretização, ou seja, $\theta \approx 1$.

3.5.1.1 Estimador GCI

O estimador GCI (*Grid Convergence Index*) é uma técnica para cálculo da incerteza numérica que tem por objetivo fornecer um intervalo ao redor da solução computacional, onde a solução analítica exata deve estar contida. A incerteza numérica obtida com esta técnica, U_{GCI} , é calculado por:

$$U_{GCI}(\phi_f) = F_s \frac{|\phi_f - \phi_g|}{q^{p_o} - 1} \quad (3.103)$$

de forma que F_s é um fator de segurança, sugerido por Roache (1998) como sendo igual a três ou três meios, dependendo da aplicação; ϕ_f corresponde ao valor da variável de interesse obtida computacionalmente para a malha mais fina e ϕ_g é o valor da variável de interesse obtida computacionalmente para a malha mais grossa; q é a razão de refino da malha e neste trabalho foi considerada constante e igual a dois e p_o é o valor da ordem assintótica. Lembrando que p_o corresponde ao menor valor das ordens verdadeiras do erro de truncamento de uma dada aproximação numérica, quando este é obtido através da expansão de uma série de Taylor *a priori* das soluções computacionais.

A forma correta de expressar o valor da solução computacional acompanhada do estimador GCI é:

$$\phi_{num} = \phi_f \pm U_{GCI}(\phi_f) \quad (3.104)$$

A efetividade do estimador GCI é dada pela razão entre o valor encontrado para o erro estimado e o módulo do erro de discretização. Quando os elementos de malha se tornam cada vez menores, ou seja, tendem a zero, a efetividade passa a ser chamada de efetividade assintótica de forma que o módulo do erro de discretização pode ser substituído pelo módulo do erro estimado de Richardson, uma vez que neste caso em especial, o módulo do erro estimado de Richardson tende ao módulo de erro. Logo, a efetividade obtida tenderá ao fator de segurança, F_s .

3.5.1.2 Estimador Convergente

Conforme citado, explicado e aplicado por Marchi (2001), a solução analítica exata para uma variável de interesse está entre o valor extrapolado da solução computacional somada ao erro estimado obtido com o estimador convergente e o valor extrapolado da solução computacional menos o erro estimado obtido com o estimador convergente, ou seja, $\phi_c - U_c \leq \Phi \leq \phi_c + U_c$.

A solução computacional extrapolada ϕ_c é calculada como a média entre a extrapolação de Richardson utilizando a ordem assintótica $\phi_\infty(p_o)$ e a ordem aparente equivalente $\phi_\infty(p_U^*)$ de uma variável de interesse ϕ , podendo ser escrita como:

$$\phi_c = \frac{[\phi_\infty(p_o) + \phi_\infty(p_U^*)]}{2} \quad (3.105)$$

onde a extrapolação de Richardson utilizando a ordem assintótica $\phi_\infty(p_o)$ e a extrapolação de Richardson utilizando a ordem aparente equivalente $\phi_\infty(p_U^*)$ são calculadas respectivamente por:

$$\phi_\infty(p_o) = \phi_f + \frac{(\phi_f - \phi_g)}{q^{(p_o)} - 1} \quad (3.106)$$

$$\phi_\infty(p_U^*) = \phi_f + \frac{(\phi_f - \phi_g)}{q^{(p_U^*)} - 1} \quad (3.107)$$

Lembrando que a ordem aparente equivalente p_U^* corresponde à inclinação local da curva do erro estimado U da solução computacional ϕ_{num} em relação ao tamanho h_m dos elementos de malha em um gráfico bi-logarítmico. E que permite verificar a *posteriori* das soluções computacionais se a ordem aparente tende à ordem assintótica, conforme os elementos da malha são reduzidos. Sendo necessárias simulações elaboradas em três tamanhos de malha diferentes para se estimar o valor de p_U^* , sendo calculado como:

$$p_U^* = \frac{\log \left| \left(\frac{\phi_i - \phi_g}{\phi_f - \phi_i} \right) \right|}{\log(q)} \quad (3.108)$$

de forma que ϕ_f corresponde à solução computacional obtida na malha mais refinada e ϕ_g , à solução computacional obtida na malha mais grossa, ϕ_i à solução computacional obtida na malha intermediária entre ϕ_f e ϕ_g . A razão de refino de malha é dada por q .

Já a incerteza numérica da solução computacional convergente U_c pode ser calculada através de:

$$U_c = \frac{|\phi_\infty(p_o) - \phi_\infty(p_U^*)|}{2} \quad (3.109)$$

Uma vez que a validade das Eq. 3.107 e Eq. 3.109 sejam atendidas, ou seja, para avaliações em que $p_U^* > 0$, a forma adequada de representação da solução computacional ao empregar este estimador de incerteza numérica é dada como:

$$\phi_{num} = \phi_c \pm U_c \quad (3.110)$$

3.5.1.3 Multiextrapolação de Richardson

Dahlquist e Björck (2008) descrevem que o método chamado de multiextrapolação de Richardson, MER, baseia-se na aplicação recursiva da extrapolação de Richardson de forma a potencializar sua eficácia reduzindo o erro computacional. Sua aplicação pode ser compreendida como uma etapa de pós-processamento dos dados e costuma ser aplicado com sucesso para variáveis globais. Segundo Dahlquist e Björck (2008), a equação aplicada de forma recursiva para a determinação da solução computacional de interesse em uma dada malha com um determinado número de extrapolações é:

$$\phi_{g_z, m} = \phi_{g_z, m-1} + \frac{\phi_{g_z, m-1} - \phi_{g_z-1, m-1}}{q^{p_{m-1}} - 1} \quad (3.111)$$

de forma que g_z refere-se à malha na qual a simulação computacional é avaliada, ou seja, $g_z = [2, 3, \dots, G]$ de maneira que $g_z = 1$ é a malha mais grossa e $g_z = G$ a mais refinada; m é o número de extrapolações de Richardson, $m = [1, 2, \dots, g_z - 1]$ e p_m é o valor das ordens verdadeiras do erro de discretização. Se m for considerado zero, a solução apresentada é a que não apresenta qualquer extrapolação e quando for considerado igual a um, refere-se à extrapolação de Richardson tradicional.

No trabalho de Martins *et al.* (2014) é recomendado a aplicação do estimador psi corrigido para cálculo do erro estimado quando a técnica MER é aplicada, pois demonstrou ser mais eficaz e confiável quando comparado com diversos outros estimadores de erro. O erro estimado aplicando o estimador de erro psi corrigido é calculado como:

$$U_{\psi^*}(\phi_{g_z, m}) = \frac{\phi_{g_z, m} - \phi_{g_z-1, m-1}}{\psi_{g_z+1} - 1}; \psi_{g_z} = \frac{\phi_{g_z-1, m-1} - \phi_{g_z-2, m-2}}{\phi_{g_z, m} - \phi_{g_z-1, m-1}}; g_z = 2, \dots, G - 1 \quad (3.112)$$

Considerado apenas o nível máximo de extrapolação $m = G - 1$, ou seja, a sequência $\phi_M = \{\phi_{2,1}, \phi_{3,2}, \dots, \phi_{g_z, g_z - 1}, \dots, \phi_{G, G - 1}\}$, a acurácia pode ser avaliada com base na ordem efetiva e ordem aparente dos valores extrapolados, ou seja, calculados respectivamente por:

$$(p_{E,M})_{g_z} = \frac{\log \left\{ \frac{\Phi - \phi_{g_z - 1, m - 1}}{\Phi - \phi_{g_z, m}} \right\}}{\log(q)}; \quad (3.113)$$

$$(p_{U,M})_{g_z} = \frac{\log[\psi_{g_z}]}{\log(q)} \quad (3.114)$$

considerando que $g_z = 2, \dots, G$ para $p_{E,M}$ e $g_z = 3, \dots, G$ para $p_{U,M}$. As avaliações de erro computacional efetuadas nesta dissertação consideraram o valor de q constante e igual a dois, seu cálculo é feito pela razão entre o número de volumes da malha em uma determinada direção para a malha mais fina em relação ao da malha mais grossa.

A eficácia da aplicação da técnica MER para redução do erro é atingida quando o módulo de ψ_{g_z} é maior que um ou $(p_{U,M})_{g_z}$ resulta em um valor positivo.

3.5.2 Validação

A avaliação de quão bem os resultados de uma modelagem numérico-computacional representam a realidade é um papel da validação. Conforme descrito em ASME (2009) para a validação de um modelo matemático, é importante estimar o erro devido à modelagem e devido às aproximações consideradas. As fontes de erro relacionadas ao erro de modelagem são os erros associados à solução computacional das equações, erros devido aos parâmetros de entrada e a diferença entre os valores obtidos pela solução computacional e resultados experimentais. Fica claro de que não há validação do modelo matemático sem dados experimentais que possam ser comparados aos dados computacionais resultantes das simulações.

Na norma ASME (2009), descreve-se que o erro de modelagem δ_{model} devido a considerações e a aproximações realizadas durante a modelagem computacional deve estar contido no intervalo:

$$\delta_{model} \subset [E_{val} - u_{val}, E_{val} + u_{val}] \quad (3.115)$$

tanto E_{val} quanto u_{val} são métricas de validação. E_{val} é compreendido como a diferença entre o valor de uma determinada grandeza obtida por uma solução computacional e o valor experimental desta mesma grandeza. Ou seja:

$$E_{val} = \phi_{num} - \phi_{exp} \quad (3.116)$$

A forma de cálculo para u_{val} pode variar em função de como a grandeza avaliada é obtida experimentalmente. Caso ela seja medida diretamente denomina-se caso 1. Se for obtida através de redução de dados que combina variáveis mensuradas, caso 2. E caso 3, quando a variável é obtida através da redução de dados que combinam variáveis mensuradas que possuem a mesma fonte de erros.

Para o caso 1, u_{val} é calculada como:

$$u_{val} = \sqrt{u_{num}^2 + u_{input}^2 + u_{exp}^2} \quad (3.117)$$

Cada uma das componentes da Eq. 3.117 são compostas por fontes de incerteza diferentes. A componente u_{exp}^2 representa a incerteza acerca dos resultados experimentais. Já u_{num}^2 representa a estimativa de erro computacional, calculada através de algum estimador de erro, como por exemplo o GCI por meio da Eq. 3.103 e o MER por meio da Eq. 3.112. Por fim, u_{input}^2 representa a estimativa de incerteza causada pelos parâmetros de entrada da solução computacional para uma variável de interesse ϕ . Considerando uma quantidade n de parâmetros de entrada X_i e considerando u_{X_i} como a incerteza padrão associada a cada parâmetro X_i , tal grandeza pode ser calculada como:

$$u_{input}^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial \phi}{\partial X_i} u_{X_i} \right)^2 \quad (3.118)$$

Para este trabalho, ϕ assumirá valores computacionais para: pressão; coeficiente de empuxo e coeficiente de descarga. E ϕ_{exp} valores obtidos experimentalmente para: pressão, presente na Tab. 27; coeficiente de empuxo e coeficiente de descarga calculados em Back, Massier e Gier (1965a).

3.6 Resumo do capítulo

Foram apresentadas as equações de balanço da massa, da segunda lei de Newton, de balanço da energia térmica e a equação de estado para escoamento compressível. Também, apresentou-se a média temporal de Reynolds e a média mássica de Favre. Através do processo de obtenção destas médias novos termos surgem nas equações, conduzindo a uma disparidade entre o número de equações e incógnitas, dando origem ao problema de fechamento. Os modelos de fechamento introduzem os conceitos de hipótese de Boussinesq, viscosidade turbulenta, comprimento de mistura de Prandtl e de energia cinética de turbulência. Adicionalmente, modelos de zero, uma e duas equações são apresentados, em especial o modelo de Baldwin-Lomax, Spalart-Allmaras e SST $k-\omega$.

Também são apresentados alguns aspectos teóricos relacionados a tubos como: considerações de foguete ideal; velocidade de saída dos gases; vazão mássica; impulso;

empuxo e coeficientes de empuxo e de descarga. Por fim, são apresentados tópicos sobre avaliações de erro computacional estimado, estimadores de erro e validação de resultados de experimentos computacionais através de resultados experimentais.

4 METODOLOGIA

O programa utilizado tanto para efetuar simulações computacionais, quanto para receber implementação de código é o Mach2D 5.10.2. Este programa baseia-se no método dos volumes finitos e é escrito em linguagem de programação Fortran 2008. Emprega precisão dupla, possui projeto do tipo *console application* e sua execução adota a versão *release*. Este programa não apenas resolve escoamentos bidimensionais em tuberias, como também fornece resultados para escoamentos externos em diversos tipos de ogivas de foguete, sendo necessário apenas selecionar a condição desejada nos parâmetros de entrada de um arquivo no formato texto simples. Seu *download* pode ser feito através do endereço eletrônico disponível em Bertoldo (2020).

Outros programas computacionais também são utilizados ao longo da dissertação como: SU2, que é um programa gratuito e de código aberto para o usuário; ICFEM 14.0, que é um programa comercial da Ansys, utilizado para geração e conversão de malhas que foram utilizadas posteriormente pelo programa CFD++, da empresa *Aerothermal Solutions & Software Distributor*; Tecplot 360, também da empresa *Aerothermal Solutions & Software Distributor* e foi utilizado para visualização dos campos de propriedades. Estes três últimos programas não permitem a edição ou modificação de seu código-fonte. Sendo assim, estes programas são utilizados como ferramentas auxiliares para propiciar comparações com o Mach2D 5.10.2, tanto de resultados quanto de propriedades auxiliares durante a fase de implementação dos modelos numérico-computacionais.

4.1 Modelagem e simulação do escoamento

Os dados desta seção são baseados no relatório técnico de Marchi e Bertoldo (2012), onde é apresentado parte do modelo físico e modelo matemático utilizados para o programa Mach2D 5.10.2.

No presente trabalho, o escoamento é modelado através de quatro modelos matemáticos diferentes, o que naturalmente implica em quatro modelos computacionais distintos. A seleção de cada modelo computacional fica ao encargo do usuário, através da adequada seleção dos arquivos de entrada.

O primeiro modelo é constituído pelas equações de Euler. O segundo modelo refere-se às equações do modelo explícito, acrescidas da equação da energia térmica. Já o terceiro modelo utiliza os mesmos conceitos do segundo, porém acrescenta um aumento na viscosidade dinâmica, aplicando a hipótese de Boussinesq e modelando o termo de viscosidade turbulenta através do modelo algébrico Baldwin-Lomax. O quarto modelo é análogo ao terceiro, porém, a viscosidade turbulenta é obtida com o modelo de uma equação Spalart-Allmaras.

4.1.1 Modelo Físico

Considera-se que o escoamento através da tubeira é modelado na forma bidimensional axissimétrica. Sendo considerado como: fluido compressível que obedece à hipótese do contínuo; termicamente perfeito (isto é, tanto entalpia quanto energia interna por unidade de massa são apenas funções da temperatura); não-reativo; podendo ser viscoso ou não; resultante de uma mistura entre argônio, oxigênio e nitrogênio, aproximando assim da composição do ar atmosférico. Também se considera que não há perda de energia térmica por efeitos de radiação térmica e que a tubeira poderá ter temperatura prescrita em sua parede ou ainda pode ser considerada adiabática.

Os calores específicos a pressão e volume constantes, viscosidade dinâmica e o coeficiente de condutividade térmica são considerados variáveis e o procedimento de cálculo destas propriedades termofísicas é apresentado na Seção 4.1.4. A pressão, temperatura e massa específica relacionam-se através da equação de estado para gases perfeitos.

4.1.2 Modelo matemático diferencial no sistema coordenado plano ou axissimétrico

Conforme dito anteriormente, as Eq. 3.1 à Eq. 3.7 são responsáveis pela modelagem do escoamento no sistema coordenado cartesiano. Entretanto, como o escoamento em questão é considerado axissimétrico, as Eq. 3.1, Eq. 3.2 e Eq. 3.7 devem ser reescritas de maneira a considerar tal condição de axissimetria, portanto, representadas por:

$$C^\phi \left[\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} + \frac{1}{y^f} \frac{\partial(\rho v y^f \phi)}{\partial y} \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma^\phi \frac{\partial\phi}{\partial x} \right) + \frac{1}{y^f} \frac{\partial}{\partial y} \left(y^f \Gamma^\phi \frac{\partial\phi}{\partial y} \right) + P^\phi + S^\phi \quad (4.1)$$

sendo que x e y representam as coordenadas axiais e radiais. Se $f = 0$ há simetria plana, se $f = 1$ há simetria axial. Se $\phi = 1$, obtém-se a equação do balanço de massa, se for $\phi = u$ ou $\phi = v$, obtém-se a equação da segunda lei de Newton em x ou y , respectivamente, e por último, se $\phi = T$, obtém-se a equação do balanço da energia térmica. Os demais símbolos presentes na Eq. 4.1, são apresentados por meio da Tab. 1 e com as Eq. 4.2 à Eq. 4.7.

TABELA 1 – SÍMBOLOS EMPREGADOS NA Eq. 4.1.

ϕ	C^ϕ	Γ^ϕ	P^ϕ	S^ϕ
1	1	0	0	0
u	1	μ	P^u Eq. 4.2	S^u Eq. 4.5
v	1	μ	P^v Eq. 4.3	S^v Eq. 4.6
T	c_p	κ	P^T Eq. 4.4	S^T Eq. 4.7

FONTE: O autor (2021).

$$P^u = -\frac{\partial p}{\partial x} \quad (4.2)$$

$$P^v = -\frac{\partial p}{\partial y} \quad (4.3)$$

$$P^T = \frac{\partial p}{\partial t} + u \frac{\partial p}{\partial x} + v \frac{\partial p}{\partial y} \quad (4.4)$$

$$S^u = \frac{1}{y^f} \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu y^f \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\vartheta}{\mu} - \frac{2}{3} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{y^f} \frac{\partial (y^f v)}{\partial y} \right) \right] \quad (4.5)$$

$$S^v = \frac{1}{y^f} \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu y^f \frac{\partial v}{\partial y} \right) - \frac{2f\mu v}{y^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\vartheta}{\mu} - \frac{2}{3} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{y^f} \frac{\partial (y^f v)}{\partial y} \right) \right] \quad (4.6)$$

$$S^T = \mu \left(\frac{\vartheta}{\mu} - \frac{2}{3} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{y^f} \frac{\partial (y^f v)}{\partial y} \right)^2 + \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + 2\mu \left[\left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + f \left(\frac{v}{y} \right)^2 \right] \quad (4.7)$$

Para escoamento invíscido, o modelo matemático sofre simplificações. Para o modelo de Euler são adotadas propriedades termofísicas constantes. Baseada no balanço da entalpia total, o cálculo da temperatura também pode ser feito de forma simplificada. De forma que para o modelo matemático de Euler, incluindo a equação de estado, têm-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u\phi) + \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} (y\rho v\phi) = P^\phi \quad (4.8)$$

$$T = \frac{1}{c_p} \left[H_{ref} - \frac{(u^2 + v^2)}{2} \right] \quad (4.9)$$

$$p = \rho RT \quad (4.10)$$

assim como feito anteriormente, se $\phi = 1$, $P^\phi = 0$ e obtém-se a equação de balanço de massa, se $\phi = u$, $P^\phi = -\frac{\partial p}{\partial x}$ ou $\phi = v$, $P^\phi = -\frac{\partial p}{\partial y}$ obtêm-se a equação da segunda lei de Newton na direção axial e radial, respectivamente. Por fim, H_{ref} é a entalpia na corrente livre.

4.1.3 Modelo matemático diferencial no sistema coordenado curvilíneo

Os cálculos computacionais não são efetuados utilizando o sistema de coordenadas cilíndricas do domínio físico do problema, mas sim no domínio transformado, ou seja, no sistema de coordenadas generalizadas (ξ, η) (também podendo ser denominado como sistema de coordenadas curvilíneo). A transformação do sistema cartesiano retangular para o transformado da Eq. 4.1 é descrita por Maliska (2004) e corresponde a:

$$C^\phi \left[\frac{1}{J} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{1}{y^f} \frac{\partial(\rho y^f U \phi)}{\partial \xi} + \frac{1}{y^f} \frac{\partial(\rho V y^f \phi)}{\partial \eta} \right] = P^\phi + S^\phi \quad (4.11)$$

$$+ \frac{1}{y^f} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\Gamma^\phi y^f J \left(\alpha \frac{\partial \phi}{\partial \xi} - \beta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{y^f} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\Gamma^\phi y^f J \left(\gamma \frac{\partial \phi}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) \right]$$

sendo que J corresponde ao Jacobiano da transformação, U e V são as componentes contravariantes do vetor velocidade e α , β e γ , são as componentes do tensor métrico. Tais grandezas são calculadas através da Eq. 4.12 à Eq. 4.17, respectivamente. Os subscritos nestas equações referem-se às derivadas parciais. Por exemplo, $x_\xi = \partial x / \partial \xi$. Assim como feito com o modelo matemático, os símbolos presentes na Eq. 4.11 estão presentes na Tab. 2.

TABELA 2 – SÍMBOLOS EMPREGADOS NA Eq. 4.11.

ϕ	C^ϕ	Γ^ϕ	P^ϕ	S^ϕ
1	1	0	0	0
u	1	μ	P^u Eq. 4.18	S^u Eq. 4.21
v	1	μ	P^v Eq. 4.19	S^v Eq. 4.22
T	c_p	κ	P^T Eq. 4.20	S^T Eq. 4.23

FONTE: O autor (2021).

$$J = \frac{1}{(x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi)} \quad (4.12)$$

$$U = u y_\eta - v x_\eta \quad (4.13)$$

$$V = v x_\xi - u y_\xi \quad (4.14)$$

$$\alpha = x_\eta^2 + y_\eta^2 \quad (4.15)$$

$$\beta = x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta \quad (4.16)$$

$$\gamma = x_\xi^2 + y_\xi^2 \quad (4.17)$$

$$P^u = \frac{\partial (py_\xi)}{\partial \eta} - \frac{\partial (py_\eta)}{\partial \xi} = y_\xi \frac{\partial p}{\partial \eta} - y_\eta \frac{\partial p}{\partial \xi} \quad (4.18)$$

$$P^v = \frac{\partial (px_\eta)}{\partial \xi} - \frac{\partial (px_\xi)}{\partial \eta} = x_\eta \frac{\partial p}{\partial \xi} - x_\xi \frac{\partial p}{\partial \eta} \quad (4.19)$$

$$P^T = \frac{1}{J} \frac{\partial p}{\partial t} - uP^u - vP^v \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} S^u &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left[J\mu \left(\frac{\vartheta}{\mu} + \frac{1}{3} \right) \left(y_\eta^2 \frac{\partial u}{\partial \xi} - y_\xi y_\eta \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial \eta} \left[J\mu \left(\frac{\vartheta}{\mu} + \frac{1}{3} \right) \left(y_\xi^2 \frac{\partial u}{\partial \eta} - y_\xi y_\eta \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right] \\ &+ \frac{1}{y^f} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[Jy^f \mu x_\eta \left(y_\xi \frac{\partial v}{\partial \eta} - y_\eta \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right] \\ &+ \frac{1}{y^f} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[Jy^f \mu x_\xi \left(y_\eta \frac{\partial v}{\partial \xi} - y_\xi \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial \xi} \left[J \frac{\mu}{y^f} \left(\frac{\vartheta}{\mu} - \frac{2}{3} \right) y_\eta \left(x_\xi \frac{\partial (y^f v)}{\partial \eta} - x_\eta \frac{\partial (y^f v)}{\partial \xi} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial \eta} \left[J \frac{\mu}{y^f} \left(\frac{\vartheta}{\mu} - \frac{2}{3} \right) y_\xi \left(x_\eta \frac{\partial (y^f v)}{\partial \xi} - x_\xi \frac{\partial (y^f v)}{\partial \eta} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned} S^v &= \frac{1}{y^f} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[J\mu \left(\frac{\vartheta}{\mu} + \frac{1}{3} \right) y^f \left(x_\eta^2 \frac{\partial v}{\partial \xi} - x_\xi x_\eta \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right] \\ &+ \frac{1}{y^f} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[J\mu \left(\frac{\vartheta}{\mu} + \frac{1}{3} \right) y^f \left(x_\xi^2 \frac{\partial v}{\partial \eta} - x_\xi x_\eta \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial \xi} \left[J\mu y_\eta \left(x_\xi \frac{\partial u}{\partial \eta} - x_\eta \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[J\mu y_\xi \left(x_\eta \frac{\partial u}{\partial \xi} - x_\xi \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial \xi} \left[J\mu \left(\frac{\vartheta}{\mu} - \frac{2}{3} \right) x_\eta \left(y_\xi \frac{\partial u}{\partial \eta} - y_\eta \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial \eta} \left[J\mu \left(\frac{\vartheta}{\mu} - \frac{2}{3} \right) x_\xi \left(y_\eta \frac{\partial u}{\partial \xi} - y_\xi \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right] - \frac{f\mu v}{Jy^2} \left(\frac{\vartheta}{\mu} + \frac{4}{3} \right) \\ &+ \frac{fv}{y} \left\{ \frac{\partial}{\partial \eta} \left[x_\xi \mu \left(\frac{\vartheta}{\mu} - \frac{2}{3} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial \xi} \left[x_\eta \mu \left(\frac{\vartheta}{\mu} - \frac{2}{3} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned}
S^T = & 2J\mu \left[\frac{\partial (y_\eta u)}{\partial \xi} - \frac{\partial (y_\xi u)}{\partial \eta} \right]^2 + 2J\mu \left[\frac{\partial (x_\xi v)}{\partial \eta} - \frac{\partial (x_\eta v)}{\partial \xi} \right]^2 \\
& + \frac{2\mu f}{J} \left(\frac{v}{y} \right)^2 + \mu J \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (vy_\eta - ux_\eta) + \frac{\partial}{\partial \eta} (ux_\xi - vy_\xi) \right]^2 \\
& + \mu J \left(\frac{\vartheta}{\mu} - \frac{2}{3} \right) \left(\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial V}{\partial \eta} + \frac{fv}{Jy} \right)^2
\end{aligned} \tag{4.23}$$

As equações de balanço são integradas em cada volume de controle e suas derivadas são aproximadas por diferenças finitas. O método de solução dos sistemas lineares para pressão, velocidades e temperatura utilizado é o MSI (*Modified Strongly Implicit Method*), método este que resolve os sistemas lineares das equações de balanço e é apresentado por Schneider e Zedan (1981).

Para estabilizar a solução das equações de balanço, é aplicado o conceito de falso transiente, visto que o objetivo principal é avaliar as variáveis de interesse na condição de regime permanente. No processo de discretização das equações diferenciais, são utilizados dois esquemas de aproximação. Para os termos advectivos da Eq. 4.24, os valores das variáveis nas faces são aproximados pelo método UDS (*Upstream Differencing Scheme*). Para as derivadas do termo difusivo da Eq. 4.24, aplica-se CDS-2 (*Central Differencing Scheme*).

Já para o modelo de Euler, o modelo computacional adotado é:

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) + \frac{1}{J} \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial \xi} (y\rho U\phi) + \frac{1}{J} \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial \eta} (y\rho V\phi) = -P^\phi \tag{4.24}$$

quando $\phi = 1$, $P^\phi = P^1 = 0$ e obtém-se a equação de balanço de massa, já quando $\phi = u$, $P^\phi = P^u = p_\xi y_\eta - p_\eta y_\xi$, se $\phi = v$, $P^\phi = P^v = p_\eta x_\xi - p_\xi x_\eta$ e são obtidas as equações da segunda lei de Newton na direção axial e radial, respectivamente. O cálculo da temperatura se dá pela própria Eq. 4.9.

4.1.4 Estimativa das propriedades termofísicas

O método de cálculo das propriedades termofísicas adotado é o mesmo efetuado por Bertoldo (2014), uma vez que a composição do gás, ar, é a mesma. Assim como dito anteriormente, considerou-se o fluido como sendo uma combinação entre argônio Ar , oxigênio O_2 e nitrogênio N_2 . As frações molares F_m , massas molares M_m e constantes do gás R_g , referente a cada uma das espécies ou componentes da mistura constam na Tab. 3.

Para que se possa determinar as propriedades termofísicas da mistura, primeiramente deve-se conhecer as propriedades para cada componente. Sendo assim, o calor específico a pressão constante $(c_p)_i$, viscosidade dinâmica μ_i e condutividade térmica κ_i

TABELA 3 – CONSTANTE DO GÁS R_g , FRAÇÃO MOLAR F_m E MASSA MOLAR M_m DE CADA COMPONENTE DA MISTURA GASOSA.

Componente	i	R_g [$J\ kg^{-1}K^{-1}$]	F_m	M_m [$kg\ mol^{-1}$]
Ar	1	208,1333233203	0,01	0,0399480000
O ₂	2	259,8381814318	0,21	0,0319988000
N ₂	3	296,8038958387	0,78	0,0280134800

FONTE: Bertoldo (2014).

para cada componente são calculadas com as equações apresentadas por McBride, Gordon e Reno (1993), conforme descrito por Bertoldo (2014), respectivamente como:

$$(c_p)_i = (R_g)_i [A_i + B_i T + C_i T^2 + D_i T^3 + E_i T^4] \quad (4.25)$$

$$\mu_i = \exp \left(A'_i \ln \left(\frac{T}{K} \right) + \frac{B'_i}{T} + \frac{C'_i}{T^2} + D'_i \right) 10^{-7} \quad (4.26)$$

$$\kappa_i = \exp \left(A''_i \ln \left(\frac{T}{K} \right) + \frac{B''_i}{T} + \frac{C''_i}{T^2} + D''_i \right) 10^{-4} \quad (4.27)$$

onde os símbolos presentes na Eq. 4.25 à Eq. 4.27 também são fornecidos por McBride, Gordon e Reno (1993) e são classificados por intervalos de temperatura, onde T^b é o limite inferior e T^e é o limite superior, sendo apresentados através das Tab. 4 à Tab. 6. Como a temperatura de estagnação T_0 é menor do que o primeiro limite superior para a temperatura, as constantes para temperaturas acima de 1000 K foram suprimidas.

TABELA 4 – SÍMBOLOS EMPREGADOS NA Eq. 4.25.

Componente	T^b (K)	T^e (K)	A_i	$B_i \times 10^4$ (K^{-1})	$C_i \times 10^7$ (K^{-2})	$D_i \times 10^{11}$ (K^{-3})	$E_i \times 10^{15}$ (K^{-4})
Ar			2,5000000	0,0000000	0,0000000	0,0000000	0,0000000
O ₂	200	1000	3,7824564	-29,967342	98,473020	-968,12951	3243,7284
N ₂			3,5310053	-1,2366099	-5,0299944	243,53061	-1408,8124

FONTE: McBride, Gordon e Reno (1993).

TABELA 5 – SÍMBOLOS EMPREGADOS NA Eq. 4.26.

Componente	T^b (K)	T^e (K)	A'_i	B'_i (K)	C'_i (K^2)	D'_i
Ar			0,57067551	-95,117331	2089,6403	2,4718808
O ₂	300	1000	0,61936357	-44,608607	-1346,0714	1,9597562
N ₂			0,60443938	-43,632704	-884,41949	1,8972150

FONTE: McBride, Gordon e Reno (1993).

TABELA 6 – SÍMBOLOS EMPREGADOS NA Eq. 4.27.

Componente	T^b (K)	T^e (K)	A_i''	B_i'' (K)	C_i'' (K ²)	D_i''
Ar	300	1000	0,56758528	-100,15251	2573,6598	2,2537407
O ₂			0,81595343	-34,366856	2278,5080	1,0050999
N ₂			0,94306384	122,79898	-11839,435	-0,10668773

FONTE: McBride, Gordon e Reno (1993).

Uma vez conhecidas as propriedades termofísicas de cada componente, pode-se calcular as propriedades termofísicas da mistura. Portanto, o calor específico a pressão constante c_p , viscosidade dinâmica μ , condutividade térmica κ , massa molar M_m , constante de gás R_g , número de Prandtl Pr e razão entre calores específicos γ_m para a mistura são calculados, respectivamente, por:

$$c_p = \sum_{i=1}^3 (F_m)_i (c_p)_i \quad (4.28)$$

$$\zeta = \sum_{i=1}^3 \frac{(F_m)_i \zeta_i}{\sum_{j=1}^3 (F_m)_j \Xi_{ij}^{\zeta}}; \quad \zeta \in \{\mu, \kappa\} \quad (4.29)$$

$$\Xi_{ij}^{\zeta} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{(M_m)_i}{(M_m)_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\zeta_i}{\zeta_j} \right)^{1/2} \left(\frac{(M_m)_j}{(M_m)_i} \right)^{1/4} \right]^2; \quad \zeta_i \in \{\mu_i, \kappa_i\} \quad (4.30)$$

$$M_m = \sum_{i=1}^3 (F_m)_i (M_m)_i \quad (4.31)$$

$$R_g = \sum_{i=1}^3 \frac{(F_m)_i (R_g)_i (M_m)_i}{M_m} \quad (4.32)$$

$$Pr = \frac{c_p \mu}{\kappa} \quad (4.33)$$

$$\gamma_m = \frac{c_p}{c_p - R_g} \quad (4.34)$$

O teste 317 do trabalho de Back, Massier e Gier (1965b), considerado como o teste experimental principal para este trabalho, além de fornecer valores para pressão e temperatura de estagnação traz uma série de resultados experimentais que estão disponíveis no Anexo A. Sabendo que a temperatura de estagnação corresponde a 838,8889 K, pode-se aplicar esta temperatura nas equações anteriormente apresentadas, obtendo-se assim as propriedades termofísicas para a mistura. Estes valores são utilizados como critério de

entrada para as simulações computacionais e seus valores são apresentados nas Tab. 7 e Tab. 8.

TABELA 7 – PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS CALCULADAS: c_p ; μ E κ .

T (K)	c_p ($J kg^{-1} K^{-1}$)	$\mu \times 10^{-6}$ (Pa s)	$\kappa \times 10^{-3}$ ($W m^{-1} K^{-1}$)
838,8889	1111,149554	38,443856	59,821039

FONTE: O autor (2021).

TABELA 8 – PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS CALCULADAS: Pr ; γ_m ; M_m E R_g .

Pr	γ_m	M_m ($kg mol^{-1}$)	R_g ($J kg^{-1} K^{-1}$)
0,714078	1,348248	0,0289697424	287,0066942673

FONTE: O autor (2021).

Os valores encontrados para as propriedades termofísicas oriundos da aplicação desta metodologia estão de acordo com interpolações efetuadas utilizando as tabelas de ar disponíveis em Bergman *et al.* (2011) para a mesma temperatura de estagnação. Possuindo uma variação relativa de: 0,32% para c_p ; 0,92% para μ ; 1,27% para κ ; 0,04% para Pr ; 0,14% para γ_m ; 0,001% para M_m e 1,51% para R_g .

4.2 Dados geométricos, geração de malha e condições de contorno

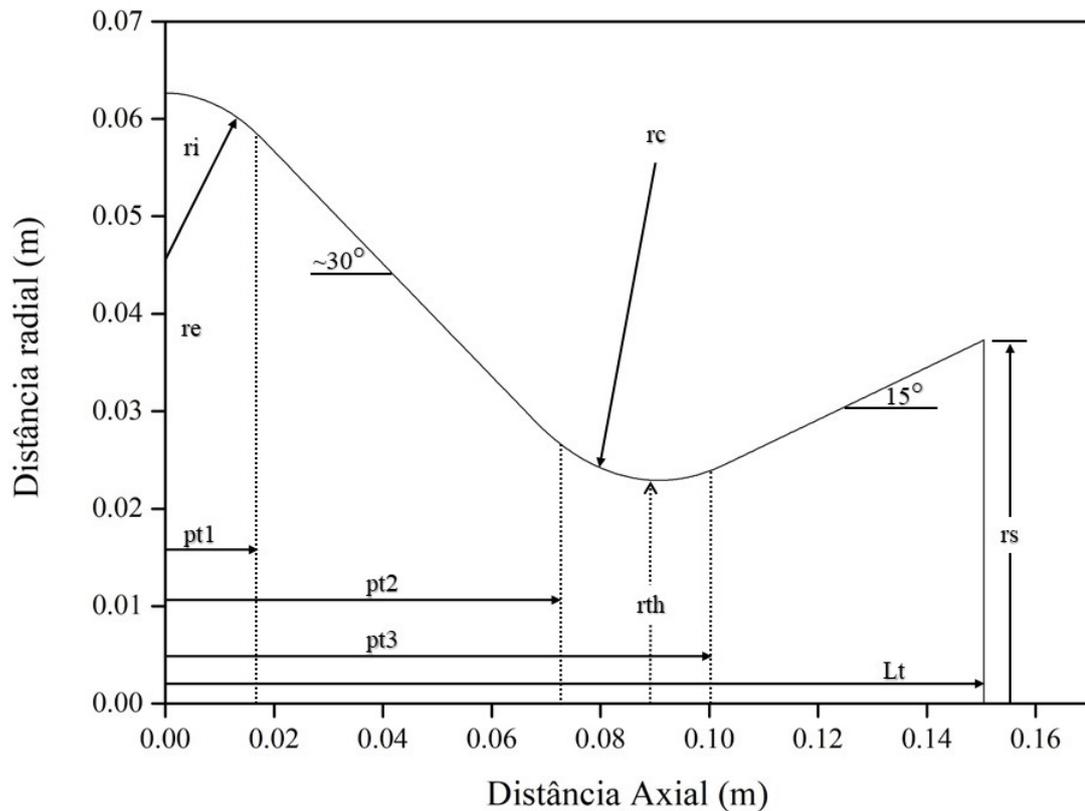
Além de apontar quais são as equações que efetivamente calculam as propriedades do escoamento, é necessário definir onde estas operações matemáticas ocorrem, por isso, os parâmetros geométricos da tubeira e quais são suas condições de contorno devem ser apresentadas.

Conforme citado anteriormente, a região de interesse é uma tubeira convergente-divergente e é apresentada com cotas na Fig. 5. Acompanhada à curva que delimita seu contorno, podem ser vistas três linhas verticais pontilhadas. Estas linhas delimitam o ponto de tangência entre as seções com raio de curvatura e seções lineares. A seta vertical apontada para cima nas proximidades do meio da geometria indica o raio da garganta, ou seja, o meio comprimento da seção transversal de menor raio. Suas dimensões, tanto no sistema imperial de unidades (dimensões originalmente fornecidas), quanto no sistema internacional de unidades constam na Tab. 9.

Segundo Back, Massier e Gier (1965a) esta geometria possui: razão entre o raio de curvatura r_c e raio de garganta r_{th} igual a dois; razão de expansão igual a 2,66, ou seja, razão entre a área de saída da tubeira e a área de garganta; razão de contração igual a 7,90, ou seja, razão entre a área da entrada da tubeira e a área da garganta. Estes

parâmetros são importantes para avaliações que envolvem diferentes perfis geométricos, mas que comparam as mesmas grandezas, como por exemplo o coeficiente de empuxo. Pode-se notar que estes valores são aproximados, uma vez que realizando os cálculos de fato, para a razão de expansão e para a razão de contração obtêm-se respectivamente 2,652 e 7,480.

FIGURA 5 – GEOMETRIA DO PROBLEMA COM COTAS E MEDIDAS.



FONTE: O autor (2021).

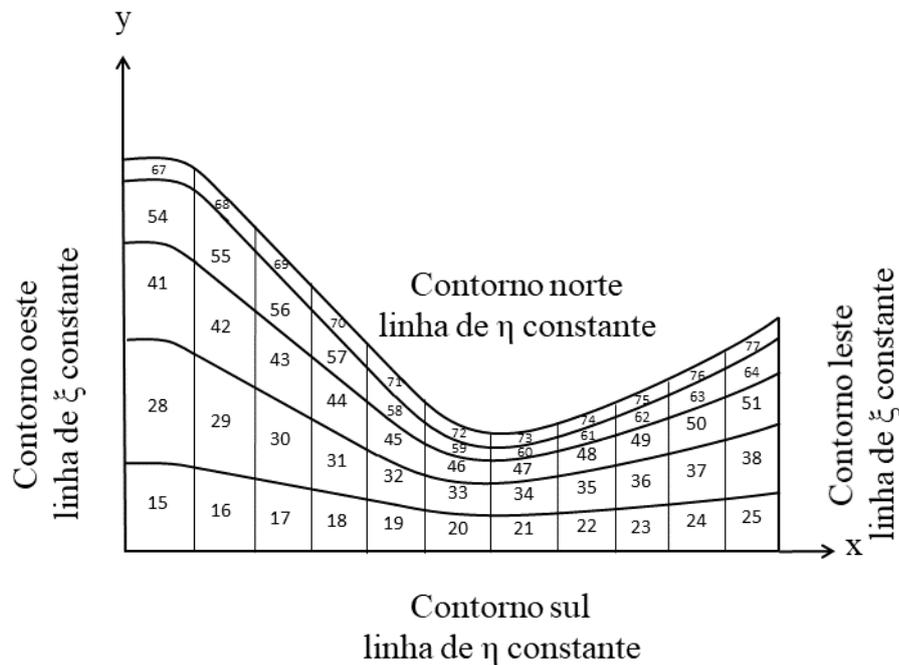
TABELA 9 – DIMENSÕES DA TUBEIRA.

Dimensão	Valor (in)	Valor (m)
pt1	0,710	1,8034E-2
pt2	2,673	6,7894E-2
pt3	4,701	1,1941E-1
Lt	5,925	1,5050E-1
re	2,467	6,2654E-2
rth	0,902	2,2911E-2
rs	1,469	3,7310E-2
ri	1,420	3,6068E-2
rc	1,800	4,5720E-2

FONTE: O autor (2021).

As operações computacionais no interior do domínio podem ser submetidas a diversos tipos de malha. Sendo assim, optou-se por classificá-las de duas formas diferentes, dependendo assim de qual modelo matemático está sendo utilizado para cada simulação. Caso o modelo matemático seja o de Euler, a malha é estruturada uniformemente distribuída tanto na direção axial, quanto radial. Quando os modelos matemáticos viscosos estiverem em simulação, a malha é estruturada e uniformemente distribuída na direção axial, mas na direção radial, a distribuição dos elementos de malha é feita em progressão geométrica (PG). A aplicação de malhas do tipo PG permite que uma maior quantidade de elementos de volume possam ser concentrados nas proximidades da parede, tanto que é recomendada por Spalart (2000). Pois dependendo da necessidade em captar fenômenos físicos oriundos da interação com a parede, um maior número de volumes nas proximidades nesta região é necessário. Um exemplo ilustrativo de uma malha de progressão geométrica, indexada no sistema de coordenadas retangulares com onze volumes reais na direção axial, $nx = 11$ e cinco volumes reais na direção radial, $ny = 5$, é apresentado na Fig. 6.

FIGURA 6 – MALHA GENÉRICA NO SISTEMA DE COORDENADAS RETANGULARES.



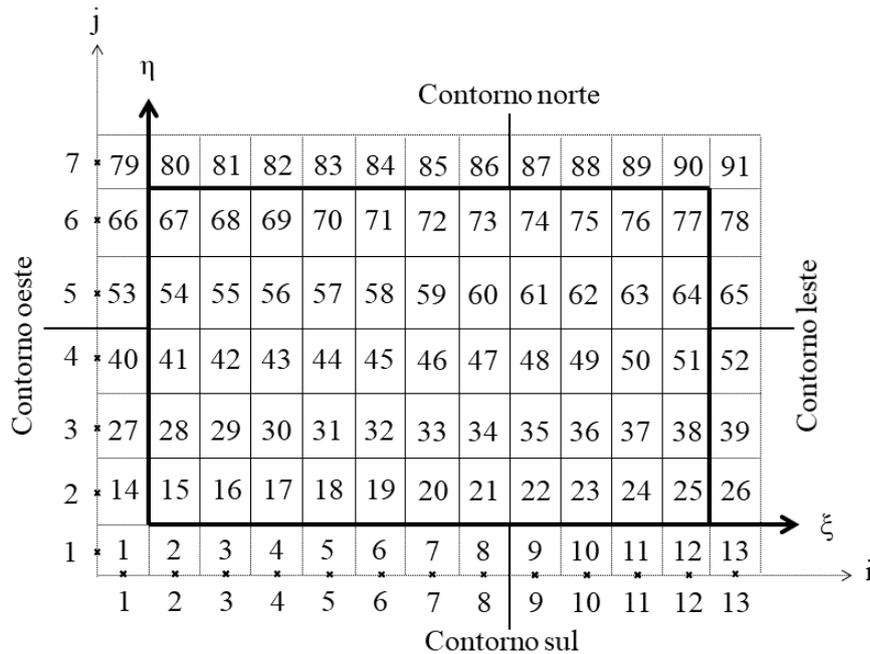
FONTE: O autor (2021).

Os cálculos computacionais são efetuados no sistema de coordenadas transformadas, ou seja, são realizados no domínio transformado e não no sistema coordenado cartesiano. A malha presente na Fig. 6 é transformada através da aplicação de jacobianos e de métricas de malha. Após a transformação, são inseridos volumes fictícios ao redor dos volumes reais, para que se possa aplicar as condições de contorno aos quais os volumes reais são submetidos. O valor de nx que no sistema de coordenadas retangulares era o número

de elementos na direção axial, no sistema de coordenadas transformadas passa a ser $nx = nx + 2$. A mesma lógica se aplica para ny na direção radial.

Uma vez que as equações de balanço são integradas computacionalmente no centro dos volumes, cada volume individual deve ser identificado através de uma determinada indexação e ser alcançado através de uma determinada ordem lexicográfica, recebendo uma identificação através de uma combinação entre índices i e j , sendo que i indica variações na direção ξ e j na direção η , resultando no valor do índice np , calculado através de $np = nx * (j - 1) + i$. O valor de np é mostrado no centro de cada volume, já no sistema de coordenadas curvilíneas na Fig. 7.

FIGURA 7 – VOLUME DE CONTROLE GENÉRICO NO SISTEMA DE COORDENADAS CURVILÍNEAS.



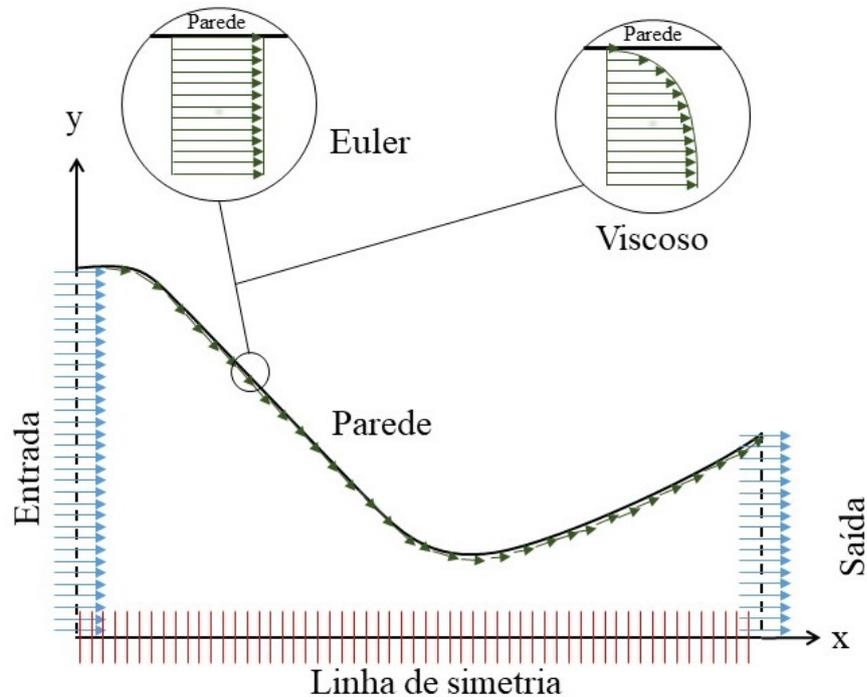
FONTE: O autor (2021).

Através dos volumes fictícios são impostas as condições de contorno para os volumes reais. Ao todo, são quatro as regiões sujeitas a estas condições, sendo elas: a fronteira norte, ou seja, a superfície da parede da tubeira; fronteira sul, onde são impostas condições de simetria; fronteira oeste, região de entrada ou admissão do escoamento; fronteira leste, que é a região de saída do escoamento, exemplificada por meio da Fig. 8.

No contorno norte as condições de contorno variam conforme o tipo de modelo computacional selecionado. Para o modelo de Euler ou modelo invíscido é considerada a hipótese de deslizamento (*slip*) na parede, de forma que o vetor de velocidades é tangente à parede e seu módulo é o mesmo encontrado no centro do volume adjacente à parede. Para os modelos computacionais viscosos, o vetor de velocidade na parede é nulo. E também,

para ambos tipos de modelos computacionais, considera-se que não existe troca de energia térmica entre a região interna e a externa da tubeira (superfície adiabática).

FIGURA 8 – REPRESENTAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO.



FONTE: O autor (2021).

O contorno leste possui condição supersônica e não seria necessário a aplicação de condições de contorno nesta região. Entretanto, como trata-se de um modelo computacional, deve-se estipular condições de contorno para que os cálculos possam ser realizados. Sendo assim, os valores temperatura, velocidade axial, velocidade radial, pressão, massa específica e variável de trabalho para cálculo da viscosidade turbulenta são resultantes da interpolação dos elementos internos do domínio.

Para o contorno sul, são aplicadas condições de simetria para todas as grandezas físicas, por conta da axissimetria. Ou seja, a derivada numérica de primeira ordem para as variáveis em relação à direção normal é nula. A velocidade radial também é considerada nula para este contorno.

Para o contorno oeste, considera-se que o escoamento possui apenas a componente de velocidade axial não nula u_{in} calculada através da simulação quase-unidimensional para os volumes reais vizinhos à fronteira. A temperatura na entrada da tubeira T_{in} é dependente da temperatura de estagnação T_0 , de u_{in} e das constantes termodinâmicas, calculada por meio da Eq. 4.35. Por mais que a velocidade radial v_{in} no contorno oeste seja nula, manteve-se presente para o cálculo de T_{in} e para cálculo do número de Mach na entrada M_{in} , Eq. 4.36, por quesitos de completude. A pressão na entrada p_{in} é dependente da pressão de

estagnação p_0 e M_{in} , sendo calculada através da Eq. 4.37.

$$T_{in} = T_0 - \frac{\gamma_m - 1}{2\gamma_m R_g} (u_{in}^2 + v_{in}^2) \quad (4.35)$$

$$M_{in} = \sqrt{\frac{u_{in}^2 + v_{in}^2}{\gamma_m R_g T_{in}}} \quad (4.36)$$

$$p_{in} = p_0 \left(1 + \frac{\gamma_m - 1}{2} M_{in}^2 \right)^{\frac{-\gamma_m}{\gamma_m - 1}} \quad (4.37)$$

Para sintetizar as descrições para cada uma das fronteiras, pode-se dizer que as equações aplicadas como condição de contorno são:

- Contorno norte, modelo computacional invíscido:

$$\frac{\partial T}{\partial n} = 0; \quad \frac{\partial p}{\partial n} = 0; \quad \vec{v} \cdot \hat{n} = 0 \quad (4.38)$$

- Contorno norte, modelos computacionais viscosos:

$$\frac{\partial T}{\partial n} = 0; \quad \frac{\partial p}{\partial n} = 0; \quad v = 0; \quad u = 0; \quad \hat{v} = 0 \quad (4.39)$$

- Contorno oeste:

$$T = T_{in}; \quad p = p_{in}; \quad v = 0; \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0; \quad \hat{v} = 0 \quad (4.40)$$

- Contorno leste:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0; \quad \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = 0; \quad \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = 0; \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0; \quad \frac{\partial^2 \hat{v}}{\partial x^2} = 0 \quad (4.41)$$

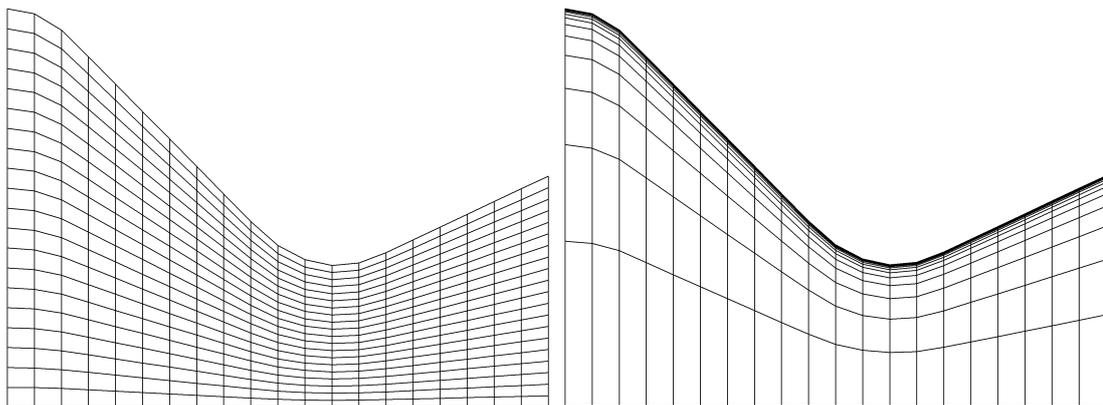
- Contorno sul:

$$\frac{\partial T}{\partial n} = 0; \quad \frac{\partial p}{\partial n} = 0; \quad v = 0; \quad \frac{\partial u}{\partial n} = 0; \quad \frac{\partial \hat{v}}{\partial n} = 0 \quad (4.42)$$

4.3 Metodologia dos experimentos computacionais

Conforme apresentado na seção anterior, o tipo de malha está condicionado ao tipo de modelo computacional a ser resolvido em cada simulação. Para soluções de escoamentos invíscidos adotam-se malhas essencialmente diferentes das quais são utilizadas para as simulações com os modelos viscosos, dando origem a duas malhas base, a partir das quais, são geradas as malhas subsequentes adotando uma razão de refino constante e igual a dois. As duas malhas bases possuem dimensões de 20×20 , ou seja, 20 volumes reais na direção axial e 20 volumes reais na direção radial. De forma que a única diferença entre elas é a disposição dos volumes na direção radial pela adoção ou não de PG. As duas malhas bases podem ser vistas na Fig. 9. Para fornecer uma noção de refino, a Fig. 10 mostra malhas intermediárias de 80×80 volumes.

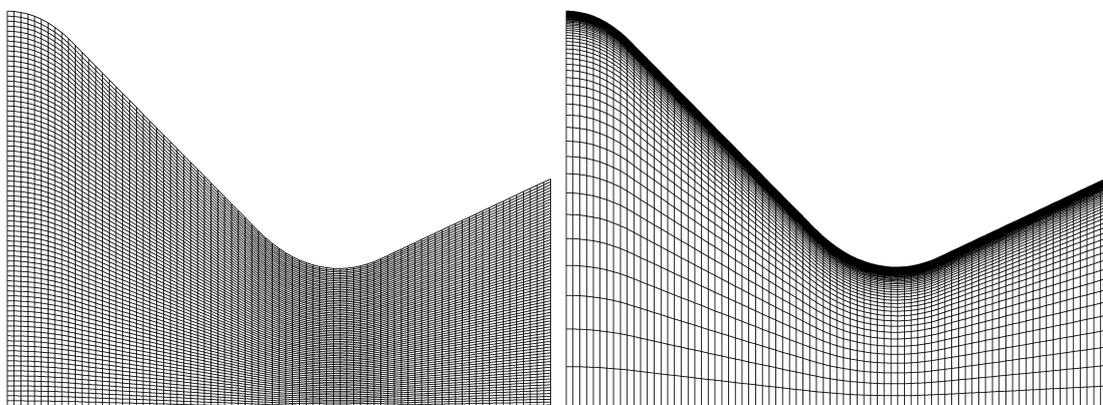
FIGURA 9 – MALHAS BASE DE 20×20 VOLUMES.



(a) Malha base para modelo invíscido - classe 1 (b) Malha base para modelos viscosos - classe 2

FONTE: O autor (2021).

FIGURA 10 – MALHAS INTERMEDIÁRIAS DE 80×80 VOLUMES.



(a) Malha intermediária para modelo invíscido - classe 1 (b) Malha intermediária para modelos viscosos - classe 2

FONTE: O autor (2021).

As simulações são organizadas levando em consideração o tipo de modelo computacional e tamanho de malha utilizada. As malhas são divididas em duas classes, a malha da classe 1 é utilizada para simulações de escoamento invíscido e as da classe 2, para simulações de escoamento viscoso. Uma visão geral das simulações, incluindo: nome; número de elementos n em cada uma das direções; o tamanho característico do elemento de malha h_m , calculado como sendo $h_m = 1/n$; classe da malha; razão de progressão geométrica q_{pg} e o tamanho do primeiro elemento de volume próximo a parede y_H são apresentados na por meio da Tab. 10.

O cálculo de y_H para as malhas da classe 1 corresponde à divisão entre o comprimento do raio local da tubeira pelo número de volumes n na direção radial. Logo, o valor para y_H varia localmente, e essencialmente, cada elemento que está em contato com a parede possui um tamanho único, uma vez que o número de volumes em cada ξ constante é o mesmo.

Já para as malhas da classe 2, foi feita uma estimativa de y_H tomando como referência o escoamento sobre uma placa plana. Quando os efeitos viscosos estão presentes e são significativos para o objetivo de análise, é importante garantir que o tamanho do primeiro volume esteja incluso dentro uma faixa de comprimento adimensional y^+ que seja representativo o suficiente para modelar o comportamento do escoamento no interior da camada limite, buscando uma simulação acurada nas proximidades da parede. Antes de iniciar a simulação, o valor de y^+ não é conhecido e, portanto, deve ser estimado para que na próxima geração de malha o valor de y_H seja corrigido até que o y^+ desejado seja alcançado.

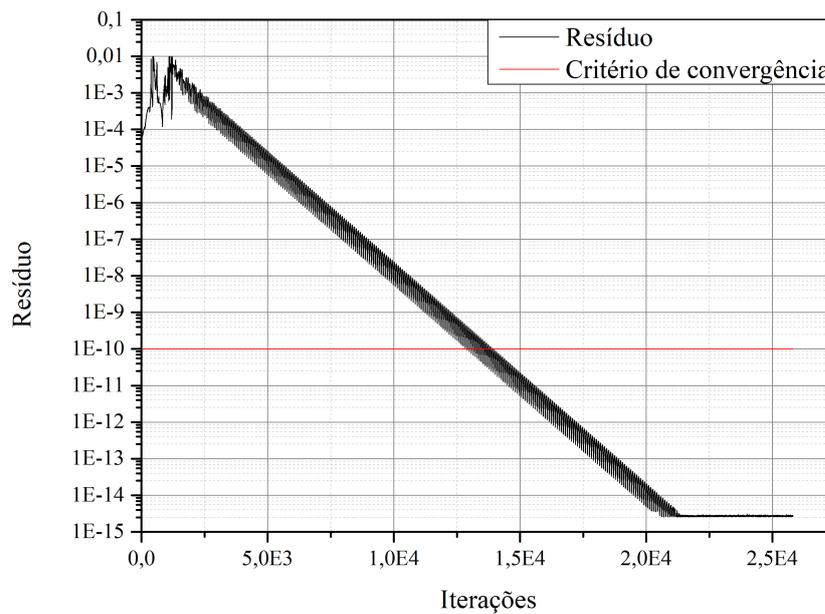
O critério de parada dos experimentos computacionais pode ser alcançado de duas formas, a primeira é pela determinação de um número máximo de iterações, por exemplo, cem mil iterações. E a segunda é através da convergência da solução computacional, ou seja, quando um determinado resíduo computacional atinge um valor preestabelecido e a partir de tal momento, o experimento computacional irá prolongar-se por mais um determinado número de iterações até que o experimento computacional cessa e suas grandezas calculadas são impressas nos arquivos de saída. O resíduo computacional é definido a partir da razão entre o maior valor encontrado para a pressão, após sua correção pelo método SIMPLEC (método utilizado para acoplar o campo de pressão com o de velocidades, transformando uma equação de balanço de massa em uma equação para pressão), e a pressão média de todo o domínio. Para exemplificar a convergência, a Fig. 11 mostra a evolução dos resíduos para a simulação E-6. Onde a linha vermelha indica constantemente o valor de 10^{-10} , tal valor é inserido antes das simulações iniciarem e a partir do momento em que o valor do resíduo ultrapassa a linha, o número da iteração em que isto acontece é gravado e o critério de parada por número de passos é definido como sendo o dobro de tal valor.

TABELA 10 – VISÃO GERAL DAS SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS COM O MACH2D.

Nome	Modelo computacional	n	h_m (m)	Classe	q_{pg}	y_H (m)
E-1	Euler	20	5,0000E-02	1	Não se aplica	Local
E-2		40	2,5000E-02			
E-3		80	1,2500E-02			
E-4		160	6,2500E-03			
E-5		320	3,1250E-03			
E-6		640	1,5625E-03			
NS-1	Explícito	20	5,0000E-02	2	1,71004463978160	5E-06
NS-2		40	2,5000E-02		1,27730926540138	
NS-3		80	1,2500E-02		1,11819887931430	
NS-4		160	6,2500E-03		1,05204277692886	
NS-5		320	3,1250E-03		1,02309120465647	
NS-6		640	1,5625E-03		1,01018882919845	
NS-BLM-1	BLM	20	5,0000E-02	2	1,71004463978160	5E-06
NS-BLM-2		40	2,5000E-02		1,27730926540138	
NS-BLM-3		80	1,2500E-02		1,11819887931430	
NS-BLM-4		160	6,2500E-03		1,05204277692886	
NS-BLM-5		320	3,1250E-03		1,02309120465647	
NS-SA-1	SA Neg	20	5,0000E-02	2	1,71004463978160	5E-06
NS-SA-2		40	2,5000E-02		1,27730926540138	
NS-SA-3		80	1,2500E-02		1,11819887931430	
NS-SA-4		160	6,2500E-03		1,05204277692886	
NS-SA-5		320	3,1250E-03		1,02309120465647	

FONTE: O autor (2021).

FIGURA 11 – AVALIAÇÃO DE CONVERGÊNCIA DA SIMULAÇÃO E-6.



FONTE: O autor (2021).

4.3.1 Malha e condições de contorno para as simulações viscosas do CFD++

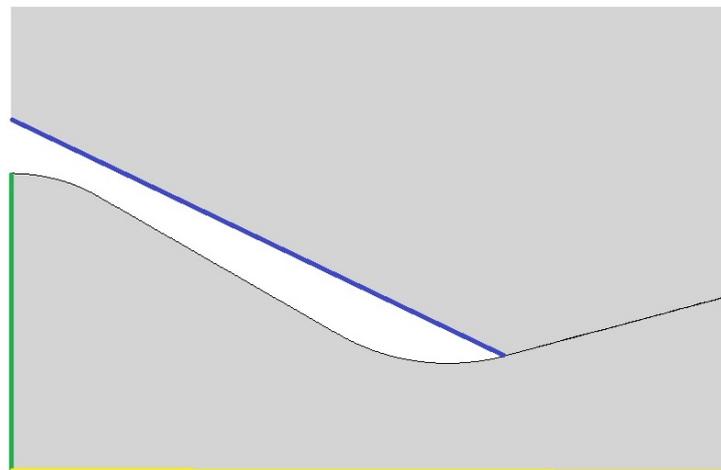
O método de geração de malhas adotado até então se deu exclusivamente por sub-rotinas internas ao Mach2D 5.10.2, não sendo possível exportá-las para outros programas. Caso outro programa possa servir como ferramenta auxiliar para comparar resultados computacionais, inevitavelmente surge a necessidade de gerar novas malhas. Assim como citado anteriormente, o programa CFD++ foi pautado como uma destas ferramentas auxiliares, logo, malhas deveriam ser geradas e importadas para este programa. Para tal, utilizou-se o programa ICEM, também citado anteriormente, para gerar estas malhas.

A Fig. 12 mostra uma vista geral e uma vista aproximada do domínio de cálculo. Também destaca seus contornos, sendo que em verde foi adotada a condição de entrada; em amarelo condição de simetria; em azul e em preto, na região externa à tubeira, condição de parede com escorregamento, ou seja, condição de Euler; em vermelho, condição de *far field*, saída e na linha preta, condições de parede sem escorregamento no interior da tubeira.

FIGURA 12 – CONTORNOS DO CFD++ PARA AS SIMULAÇÕES VISCOSAS.



(a) Vista geral.



(b) Vista aproximada.

FONTE: O autor (2021).

Já a Fig. 13 mostra a distribuição dos elementos da malha gerados para simulações que consideraram o escoamento viscoso. Quando o escoamento foi considerado invíscido, apenas a região interna à tubeira, limitada pela parede, fora suficiente para atingir convergência das simulações. Fato este que não se repetiu para escoamentos viscosos, conduzindo assim à necessidade da adoção de um domínio maior para aplicar condições de *far field*.

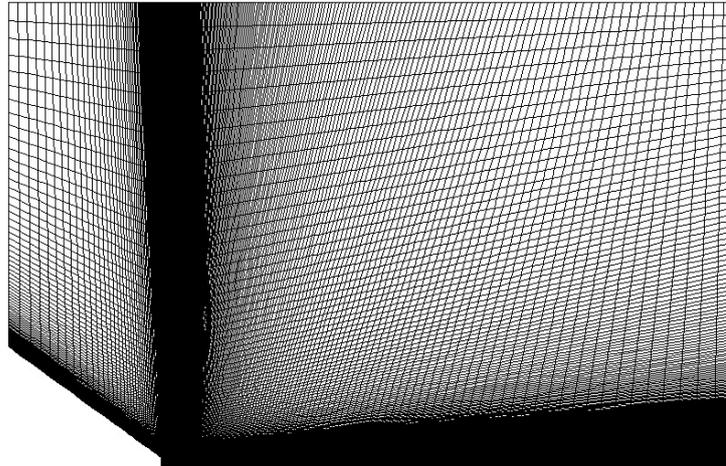
O fato do escoamento possuir ou não viscosidade durante as simulações computacionais com o CFD++, quando o domínio de cálculo é totalmente envolto por superfícies de parede, pode conduzir à dificuldades de convergência ou a campos de propriedades que não condizem com o tipicamente esperado para tubeiras. Como exemplo disto, pode ser citado o motivo principal que conduziu à necessidade de ampliar o domínio de cálculo. Por se tratar de um programa comercial, por mais que ele seja confiável e que atenda uma série de simulações tão complexas quanto o escoamento em uma tubeira, o programa acaba sendo para soluções gerais de problemas e não necessariamente consegue representar adequadamente e fielmente todos os casos. Um destes casos foi quando grandes picos de temperatura foram obtidos, mesmo após a convergência do programa na região de saída da tubeira, próxima à parede. Pela análise efetuada, percebeu-se uma certa dificuldade do programa em adequar a transição entre a velocidade de saída da tubeira, cerca de 2,5 Mach e zero na parede. Diversas condições de contorno foram impostas à saída da tubeira, porém, nenhuma delas conduziu à convergência adequada. A solução para este problema se deu pela expansão do domínio de cálculo, resultando por um lado em maior custo computacional, porém, sem picos de temperatura. Maiores detalhes são fornecidos no Cap. 5.

Para o interior da tubeira, a distribuição de volumes foi realizada de forma análoga à feita pelo Mach2D 5.10.2. Porém, gerando uma malha para escoamentos invíscidos e uma para escoamentos viscosos. Para ambas as malhas utilizou-se a uma distribuição de elementos muito próxima das quais foram utilizadas pelas simulações E-6 e NS-6 da Tab. 10, respectivamente. Pois o CFD++ não aceita malhas estruturadas, sendo assim, é necessário fazer uma conversão para malhas não estruturadas de forma que mantenha características próximas às das malhas estruturadas. O próprio programa ICEM faz esta correção internamente, durante a exportação da malha.

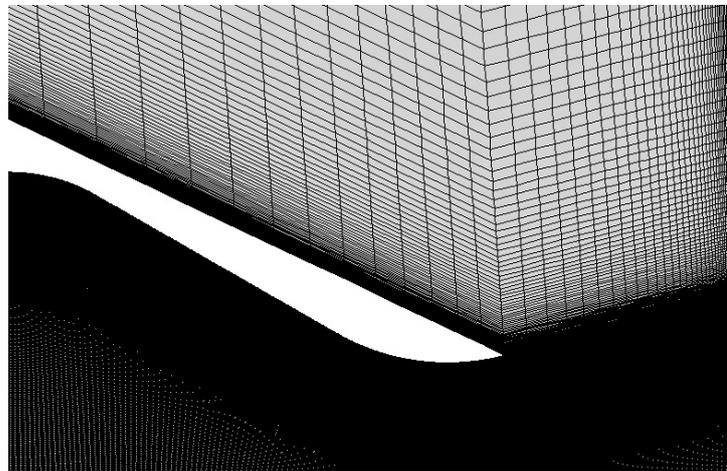
4.4 Cálculo numérico-computacional das variáveis de interesse: C_f e C_d .

As variáveis de interesse foram definidas e apresentadas no Seç. 3.5, entretanto, o método de cálculo destas variáveis pode ser explorado com maiores detalhes descrevendo como que as variáveis de interesse são realmente calculadas computacionalmente pelo código Mach2D 5.10.2.

FIGURA 13 – MALHA DO CFD++ PARA AS SIMULAÇÕES VISCOSAS.



(a) Vista geral.



(b) Vista aproximada.

FONTE: O autor (2021).

Para que se possa fazer o cálculo do coeficiente de empuxo no vácuo C_f , primeiramente, deve-se calcular qual é o valor da força de empuxo fornecido pela tubeira no vácuo F_v e o valor da força de empuxo padrão, que corresponde ao produto entre a pressão de estagnação p_o e a área da garganta da tubeira A_{th} . A razão entre as duas forças de empuxo, respectivamente, resulta no valor para C_f , calculado como:

$$C_f = \frac{F_v}{p_o A_{th}} \quad (4.43)$$

o valor de F_v corresponde à soma entre a força de empuxo dinâmico que é gerado pela expansão e aceleração dos gases F_d , e a força de empuxo de pressão F_{pv} , gerado pela diferença entre a pressão da saída da tubeira e a pressão externa, ou pressão ambiente.

Computacionalmente, a F_{pv} é avaliada para a última coluna de volumes reais na região de saída da tubeira e se dá pelo somatório do valor da força em cada volume. Para o último elemento de malha da última coluna do domínio real, volume np , obtém-se F_{pv}

como:

$$\sum_{np \text{ inicial}}^{np \text{ final}} F_{pv} = \sum_{np \text{ inicial}}^{np \text{ final} - nx} F_{pv} + p(np) rp(np) \frac{(ye(np-1) + ye(np))}{2} \quad (4.44)$$

onde np representa um determinado volume a cada iteração, respeitando a ordem lexicográfica $np = nx(j-1) + i$ com j variando entre 2 e $ny-1$, enquanto i é mantido constante e igual a $nx-1$. Ou seja, np demarca uma posição específica no domínio de cálculo; $np-1$ refere-se volume imediatamente à oeste; rp é o raio do centro do volume np , ou seja, a distância do eixo de simetria até o centroide do volume np ; ye é a métrica de malha y_n na face oeste do volume np , ou seja, diferença de valores entre a posição y da malha no volume avaliado e no volume ao sul; o valor de $np \text{ inicial}$ refere-se ao primeiro volume do somatório, ou seja, primeira linha de volumes do domínio real $j=2$ e última coluna de volumes reais $i=nx-1$. Considerando a ordem lexicográfica apresentada, o $np \text{ inicial}$ vale $np=2nx-1$. Já o $np \text{ final}$ refere-se ao volume localizado na última linha de volumes reais $j=ny-1$, ainda na última coluna de volumes reais $i=nx-1$ e vale $np=nx*ny-nx-1$. Após o cálculo de F_{pv} , ele é multiplicado por 2π , pois a força é determinada pela relação com a área local, perpendicularmente à saída do escoamento.

A força de empuxo dinâmico F_d é calculada de forma semelhante à força de empuxo no vácuo, também é avaliada para a última coluna de volumes reais, ao leste do domínio de cálculo e é feita de forma cumulativa entre os volumes até atingir o último volume. Sendo então, calculada por:

$$\sum_{np \text{ inicial}}^{np \text{ final}} F_d = \sum_{np \text{ inicial}}^{np \text{ final} - nx} F_d + rp(np) \rho(np) \left[\frac{(ye(np-1) + ye(np))}{2} \right] u(np)^2 \quad (4.45)$$

onde $u(np)$ é a velocidade na direção axial, avaliada no volume np . Assim como F_{pv} , F_d também é multiplicada por 2π assim que seu valor é calculado para o último volume real da fronteira leste.

Outra variável de interesse descrita na Seç. 3.5 é o coeficiente de descarga C_d , calculado como a razão entre a vazão mássica obtida computacionalmente, \dot{m} , e a vazão mássica obtida pela teoria quase-unidimensional \dot{m}_{Q1D} , sendo apresentado na Eq. 4.46. O cálculo de \dot{m} é feito de forma análoga ao cálculo de F_{pv} e F_d , resultando na Eq. 4.47. Já \dot{m}_{Q1D} é obtida através da Eq. 4.48.

$$C_d = \frac{\dot{m}}{\dot{m}_{Q1D}} \quad (4.46)$$

$$\sum_{np \text{ inicial}}^{np \text{ final}} \dot{m} = \sum_{np \text{ inicial}}^{np \text{ final} - nx} \dot{m} + re(np) \rho e(np) U_e(np) \quad (4.47)$$

$$\dot{m}_{Q1D} = p_o A_{th} \sqrt{\frac{\gamma_m}{R_g T_o}} \left(\frac{2}{\gamma_m + 1} \right)^{\frac{\gamma_m + 1}{\gamma_m - 1}} \quad (4.48)$$

onde $U_e(np)$ é a componente da velocidade contravariante na direção axial para a face leste do volume np , calculado para os volumes da última coluna de elementos de volume reais; $\rho e(np)$ é a massa específica calculada na face do volume na posição np e $re(np)$ é o raio no centro da face leste calculada para o volume np . Após o cálculo de \dot{m} para o último volume, também é multiplicado por 2π .

Para quesitos de comparação, uma versão análoga do coeficiente de empuxo pode ser calculado, porém, utilizando apenas valores obtidos pela teoria quase-unidimensional isentrópica para tubeiras, sendo C_{fQ1D} :

$$C_{fQ1D} = \frac{F_{vQ1D}}{p_o A_{th}} \quad (4.49)$$

de forma que F_{vQ1D} é composto pela soma entre o empuxo dinâmico baseado no escoamento quase-unidimensional isentrópico F_{dQ1D} e o empuxo de pressão no vácuo F_{pvQ1D} . Tais grandezas são calculadas por meio das Eq. 4.50 e Eq. 4.51, respectivamente.

$$F_{dQ1D} = \dot{m}_{Q1D} M_{sQ1D} \sqrt{\gamma_m R_g \frac{T_o}{1 + \frac{(\gamma_m - 1) M_{sQ1D}^2}{2}}} \quad (4.50)$$

$$F_{pvQ1D} = p_o \left[1 + \frac{(\gamma_m - 1) M_{sQ1D}^2}{2} \right]^{\frac{-\gamma_m}{\gamma_m - 1}} \pi r s^2 \quad (4.51)$$

onde M_{sQ1D} é o número de Mach na saída da tubeira, para o escoamento quase-unidimensional isentrópico. Sua estimativa é feita de forma recursiva da Eq. 4.53, relacionando a razão de expansão de área com o número de Mach. Esta estimativa é válida para quaisquer posições da tubeira.

$$\frac{A_y}{A_x} = \frac{M_x}{M_y} \sqrt{\left\{ \frac{1 + [(\gamma_m - 1)/2] M_y^2}{1 + [(\gamma_m - 1)/2] M_x^2} \right\}^{\frac{(\gamma_m + 1)}{(\gamma_m - 1)}}} \quad (4.52)$$

Destá forma, caso a posição x seja a garganta e y a saída da tubeira e considerando que o escoamento é bloqueado, ou seja, que a velocidade sônica é atingida na garganta e

M_x passa a ser igual a um, a Eq. 4.52 passa a ser escrita como:

$$0 = - \left(\frac{A_s}{A_{th}} M_{sQ1D} \right)^2 + \left\{ \frac{2}{\gamma_m + 1} \left[1 + \frac{(\gamma_m - 1) M_{sQ1D}^2}{2} \right] \right\}^{\frac{(\gamma_m + 1)}{(\gamma_m - 1)}} \quad (4.53)$$

Informações e discussões adicionais sobre estas equações podem ser encontradas em Sutton e Biblarz (2017).

4.5 Acoplamento dos modelos de fechamento às equações do modelo computacional no sistema coordenado transformado

Conforme já apresentado ao longo do Cap. 3, os modelos de fechamento avaliados ao longo da dissertação obedecem à hipótese de Boussinesq e utilizam artifícios matemáticos para computar valores para a viscosidade turbulenta ν_t e condutividade térmica turbulenta κ_t . Entretanto, apenas calcular estas variáveis não é suficiente, elas devem ser integradas às equações discretizadas da segunda lei de Newton e também à equação da energia térmica, para que o aumento da viscosidade dinâmica e condutividade térmica sejam “percebidos” pelo escoamento e para que o conjunto das equações corrigidas possa ser chamado de modelo de turbulência. Os procedimentos que proporcionam esta “percepção” são explorados nesta seção.

4.5.1 Modelo Baldwin-Lomax - BLM

Através do cálculo de ν_t , Eq. 3.50, o acoplamento do modelo de fechamento às equações da segunda lei de Newton e à equação da energia térmica ocorre pela adição de $\rho \nu_t$ à viscosidade dinâmica e através da modificação da condutividade térmica κ . O processo de atualização de μ e κ , conforme descrito por Baldwin e Lomax (1978), ocorre através de:

$$\mu \rightarrow \mu + \rho \nu_t \quad (4.54)$$

e

$$\kappa \rightarrow \kappa + \frac{\rho c_p}{Pr_t} \nu_t. \quad (4.55)$$

onde Pr_t é o número de Prandtl turbulento, geralmente representado como sendo igual a 0,9 e calculado como sendo a razão entre a difusividade turbulenta de quantidade de movimento linear e a difusividade térmica turbulenta.

Para que se possa efetivamente calcular qual é o comprimento de mistura l_{mix} utilizado neste modelo, precisa-se calcular a distância adimensional à parede, y^+ . Podendo

ser calculada como uma relação entre a posição local do volume em relação a parede $y(np)$, velocidade de fricção u_τ , massa específica na parede ρ_{wall} e viscosidade dinâmica na parede μ_{wall} :

$$y^+ = y(np) \frac{u_\tau \rho_{wall}}{\mu_{wall}} \quad (4.56)$$

onde u_τ é utilizado para referir-se a uma velocidade de atrito, válida para os volumes em contato com a parede e corresponde a $\sqrt{\tau_{wall}/\rho_{wall}}$.

A tensão de cisalhamento que o escoamento induz na parede da tubeira, τ_{wall} é interpretada como o módulo entre o produto da viscosidade dinâmica com o gradiente de velocidades na direção tangencial à parede. Como os cálculos ocorrem no sistema de coordenadas curvilíneas, Marchi e Bertoldo (2012) apresentam uma equação equivalente a qual foi descrita acima, mas já no sistema de coordenadas curvilíneas, calculada como:

$$\tau_{wall} = \mu_{wall} J_{wall} \left| \left(\frac{\partial u}{\partial \eta} x_\xi + \frac{\partial v}{\partial \eta} y_\xi \right) \right|_{wall} \quad (4.57)$$

de forma que J_{wall} é o valor do Jacobiano dos volumes em contato com a parede. A discretização da Eq. 4.57 para o método dos volumes finitos (lembrando que o vetor de velocidade é nulo na parede) implica em:

$$\tau_{wall} = 2\mu_n J_n \left| u(np) (x_\xi)_n + v(np) (y_\xi)_n \right| \quad (4.58)$$

o subscrito n indica que determinada propriedade é avaliada na fronteira norte do volume np .

Já para o cálculo da vorticidade, presente na Eq. 3.51, que também é necessária para o cálculo de ν_t , da mesma forma deve ser expresso em termos do sistema de coordenadas curvilíneo. Marchi e Bertoldo (2012) trazem a metodologia de cálculo da vorticidade S , dada por:

$$S = J \left| \frac{\partial v}{\partial \xi} y_\eta - \frac{\partial v}{\partial \eta} y_\xi + \frac{\partial u}{\partial \xi} x_\eta - \frac{\partial u}{\partial \eta} x_\xi \right| \quad (4.59)$$

A obtenção da equação que efetivamente é utilizada para o cálculo da vorticidade ocorre após a discretização para o método dos volumes finitos. Aproximando as derivadas

com CDS-2, o cálculo da vorticidade é feito por:

$$\begin{aligned}
 S(np) = & \frac{J(np)}{4} | (v_E - v_W) (y_{NE} - y_{SE} + y_{NW} - y_{SW}) \\
 & - (v_N - v_S) (y_{NE} + y_{SE} - y_{NW} - y_{SW}) + (u_E - u_W) (x_{NE} - x_{SE} + x_{NW} - x_{SW}) \\
 & - (u_N - u_S) (x_{NE} + x_{SE} - x_{NW} - x_{SW}) |
 \end{aligned} \tag{4.60}$$

de forma que, tomando como referência a posição do volume np como central, os subscritos NE , NW , SE , SW correspondem à propriedade sendo avaliada no volume à nordeste, noroeste, sudeste e sudoeste do volume np . A mesma lógica é válida para N , S , E , W , referindo-se ao volume ao norte, sul, leste e oeste, respectivamente. Uma visualização deste tipo de indexação é fornecida na Fig. B.1, localizada no Apêndice B.

Uma vez que as equações necessárias para se calcular o valor de ν_t já são conhecidas, o procedimento computacional para a atualização de μ e κ ocorre através do Algoritmo 1.

Algoritmo 1 ALGORITMO PARA CÁLCULO COMPUTACIONAL DO BLM

- 1: Determinar as constantes calibradas do modelo mostrados na Eq. 3.58;
- 2: Importar as métricas de malha, campos de μ , ρ , u , v .
- 3: Calcular τ_{wall} com a Eq. 4.58;
- 4: Calcular a distância entre o centroide de cada volume e a parede;
- 5: Encontrar o valor de y^+ com a Eq. 4.56;
- 6: Efetuar o cálculo do módulo da vorticidade para cada volume, com a Eq. 4.60;
- 7: Encontrar o valor de l_{mix} para cada volume através da Eq. 3.52;
- 8: Verificar qual é o máximo valor para a distância do centroide do volume à parede no qual o valor de $l_{mix} |S(np)|$ atinge o máximo valor, ou seja, y_{max} ;
- 9: Efetuar o cálculo de U_{dif} , F_{max} e F_{wake} através das Eq. 3.57, Eq. 3.54. e Eq. 3.53, respectivamente;
- 10: Definir os valores para a ν_{ti} e ν_{to} , com a Eq. 3.51 e Eq. 3.55, respectivamente.
- 11: Verificar qual é o menor valor da distância perpendicular à parede para $\nu_{ti} = \nu_{to}$;
- 12: Calcular ν_t para todos os volumes com Eq. 3.50;
- 13: Atualizar μ para todos os volumes Eq. 4.54;
- 14: Atualizar κ para todos os volumes Eq. 4.55;

FONTE: O autor(2021).

4.5.2 Modelo Spalart-Allmaras - SA

Da mesma forma que a vorticidade e a tensão de cisalhamento do modelo de zero equação precisaram ser transformados para o sistema de coordenadas curvilíneas e em seguida sofrer o processo de discretização, os operadores da EDP do modelo SA também necessitam passar por tal transformação para que possam ser implementados.

O processo de mudança do sistema de coordenadas retangulares para coordenadas cilíndricas e em seguida, para o sistema de coordenadas curvilíneas dos operadores presentes

na Eq. 3.77 é mostrado em detalhes no Apêndice A. Após a realização deste processo, o conjunto de equações resultantes, ou seja, Eq. A.23, Eq. A.29, Eq. A.30 e Eq. A.52 deve ser discretizado.

As etapas de discretização das equações resultantes da mudança de coordenadas são apresentadas no Apêndice B. Não restringindo-se apenas aos operadores transformados, nesta etapa é feita a inclusão do termo temporal, que não carrega a necessidade de sofrer o processo de mudança de coordenadas, mas sim o de discretização. Como resultado das discretizações, obtêm-se as Eq. B.3, Eq. B.22, Eq. B.34 e Eq. B.41.

Assim que as equações discretizadas são conhecidas, deve-se montar um sistema linear para que o o campo escalar, computacionalmente escrito como o vetor de incógnitas, seja encontrado. A forma resultante do sistema linear é dada através da Eq. B.53, apresentada novamente aqui por facilidade como sendo:

$$[a]_{SA} \hat{v} = \overrightarrow{STSA} \quad (4.61)$$

o vetor de incógnitas é multiplicado pela matriz de coeficientes $[a]_{SA}$, que é resultante da associação entre coeficientes dos componentes advectivos, difusivos e temporal. \overrightarrow{STSA} é considerado como sendo o termo fonte, composto por termos avaliados no centro de cada volume, incluindo nesta definição o termo de transformação de energia do campo médio para a turbulência, de transformação de energia cinética em energia interna, laplaciano da variável de trabalho, produto escalar entre o gradiente de massa específica com o gradiente da variável de trabalho e também o termo temporal, resultante da iteração prévia já convergida.

De forma semelhante à qual foi mostrada para o BLM, uma vez que as equações necessárias para se obter a solução do sistema linear já estão implementadas, o procedimento para atualizar os valores de μ e κ levando em conta a contribuição do modelo de fechamento SA ocorre conforme o Algoritmo 2. Neste algoritmo estão presentes algumas variáveis importantes utilizadas durante a implementação, tais como: a tolerância alvo para a solução do sistema linear, $normtol$; máximo número de iterações para calcular \hat{v} , $nitmax$; resíduo do sistema linear de \hat{v} em uma dada iteração, $norm1$ e o resíduo do sistema linear da iteração anterior, $norm0$.

O modelo SA descrito no Cap. 3 foi concebido para aplicações em que o campo de \hat{v} é positivo para todo o domínio, exclusivamente. Entretanto para soluções discretas da EDP do modelo SA esta condição nem sempre é atendida computacionalmente, podendo resultar valores negativos de \hat{v} em escoamentos do tipo esteira e na fronteira da camada limite de escoamentos forçados internos ou externos, como em uma placa plana ou em um tubo. A origem desta não conformidade costuma estar relacionada com escoamentos transientes ou em situações quando a malha é considerada não refinada o suficiente para

Algoritmo 2 ALGORITMO PARA CÁLCULO COMPUTACIONAL DO SA

- 1: Determinar as constantes calibradas do modelo;
- 2: Determinar as métricas do critério de Scarborough;
- 3: Determinar a tolerância alvo para a solução do sistema linear, $normtol$;
- 4: Determinar o máximo número de iterações para calcular $\hat{\nu}$, $nitmax$;
- 5: Inicializar o campo de $\hat{\nu}$ como $0,1 \nu$ e calcular a distância d entre cada centroide e a parede mais próxima;
- 6: Calcular o campo de vorticidade;
- 7: Zerar o resíduo do sistema linear da iteração anterior, $norm0$;
- 8: **repeat**
- 9: Zerar o resíduo do sistema linear de $\hat{\nu}$, $norm1$;
- 10: Interpolar $\hat{\nu}$ para as faces dos volumes;
- 11: Calcular um vetor auxiliar que será utilizado pelo operador Laplaciano e extrapolá-lo para as faces;
- 12: Calcular a matriz de coeficientes $[a]_{SA}$ e o termo fonte $\overrightarrow{STS\dot{A}}$;
- 13: Determinar as condições de contorno para $\hat{\nu}$
- 14: Aplicar o critério de Scarborough e deixar a matriz $[a]_{SA}$ com a diagonal principal dominante;
- 15: Solucionar o sistema linear e encontrar o campo de $\hat{\nu}$;
- 16: Calcular do resíduo do sistema linear $norm1$;
- 17: **if** $abs(norm1 - norm0) < normtol$ **then**
- 18: Encerrar o ciclo iterativo;
- 19: **end if**
- 20: $norm0 = norm1$;
- 21: **until** $nitmax$
- 22: Calcular ν_t com Eq. 3.60;
- 23: Atualizar μ com Eq. 4.54;
- 24: Atualizar κ com Eq. 4.55;

FONTE: O autor(2021).

uma determinada aplicação. Alternativas de solução para este tipo de problema, assim como sugestões para evitá-los são apresentados em Allmaras (1999), Spalart (2000), Allmaras, Johnson e Spalart (2012) e Rumsey (2021b). Recentemente foi proposto uma melhoria, uma correção do modelo SA, mais precisamente ao que diz respeito da constante c_{w2} que integra a componente de transformação de energia cinética em energia interna. Esta melhoria pode ser aplicada em todas as versões prévias do modelo SA e proporciona uma melhor estimativa para o coeficiente de atrito, melhorando assim a modelagem de regiões em que há um menor número de Reynolds, como próximas às paredes e em regiões onde existe equilíbrio entre componentes viscosas e componentes inerciais. Os detalhes desta melhoria encontram-se em Spalart e Garbaruk (2020).

Segundo Allmaras, Johnson e Spalart (2012), limitações para o crescimento da razão entre a variável de trabalho e a viscosidade cinemática, χ , devem ser evitadas, uma vez que dependendo do tipo de aplicação estes valores podem passar facilmente de $\chi \approx 10^5$.

Ainda segundo os mesmos autores, para aplicações em que a camada limite está colada o valor máximo local esperado para χ deve ser de $0,00059Re_x^{0,83}$, onde Re_x é o número de Reynolds local, considerando ρ , μ e velocidade axial u e um comprimento característico local, considerado como a posição axial de cada volume da malha. Esta estimativa é um parâmetro válido para ser utilizado como referência, pois fornece uma estimativa de quais seriam os valores máximos do campo de $\hat{\nu}$ esperados localmente.

Durante o processo de implementação da Eq. 3.77 foi possível observar o surgimento de valores negativos para $\hat{\nu}$ e conseqüentemente para ν_t . Os volumes mais próximos à parede da tubeira manifestaram esse comportamento antes dos demais volumes, independentemente do tamanho da malha ou número de volumes para os casos de testes que apontaram tal comportamento. Notou-se também que o surgimento de valores negativos está fortemente relacionado não só com o tipo de malha empregada, mas também com o tamanho do primeiro volume de controle próximo à parede. Estes valores negativos não ocorrem em todas as aplicações e só podem ser estimados após todo o processo de implementação do modelo e submissão do modelo computacional a uma simulação em que o fenômeno físico seja devidamente associado ao modelo de fechamento. A forma alternativa de se reescrever c_{w2} foi testada, porém, não contribuiu significativamente para a redução de surgimento de valores negativos para $\hat{\nu}$.

Para situações em que os primeiros valores para y^+ sobresscrevem a região mais externa da camada limite, ou seja, $y^+ \gg \delta^*$, apenas valores positivos para $\hat{\nu}$ eram obtidos pela solução do sistema linear e a convergência da solução computacional era obtida. Porém, este tipo de resultado não é satisfatório uma vez que o escoamento no interior da camada limite não é devidamente modelado. Ao adotar um $y^+ \ll \delta^*$ ou mesmo y^+ unitário para os volumes anexos à parede (havendo volumes presentes em todas as regiões da camada limite), valores negativos para $\hat{\nu}$ surgiam nestes volumes e com a progressão do processo iterativo, uma vez que a iteração subsequente é dependente da anterior, cada vez mais volumes apresentavam valores negativos para $\hat{\nu}$, resultando em um espalhamento cada vez maior de valores negativos para ν_t em direção a todo o domínio partindo da parede. Esta alimentação recursiva de valores negativos à viscosidade dinâmica (valores estes em que a cada iteração aumentavam de magnitude em até ordens de grandeza) resulta em instabilidades e oscilações na solução computacional que acabam conduzindo à divergência do código.

Esta situação exige algum tipo de tratativa para que a modelagem no interior da camada limite seja possível. Para sanar estas instabilidades, optou-se por utilizar uma abordagem proposta em Allmaras, Johnson e Spalart (2012), chamada de modelo Spalart-Allmaras Negativo (*Negative SA model*), Eq. 4.62. Uma vez que apenas eliminar a contribuição de ν_t para volumes que resultavam valores negativos de $\hat{\nu}$ e testar diferentes condições de contorno não resolveram o problema, pois não eliminavam a causa raiz do

problema.

$$\frac{D\hat{\nu}}{Dt} = P_n - D_n + \frac{1}{\sigma} \left[\nabla \cdot (\nu + \hat{\nu} f_n) \nabla \hat{\nu} + c_{b2} (\nabla \hat{\nu})^2 \right] \quad (4.62)$$

A principal vantagem do modelo SA Negativo (SA Neg) é sua maior robustez, nele são inclusas funções adimensionais que devem evitar o surgimento de valores negativos de $\hat{\nu}$. Segundo os autores, a aplicação deste modelo não modifica os valores positivos que seriam obtidos com o modelo SA escrito em sua forma tradicional. O modelo SA Neg é elaborado tomando como referência o modelo SA tradicional, porém ao longo da elaboração da presente dissertação foi trabalhado com o modelo SA escrito em sua forma compressível, considerando inclusa a equação de balanço de massa, conforme apresentado na Eq. 3.77. Para sanar esta aparente incompatibilidade de equações, o mesmo processo de inclusão da equação de balanço de massa efetuada para o SA tradicional por meio da Eq. 3.69, deve ser efetuada para o modelo SA Neg.

Uma das vantagens desta operação é que além de permitir a implementação de um modelo adicional, permite utilizar os mesmos operadores que previamente foram submetidos à verificação de código individualmente, e posteriormente, submetidos à verificação de código estando todos juntos em uma única equação. O modelo SA Neg utiliza as mesmas constantes e funções auxiliares presentes no modelo SA tradicional, mas também carrega certas modificações nas componentes de transformação de energia do campo médio para a turbulência e transformação de energia cinética em energia interna, incluindo uma nova função adimensional. Após efetuar as operações matemáticas na Eq. 4.62, ela passa a ser escrita como:

$$\frac{\partial(\rho\hat{\nu})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \hat{\nu}) - \rho(P_n - D_n) - \frac{1}{\sigma} \nabla \cdot [\rho(\nu + \hat{\nu} f_n) \nabla \hat{\nu}] - \frac{c_{b2}}{\sigma} \rho (\nabla \hat{\nu})^2 + \frac{1}{\sigma} (\nu + \hat{\nu} f_n) \nabla \rho \cdot \nabla \hat{\nu} = 0 \quad (4.63)$$

onde os termos P_n , D_n e f_n , são respectivamente:

$$P_n = c_{b1} (1 - c_{t3}) S \hat{\nu} \quad (4.64)$$

$$D_n = -c_{w1} \left(\frac{\hat{\nu}}{d} \right)^2 \quad (4.65)$$

$$f_n = \frac{c_{n1} + \chi^3}{c_{n1} - \chi^3} \quad (4.66)$$

onde o termo de transformação de energia do campo médio para a turbulência passa a utilizar a vorticidade S ao invés da vorticidade modificada \tilde{S} , passando a ser chamado de

P_n . Outra modificação ocorre no termo de transformação de energia cinética para energia interna, o qual passa a ser mais enxuto e sofre inversão de sinal, sendo agora chamado de D_n . A nova função inserida, f_n , modifica a difusão de $\hat{\nu}$ e com ela, uma nova constante, c_{n1} é adicionada, tendo seu valor igual à 16. Além disso, são inclusos alguns requisitos para a estabilidade da aplicação do modelo, que são:

$$1 + \chi(f_n - c_{b2}) \geq 0 \quad (4.67)$$

$$P_n - D_n \geq 0; 1 + \chi f_n \geq 0 \quad (4.68)$$

$$\nu + \hat{\nu} f_n \geq 0 \quad (4.69)$$

Como há grande semelhança entre a Eq. 4.63 e a Eq. 3.77, a execução do Algoritmo 2 é praticamente a mesma necessária para executar os cálculos computacionais da Eq. 4.63, sendo necessário mudar poucas linhas de código, como as para: o vetor auxiliar que acompanha o Laplaciano; P_n ; D_n e para o vetor que acompanha o produto dos gradientes $\nabla\rho$ e $\nabla\hat{\nu}$. Como a lógica de execução do SA Neg é bem semelhante à lógica já apresentada para o SA da Eq. 3.77, não será novamente apresentada.

4.6 Algoritmo principal do Mach2D 5.10.2

Uma visão geral de como o programa Mach2D 5.10.2 funciona pode ser dada através de uma breve apresentação do esquema geral de funcionamento. Sendo aqui apresentado como o Algoritmo 3.

Na oitava linha é feita a chamada do Algoritmo 1 quando no arquivo de entrada a opção do BLM estiver selecionada. Caso esteja selecionada a opção do SA, ao invés do BLM ser chamado, na nona linha é chamado o Algoritmo 2. O mesmo vale para a opção de chamada do SA Neg estiver habilitado, porém, considerando as modificações descritas na seção anterior.

4.7 Resumo do capítulo

Foram abordadas a metodologia de transformação do sistema de coordenadas das equações de balanço e a estimativa das propriedades termofísicas para a mistura gasosa. Posteriormente, apresentou-se quais são as cotas geométricas da tubeira axissimétrica e como ela é compreendida no domínio computacional curvilíneo já indexado. Uma vez que já se conheça o domínio matemático, as condições de contorno são comentadas e sumarizadas. Também foi discutido sobre como as simulações computacionais são classificadas, tomando

como referência os dois tipos de malhas base das simulações computacionais com o Mach2D 5.10.2.

Os procedimentos para cálculo computacional das variáveis globais de interesse são abordados e discutidos, sendo seguidos pela descrição de como é feito o acoplamento entre os modelos de fechamento e as equações de balanço. Tanto o BLM quanto o SA são acompanhados pelo algoritmo de atualização de μ e κ . Por fim, uma ideia geral de funcionamento do programa Mach2D 5.10.2 é fornecida por meio de um algoritmo simplificado.

Algoritmo 3 ALGORITMO PRINCIPAL DO MACH2D 5.10.2

- 1: Ler os arquivos de entrada e inicializar as funções com 0.d0;
- 2: Gerar a malha e suas métricas de transformação;
- 3: Calcular p , T , u , v , ρ , U e V nos centroides e faces dos volumes;
- 4: Calcular as propriedades termofísicas;
- 5: Inicializar o BLM, caso tenha sido selecionado no arquivo de entrada;
- 6: **repeat**
- 7: Atualizar campos de propriedades;
- 8: Chamar o BLM e atualização de μ e κ ;
- 9: Inicializar do SA, caso tenha sido selecionado no arquivo de entrada;
- 10: Chamar o SA ou SA Neg e atualização de μ e κ
- 11: Iniciar o ciclo de correção de massa;
- 12: Calcular os coeficientes e termos fonte para solução do sistema linear de u e v ;
- 13: Calcular as métricas do SIMPLEC;
- 14: Solucionar os sistemas lineares de u e v ;
- 15: Calcular os resíduos da solução dos sistemas lineares de u e v ;
- 16: Calcular as velocidades para as faces;
- 17: Efetuar correção de p ;
- 18: Calcular os resíduos da solução dos sistemas lineares de p ;
- 19: Atualizar o campo de velocidades com a pressão corrigida;
- 20: Atualizar ρ com a pressão corrigida para os centroides e faces;
- 21: Conferir aa equação de balanço de massa
- 22: Calcular os coeficientes e fontes para a equação da energia
- 23: Solucionar o sistema linear para obter o campo de T
- 24: Calcular o resíduo da solução do sistema linear de T
- 25: Calcular o campo de p utilizando a equação de estado
- 26: Atualizar o campo de ρ para os centroides e faces dos volumes;
- 27: Calcular o incremento de tempo;
- 28: Checar a convergência e atualização do número de iterações;
- 29: **until** Número de passos especificados
- 30: Calcular das variáveis de interesse e imprimir dos arquivos de saída;

FONTE: O autor(2021).

5 RESULTADOS

Primeiramente, antes de iniciar a apresentação dos resultados em si, alguns comentários sobre a implementação do modelo SA devem ser feitos. Na Seç. 4.5.2 foi comentado sobre os problemas encontrados durante a implementação que exigiram testes adicionais, correções e readequações para que o modelo SA pudesse ser modificado para o SA Negativo (SA Neg), frente à disseminação de valores negativos de $\hat{\nu}$ e ν_t . Valores estes que surgiam nas proximidades das paredes e difundiam-se para o resto do domínio. Estas mudanças foram feitas de forma que as discretizações dos operadores e o código já verificado pudessem ser reutilizados, modificando o modelo computacional por meio de mudanças nos escalares que multiplicam os operadores, ou que neles são inseridos. Durante a recursividade das iterações, pôde-se perceber que por mais que o modelo SA Neg, teoricamente, deveria limitar o surgimento de valores negativos de $\hat{\nu}$ isto não aconteceu para todos os volumes, mas mesmo assim, o processo iterativo demonstrou-se robusto o suficiente e manteve-se funcionando até a convergência das simulações, não crescendo a magnitude de $\hat{\nu}$ que previamente levava à divergência ao aplicar-se o modelo SA oriundo da Eq. 3.77, primeiramente implementada. Boa parte dos trabalhos disponíveis na literatura descrevem que a implementação do modelo SA é simples e que não deve gerar grandes problemas, porém, isso não se mostrou totalmente válido para o tipo de problema discutido ao longo da dissertação. Uma certa vacância na literatura sobre as tratativas de problemas de implementação deste modelo foi percebida pelo autor. Porém, se esta mesma situação for percebida de outra forma, são oportunidades para se explorar ainda mais o modelo de fechamento e gerar uma maior contribuição com o trabalho realizado.

Outro fato que merece destaque é que, para as simulações computacionais realizadas, a magnitude da viscosidade turbulenta diminuía conforme as iterações progrediam, tanto que, ao fim dos ciclos iterativos, seus valores tendiam a zero independentemente da posição no domínio computacional. Isto contribuiu para que parte dos resultados computacionais obtidos com o Mach2D 5.10.2, ao selecionar o modelo computacional SA Neg, ficassem semelhantes aos do modelo explícito. O autor reconhece que este não é o comportamento ideal esperado para o campo de $\hat{\nu}$, porém, estes foram parte dos resultados encontrados frente às adversidades enfrentadas nas implementações.

As simulações efetuadas com o programa Mach2D 5.10.2 foram realizadas em um computador com as seguintes características: processador Intel(R) Core(TM) i5-3330 CPU @ 3 GHz com quatro núcleos; 16 GB de memória RAM e Windows 10 como sistema operacional. A Tab. 11 apresenta resultados para: número de iterações até atingir o erro de máquina N_{it} ; tempo demandado para cada simulação t_{CPU} e quantidade de memória RAM consumida X_{RAM} , dada em Megabytes (Mb), acompanhada de seu nome. Já as simulações efetuadas com os programas ICEM e CFD++ foram realizadas em um computador com

as seguintes características: dois processadores Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620 v3 @ 2.4 GHz com um todo de 24 núcleos; 32 GB de memória RAM e Windows 7 como sistema operacional.

TABELA 11 – DADOS DAS SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS COM O MACH2D.

Nome	N_{it}	t_{CPU} (s)	X_{RAM} (Mb)
E-1	1232	0,84s	9,5
E-2	1818	2,98s	10,6
E-3	2664	16,45s	16,4
E-4	4174	2 min 84,86s	39,7
E-5	9584	25 min 41,62s	127,4
E-6	25816	3h 28 min 55,98s	480,6
NS-1	2582	2,38s	11,3
NS-2	3054	10,62s	10,6
NS-3	3676	52,22s	16,3
NS-4	4844	3 min 27,88s	39,0
NS-5	8578	36 min 38,98s	127,3
NS-6	21480	5h 59 min 1,39s	480,6
NS-BLM-1	2582	2,78s	11,1
NS-BLM-2	3054	10,69s	10,6
NS-BLM-3	3678	47,17s	16,5
NS-BLM-4	4852	4 min 59,70s	39,6
NS-BLM-5	8852	39 min 26,81s	131,3
NS-SA-1	2486	3,09s	9,4
NS-SA-2	3206	13,67s	12,1
NS-SA-3	4698	1 min 31,52s	22,5
NS-SA-4	10246	17 min 32,98s	63,6
NS-SA-5	27236	3h 6 min 59,28s	226,9

FONTE: O autor (2021).

Os campos de distribuição de temperatura, pressão, número de Mach, velocidade axial e radial, massa específica e viscosidades para todo o domínio de cálculo estão disponíveis para visualização no Apêndice C. Estes campos são gerados a partir das propriedades calculadas com as malhas mais refinadas de cada modelo computacional. Alguns dos campos de propriedades do Apêndice C são apresentados no presente capítulo devido a comentários pertinentes sobre tais campos.

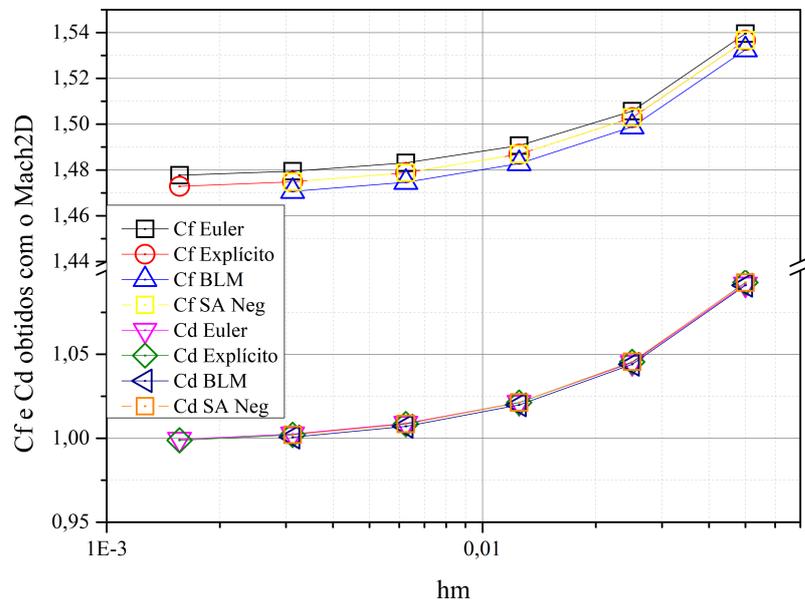
5.1 Resultados para C_d e C_f

A Fig. 14 mostra a convergência dos valores computacionais de C_f e C_d , sem extrapolações, conforme as malhas são refinadas para os quatro modelos computacionais empregados ao se utilizar o programa Mach2D 5.10.2 e correspondem a uma parte dos resultados apresentados nas tabelas presentes nesta seção. Por motivos de síntese de

nomenclatura, referências ao programa Mach2D 5.10.2 daqui em diante, são renomeadas como Mach2D.

Já os valores computacionais de C_d e C_f encontrados com o programa CFD++, obtidos após uma análise dos campos de propriedades, ou seja um pós-processamento, são apresentados por meio da Tab. 12. Nesta tabela, para fins de comparação, estão também sumarizados valores para C_d e C_f obtidos com o menor tamanho característico de malha h_m presentes na Fig. 14. Resultados para o BLM e SA Neg não foram gerados com o programa CFD++ pois não há disponibilidade de seleção destes modelos. Pode-se perceber que existe uma diferença entre os valores de C_f quando comparados entre os modelos computacionais tanto para o programa CFD++, quanto para o Mach2D de até 2,122%. Esta comparação permite evidenciar que para as variáveis globais C_f , o uso de um modelo computacional menos realista como o de Euler apresenta uma diferença percentual entre os dois programas de 1,879%. Para os valores de C_d pode-se perceber que há uma diferença entre os dois programas variando de 3,127% para Euler até 8,433% utilizando o modelo SA. As diferenças relativas entre os valores computacionais, analíticos e experimentais são exploradas mais a diante.

FIGURA 14 – C_d E C_f CALCULADOS COMPUTACIONALMENTE COM O PROGRAMA MACH2D EM RELAÇÃO À h_m PARA OS QUATRO MODELOS COMPUTACIONAIS.



FONTE: O autor (2021).

Os valores analíticos para C_f (calculados pela abordagem quase-unidimensional), C_d (calculados pela abordagem de Kliegel e Levine, C_{dKL} , e pela abordagem de Hall, C_{dHall}) e C_d experimental fornecido por Back, Massier e Gier (1965a), C_{dexp} , também são

TABELA 12 – RESULTADOS COMPUTACIONAIS OBTIDOS ATRAVÉS DOS PROGRAMAS CFD++ E MACH2D PARA C_d E C_f NAS MALHAS MAIS REFINADAS.

Modelo computacional	Variável	CFD++ Valor	Mach2D Valor
Euler	C_d	0,9691	0,9994
	C_f	1,5060	1,4777
Explícito	C_d	0,9372	0,99879
	C_f	1,5035	1,4729
BLM	C_d	-	1,00065
	C_f	-	1,47067
SA	C_d	0,9241	-
	C_f	1,5061	-
SA Neg	C_d	-	1,00203
	C_f	-	1,4748

FONTE: O autor (2021).

relevantes e são apresentados na Tab. 13. O C_d experimental é fornecido em um intervalo devido à faixa de pressão de estagnação para a tubeira 30-15. Estes valores constam na sétima página do trabalho Back, Massier e Gier (1965a), na Fig. 6.

Uma vez conhecidos os valores de tais grandezas, podem ser feitas algumas estimativas de quais são as porcentagens relacionadas à diferença entre valores analíticos em relação aos valores obtidos pelos diferentes modelos computacionais. Sendo assim, as diferenças percentuais para C_d e C_f utilizando os modelos computacionais de Euler, modelo explícito e modelo SA com o programa CFD++ em relação às grandezas da Tab. 13 são apresentadas por meio da Tab. 14. O maior desvio obtido para C_d foi de 7,241% e ocorreu ao se empregar o modelo SA, relacionando C_d ao C_{dKL} . Já o menor foi de 0,948%, e ocorreu ao empregar o modelo computacional de Euler, comparando-se ao limite inferior do C_{dexp} . Para C_f , todas as estimativas ficaram abaixo de 0,490%, que foi justamente o valor encontrado ao se empregar o modelo computacional explícito, comparando-se à C_{fQ1D} .

TABELA 13 – VALORES ANALÍTICOS, QUASE-UNIDIMENSIONAIS E EXPERIMENTAIS PARA C_d E C_f .

Variável	Valor
C_{dKL}	0,9962
C_{dHall}	0,9943
C_{dexp}	$0,9600 \leq C_{dexp} \leq 0,9900$
C_{fQ1D}	1,5109

FONTE: O autor (2021).

Nas Tab. 15 e Tab. 16 são apresentados os valores das soluções computacionais

extrapoladas para C_d e C_f , respectivamente, acompanhadas do erro estimado para cada modelo computacional dado entre parêntesis. Para a incerteza com o estimador GCI, o valor segue como sendo o da solução computacional para a malha mais refinada. Para o estimador convergente, a extrapolação é obtida através da Eq. 3.105 e para o estimador Psi corrigido, Eq. 3.111. Esta forma de apresentação de resultados é conhecida como notação compacta. Tomando como exemplo um resultado computacional para uma determinada variável que seja igual a $1,47182497503873E+00$ e sua estimativa de erro $1,22097138108150E-02$. Apenas os dois primeiros algarismos da estimativa de erro são confiáveis o suficiente para servir como limite superior e inferior do resultado computacional. Desta forma, o resultado final deve ser expresso como $1,472 \pm 0,012$ ou $1,472(12)$.

TABELA 14 – DIFERENÇA PERCENTUAL PARA C_d E C_f OBTIDOS COM O CFD++, EM RELAÇÃO ÀS SOLUÇÕES ANALÍTICAS, QUASE-UNIDIMENSIONAIS E EXPERIMENTAIS.

Variável referência	Euler %	Explícito %	SA %
C_{dKL}	2,724	5,926	7,241
C_{dHall}	2,534	5,743	7,060
C_{dexp} limite superior	2,111	5,333	6,657
C_{dexp} limite inferior	0,948	2,375	3,740
C_{fQ1D}	0,324	0,490	0,318

FONTE: O autor (2021).

TABELA 15 – RESULTADOS COMPUTACIONAIS, OBTIDOS COM O MACH2D, EXTRAPOLADOS E ACOMPANHADOS DOS ERROS ESTIMADOS PARA C_d .

Modelo computacional	Estimador de erro	Valor
Euler	GCI	0,9993(47)
	Convergente	0,9962299(58)
	Psi corrigido	0,996237945(16)
Explícito	GCI	0,9987(48)
	Convergente	0,9955468(38)
	Psi corrigido	0,99555696120(45)
BLM	GCI	1,0006(96)
	Convergente	0,9941076(89)
	Psi corrigido	0,994193(55)
SA Neg	GCI	1,0020(97)
	Convergente	0,995461(89)
	Psi corrigido	0,995548(55)

FONTE: O autor (2021).

Assim como realizado para C_d e C_f ao se avaliar os resultados para o programa CFD++, pode-se realizar uma avaliação da diferença percentual dos valores analíticos,

quase-unidimensionais e experimentais em relação aos resultados computacionais obtidos com o programa Mach2D. A Tab. 17 apresenta estas diferenças para os valores extrapolados com cada estimador e também para a solução computacional para a malha mais refinada ϕ_{num} , para os quatro modelos computacionais. A maior disparidade encontrada para C_d ocorreu quando o modelo SA estava habilitado, ao se comparar ϕ_{num} ao limite superior de C_{dexp} , sendo igual a 4,378%. E a menor diferença encontrada para C_d foi de 0,0002% ao se utilizar o modelo computacional de Euler, comparando o valor de C_d multiextrapolado com MER ao valor de C_{dKL} .

TABELA 16 – RESULTADOS COMPUTACIONAIS, OBTIDOS COM O MACH2D, EXTRAPOLADOS E ACOMPANHADOS DOS ERROS ESTIMADOS PARA C_f .

Modelo computacional	Estimador de erro	Valor
Euler	GCI	1,4777(26)
	Convergente	1,475970(49)
	Psi corrigido	1,47596331(21)
Explícito	GCI	1,4728(28)
	Convergente	1,471009(49)
	Psi corrigido	1,471007620112(23)
BLM	GCI	1,4706(59)
	Convergente	1,466791(96)
	Psi corrigido	1,46685(22)
SA Neg	GCI	1,4748(59)
	Convergente	1,470932(99)
	Psi corrigido	1,46685(23)

FONTE: O autor (2021).

Para C_f , a maior diferença encontrada foi de 2,919% ao se relacionar o valor extrapolado de C_f com o estimador convergente à C_{fQ1D} utilizando o BLM.

Nas Tab. 18 à Tab. 21, além de apresentar os valores computacionais para C_f e C_d , ϕ_{num} em cada malha, são também apresentados: ordem aparente equivalente pU^* ; ϕ_{num} extrapolados com o estimador Psi corrigido ϕ_{ψ^*} , com o estimador convergente ϕ_c e extrapolações de Richardson baseadas na ordem aparente equivalente $\phi_\infty(pU^*)$ e baseados na ordem assintótica $\phi_\infty(p_o)$. Estes valores computacionais são referenciados em relação aos tamanhos característicos dos elementos de malha h_m para os quatro modelos computacionais do programa Mach2D. Já as Tab. 22 e Tab. 23 apresentam: erros estimados com os estimadores GCI U_{GCI} , convergente U_c e Psi corrigido U_{ψ^*} de C_d e C_f para os quatro modelos computacionais do programa Mach2D.

Nestas tabelas, as células preenchidas com “–” indicam que não foi possível gerar resultados para determinadas estimativas de erro ou extrapolações naquelas células, uma vez que as aplicações de determinadas técnicas demandam sucessivos resultados em malhas

diferentes, geralmente mais grossas, para gerar resultados em malhas mais refinadas. Já o termo “Não avaliado” refere-se às estimativas que não puderam ser realizadas devido a não convergência das soluções computacionais quando empregado os modelos de fechamento para as simulações com o Mach2D nas malhas 640x640. A razão de estiramento da malha (razão entre altura e largura dos volumes) foi mantida constante, propositalmente, para propiciar uma verificação de solução apropriada, por mais que houvesse convergência em malhas de até 40x2560 volumes durante testes com o modelo SA Neg.

TABELA 17 – DIFERENÇAS PERCENTUAIS ENTRE VALORES EXTRAPOLADOS PARA C_d E C_f OBTIDOS COM O MACH2D, EM RELAÇÃO ÀS SOLUÇÕES ANALÍTICAS, QUASE-UNIDIMENSIONAIS E EXPERIMENTAIS.

Modelo computacional	ϕ_{num} %	GCI %	Convergente %	Psi corrigido %
Em relação à C_{dKL}				
Euler	0,317	0,307	0,001	0,0002
Explícito	0,256	0,247	0,070	0,069
SA Neg	0,581	0,578	0,078	0,069
BLM	0,443	0,438	0,214	0,205
Em relação à C_{dHall}				
Euler	0,513	0,503	0,194	0,195
Explícito	0,452	0,443	0,125	0,126
SA Neg	0,777	0,774	0,117	0,126
BLM	0,639	0,634	0,019	0,011
Em relação ao limite inferior de C_{dexp}				
Euler	0,949	0,939	0,629	0,630
Explícito	0,888	0,879	0,560	0,561
SA Neg	1,215	1,212	0,552	0,560
BLM	1,076	1,071	0,415	0,424
Em relação ao limite superior de C_{dexp}				
Euler	4,104	4,094	3,774	3,775
Explícito	4,041	4,031	3,703	3,704
SA Neg	4,378	4,375	3,694	3,703
BLM	4,234	4,229	3,553	3,562
Em relação à C_{fQ1D}				
Euler	2,197	2,197	2,312	2,312
Explícito	2,515	2,522	2,640	2,640
SA Neg	2,389	2,389	2,645	2,915
BLM	2,663	2,667	2,919	2,915

FONTE: O autor (2021).

TABELA 18 – RESULTADOS PARA C_d , OBTIDOS COM O MACH2D: pU^* ; ϕ_{ψ^*} ; ϕ_c ; $\phi_{\infty}(pU^*)$; $\phi_{\infty}(p_o)$ E ϕ_{num} PARA OS MODELOS COMPUTACIONAIS EXPLÍCITOS.

h_m	Euler	Explícito
pU^*		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	9,76504635501689E-01	9,63494851201931E-01
6,250E-03	9,30369057759957E-01	9,26375095910600E-01
3,130E-03	9,82060201482498E-01	9,80368553564177E-01
1,560E-03	9,97454996466774E-01	9,98286667129450E-01
ϕ_{num}		
5,000E-02	1,09180737426261E+00	1,09282280303371E+00
2,500E-02	1,04507583401643E+00	1,04551919243012E+00
1,250E-02	1,02132641941513E+00	1,02126127909853E+00
6,250E-03	1,00886452934915E+00	1,00849728046662E+00
3,130E-03	1,00255561926843E+00	1,00202784466544E+00
1,560E-03	9,99395594662643E-01	9,98789282958254E-01
ϕ_{ψ^*}		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	9,98344293770250E-01	9,98215581826530E-01
1,250E-02	9,97321241828356E-01	9,96599293747076E-01
6,250E-03	9,95824033003130E-01	9,95125724349236E-01
3,130E-03	9,96247415065696E-01	9,95554059895790E-01
1,560E-03	9,96237945033487E-01	9,95556961207441E-01
ϕ_c		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	9,97180551852372E-01	9,96365376129100E-01
6,250E-03	9,95754365425844E-01	9,95028067380062E-01
3,130E-03	9,96166768333563E-01	9,95468543254359E-01
1,560E-03	9,96229980789183E-01	9,95546868298433E-01
$\phi_{\infty}(pU^*)$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	9,96784098890914E-01	9,95727386491259E-01
6,250E-03	9,95106091568517E-01	9,94322852925415E-01
3,130E-03	9,96086827479417E-01	9,95378677644459E-01
1,560E-03	9,96224391521509E-01	9,95543015345799E-01
$\phi_{\infty}(p_o)$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	9,98344293770250E-01	9,98215581826530E-01
1,250E-02	9,97577004813830E-01	9,97003365766940E-01
6,250E-03	9,96402639283170E-01	9,95733281834710E-01
3,130E-03	9,96246709187710E-01	9,95558408864260E-01
1,560E-03	9,96235570056856E-01	9,95550721251068E-01

FONTE: O autor (2021).

TABELA 19 – RESULTADOS PARA C_d , OBTIDOS COM O MACH2D: pU^* ; ϕ_{ψ^*} ; ϕ_c ; $\phi_{\infty}(pU^*)$; $\phi_{\infty}(p_o)$ E ϕ_{num} PARA OS MODELOS COMPUTACIONAIS COM MODELOS DE FECHAMENTO.

h_m	BLM	SA Neg
pU^*		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	9,58893105270354E-01	9,59033098280700E-01
6,250E-03	9,25790322892167E-01	9,25267104046396E-01
3,130E-03	9,80512547429310E-01	9,80530260846418E-01
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
ϕ_{num}		
5,000E-02	1,09109508931538E+00	1,09275079993984E+00
2,500E-02	1,04405107554724E+00	1,04556263279757E+00
1,250E-02	1,01984921350063E+00	1,02128896636367E+00
6,250E-03	1,00710954509264E+00	1,00850686588111E+00
3,130E-03	1,00065308551591E+00	1,00202898127954E+00
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
ϕ_{ψ^*}		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	9,97007061779100E-01	9,98374465655300E-01
1,250E-02	9,95194114678993E-01	9,96562244687926E-01
6,250E-03	9,93765471344745E-01	9,95113493297698E-01
3,130E-03	9,94193456769625E-01	9,95548787245154E-01
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
ϕ_c		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	9,94927026983013E-01	9,96295407843318E-01
6,250E-03	9,93659951277941E-01	9,95007032840424E-01
3,130E-03	9,94107611992262E-01	9,95461870202223E-01
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
$\phi_{\infty}(pU^*)$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	9,94206702512006E-01	9,95575515756866E-01
6,250E-03	9,92950025871232E-01	9,94289300282298E-01
3,130E-03	9,94018598045343E-01	9,95372643726475E-01
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
$\phi_{\infty}(p_o)$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	9,97007061779100E-01	9,98374465655300E-01
1,250E-02	9,95647351454020E-01	9,97015299929770E-01
6,250E-03	9,94369876684650E-01	9,95724765398550E-01
3,130E-03	9,94196625939180E-01	9,95551096677970E-01
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado

FONTE: O autor (2021).

TABELA 20 – RESULTADOS PARA C_f , OBTIDOS COM O MACH2D: pU^* ; ϕ_{ψ^*} ; ϕ_c ; $\phi_\infty(pU^*)$; $\phi_\infty(p_o)$ E ϕ_{num} PARA OS MODELOS COMPUTACIONAIS EXPLÍCITOS.

h_m	Euler	Explícito
pU^*		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	1,17233341153703E+00	1,08294740593762E+00
6,250E-03	1,00266006131523E+00	9,76801091472568E-01
3,130E-03	1,04439575484027E+00	1,03644382117295E+00
1,560E-03	1,03530527588331E+00	1,03897469197277E+00
ϕ_{num}		
5,000E-02	1,53958181884345E+00	1,53662601619183E+00
2,500E-02	1,50567471810037E+00	1,50282420340988E+00
1,250E-02	1,49063003186155E+00	1,48686760411537E+00
6,250E-03	1,48312154576489E+00	1,47875997430668E+00
3,130E-03	1,47948107178437E+00	1,47480727996754E+00
1,560E-03	1,47770483856244E+00	1,47288360946877E+00
ϕ_{ψ^*}		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	1,47176761735729E+00	1,46902239062793E+00
1,250E-02	1,47685792171121E+00	1,47154054288517E+00
6,250E-03	1,47544577996513E+00	1,47042692174825E+00
3,130E-03	1,47599264371418E+00	1,47100923307475E+00
1,560E-03	1,47596331310535E+00	1,47100762011239E+00
ϕ_c		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	1,47710785812731E+00	1,47175537297369E+00
6,250E-03	1,47562686573239E+00	1,47051875230173E+00
3,130E-03	1,47594767433792E+00	1,47095078415870E+00
1,560E-03	1,47597053176811E+00	1,47100988050128E+00
$\phi_\infty(pU^*)$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	1,47863037063189E+00	1,47259974112652E+00
6,250E-03	1,47564067179654E+00	1,47038516010546E+00
3,130E-03	1,47605475087200E+00	1,47104698268900E+00
1,560E-03	1,47601245819571E+00	1,47105982203256E+00
$\phi_\infty(p_o)$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	1,47176761735729E+00	1,46902239062793E+00
1,250E-02	1,47558534562273E+00	1,47091100482086E+00
6,250E-03	1,47561305966823E+00	1,47065234449799E+00
3,130E-03	1,47584059780385E+00	1,47085458562840E+00
1,560E-03	1,47592860534051E+00	1,47095993897000E+00

FONTE: O autor (2021).

TABELA 21 – RESULTADOS PARA C_f , OBTIDOS COM O MACH2D: pU^* ; ϕ_{ψ^*} ; ϕ_c ; $\phi_{\infty}(pU^*)$; $\phi_{\infty}(p_o)$ E ϕ_{num} PARA OS MODELOS COMPUTACIONAIS COM MODELOS DE FECHAMENTO.

h_m	BLM	SA Neg
pU^*		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	1,07315853914891E+00	1,07628082599165E+00
6,250E-03	9,75704253329119E-01	9,75912977371732E-01
3,130E-03	1,03618744388380E+00	1,03747575247942E+00
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
ϕ_{num}		
5,000E-02	1,53252608603739E+00	1,53669217826235E+00
2,500E-02	1,49881240243872E+00	1,50292382205261E+00
1,250E-02	1,48278905328223E+00	1,48690918472302E+00
6,250E-03	1,47464131539816E+00	1,47876705478937E+00
3,130E-03	1,47066836130036E+00	1,47480037898263E+00
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
ϕ_{ψ^*}		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	1,46509871884005E+00	1,46509871884005E+00
1,250E-02	1,46732136588763E+00	1,46732136588763E+00
6,250E-03	1,46627165475152E+00	1,46627165475152E+00
3,130E-03	1,46685024800392E+00	1,46685024800392E+00
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
ϕ_c		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	1,46752065557560E+00	1,47167891151756E+00
6,250E-03	1,46635281280223E+00	1,47048549648654E+00
3,130E-03	1,46679144332430E+00	1,47093287273762E+00
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
$\phi_{\infty}(pU^*)$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	1,46827560702547E+00	1,47246327564168E+00
6,250E-03	1,46621204809036E+00	1,47034606811737E+00
3,130E-03	1,46688747944604E+00	1,47103204229935E+00
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
$\phi_{\infty}(p_o)$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	1,46509871884005E+00	1,46915546584287E+00
1,250E-02	1,46676570412574E+00	1,47089454739343E+00
6,250E-03	1,46649357751409E+00	1,47062492485572E+00
3,130E-03	1,46669540720256E+00	1,47083370317589E+00
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado

FONTE: O autor (2021).

TABELA 22 – ERROS ESTIMADOS PARA C_d E C_f , OBTIDOS COM O MACH2D: U_{gci} ; U_c E U_{ψ^*} PARA OS MODELOS COMPUTACIONAIS EXPLÍCITOS.

h_m	Euler	Explícito
$U_{gci} C_d$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	7,00973103692701E-02	7,09554159053850E-02
1,250E-02	3,56241219019500E-02	3,63868699973848E-02
6,250E-03	1,86928350989698E-02	1,91459979478652E-02
3,130E-03	9,46336512108015E-03	9,70415370176980E-03
1,560E-03	4,74003690868036E-03	4,85784256077909E-03
$U_c C_d$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	3,96452961457738E-04	6,37989637840508E-04
6,250E-03	6,48273857326465E-04	7,05214454647551E-04
3,130E-03	7,99408541465874E-05	8,98656099008188E-05
1,560E-03	5,58926767341150E-06	3,85295263444219E-06
$U_{\psi^*} C_d$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	1,02305200000000E-03	1,61628800000000E-03
1,250E-02	3,96453000000000E-04	1,66881600000000E-02
6,250E-03	3,30050200000000E-04	3,31868400000000E-04
3,130E-03	9,26284500000000E-06	2,92109800000000E-06
1,560E-03	1,67252100000000E-08	4,57860200000000E-10
$U_{gci} C_f$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	5,08606511146200E-02	5,07027191729249E-02
1,250E-02	2,25670293582301E-02	2,39348989417651E-02
6,250E-03	1,12627291449898E-02	1,21614447130349E-02
3,130E-03	5,46071097078005E-03	5,92904150870988E-03
1,560E-03	2,66434983289499E-03	2,88550574815494E-03
$U_c C_f$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	1,52251250458013E-03	8,44368152830288E-04
6,250E-03	1,38060641566851E-05	1,33592196263077E-04
3,130E-03	1,07076534073380E-04	9,61985302987411E-05
1,560E-03	4,19264276021458E-05	4,99415312797957E-05
$U_{\psi^*} C_f$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	5,09030400000000E-03	2,51815200000000E-03
1,250E-02	1,10546600000000E-03	7,72148300000000E-04
6,250E-03	3,94204700000000E-04	3,82370300000000E-04
3,130E-03	2,78375600000000E-05	1,60850700000000E-06
1,560E-03	2,16266900000000E-07	2,36667200000000E-11

FONTE: O autor (2021).

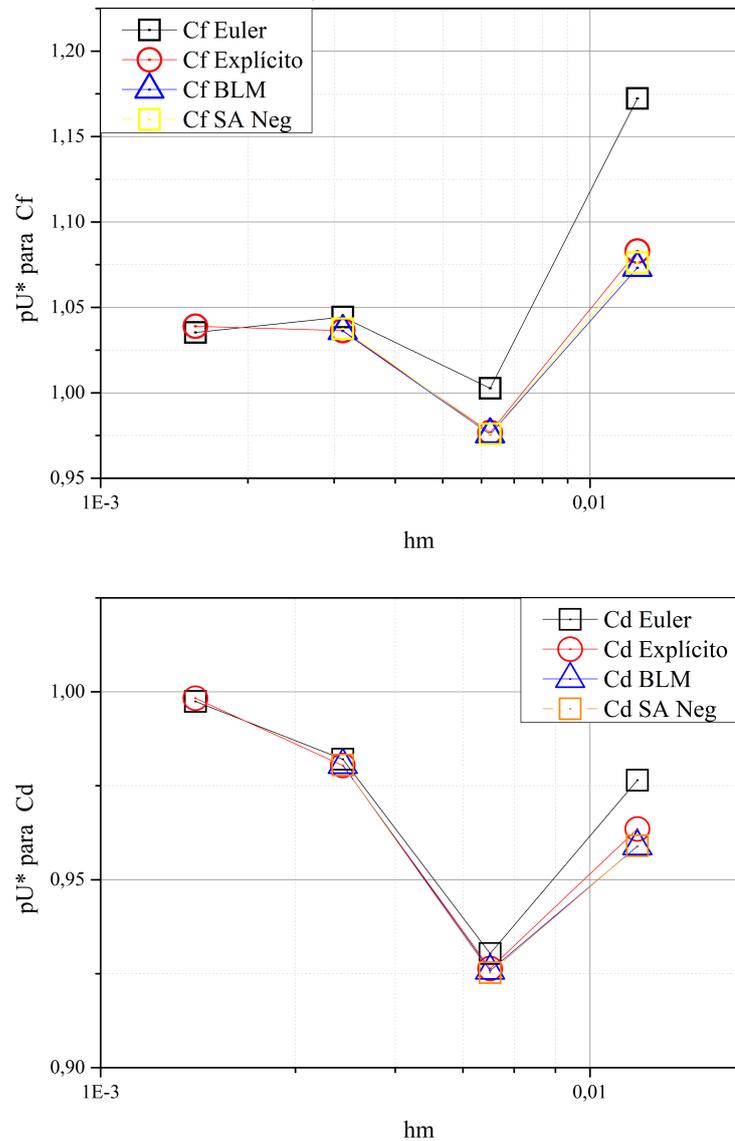
TABELA 23 – ERROS ESTIMADOS PARA C_d E C_f , OBTIDOS COM O MACH2D: U_{gci} ; U_c E U_{ψ^*} PARA OS MODELOS COMPUTACIONAIS COM MODELOS DE FECHAMENTO.

h_m	BLM	SA Neg
$U_{gci} C_d$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	7,05660206522097E-02	7,07822507134050E-02
1,250E-02	3,63027930699150E-02	3,64104996508501E-02
6,250E-03	1,91095026119852E-02	1,91731507238398E-02
3,130E-03	9,68468936509503E-03	9,71682690235509E-03
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
$U_c C_d$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	7,20324471006950E-04	7,19892086451956E-04
6,250E-03	7,09925406709055E-04	7,17732558126238E-04
3,130E-03	8,90139469182927E-05	8,92264757472172E-05
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
$U_{\psi^*} C_d$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	1,81294700000000E-03	1,81222100000000E-03
1,250E-02	6,73960300000000E-03	7,22332200000000E-03
6,250E-03	3,29327300000000E-04	3,34722700000000E-04
3,130E-03	5,50061400000000E-05	5,54137700000000E-05
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
$U_{gci} C_f$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	5,05705253980050E-02	5,06525343146099E-02
1,250E-02	2,40350237347348E-02	2,40219559943849E-02
6,250E-03	1,22216068261053E-02	1,22131949004749E-02
3,130E-03	5,95943114669995E-03	5,95001371011006E-03
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
$U_c C_f$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	-	-
1,250E-02	7,54951449862373E-04	7,84364124125525E-04
6,250E-03	1,40764711862640E-04	1,39428369175354E-04
3,130E-03	9,60361217391403E-05	9,91695617312827E-05
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado
$U_{\psi^*} C_f$		
5,000E-02	-	-
2,500E-02	2,22264700000000E-03	2,32244100000000E-03
1,250E-02	7,12983500000000E-04	7,33721200000000E-04
6,250E-03	3,72998900000000E-04	3,81566400000000E-04
3,130E-03	2,26499100000000E-04	2,34780700000000E-04
1,560E-03	Não Avaliado	Não Avaliado

FONTE: O autor (2021).

Na Fig. 15 são apresentadas as ordens aparente convergentes para C_f e C_d obtidas com o Mach2D. Pode-se perceber que para C_f , pU^* tende à ordem assintótica p_o através de valores onde $pU^* > p_o$ conforme $h_m \rightarrow 0$, já para C_d a convergência ocorre para valores de $pU^* < p_o$ conforme $h_m \rightarrow 0$. Isso indica que estas curvas caracterizam comportamentos superconvergente e subconvergente, respectivamente. Quanto mais próximas as curvas de pU^* estiverem de p_o , mais acuradas são as estimativas de erro. Como os modelos computacionais aproximam as derivadas com CDS-2 ($p_o = 2$) e as propriedades nas faces são calculadas com UDS ($p_o = 1$) nos termos advectivos, a ordem assintótica que espera-se obter é a de menor valor entre UDS e CDS-2, pois quando duas aproximações computacionais de ordens diferentes estão presentes na mesma equação espera-se que haja uma degeneração da maior ordem para a menor, ou seja, a p_o esperada passa a ser igual à unidade.

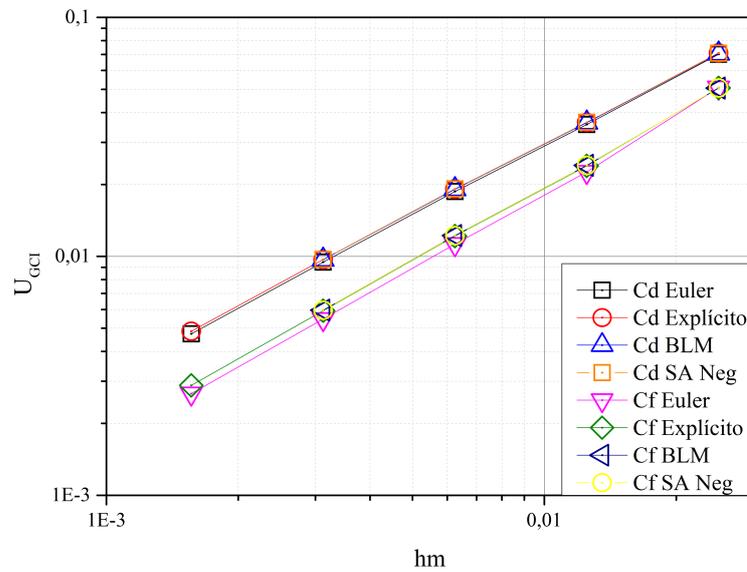
FIGURA 15 – pU^* PARA C_f E C_d OBTIDOS COM O MACH2D.



FONTE: O autor (2021).

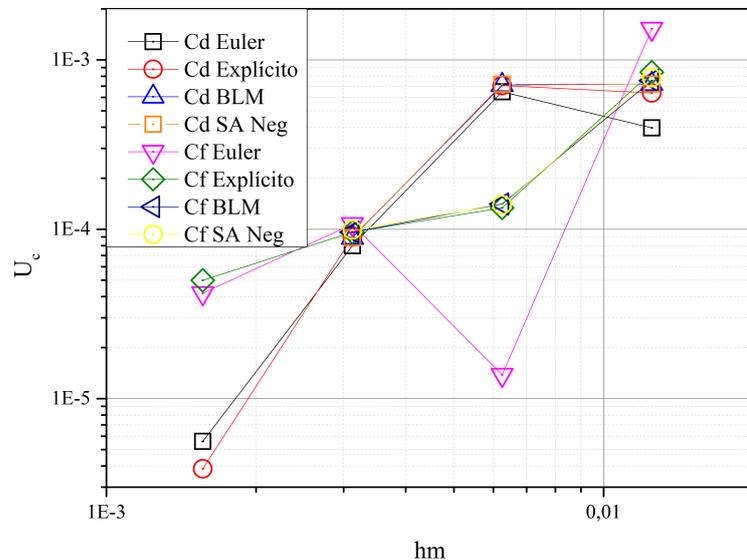
O fato de pU^* não ser igual à p_o reforça que a equação do erro não é composta por apenas um único termo, por mais que a tendência à ordem assintótica demonstre predominância da primeira componente da equação do erro quando expandida com a série de Taylor, que é uma forma alternativa de representação da Eq. 3.100. As estimativas de erro e incertezas computacionais são fornecidas em forma gráfica, apresentando U_{GCI} , U_c e U_{ψ^*} através das Fig. 16, Fig. 17 e Fig. 18, respectivamente.

FIGURA 16 – U_{GCI} DE C_d E C_f PARA OS QUATRO MODELOS COMPUTACIONAIS DO MACH2D EM RELAÇÃO À h_m .



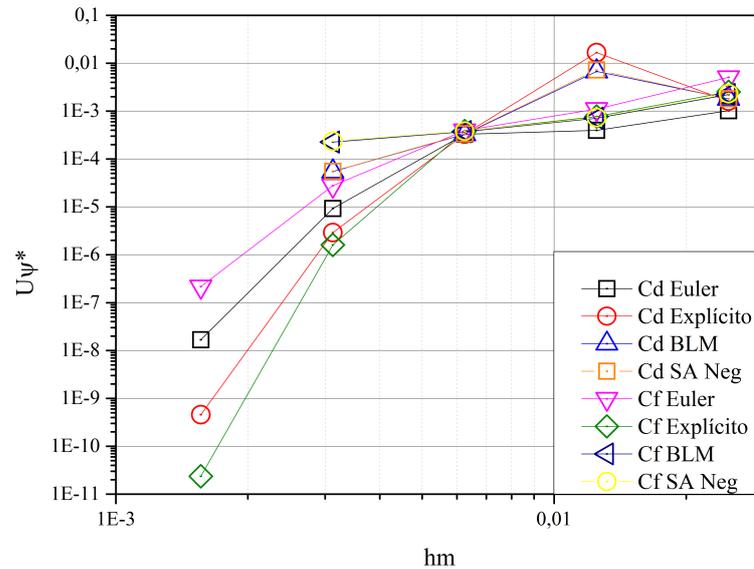
FONTE: O autor (2021).

FIGURA 17 – U_c DE C_d E C_f PARA OS QUATRO MODELOS COMPUTACIONAIS DO MACH2D EM RELAÇÃO À h_m .



FONTE: O autor (2021).

FIGURA 18 – U_{ψ^*} DE C_d E C_f PARA OS QUATRO MODELOS COMPUTACIONAIS DO MACH2D EM RELAÇÃO À h_m .



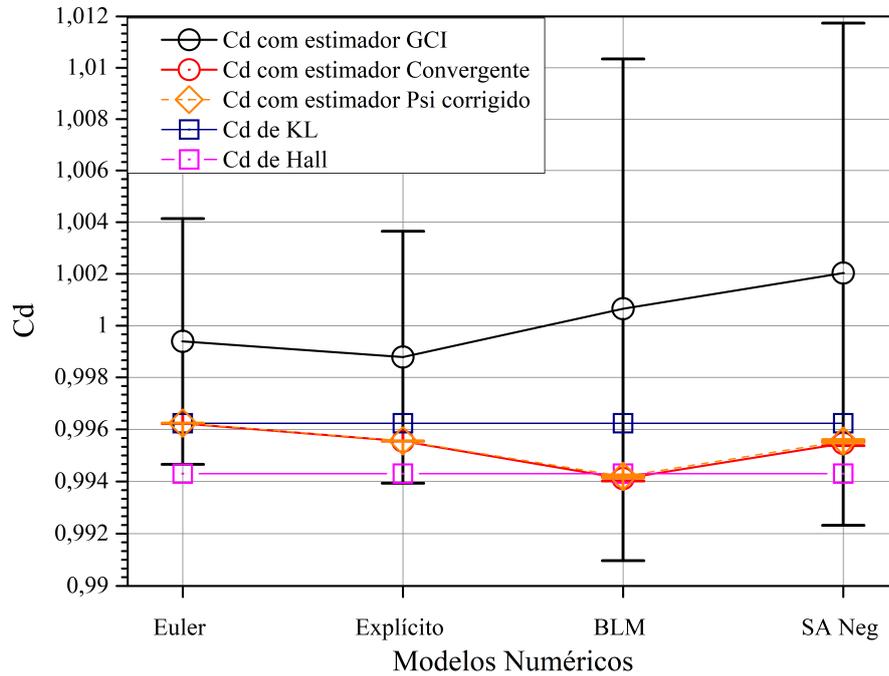
FONTE: O autor (2021).

Pode-se perceber o aumento da ordem da estimativa devido à inclinação das curvas conforme $h_m \rightarrow 0$ para U_{ψ^*} . Para U_c o mesmo comportamento ocorre para os valores de C_d , mas não para C_f . Já para U_{GCI} não há variação de ordem, ela permanece constante e igual à unidade.

A visualização dos valores de C_d e C_f extrapolados e com suas bandas de incerteza inclusas pode ser fornecida de forma gráfica através da Fig. 19 e Fig. 20, respectivamente. Além dos resultados computacionais, nestas figuras também foram adicionados os valores do C_{dKL} , C_{dHall} e C_{fQ1D} . As diferenças percentuais para C_d e C_f em relação às soluções analíticas foram apresentadas na Tab. 17.

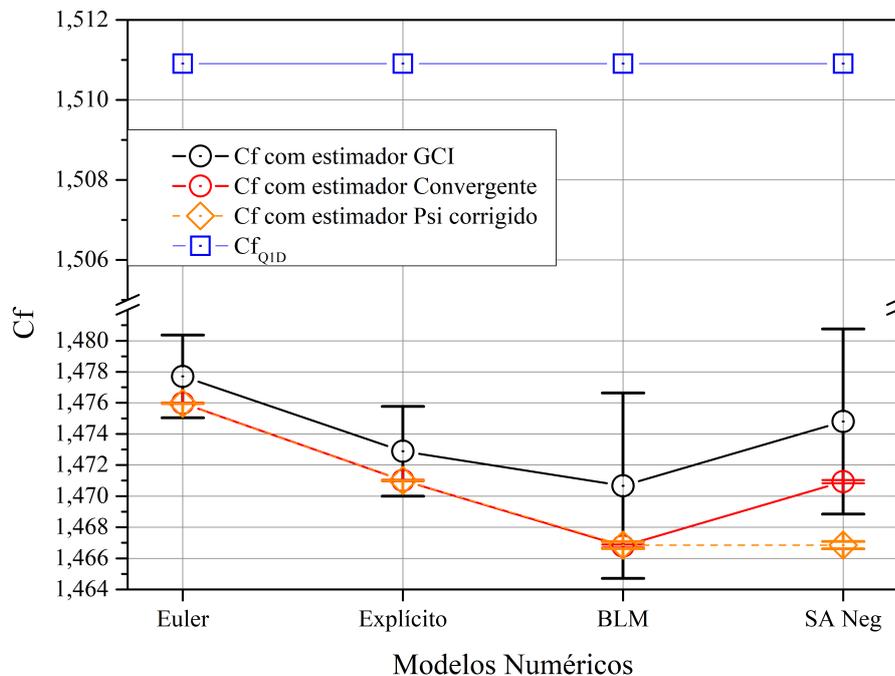
Os valores de C_d calculados analiticamente permaneceram envoltos pela incerteza do estimador GCI, exceto para C_d obtido com o modelo computacional de Euler, comparado com o C_d de Hall. Os valores extrapolados com o estimador convergente e Psi corrigido mostraram-se praticamente idênticos para os quatro modelos computacionais e tendendo ao C_d de Hall até o BLM. Para o modelo SA Neg, retornam à semelhança com o modelo explícito e seus valores ficam mais próximos às soluções de C_d de Kliegel e Levine. Já o C_d para as malhas mais refinadas, sem extrapolações, ficaram mais próximas às soluções analíticas para o modelo explícito e mais distantes para Euler, BLM e SA Neg. Para C_f , a solução quase-unidimensional não chegou a ser envolta pelas maiores estimativas de erro. Os valores extrapolados com o estimador convergente e com o estimador Psi corrigido ficaram coerentes entre si até o BLM, para o SA Neg houve distinção, tanto que foi a única extrapolação que ficou fora faixa de incerteza do estimador GCI.

FIGURA 19 – ERROS ESTIMADOS E VALORES EXTRAPOLADOS PARA C_d OBTIDOS COM O MACH2D.



FONTE: O autor (2021).

FIGURA 20 – ERROS ESTIMADOS E VALORES EXTRAPOLADOS PARA C_f OBTIDOS COM O MACH2D.

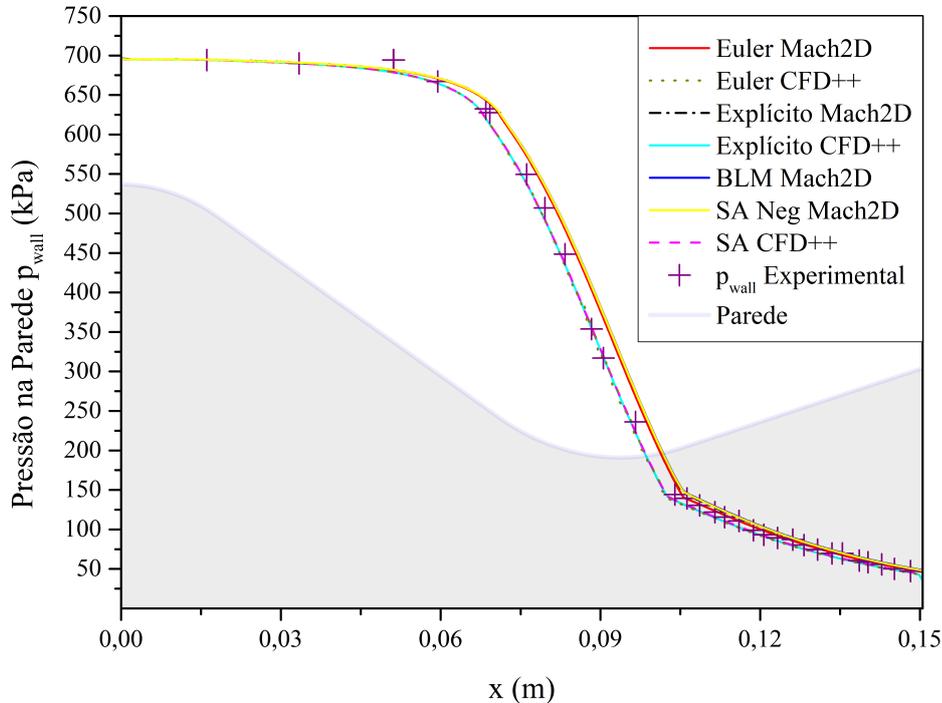


FONTE: O autor (2021).

5.2 Resultados para p_{wall} e T_{wall}

Além dos parâmetros globais de eficiência avaliados na seção anterior, as distribuições de temperatura e pressão na superfície interna da tubeira também são parâmetros de interesse. Na Fig. 21 são apresentadas as distribuições computacionais de pressão nas proximidades das paredes que foram obtidas pelo Mach2D e pelo CFD++, assim como as pressões experimentais tabuladas no Anexo A. Na Fig. 22, os valores computacionais para a pressão são apresentados de forma adimensionalizada em relação à pressão de estagnação. A distribuição computacional de pressão foi então interpolada entre os volumes vizinhos às posições axiais das tomadas de pressão experimental, para fornecer uma sobreposição de valores obtidos pelas diferentes abordagens. Experimentalmente, os autores Back, Massier e Gier (1965b) descrevem que não foi possível obter uma aferição válida para a décima sexta tomada de pressão, porém, para a impressão dos gráficos foi considerado um valor mediano entre as duas tomadas vizinhas apenas para critérios de comparação, evidenciando assim a posição da referente tomada de pressão às tomadas vizinhas.

FIGURA 21 – DISTRIBUIÇÕES DE p_{wall} UTILIZANDO MODELOS COMPUTACIONAIS VISCOSOS E INVÍSCIDOS, OBTIDAS COM O MACH2D E CFD++ ACOMPANHADAS DA DISTRIBUIÇÃO DE PRESSÃO EXPERIMENTAL.

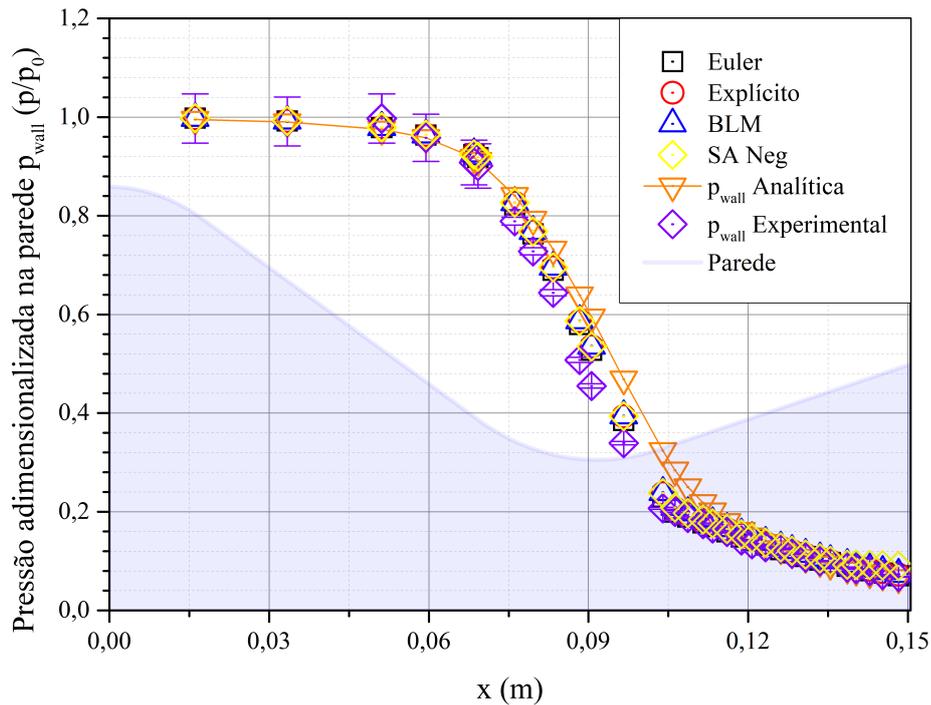


FONTE: O autor (2021).

A Fig. 22 assemelha-se à Fig. 21, porém omitindo resultados com o CFD++. Pode-se perceber que as distribuições computacionais de pressão permaneceram mais próximas às experimentais quando comparadas com a distribuição analítica, calculada

para escoamento isentrópico, chamada de p_{wall} Analítica nestas figuras. Para se avaliar um número reduzido de pontos por vez, a Fig. 23 divide a quantidade total de tomadas de pressão em oito seções. Uma vez que, em especial para a região de menor pressão, as linhas e pontos não facilitam a visualização.

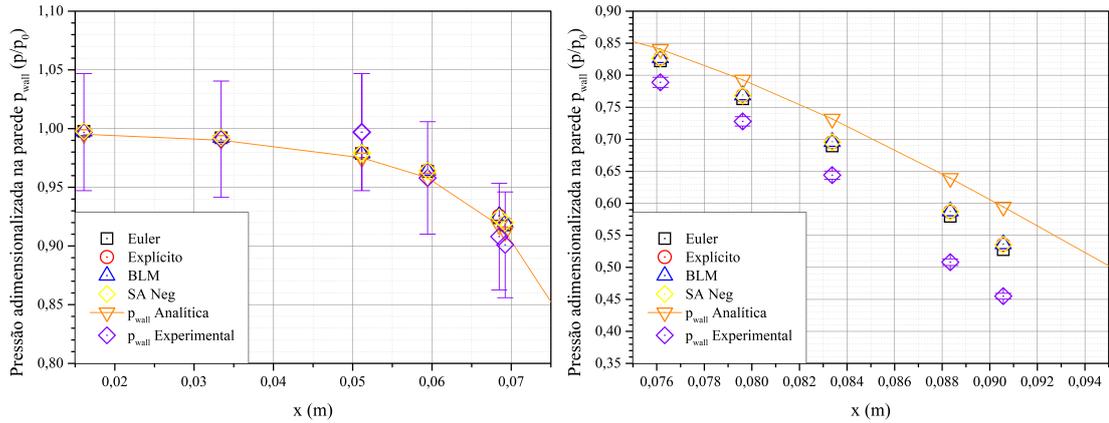
FIGURA 22 – DISTRIBUIÇÕES COMPUTACIONAIS DE p_{wall} OBTIDAS COM O MACH2D, ASSOCIADAS À DISTRIBUIÇÃO DE PRESSÃO ANALÍTICA E EXPERIMENTAL COM A BANDA DE INCERTEZA.



FONTE: O autor (2021).

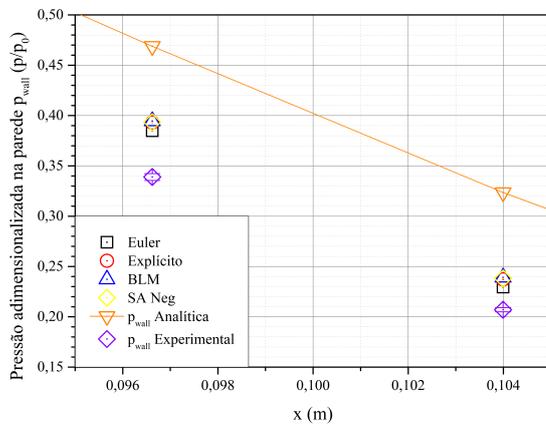
Pode-se notar que apenas nas primeiras seis tomadas de pressão, todas as pressões computacionais ficaram envoltas pela incerteza experimental fornecida no artigo original. Isso se deve por conta dos 5% de incerteza na leitura. Nos demais pontos, essa incerteza é de 1%, conforme previamente descrito. Em geral, as estimativas computacionais de pressão permaneceram entre a analítica e experimental, com exceção de alguns pontos no início da região convergente e ao fim da seção divergente. Os valores computacionais, para os quatro modelos, que mais se afastaram do valor experimental ocorreu para a décima segunda tomada de pressão (50,493 kPa para Euler, 55,800 kPa para explícito, 56,545 kPa para BLM e 55,890 kPa para SA Neg), já em relação à pressão analítica, isto ocorreu para a décima quarta posição (65,479 kPa para Euler, 60,229 kPa para explícito, 58,759 kPa para BLM e 59,546 kPa para SA Neg). A diferença percentual entre valores computacionais e analíticos em relação aos resultados experimentais constam nas Tab. 24 e Tab. 25.

FIGURA 23 – DISTRIBUIÇÕES COMPUTACIONAIS E EXPERIMENTAIS DE p_{wall} .

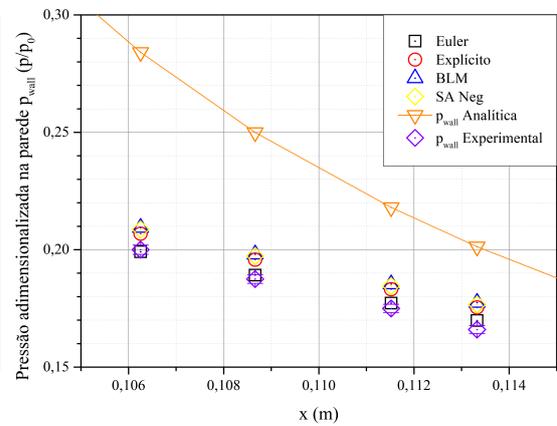


(a) 1° a 6° tomada de pressão.

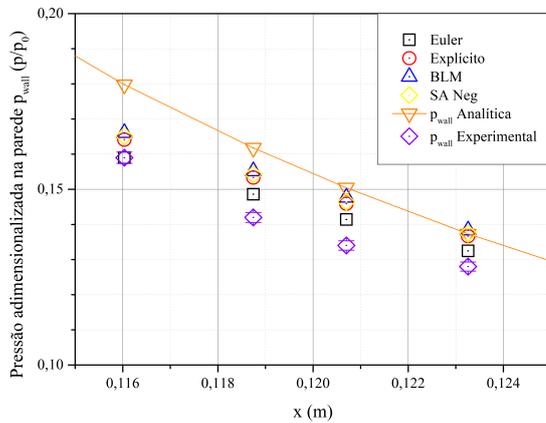
(b) 7° a 11° tomada de pressão.



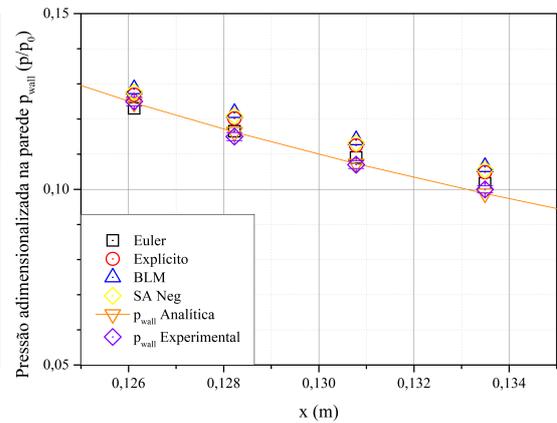
(c) 12° e 13° tomada de pressão.



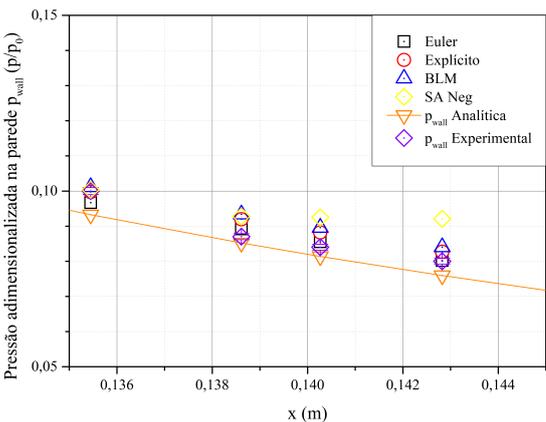
(d) 14° a 17° tomada de pressão.



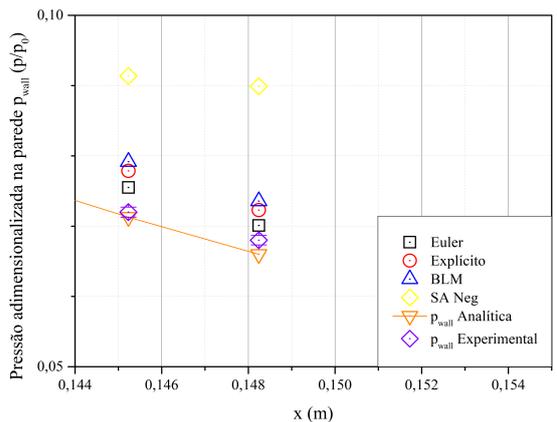
(e) 18° a 21° tomada de pressão.



(f) 22° a 25° tomada de pressão.



(g) 26° a 29° tomada de pressão.

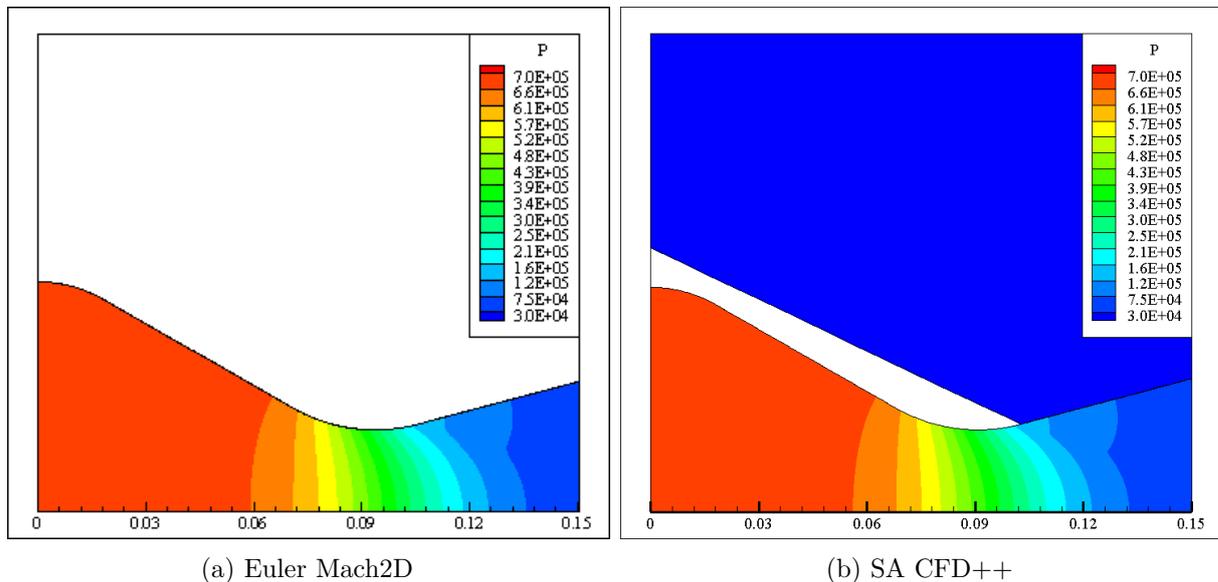


(h) 30° e 31° tomada de pressão.

É perceptível que, de forma geral, nos resultados com os quatro modelos computacionais para o Mach2D a região da garganta apresenta maior desvio percentual entre os valores computacionais de p_{wall} em relação aos de p_{wall} experimentais quando comparados às demais regiões, em especial para as tomadas 11 a 14. A maior diferença entre valores computacionais e experimentais ocorreu para a distribuição de pressão analítica na décima quarta tomada de pressão, com 56,313%. O maior desvio para as distribuições computacionais de p_{wall} para o modelo de Euler, explícito, BLM e SA foram de 15,936%, 17,611%, 17,846% e 32,215%, respectivamente.

Ao se avaliar o desvio percentual médio de p_{wall} , pode-se notar que para o Mach2D, o modelo de Euler apresentou um menor desvio de p_{wall} em relação aos demais modelos computacionais quando comparados aos resultados experimentais, sendo igual a 3,712%. Para o CFD++ este menor desvio percentual médio ocorreu ao se utilizar o modelo SA, sendo igual a 3,276%. Portanto, os campos de distribuição de pressão destes dois modelos computacionais podem ser mostrados por meio da Fig. 24, como sendo os campos de pressão, obtidos computacionalmente, que apresentaram maior proximidade com a distribuição experimental de p_{wall} . Estas mesmas figuras constam no Apêndice C, sendo Fig. C.1a e Fig. C.3b.

FIGURA 24 – CAMPOS DE PRESSÃO [KPA] QUE APRESENTARAM MENORES DESVIOS PERCENTUAIS MÉDIOS DE p_{wall} EM RELAÇÃO AOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS TANTO COM O MACH2D QUANTO COM O CFD++.



FONTE: O autor (2021).

A distribuição de temperatura na superfície interna da tubeira, ou seja, temperatura do gás quente, da mesma forma que realizado para a pressão, também pode ser fornecida. A Fig. 25 proporciona uma visão geral dos valores computacionais e ex-

TABELA 24 – DIFERENÇAS PERCENTUAIS ENTRE OS VALORES COMPUTACIONAIS, CALCULADOS EXPLICITAMENTE PARA p_{wall} , OBTIDOS COM O MACH2D E CFD++, EM RELAÇÃO AOS VALORES EXPERIMENTAIS DE PRESSÃO.

Tomada	Euler Mach2D	Euler CFD++	Explícito Mach2D	Explícito CFD++
1	0,073	0,039	0,076	0,029
2	0,122	0,002	0,138	0,304
3	1,824	2,255	1,780	2,263
4	1,834	2,264	1,790	2,271
5	0,574	0,368	0,653	0,372
6	1,761	1,507	1,936	1,432
7	1,882	2,557	2,072	2,373
8	4,226	2,147	4,716	2,211
9	4,835	3,371	5,501	3,110
10	7,054	2,826	7,976	2,971
11	14,110	1,726	15,520	0,364
12	15,936	0,598	17,611	0,400
13	13,546	7,176	15,960	6,094
14	10,888	6,301	14,531	5,355
15	0,439	7,492	3,418	6,772
16	-	-	-	-
17	1,297	6,426	4,659	5,788
18	2,319	5,656	5,664	5,027
19	0,006	7,878	3,226	7,261
20	4,657	3,644	7,992	2,986
21	5,543	2,881	8,888	2,203
22	3,488	4,970	6,751	4,284
23	1,556	9,392	1,534	8,714
24	1,331	6,637	4,504	6,913
25	1,932	6,312	5,119	5,582
26	1,702	6,542	4,878	5,807
27	3,287	6,542	0,269	5,807
28	2,537	6,191	5,738	5,388
29	1,827	6,521	5,007	5,661
30	0,241	8,128	3,375	7,199
31	4,877	3,622	8,161	2,564
32	3,089	5,161	6,326	4,081

FONTE: O autor (2021).

perimentais para T_{wall} . Para a distribuição de T_{wall} com o modelo de Euler, ocorreram perturbações causadas pela geração de malha que afetaram em especial a região transônica nas proximidades da garganta. Porém, estas irregularidades não apareceram para a pressão.

As simulações que consideraram os modelos computacionais viscosos forneceram grandezas maiores para T_{wall} quando comparado às de Euler. Isso já era esperado, fisicamente falando, uma vez que há mudança de condição de contorno nesta região e com a

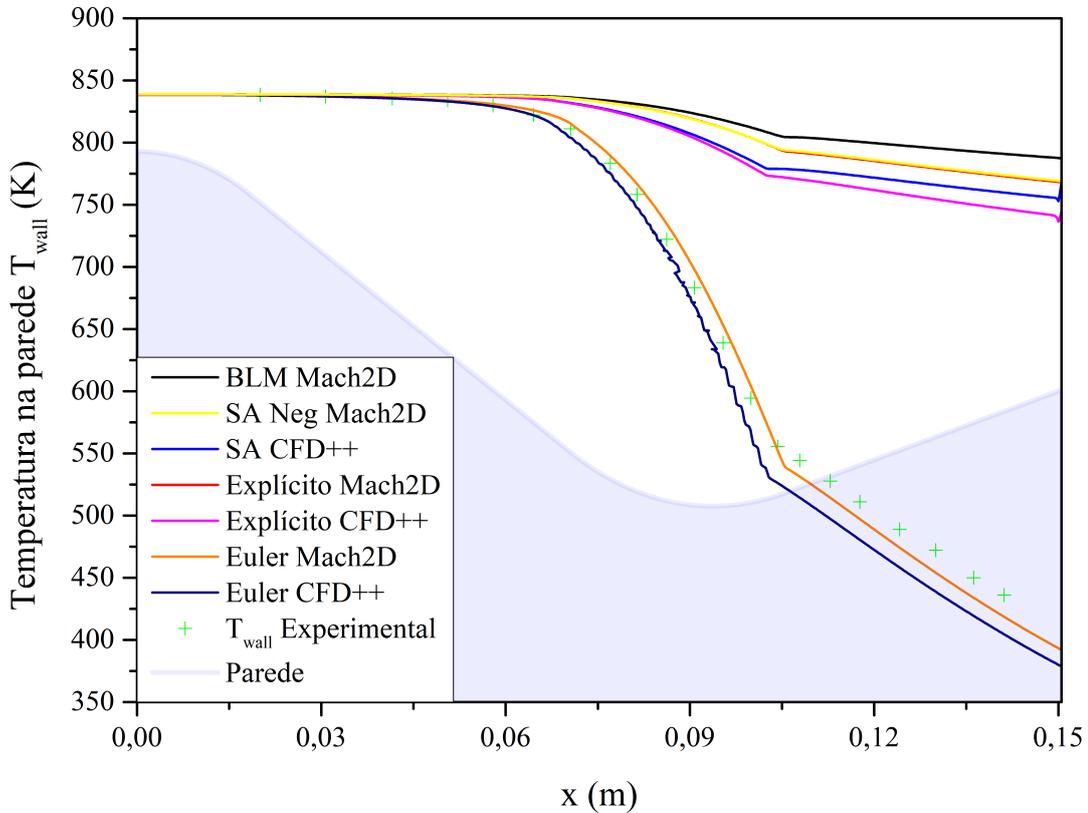
TABELA 25 – DIFERENÇAS PERCENTUAIS ENTRE OS VALORES COMPUTACIONAIS, CALCULADOS COM MODELOS DE FECHAMENTO, E ANALÍTICOS PARA p_{wall} , OBTIDOS COM O MACH2D E CFD++, EM RELAÇÃO AOS VALORES EXPERIMENTAIS DE PRESSÃO.

Tomada	BLM Mach2D	SA Neg Mach2D	SA CFD++	Analítico
1	0,077	0,076	0,030	0,182
2	0,139	0,137	0,305	0,090
3	1,782	1,784	2,257	2,181
4	1,792	1,793	2,265	2,192
5	0,652	0,650	0,362	0,016
6	1,965	1,807	1,407	1,042
7	2,108	2,104	2,332	1,222
8	4,817	4,764	2,121	6,546
9	5,606	5,534	2,992	8,894
10	8,102	8,001	2,810	13,630
11	15,699	15,533	0,609	25,832
12	17,846	17,639	0,692	30,654
13	16,384	16,067	5,658	38,292
14	15,551	15,006	4,941	56,313
15	4,713	4,320	6,210	42,038
16	-	-	-	-
17	5,899	5,417	5,113	24,580
18	6,911	6,389	4,316	21,237
19	4,444	3,886	6,534	13,069
20	9,280	8,654	2,192	13,934
21	10,202	9,299	1,379	12,258
22	8,067	7,381	3,445	7,275
23	2,824	2,134	7,881	0,333
24	5,870	5,131	5,316	1,122
25	6,541	5,764	4,658	0,278
26	6,354	5,544	4,849	1,194
27	1,176	0,382	4,849	6,737
28	7,343	6,619	4,349	2,059
29	6,645	10,154	4,605	3,117
30	5,050	15,126	6,122	5,061
31	9,977	26,894	1,399	1,000
32	8,189	32,215	2,844	2,954

FONTE: O autor (2021).

viscosidade atuante, parte da energia cinética do escoamento é transferida por ação da tensão de cisalhamento à energia interna, resultando assim no aumento de temperatura nesta região. A distribuição de temperatura experimental na parede aproxima-se muito mais das encontradas pelos modelos de Euler, tanto para simulações com o Mach2D quanto para o CFD++. Este é um detalhe interessante, pois esperava-se que a aplicação de modelos computacionais mais realistas representaria mais fielmente tal distribuição. Vale

FIGURA 25 – DISTRIBUIÇÃO DE T_{wall} UTILIZANDO MODELOS COMPUTACIONAIS VISCOSOS E INVÍSCIDOS COM O MACH2D E CFD++.

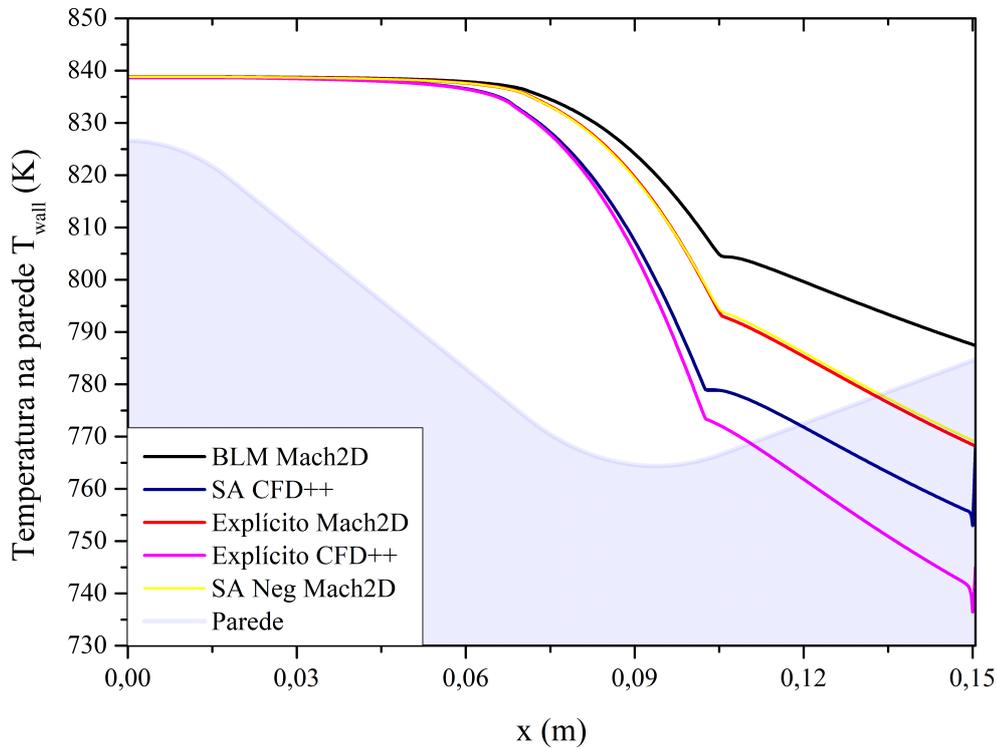


FONTE: O autor (2021).

ressaltar que cada tomada de temperatura aferia dois valores, um era para a temperatura do gás quente e outra mais interna à parede sólida. A T_{wall} Experimental mostrada no gráfico refere-se à distribuição de temperatura experimental do gás quente. A máxima temperatura, mais interna à parede, aferida para o teste 317 foi cerca de 537,78 K e para o gás quente, a própria temperatura de estagnação.

A Fig. 26 apresenta em maiores detalhes as curvas de T_{wall} nesta região. Dentre os modelos computacionais viscosos, o BLM do Mach2D previu a maior distribuição de T_{wall} , o que de certa forma, já era esperado, visto que há aumento na viscosidade dinâmica por conta do acréscimo de μ_t à μ . Esse aumento de temperatura passa a ser perceptível no início da região transônica e se estende até o fim da região supersônica da tubeira. A maior disparidade encontrada entre T_{wall} calculada com o BLM e explícito pelo Mach2D foi de 20,33 K. O mesmo, teoricamente, deveria acontecer para o SA Neg, assim como aconteceu com o CFD++ ao avaliar o aumento de temperatura entre T_{wall} com o modelo SA e explícito. Porém, devido ao comportamento computacional descrito no início do presente capítulo, seus valores permaneceram semelhantes aos do modelo explícito. Por mais que os valores estejam muito próximos, pode-se perceber que a curva para o SA Neg ultrapassa a curva de T_{wall} explícito ao início da seção divergente.

FIGURA 26 – DISTRIBUIÇÃO DE T_{wall} UTILIZANDO MODELOS COMPUTACIONAIS VISCOSOS COM O MACH2D E CFD++.



FONTE: O autor (2021).

Para os resultados com o programa CFD++, pode-se perceber que também nas proximidades da região transônica começa a disparidade de temperaturas, com o modelo SA apresentando um aumento crescente até o fim do divergente de até 23,17 K para T_{wall} no vale de temperatura e de 16,55 K imediatamente antes, ao comparar a solução explícita com a solução com modelo SA. A queda repentina de T_{wall} para os últimos volumes na saída da tubeira ocorre devido a um descolamento do escoamento. Como para as simulações viscosas com o CFD++ foi necessário considerar a condição de contorno de saída aplicada em uma superfície maior, o jato também foi simulado e para estas duas simulações, a pressão fora da tubeira não foi pequena o suficiente para garantir expansão ótima do escoamento. Porém, este detalhe acaba não afetando a distribuição de T_{wall} nas proximidades da última tomada de temperatura experimental, visto que a mudança da inclinação da curva ocorre após tal posição.

Assim como efetuado para a pressão, uma avaliação do desvio para cada tomada de temperatura também pode ser realizada. Porém, como apenas as distribuições de T_{wall} obtidas com os modelos de Euler ficaram mais próximas aos valores experimentais, esta avaliação é restrita a estes modelos computacionais. Os valores tabulados para estas diferenças são apresentados por meio da Tab. 26.

TABELA 26 – DIFERENÇAS PERCENTUAIS PARA T_{wall} , OBTIDOS COM O CFD++ E MACH2D, EM RELAÇÃO AOS VALORES EXPERIMENTAIS.

Tomada	Euler CFD++	Euler Mach2D
1	0,040	0,027
2	0,011	0,011
3	0,005	0,053
4	0,090	0,014
5	0,092	0,123
6	0,033	0,451
7	0,875	0,509
8	1,030	0,778
9	1,412	1,092
10	1,301	1,723
11	1,737	2,132
12	3,079	2,227
13	4,571	2,794
14	3,106	0,539
15	5,525	2,400
16	5,755	2,561
17	6,025	2,738
18	6,275	3,003
19	7,041	3,838
20	7,041	3,838
21	6,809	3,568
22	7,274	4,014

FONTE: O autor (2021).

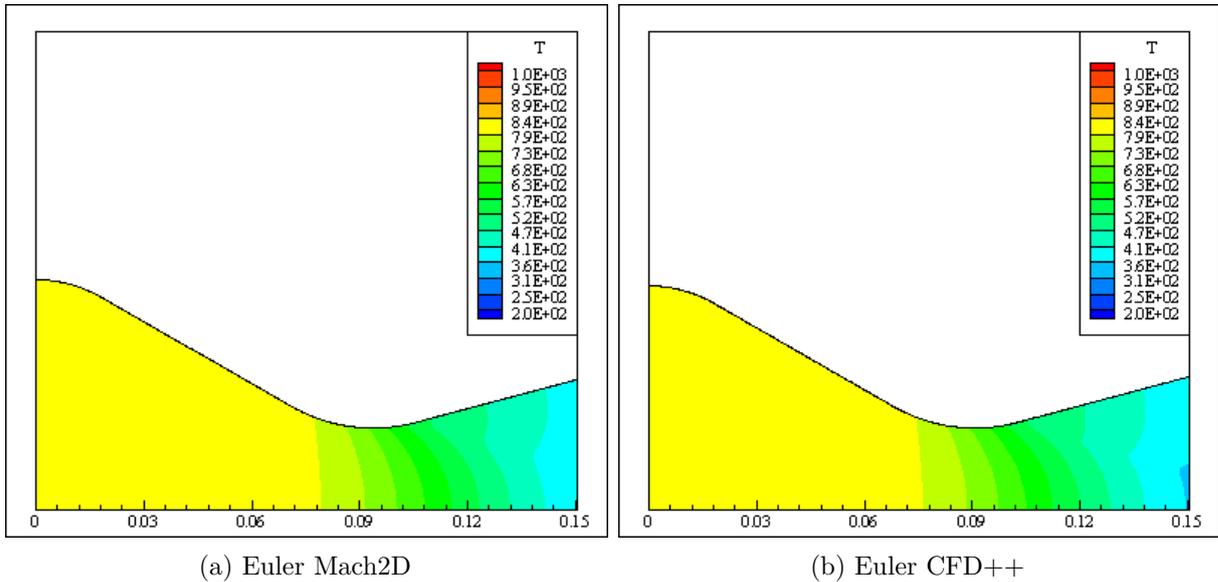
Para 17 das 22 tomadas de temperatura o Mach2D representou com maior fidelidade os valores de T_{wall} experimentais, com a diferença entre os valores não passando de 4,014%, enquanto que a maior disparidade com o CFD++ foi de 7,274%.

Como estes modelos computacionais demonstraram maior proximidade com os resultados experimentais, na Fig. 27 são apresentados os campos de distribuição de temperatura ao se empregar os modelos computacionais de Euler, obtidos tanto com o Mach2D, quanto com o CFD++. Estas mesmas figuras constam no Apêndice C, Fig. C.5.

5.3 Comentários sobre campos de número de Mach e campo de massa específica para o Mach2D

Da mesma maneira que para os campos de pressão e temperatura, os campos de número de Mach e da distribuição de massa específica também devem receber algumas observações pertinentes. Na Fig. 28 são apresentados os campos de distribuição de número de Mach e de massa específica ao empregar o modelo computacional de Euler, sendo eles obtidos através do programa Mach2D, ou seja, são campos da simulação E-6, conforme

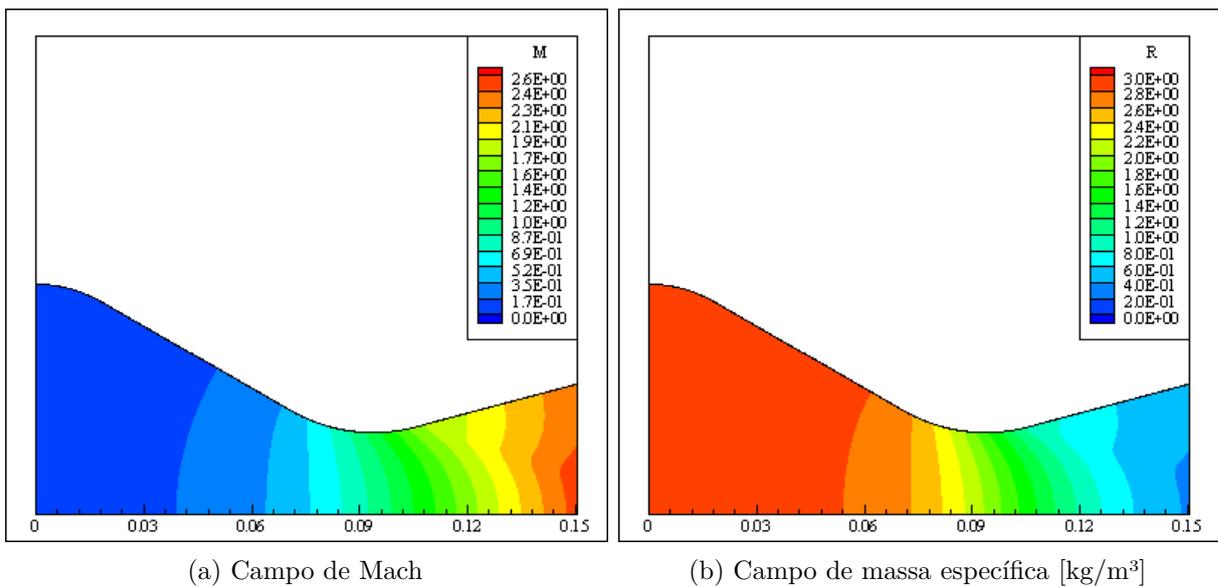
FIGURA 27 – CAMPOS DE TEMPERATURA [K] QUE APRESENTARAM MENORES DESVIOS PERCENTUAIS MÉDIOS DE T_{wall} EM RELAÇÃO AOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS TANTO COM O MACH2D QUANTO COM O CFD++.



FONTE: O autor (2021).

nomenclatura adotada nas Tab. 10 e Tab. 11. Estas mesmas figuras constam no Apêndice C, sendo respectivamente a Fig. C.10a e Fig. C.20a.

FIGURA 28 – CAMPOS DE NÚMERO DE MACH E DE MASSA ESPECÍFICA PARA A SIMULAÇÃO E-6.

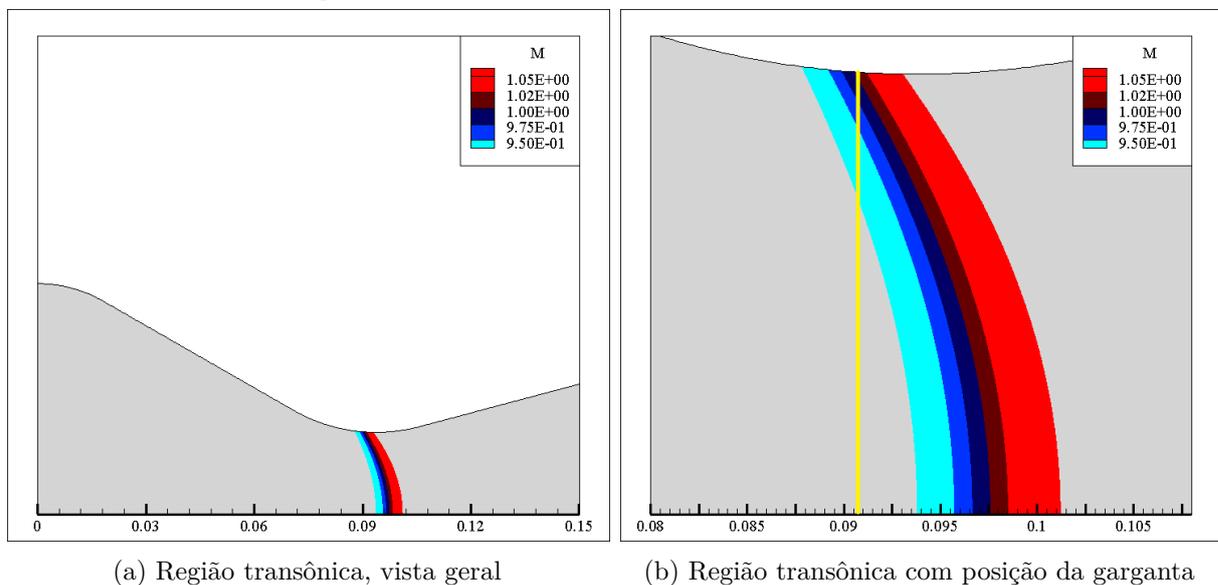


FONTE: O autor (2021).

Na Fig. 29 também é apresentado o campo de distribuição do número de Mach para a simulação computacional E-6, porém, com um enfoque maior na região de transição para escoamento supersônico. Optou-se por modificar a paleta de cores da figura para

facilitar a visualização desta região. Na Fig. 29b existe uma linha vertical amarela que mostra a posição geométrica da garganta da tubeira. Pelas considerações de escoamento isentrópico quase-unidimensional, o número de Mach nesta linha deveria ser igual à unidade. Mas conforme esta mesma figura evidencia, a linha de Mach unitário (linha que divide o azul mais escuro do marrom) corresponde a uma curva e em sua maior parte, à jusante da posição geométrica da garganta. Este é um comportamento esperado para escoamentos supersônicos em bocais, tanto que Anderson (2003) ao descrever o método das características (método responsável pelo dimensionamento de seções divergentes de tubeiras, ou seja, a região supersônica, que considera a trajetória de ondas de expansão, ondas de compressão e a função de Prandtl–Meyer) comenta que a posição da linha sônica é em forma de arco, também recomenda que a aplicação do método das características considere a linha sônica curva como primeira linha característica ao invés da linha reta que une a parede da tubeira à linha de simetria, a linha amarela. Ou seja, caso a mesma tubeira usada até então viesse a ser alvo de otimização, a simulação E-6 poderia ser utilizada como base para o projeto da nova seção divergente.

FIGURA 29 – CAMPOS DE NÚMERO DE MACH NA REGIÃO TRANSÔNICA PARA A SIMULAÇÃO E-6.



FONTE: O autor (2021).

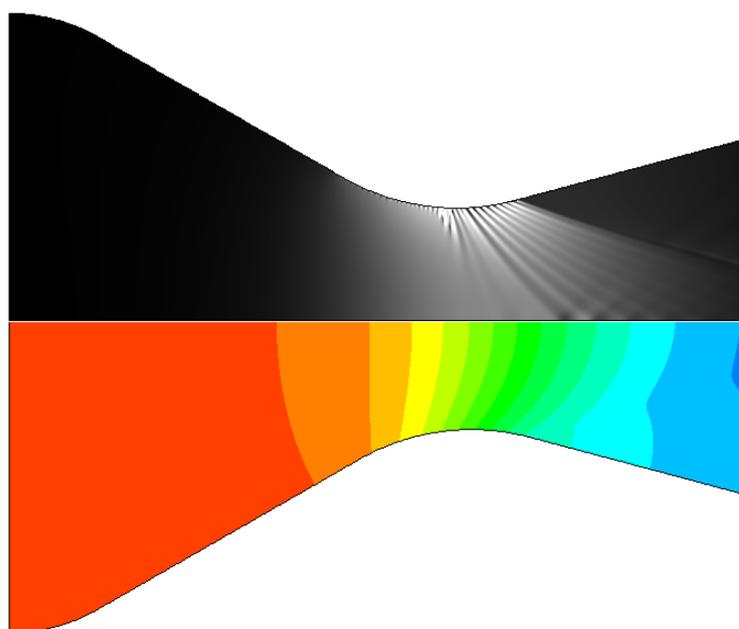
Algumas estimativas sobre a interseção da linha sônica com a fronteira da camada limite foram elaboradas e discutidas por Back, Massier e Gier (1965a) para a tubeira 30-15 e 45-15 com paredes refrigeradas, considerando a posição estimada analiticamente e obtida experimentalmente. Segundo os autores, a previsão analítica da distância a montante da garganta, adimensionalizada pelo raio da tubeira, é superestimada em relação às medições experimentais, apresentando uma variação de até 26,667%. Porém, considerando as mesmas estimativas de Hall para esta distância adimensionalizada a disparidade reduz para até

6,667%.

Voltando a atenção para a Fig. 28b que apresenta a distribuição dos valores de massa específica ao longo da tubeira, pode-se perceber que sua magnitude varia de forma inversamente proporcional ao do número de Mach. Isso de fato está coerente, uma vez que em escoamentos compressíveis a mudança geométrica que gera o aumento da velocidade do escoamento também modifica a magnitude da massa específica, devido à necessidade de satisfazer a equação do balanço de massa. Após atingir a velocidade supersônica esta relação intensifica-se ainda mais, conduzindo a maiores mudanças de massa específica quando submetidas a menores incrementos ao número de Mach.

Existem diversas técnicas qualitativas de visualização dos gradientes de massa específica em um escoamento. Uma delas é a técnica Schlieren que utiliza lentes côncavas especiais e costuma ser aplicada para modelos em túneis de vento. A Fig. 30 mostra o campo de massa específica para a simulação computacional E-6 (na região inferior da figura) em conjunto com a visualização fornecida pela técnica Schlieren (complementando o campo e formando a figura da tubeira inteira), gerada computacionalmente com o programa CFD++ ao aplicar o modelo computacional de Euler. Simulando como seria a refração da luz causada pelos gradientes de massa específica.

FIGURA 30 – CAMPO DE MASSA ESPECÍFICA EM CONJUNTO COM A VISUALIZAÇÃO SCHLIEREN OBTIDA COMPUTACIONALMENTE.



FONTE: O autor (2021).

As linhas em branco que emanam da região da garganta, na seção divergente da tubeira, correspondem às relações entre ondas de expansão e gradientes de massa específica. Na linha de simetria pode-se notar uma certa reflexão das linhas de expansão, o que na

verdade, por conta da aplicação da condição de contorno de simetria, correspondem às ondas de expansão oriundas da outra parede da tubeira.

5.4 Resumo do capítulo

O enfoque deste capítulo se deu pela apresentação dos resultados para as variáveis globais de interesse, ou seja, C_d e C_f calculados computacionalmente com os programas Mach2D e CFD++. Foram feitas discussões relacionando os valores computacionais obtidos para as malhas mais refinadas e seus valores extrapolados, em relação à C_d e C_f experimentais e analíticos, estimando qual foi o desvio encontrado. Também, foram apresentadas as estimativas de erro com três estimadores, além de se fazer discussões sobre a ordem aparente equivalente e sua tendência à ordem assintótica para estas mesmas variáveis globais.

Outras variáveis de interesse, porém locais, foram apresentadas e discutidas, como a distribuição de pressão e temperatura na parede da tubeira, p_{wall} e T_{wall} , calculadas computacionalmente pelo Mach2D e CFD++. Por fim, foi discutido sobre a posição da linha sônica e sobre os gradientes de massa específica e sua relação com a visualização ao aplicar a técnica de Schlieren computacional.

6 CONCLUSÃO

Neste capítulo são apresentados os comentários finais do trabalho resumindo assim os resultados, também são apresentadas as principais contribuições e as recomendações de trabalhos futuros.

6.1 Conclusão geral

Por meio de simulações computacionais realizadas com o programa Mach2D 5.10.2 e com o programa CFD++ uma série de avaliações foram realizadas ao se empregar quatro modelos matemáticos, sendo eles invíscidos, viscosos explícitos e com modelos de fechamento. Foram avaliadas principalmente duas variáveis globais, sendo elas o coeficiente de descarga C_d e coeficiente de empuxo C_f . Também foram realizadas comparações entre valores computacionais, analíticos e experimentais para a distribuição de pressão e temperatura nas proximidades da parede da tubeira 30-15, apresentada em detalhes no Cap. 4.

Em geral, previsões dos valores de C_d obtidos por meio do programa Mach2D resultaram em estimativas (quando extrapoladas com os estimadores de erro) mais próximas às previsões analíticas e experimentais, variando em até 4,378% para o limite superior de $C_{d_{exp}}$. Quando fora considerado esta mesma diferença em relação à $C_{d_{KL}}$, $C_{d_{Hall}}$ e para o limite inferior de $C_{d_{exp}}$, a variação ficou abaixo de 1,215%. Enquanto com o programa CFD++ as diferenças foram de até 7,241% quando calculadas em relação ao $C_{d_{KL}}$. Levando assim a concluir que para C_d , o Mach2D obteve melhor representação. Para C_f o programa CFD++ apresentou a maior diferença percentual de 0,490% em relação ao $C_{f_{Q1D}}$ quando calculado com o modelo explícito. Enquanto o Mach2D apresentou diferenças de até 2,919% em relação ao $C_{f_{Q1D}}$ quando calculado com o modelo BLM. O que levou a concluir que para as estimativas de C_f , o CFD++ aproximou-se mais das estimativas quase-unidimensionais. Porém, para efetivamente afirmar qual é o programa com maior representação deste coeficiente, seria necessário conhecer seu valor experimental.

As distribuições computacionais de pressão na parede calculadas pelo CFD++ apresentaram um desvio significativamente menor na região da garganta, sendo superiores a 15%, quando comparado às soluções com o Mach2D para a posição da décima segunda tomada de pressão. São ainda maiores estas diferenças ao comparar com a distribuição analítica quase-unidimensional, especialmente para as tomadas de pressão mais próximas à garganta. Já era esperado um desvio significativo de pressão analítica nessa região, devido às considerações de escoamento isentrópico impostas em sua dedução. O desvio percentual médio de p_{wall} para as soluções computacionais utilizando o Mach2D foram de: 3,712% com Euler; 5,492% com o modelo explícito; 6,312% com o BLM e 7,694% com o SA Neg. Já ao se utilizar o CFD++, estes desvios foram de: 4,285% com Euler; 3,800% com o

modelo explícito e 3,276% com o modelo SA.

Para as avaliações acerca da distribuição de temperatura nas paredes, as soluções computacionais que empregaram modelos invíscidos permaneceram em maior conformidade com os resultados experimentais para a temperatura do gás quente nas proximidades da parede do que os modelos viscosos. Estima-se que as tomadas experimentais de temperatura fizeram medições após a camada limite, em uma região mais interna da tubeira. Pois mesmo para as soluções viscosas, conforme aumenta-se o valor de y^+ , afastando-se da parede, a temperatura tende a reduzir para a temperatura de corrente livre.

Voltando a atenção para o desvio percentual de T_{wall} computacional em relação à T_{wall} experimental para cada tomada de temperatura, notou-se que os valores computacionais obtidos com o Mach2D aproximaram-se com maior fidelidade para mais de 75% das tomadas de temperatura apresentando um desvio máximo de 4,014% para a vigésima segunda tomada. Enquanto que para o CFD++, para esta mesma posição, o desvio foi de 7,274%. O desvio percentual médio de T_{wall} ao se utilizar o Mach2D, para o modelo de Euler, foi de 1,747%, enquanto ao se utilizar o CFD++, também para o modelo de Euler, este desvio foi de 3,144%.

Por mais que em alguns pontos ocorreram desvios da ordem de 10%, em geral, para a maioria das tomadas de pressão, estas variações foram consideradas pequenas o suficiente para dizer que as medições tanto com o Mach2D quanto com o CFD++ foram representativas, em especial, para as pressões obtidas com o modelo de Euler para o Mach2D e com o modelo SA para o CFD++. O mesmo ocorreu para as distribuições de temperatura na parede usando o modelo de Euler, uma vez que o maior desvio de temperatura encontrado foi 7,274% ao empregar o CFD++ e 4,014% ao utilizar o programa Mach2D.

Mesmo com muitas dificuldades na implementação do modelo Spalart-Allmaras, foi possível efetuar a verificação do código para a equação completa utilizando o método das soluções fabricadas. Entretanto, após a migração do código verificado, para o problema fabricado, ao código principal não foi possível de se obter uma distribuição de viscosidade turbulenta adequada para o problema em questão, gerando divergência do código. Isso resultou em uma série de tentativas de solução para que fosse possível obter um campo convergido de viscosidade turbulenta ao fim das iterações. A adaptação do modelo Spalart-Allmaras escrito na forma compressível com a equação de balanço de massa inserida nele, para o modelo Spalart-Allmaras negativo foi a única abordagem que resultou na convergência do código, porém, ao fim do processo iterativo, o campo de viscosidade turbulenta tendeu a zero. Este mesmo comportamento não foi obtido com o modelo Spalart-Allmaras habilitado no CFD++ e nem com o Baldwin-Lomax no Mach2D.

6.2 Contribuições

As principais contribuições geradas pelo trabalho podem ser sumarizadas pela:

- apresentação e descrição das etapas necessárias para o processo de mudança do coordenadas retangulares para o sistema de coordenadas curvilíneas dos operadores do modelo Spalart-Allmaras escrito na forma compressível;
- apresentação e descrição do processo de discretização dos operadores do modelo Spalart-Allmaras, escritos de forma genérica, utilizando o método dos volumes finitos; e
- geração de um módulo com código verificado para o modelo de fechamento Spalart-Allmaras e Spalart-Allmaras Negativo, escrito em linguagem de programação Fortran 2008 que integra e contribui com o desenvolvimento do código livre Mach2D na sua versão 5.10.2.

6.3 Recomendação de Trabalhos Futuros

Algumas continuções do presente trabalho podem ser sugeridas, podendo ainda aproveitar parcialmente ou integralmente os resultados e códigos já existentes, sendo elas:

- explorar em detalhes os motivos que conduziram ao surgimento das viscosidades negativas, efetuar eventuais modificações no código com a finalidade de se obter um campo de viscosidade apropriado e validá-lo;
- selecionar diferentes testes disponíveis em Back, Massier e Gier (1965b), que possuam outras propriedades de estagnação e acompanhar a convergência da viscosidade turbulenta para o modelo SA Negativo;
- realizar simulações computacionais para problemas canônicos que possuam resultados para validação da solução computacional, como por exemplo, utilizar o resalto transônico axissimétrico (*Axisymmetric Transonic Bump*) que pode ser encontrado em Rumsey (2021a);
- utilizar os mesmos operadores discretizados para a implementação da equação diferencial parcial para o cálculo da energia cinética de turbulência;
- implementar ao Mach2D outros modelos de fechamento como o modelo SST $k-\omega$;
- efetuar comparações entre valores computacionais, experimentais e analíticos para a distribuição do coeficiente de transferência de energia térmica, distribuição do número de Stanton, distribuição da tensão de cisalhamento nas paredes e avaliações da temperatura na parede permitindo fluxo de energia térmica através da mesma;

-
- implementar ao Mach2D modelos computacionais que considerem refrigeração regenerativa de suas paredes, e que em suas simulações computacionais a modelagem da turbulência esteja habilitada; e
 - modificar a geometria de interesse para uma ogiva ou perfil de asa por meio de modificações no arquivo de entrada da geometria ou mesmo, modificando o código-fonte. Também, adequar o modelo SA Negativo implementado para este tipo de aplicação (*trip term*).
 - aplicar o método das características para projetar um novo divergente, considerando a posição da linha sônica curva encontrada para a tubeira 30-15. Tendo por objetivo otimizar variáveis globais de eficiência para a nova tubeira, comparando-as com as quais foram geradas na presente dissertação.

REFERÊNCIAS

- ALLMARAS, S. R. Multigrid for the 2-d compressible navier-stokes equations. In: *14th Computational Fluid Dynamics Conference*. [S.l.: s.n.], 1999. p. 3336. Citado na página 104.
- ALLMARAS, S. R.; JOHNSON, F. T.; SPALART, P. R. Modifications and clarifications for the implementation of the spalart-allmaras turbulence model. In: *Seventh international conference on computational fluid dynamics (ICCFD7)*. [S.l.: s.n.], 2012. p. 1–11. Citado 5 vezes nas páginas 35, 61, 104, 105 e 150.
- AMÉRICO, C. E.; MORO, D. F.; MARCHI, C. H.; AGUIAR, F. M. de. Development of ballistic evaluation motor for knsu burn rate measurements. *18th Brazillian Congress of Thermal Sciences and Engineering*, 2020. Citado na página 43.
- ANDERSON, J. D. *Modern Compressible Flow: With Historical Perspective*. [S.l.]: McGraw Hill, 2003. Citado na página 136.
- ASME. *Standard for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer: An American National Standard*. [S.l.]: American Society of Mechanical Engineers, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 69, 70 e 75.
- BACK, L. H.; MASSIER, P. F.; GIER, H. L. Comparison of measured and predicted flows through conical supersonic nozzles, with emphasis on the transonic region. *AIAA Journal*, v. 3, n. 9, p. 1606–1614, 1965. Citado 12 vezes nas páginas 25, 33, 35, 38, 45, 46, 68, 76, 86, 111, 112 e 136.
- BACK, L. H.; MASSIER, P. F.; GIER, H. L. Convective heat transfer in a convergent-divergent nozzle. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 7, n. 5, p. 549–568, 1965. Citado 12 vezes nas páginas 25, 33, 35, 38, 39, 63, 69, 85, 126, 141, 148 e 149.
- BALABEL, A.; HEGAB, A. M.; NASR, M.; EL-BEHERY, S. M. Assessment of turbulence modeling for gas flow in two-dimensional convergent–divergent rocket nozzle. *Applied Mathematical Modelling*, Elsevier, v. 35, n. 7, p. 3408–3422, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 42 e 64.
- BALABEL, A.; HEGAB, A. M.; WILSON, S.; NASR, M.; EL-BEHERY, S. M. Numerical simulation of turbulent gas flow in a solid rocket motor nozzle. In: *13th International conference on aerospace science and aviation technology, Egypt*. [S.l.: s.n.], 2009. Citado na página 32.
- BALDWIN, B. S.; LOMAX, H. Thin-layer approximation and algebraic model for separated turbulent flows. In: *16th aerospace sciences meeting*. [S.l.: s.n.], 1978. p. 257. Citado 4 vezes nas páginas 35, 56, 57 e 100.
- BARDINA, J. E.; HUANG, P. G.; COAKLEY, T. J. Turbulence modeling validation, testing, and development. 1997. Citado 2 vezes nas páginas 41 e 53.
- BEJAN, A. *Convection Heat Transfer*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2004. Citado na página 28.

- BERGMAN, T. L.; LAVINE, A. S.; P., I. F.; P., D. D. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2011. Citado na página 86.
- BERTOLDO, G. *Otimização aerodinâmica de Newton com base nas equações de Navier-Stokes*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 83 e 84.
- BERTOLDO, G. *MACH-2D 5.10.2*. 2020. <<https://github.com/gbertoldo/MACH-2D>>. Citado na página 78.
- BOUSSINESQ, J. Theorie de l'e'coulement tourbillant. In: *Mem. Pres. Acad. Sci. XXIII, Paris*. [S.l.: s.n.], 1877. Citado na página 53.
- CEBECI, T. *Analysis of turbulent flows with computer programs*. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 2013. Citado 4 vezes nas páginas 28, 47, 50 e 53.
- DAHLQUIST, G.; BJÖRCK, *Numerical Methods in Scientific Computing*. [S.l.]: SIAM, 2008. Citado na página 74.
- ENERGOMASH. 2021. <<https://www.roscosmos.ru/26349/>>. Citado na página 31.
- FAVRE, A. Equations des gaz turbulents compressibles. 2. methode des vitesses moyennes methode des vitesses macroscopiques ponderees par la masse volumique. *Journal de mecanique*, GAUTHIER-VILLARS/EDITIONS ELSEVIER 23 RUE LINOIS, 75015 PARIS, FRANCE, v. 4, n. 4, p. 391, 1965. Citado na página 50.
- GERMER, E. M. *Avaliação do efeito da geometria de seção convergente em tubeiras de motor-foguete*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, 2014. Citado na página 46.
- GUSMAN, M.; HOUSMAN, J.; KIRIS, C. Best practices for cfd simulations of launch vehicle ascent with plumes-overflow perspective. In: *49th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*. [S.l.: s.n.], 2011. p. 1054. Citado 2 vezes nas páginas 42 e 64.
- HADINGER, F. A. Influence of turbulence modeling on the performance prediction for rocket engine nozzles. *Joint propulsion*, 1997. Citado na página 42.
- HALL, I. M. Transonic flow in two-dimensional and axially-symmetric nozzles. In: *Quart. J. Mech. Appl. Math. XV*. [S.l.: s.n.], 1962. p. 487–508. Citado na página 37.
- HAMED, A.; VOGIATZIS, C. Assessment of turbulence models in overexpanded 2d-cd nozzle flow simulations. In: *31st Joint Propulsion Conference and Exhibit*. [S.l.: s.n.], 1995. p. 2615. Citado na página 42.
- HINZE, J. O. *Turbulence, an Introduction to Its Mechanism and Theory*. [S.l.]: McGraw-Hill, 1959. Citado na página 28.
- HUMBLE, R. W.; HENRY, G. N.; LARSON, W. J. *Space Propulsion Analysis and Design*. [S.l.]: McGraw Hill, 1995. Citado na página 66.
- KLIEGEL, J. R.; LEVINE, J. N. Transonic flow in small throat radius of curvature nozzles. *AIAA Journal*, Elsevier Inc., n. 7, 1969. Citado na página 68.

- LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Fluid mechanics*. [S.l.: s.n.], 1987. Citado na página 48.
- MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos Editora Ltda, 2004. Citado 3 vezes nas páginas 81, 151 e 159.
- MARCHI, C. H. *Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2001. Citado 3 vezes nas páginas 70, 71 e 73.
- MARCHI, C. H.; BERTOLDO, G. Relatório técnico do projeto cfd-14/ufpr: modelagem de escoamento turbulento (baldwin-lomax) do código mach2d. *Curitiba: Universidade Federal do Paraná*, 2012. Citado 3 vezes nas páginas 31, 78 e 101.
- MARKATOS, N. C. The mathematical modelling of turbulent flows. Centre for Numerical Modelling and Process Analysis, 1986. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 57.
- MARTINS, M. A.; MARCHI, C. H.; ARAKI, L. K.; PINTO, M. A. V. Estimativa para o erro de discretização com o emprego de multiextrapolação de richardson em cfd. *CMAC*, 2014. Citado na página 74.
- MCBRIDE, J.; GORDON, S.; RENO, M. A. *Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species*. [S.l.]: NASA Langley Research Center, 1993. Citado 2 vezes nas páginas 84 e 85.
- MCDONOUGH, J. M. Introductory lectures on turbulence: physics, mathematics and modeling. 2007. Citado na página 54.
- MENTER, F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA journal*, v. 32, n. 8, p. 1598–1605, 1994. Citado na página 64.
- NASA/JPL. *Storm on the Horizon*. 2019. <<https://www.jpl.nasa.gov/spaceimages/details.php?id=PIA22950>>. Citado na página 29.
- NEE, V. W.; KOVASZNAY, L. S. G. Simple phenomenological theory of turbulent shear flows. *The Physics of Fluids*, American Institute of Physics, v. 12, n. 3, p. 473–484, 1969. Citado na página 59.
- NICKERSON, G. R.; DANG, L. D.; COATS, D. E. Two-dimensional kinetic reference computer program (tdk), final report contract n°. nas8-35931. *George C. Marshall Space Flight Center*, 1985. Citado na página 31.
- OSWATITSCH, K.; ROTHSTEIN, W. Flow pattern in a converging-diverging nozzle. In: *NACA TM-1215*. [S.l.: s.n.], 1949. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 39.
- PRANDTL, L. Turbulent flow. In: *NACA Tech. Memo, 435*. [S.l.: s.n.], 1926. Citado na página 53.
- RAJE, P. V.; SINHA, K. *Spalart-Allmaras turbulence model for Compressible flows*. [S.l.]: Department of Aerospace Engineering, Indian Institute of Technology, 2015. Citado na página 63.
- ROACHE, P. J. *Verification and Validation in Computational Science and Engineering*. [S.l.]: Albuquerque, USA: Hermosa, 1998. Citado na página 72.

- ROY, C. J.; BLOTTNER, F. G. Methodology for turbulence model validation: Application to hypersonic flows. *Journal of Spacecraft and Rockets*, v. 40, n. 3, p. 313–325, 2003. Citado na página 44.
- RUMSEY, C. *Implementing Turbulence Models into the Compressible RANS Equations*. 2017. <<https://turbmodels.larc.nasa.gov/implementrans.html>>. Acesso em 26/05/2021. Citado na página 50.
- RUMSEY, C. *ATB: Axisymmetric Transonic Bump*. 2021. <https://turbmodels.larc.nasa.gov/axibump_val.html>. Acesso em 27/06/2021. Citado na página 141.
- RUMSEY, C. *The Spalart-Allmaras Turbulence Model*. 2021. <<https://turbmodels.larc.nasa.gov/spalart.html#saIa>>. Citado 2 vezes nas páginas 60 e 104.
- SCHNEIDER, G. E.; ZEDAN, M. A modified strongly implicit procedure for the numerical solution of field problems. In: . [S.l.]: Hemisphere Publishing Corporation, 1981. v. 4, p. 1–19. Citado na página 83.
- SPALART, P.; ALLMARAS, S. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows. In: *30th aerospace sciences meeting and exhibit*. [S.l.: s.n.], 1992. p. 439. Citado 4 vezes nas páginas 35, 59, 60 e 61.
- SPALART, P. R. Trends in turbulence treatments. In: *Fluids 2000 conference and exhibit*. [S.l.: s.n.], 2000. p. 2306. Citado 2 vezes nas páginas 88 e 104.
- SPALART, P. R.; GARBARUK, A. V. Correction to the spalart-allmaras turbulence model, providing more accurate skin friction. In: . [S.l.]: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2020. v. 58, n. 5, p. 1903–1905. Citado na página 104.
- SPOTTS, N.; GUZIK, S.; GAO, X. A cfd analysis of compressible flow through convergent-conical nozzles. In: *49th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*. [S.l.: s.n.], 2013. p. 3734. Citado na página 44.
- SUTTON, G. P.; BIBLARZ, O. *Rocket Propulsion Elements*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2017. Citado 7 vezes nas páginas 29, 30, 31, 65, 66, 67 e 100.
- TANG, S. P.; FENN, J. B. Experimental determination of the discharge coefficients for critical flow through an axisymmetric nozzle. *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, v. 16, n. 1, p. 41–46, 1978. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 68.
- THORNOCK, R. L.; BROWN, E. F. An experimental study of compressible flow through convergent-conical nozzles, including a comparison with theoretical results. 1972. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 44.
- TIAN, C.; LU, Y. Turbulence models of separated flow in shock wave thrust vector nozzle. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, Taylor & Francis, v. 7, n. 2, p. 182–192, 2013. Citado na página 45.
- van DRIEST, E. R. On turbulent flow near a wall. *Journal of the aeronautical sciences*, 1956. Citado na página 56.
- von KÁRMÁN, T. Turbulence, twenty-fifth wilbur wright memorial lecture. *J. Row. Aeronaut*, n. Soc. 41, 1937. Citado na página 28.

WILCOX, D. C. *Turbulence modeling for CFD*. [S.l.]: DCW Industries, 2004. Citado 9 vezes nas páginas 31, 50, 52, 53, 54, 56, 57, 59 e 69.

WILDE, D. Analysis of curvature effects on boundary layer separation and turbulence model accuracy for circulation control applications. *American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA)*, 2010. Citado na página 64.

ŽIVKOVIĆ, S.; FILIPOVIĆ, M. H.; ELEK, P. K.; MILINIVIĆ, M.; GLIGORIJEVIĆ, N.; BOULAHLIB, M. A. Experimental determination of rocket motor internal ballistic coefficients and performance parameters. *6th Internat. Scientific Conference on Defense Technologies*, 2014. Citado na página 43.

ANEXO A – RESULTADOS EXPERIMENTAIS PARA VALIDAÇÃO

Conforme descrito na página trinta do trabalho de Back, Massier e Gier (1965b), para o teste 317 foram utilizados trinta e duas tomadas de pressão distribuídas ao longo da tubeira. Na última coluna da Tab. 27 consta a razão entre a pressão medida na superfície interna da tubeira e a pressão de estagnação de todas as tomadas de pressão.

TABELA 27 – DISTRIBUIÇÕES DE PRESSÃO (p/p_0)

Tomada de pressão	Razão de distância axial x/L_t	Razão de área A_b/A_{th}	p/p_0 $p_0 = 101,0$ psia
1	0,107	7,001	0,977
2	0,222	4,691	0,991
3	0,3396	2,939	0,977
4	0,3401	2,924	0,977
5	0,395	2,255	0,958
6	0,455	1,631	0,908
7	0,460	1,561	0,901
8	0,506	1,235	0,789
9	0,529	1,135	0,728
10	0,554	1,054	0,644
11	0,587	1,0078	0,508
12	0,5018	1,0012	0,455
13	0,542	1,028	0,339
14	0,691	1,176	0,207
15	0,706	1,231	0,200
16	0,722	1,297	-
17	0,741	1,372	0,175
18	0,753	1,423	0,166
19	0,771	1,505	0,159
20	0,789	1,582	0,142
21	0,802	1,642	0,134
22	0,819	1,716	0,128
23	0,838	1,815	0,125
24	0,852	1,866	0,115
25	0,869	1,960	0,107
26	0,887	2,049	0,100
27	0,900	2,112	0,100
28	0,921	2,210	0,087
29	0,932	2,283	0,084
30	0,949	2,379	0,080
31	0,965	2,471	0,072
32	0,985	2,574	0,068

FONTE: Back, Massier e Gier (1965b).

A Tab. 28 traz resultados experimentais de Back, Massier e Gier (1965b) para vinte e dois pontos de coleta de dados distribuídos ao longo da tubeira para o teste 317, presente na página trinta e quatro da mesma referência. Sendo que, são apresentados valores para: razão entre a distância axial pelo comprimento total x/L_t ; fluxo de energia térmica estimada que deixa a parede q_{wall} ; temperatura medida na parede T_{wall} ; temperatura estática na corrente livre T_{cl} ; coeficiente de transferência de calor h ; estimativa do fluxo de massa na fronteira da camada limite $\rho_{\delta^*}u_{\delta^*}$; número de Reynolds por polegada $\rho_{\delta^*}u_{\delta^*}/\mu_{\delta^*}$ e o número de Stanton St .

Juntamente aos dados tabelados, são apresentados dados adicionais para: comprimento refrigerado $l = 0$ in; pressão de estagnação $p_0 = 101$ psia; temperatura de estagnação $T_0 = 1510$ R; vazão mássica $\dot{m} = 3,419$ lb/s; espessura estimada de momento $\delta^\theta = 0,013$ in; espessura estimada da camada limite $\delta^* = 0,019$ in e espessura estimada da energia $\delta^\phi = 0$ in.

TABELA 28 – DISTRIBUIÇÕES DE DIVERSAS PROPRIEDADES PARA O TESTE 317

Razão de distância x/L_t	q_{wall} $BTU/(s\ in^2)$	T_{wall} $^\circ R$	T_{cl} $^\circ R$	h $\times 10^{-4}$ $BTU/(s\ in^2\ ^\circ F)$	$\rho_{\delta^*}u_{\delta^*}$ $lb/(s\ in^2)$	$(\rho_{\delta^*}u_{\delta^*})/\mu_{\delta^*}$ $\times 10^5$ in^{-1}	St
0,133	0,123	783	1509	1,69	0,174	0,736	3,73
0,204	-	-	1507	-	0,236	1,10	-
0,276	0,124	777	1504	1,69	0,312	1,47	2,08
0,336	0,181	852	1501	2,75	0,403	1,92	2,64
0,385	0,186	836	1494	2,76	0,521	2,49	1,90
0,429	0,237	874	1480	3,75	0,666	3,21	2,16
0,469	0,262	929	1460	4,56	0,861	4,21	2,05
0,512	0,302	956	1410	5,56	1,12	5,47	1,91
0,541	-	-	1365	-	1,23	6,22	-
0,573	0,312	968	1300	6,01	1,29	6,76	1,80
0,603	0,271	941	1230	5,02	1,28	6,94	1,54
0,634	0,271	927	1150	4,96	1,21	6,82	1,62
0,664	0,240	903	1070	4,29	1,10	6,45	1,56
0,693	0,218	876	1000	3,76	0,952	5,95	1,60
0,717	0,227	866	980	3,90	0,916	5,80	1,73
0,750	0,221	831	950	3,62	0,868	5,61	1,65
0,782	0,184	831	920	3,05	0,812	5,37	1,53
0,825	0,188	802	880	3,00	0,743	5,05	1,66
0,864	0,171	807	850	2,78	0,680	4,74	1,68
0,864	0,200	787	850	3,15	0,680	4,74	1,90
0,905	0,135	761	810	2,05	0,618	4,46	1,37
0,938	0,156	719	785	2,26	0,576	4,15	1,62

FONTE: Back, Massier e Gier (1965b).

APÊNDICE A – MUDANÇA DE COORDENADAS DOS OPERADORES DA EQUAÇÃO DIFERENCIAL DO MODELO SPALART-ALLMARAS

Baseadas no artigo Allmaras, Johnson e Spalart (2012), as equações para a obtenção dos valores da variável de trabalho $\hat{\nu}$ são aqui reescritas, sofrem transformação do sistema de coordenadas e são discretizadas (no Apêndice B), por meio da aplicação do método dos volumes finitos. As considerações efetuadas para as equações do Cap. 3, tratando-se do modelo SA, permanecem válidas e são as mesmas aqui consideradas. A equação alvo de estudo nestes apêndices é a 3.77, reescrita aqui por motivos de facilidade como:

$$\frac{\partial(\rho\hat{\nu})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u}\hat{\nu}) - \rho(P - D) - \frac{1}{\sigma}\nabla \cdot [\rho(\nu + \hat{\nu})\nabla\hat{\nu}] - \frac{c_{b2}}{\sigma}\rho(\nabla\hat{\nu})^2 + \frac{1}{\sigma}(\nu + \hat{\nu})\nabla\rho \cdot \nabla\hat{\nu} = 0 \quad (\text{A.1})$$

sendo assim, o mesmo vale para suas constantes e funções auxiliares que não são aqui replicadas, pois o interesse principal desta seção é trabalhar de forma genérica com os operadores que compõem a Eq. A.1. Uma vez que estes mesmos operadores estejam discretizados, poderão ser aplicados para outras equações permitindo assim uma maior intercambiabilidade para implementação de outros modelos de fechamento ou mesmo para diferentes modelos matemáticos e computacionais, que usem os mesmos operadores e métodos de discretização.

Nas aplicações da presente dissertação, ϕ entende-se como a variável principal $\hat{\nu}$ e ψ como uma variável que acompanha a variável principal, geralmente sendo igual a ρ ou alguma outra grandeza escalar que multiplica ϕ . Tanto ψ quanto ϕ podem assumir o papel de quaisquer grandezas escalares.

A.1 Obtenção do operador difusivo

O operador difusivo $\nabla \cdot [\rho(\nu + \hat{\nu})\nabla\hat{\nu}]$ está sendo escrito da forma genérica $\nabla \cdot (\psi\nabla\phi)$. Neste operador, caso $\psi = 1$, pode ser obtido o laplaciano $\nabla \cdot (\nabla\phi)$. Sendo assim, considerando $\psi\nabla\phi$ como sendo igual a um vetor auxiliar, \vec{F} , substituindo esta consideração no operador $\nabla \cdot (\psi\nabla\phi)$, obtêm-se:

$$\nabla \cdot (\psi\nabla\phi) = \nabla \cdot \vec{F} \quad (\text{A.2})$$

Primeiramente, os operadores devem ser escritos em coordenadas cilíndricas. Para isso, o gradiente de uma propriedade ϕ é compreendido como:

$$\nabla\phi = \frac{\partial\phi}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial\phi}{\partial y}\vec{j} \quad (\text{A.3})$$

Reescrevendo as componentes em cada uma das direções do $\nabla\phi$ como uma soma de suas decomposições em ξ e η e expandindo os termos do lado direito da Eq. A.3, obtém-se:

$$\nabla\phi = \left(\frac{\partial\phi}{\partial\xi} \frac{\partial\xi}{\partial x} + \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \frac{\partial\eta}{\partial x} \right) \vec{i} + \left(\frac{\partial\phi}{\partial\xi} \frac{\partial\xi}{\partial y} + \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \frac{\partial\eta}{\partial y} \right) \vec{j} \quad (\text{A.4})$$

A transformação de coordenadas partindo do sistema de coordenadas retangulares para o sistema de coordenadas curvilíneas $(x,y) \rightarrow (\xi,\eta)$ depende de uma série de métricas, originalmente obtidas por Maliska (2004) e apresentadas aqui por meio das Eq. A.5 à Eq. A.15.

$$dx = \frac{\partial x}{\partial \xi} d\xi + \frac{\partial x}{\partial \eta} d\eta = x_\xi d\xi + x_\eta d\eta \quad (\text{A.5})$$

$$dy = \frac{\partial y}{\partial \xi} d\xi + \frac{\partial y}{\partial \eta} d\eta = y_\xi d\xi + y_\eta d\eta \quad (\text{A.6})$$

$$\partial\xi = \xi_x dx + \xi_y dy \quad (\text{A.7})$$

$$\partial\eta = \eta_x dx + \eta_y dy \quad (\text{A.8})$$

$$\partial\xi = J (y_\eta dx - x_\eta dy) \quad (\text{A.9})$$

$$\partial\eta = J (-y_\xi dx + x_\xi dy) \quad (\text{A.10})$$

$$J = (x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi)^{-1} \quad (\text{A.11})$$

$$\xi_x = y_\eta J \quad (\text{A.12})$$

$$\xi_y = -x_\eta J \quad (\text{A.13})$$

$$\eta_x = -y_\xi J \quad (\text{A.14})$$

$$\eta_y = x_\xi J \quad (\text{A.15})$$

Efetuando as substituições das Eq. A.12 à Eq. A.15 na Eq. A.4, chega-se em:

$$\nabla\phi = (\phi_\xi y_\eta J - \phi_\eta y_\xi J) \vec{i} + (-\phi_\xi x_\eta J + \phi_\eta x_\xi J) \vec{j} \quad (\text{A.16})$$

multiplicando ambos os lados da igualdade e deixando o Jacobiano da transformação em evidência:

$$\psi\nabla\phi = \psi J (\phi_\xi y_\eta - \phi_\eta y_\xi) \vec{i} + \psi J (-\phi_\xi x_\eta + \phi_\eta x_\xi) \vec{j} \quad (\text{A.17})$$

Uma vez que $\vec{F} \equiv \psi\nabla\phi$, a Eq. A.17 ainda pode ser escrita como:

$$\vec{F} \equiv \psi\nabla\phi = F_x \vec{i} + F_y \vec{j} \quad (\text{A.18})$$

$$\nabla \cdot \vec{F} = \frac{J}{y} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (yF^\xi) + \frac{\partial}{\partial \eta} (yF^\eta) \right] \quad (\text{A.19})$$

lembrando que F^ξ e F^η podem ser escritos respectivamente como:

$$\begin{aligned} F^\xi &= F_x y_\eta - F_y x_\eta \\ &= \psi J (\phi_\xi y_\eta - \phi_\eta y_\xi) y_\eta - \psi J (-\phi_\xi x_\eta + \phi_\eta x_\xi) x_\eta \\ &= \psi J (\phi_\xi y_\eta^2 - \phi_\eta y_\xi y_\eta + \phi_\xi x_\eta^2 + \phi_\eta x_\xi x_\eta) \\ &= \psi J [\phi_\xi (y_\eta^2 + x_\eta^2) - \phi_\eta (x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta)] \\ &= \psi J (\phi_\xi \alpha - \phi_\eta \beta) \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

$$\begin{aligned} F^\eta &= -F_x y_\xi + F_y x_\xi \\ &= -\psi J (\phi_\xi y_\eta - \phi_\eta y_\xi) y_\xi + \psi J (-\phi_\xi x_\eta + \phi_\eta x_\xi) x_\xi \\ &= \psi J (-\phi_\xi y_\eta y_\xi + \phi_\eta y_\xi^2 + \phi_\eta x_\xi^2 - \phi_\xi x_\xi x_\eta) \\ &= \psi J [-\phi_\xi (y_\eta y_\xi + x_\eta x_\xi) + \phi_\eta (x_\xi^2 + y_\xi^2)] \\ &= \psi J (\phi_\eta \gamma - \phi_\xi \beta) \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Basta substituir os termos da Eq. A.20 e da Eq. A.21, na Eq. A.19 para obter a forma transformada do divergente de um vetor \vec{F} :

$$\nabla \cdot \vec{F} = \frac{J}{y} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} [y\psi J (\phi_\xi \alpha - \phi_\eta \beta)] + \frac{\partial}{\partial \eta} [y\psi J (\phi_\eta \gamma - \phi_\xi \beta)] \right\} \quad (\text{A.22})$$

para adequar a Eq. A.22 ao termo desejado, ou seja, $\frac{1}{\sigma} \nabla \cdot (\psi \nabla \phi)$, basta substituir ψ por $\rho(\hat{\nu} + \nu)$, ϕ por $\hat{\nu}$ e incluir a constante σ^{-1} . Chegando em:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sigma} \nabla \cdot [\rho(\hat{\nu} + \nu) \nabla \hat{\nu}] = \\ & \frac{J}{\sigma y} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} [y\rho(\hat{\nu} + \nu) J(\hat{\nu}_\xi \alpha - \hat{\nu}_\eta \beta)] + \frac{\partial}{\partial \eta} [y\rho(\hat{\nu} + \nu) J(\hat{\nu}_\eta \gamma - \hat{\nu}_\xi \beta)] \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

A.2 Obtenção do operador $\nabla \phi \cdot \nabla \psi$

Os gradientes das grandezas escalares são apresentados por:

$$\begin{aligned} \nabla \phi &= \frac{\partial \phi}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \vec{j} \\ &= (\phi_\xi y_\eta - \phi_\eta y_\xi) J \vec{i} + (\phi_\eta x_\xi - \phi_\xi x_\eta) J \vec{j} \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

$$\begin{aligned} \nabla \psi &= \frac{\partial \psi}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \vec{j} \\ &= (\psi_\xi y_\eta - \psi_\eta y_\xi) J \vec{i} + (\psi_\eta x_\xi - \psi_\xi x_\eta) J \vec{j} \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

efetuando o produto interno entre Eq. A.24 e Eq. A.25:

$$\begin{aligned} \nabla \phi \cdot \nabla \psi &= (\phi_\xi y_\eta - \phi_\eta y_\xi) (\psi_\xi y_\eta - \psi_\eta y_\xi) J^2 \\ &+ (\phi_\eta x_\xi - \phi_\xi x_\eta) (\psi_\eta x_\xi - \psi_\xi x_\eta) J^2 \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

fazendo a distribuição multiplicativa e agrupando os termos, obtém-se:

$$\begin{aligned} \nabla \phi \cdot \nabla \psi &= J^2 \left[\phi_\xi \psi_\xi (x_\eta^2 + y_\eta^2) + \phi_\eta \psi_\eta (x_\xi^2 + y_\xi^2) \right] \\ &+ J^2 \left[-\phi_\eta \psi_\xi (x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta) - \phi_\xi \psi_\eta (x_\eta x_\xi + y_\eta y_\xi) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

por fim, a substituição das métricas α , β e γ na Eq. A.27 podem ser efetuadas, o que resulta em:

$$\nabla \phi \cdot \nabla \psi = J^2 [\phi_\xi \psi_\xi \alpha + \phi_\eta \psi_\eta \gamma - \phi_\eta \psi_\xi \beta - \phi_\xi \psi_\eta \beta] \quad (\text{A.28})$$

Para adequar a Eq. A.28 para os termos $\nabla \rho \cdot \nabla \hat{\nu}$ e $\nabla \hat{\nu} \cdot \nabla \hat{\nu}$, basta fazer $\phi = \rho$ e $\psi = \hat{\nu}$ e depois, $\psi = \phi = \hat{\nu}$. Resultando na Eq. A.29 e na Eq. A.30, respectivamente.

$$\nabla \rho \cdot \nabla \hat{\nu} = J^2 [\rho_\xi \hat{\nu}_\xi \alpha + \rho_\eta \hat{\nu}_\eta \gamma - \rho_\eta \hat{\nu}_\xi \beta - \rho_\xi \hat{\nu}_\eta \beta] \quad (\text{A.29})$$

$$(\nabla \hat{\nu})^2 = J^2 [\hat{\nu}_\xi^2 \alpha + \hat{\nu}_\eta^2 \gamma - 2\hat{\nu}_\eta \hat{\nu}_\xi \beta] \quad (\text{A.30})$$

A.3 Obtenção do operador advectivo

Na obtenção do operador advectivo, ou seja, $\nabla \cdot (\psi \phi \vec{u})$, \vec{u} representa o vetor velocidade que pode ser decomposto em u , componente da velocidade na direção axial e v que é a componente da velocidade na direção radial.

Considerando a Eq. A.19, pode-se efetuar a decomposição de \vec{F} conforme:

$$\begin{aligned}\vec{F} &= \frac{\partial \vec{F}}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial y} \vec{j} \\ &= F_x \vec{i} + F_y \vec{j} \\ &= (\phi \psi u) \vec{i} + (\phi \psi v) \vec{j}\end{aligned}\tag{A.31}$$

$$\begin{aligned}F_x &= \vec{F}_\xi \xi_x + \vec{F}_\eta \eta_x \\ &= J (F_x y_\eta - F_y y_\xi)\end{aligned}\tag{A.32}$$

$$\begin{aligned}F_y &= \vec{F}_\xi \xi_y + \vec{F}_\eta \eta_y \\ &= J (F_y x_\xi - F_x x_\eta)\end{aligned}\tag{A.33}$$

Substituindo as Eq. A.32 e Eq. A.33 na Eq. A.19, obtém-se:

$$\nabla \cdot \vec{F} = \frac{J}{y} \left[\frac{\partial (y F_x)}{\partial \xi} y_\eta - \frac{\partial (y F_x)}{\partial \eta} y_\xi - \frac{\partial (y F_y)}{\partial \xi} x_\eta + \frac{\partial (y F_y)}{\partial \eta} x_\xi \right]\tag{A.34}$$

Chamando um vetor auxiliar de \vec{G} , sendo igual a $y \vec{F}$, a Eq. A.34 é reescrita como:

$$\nabla \cdot \vec{F} = \frac{J}{y} \left(\frac{\partial G_x}{\partial \xi} y_\eta - \frac{\partial G_x}{\partial \eta} y_\xi - \frac{\partial G_y}{\partial \xi} x_\eta + \frac{\partial G_y}{\partial \eta} x_\xi \right)\tag{A.35}$$

Para que o termo possa ser discretizado corretamente, a Eq. A.35 deve ser escrita de forma conservativa. Avaliando cada termo no interior dos parênteses, obtém-se:

$$\frac{\partial (G_x y_\eta)}{\partial \xi} = \frac{\partial G_x}{\partial \xi} y_\eta + G_x \frac{\partial (y_\eta)}{\partial \xi}\tag{A.36}$$

$$-\frac{\partial (G_x y_\xi)}{\partial \eta} = - \left(\frac{\partial G_x}{\partial \eta} y_\xi + G_x \frac{\partial (y_\xi)}{\partial \eta} \right)\tag{A.37}$$

$$-\frac{\partial (G_y x_\eta)}{\partial \xi} = - \left(\frac{\partial G_y}{\partial \xi} x_\eta + G_y \frac{\partial (x_\eta)}{\partial \xi} \right)\tag{A.38}$$

$$\frac{\partial (G_y x_\xi)}{\partial \eta} = \frac{\partial G_y}{\partial \eta} x_\xi + G_y \frac{\partial (x_\xi)}{\partial \eta}\tag{A.39}$$

combinando a Eq. A.36 com Eq. A.37 e Eq. A.38 com Eq. A.39, obtêm-se, respectivamente:

$$\frac{\partial (G_x y_\eta)}{\partial \xi} - \frac{\partial (G_x y_\xi)}{\partial \eta} = \frac{\partial G_x}{\partial \xi} y_\eta - \frac{\partial G_x}{\partial \eta} y_\xi \quad (\text{A.40})$$

$$\frac{\partial (G_y x_\xi)}{\partial \eta} - \frac{\partial (G_y x_\eta)}{\partial \xi} = \frac{\partial G_y}{\partial \eta} x_\xi - \frac{\partial G_y}{\partial \xi} x_\eta \quad (\text{A.41})$$

substituindo as Eq. A.40 e Eq. A.41 na Eq. A.34, obtêm-se:

$$\nabla \cdot \vec{F} = \frac{J}{y} \left[\frac{\partial (G_x y_\eta - G_y x_\eta)}{\partial \xi} + \frac{\partial (G_y x_\xi - G_x y_\xi)}{\partial \eta} \right] \quad (\text{A.42})$$

chamando $G_x y_\eta - G_y x_\eta$ de G^ξ e $G_y x_\xi - G_x y_\xi$ de G^η :

$$\nabla \cdot \vec{F} = \frac{J}{y} \left[\frac{\partial G^\xi}{\partial \xi} + \frac{\partial G^\eta}{\partial \eta} \right] \quad (\text{A.43})$$

uma vez que: $G^\xi = yF^\xi$ e $G^\eta = yF^\eta$, logo:

$$\frac{\partial G^\xi}{\partial \xi} = y_\xi F^\xi + y \frac{\partial F^\xi}{\partial \xi} \quad (\text{A.44})$$

$$\frac{\partial G^\eta}{\partial \eta} = y_\eta F^\eta + y \frac{\partial F^\eta}{\partial \eta} \quad (\text{A.45})$$

substituindo a Eq. A.44 e Eq. A.45 na Eq. A.43, é obtido:

$$\nabla \cdot \vec{F} = \frac{J}{y} \left[\frac{\partial (yF^\xi)}{\partial \xi} + \frac{\partial (yF^\eta)}{\partial \eta} \right] \quad (\text{A.46})$$

e lembrando que:

$$F^\xi = F_x y_\eta - F_y x_\eta \quad (\text{A.47})$$

$$F^\eta = F_y x_\xi - F_x y_\xi \quad (\text{A.48})$$

$$U = u y_\eta - v x_\eta \quad (\text{A.49})$$

$$V = v x_\xi - u y_\xi \quad (\text{A.50})$$

a equação genérica para o operador advectivo pode ser encontrada ao substituir a Eq. A.31, Eq. A.49 e Eq. A.50 na Eq. A.46, resultando em:

$$\nabla \cdot (\phi\psi\vec{u}) = \frac{J}{y} \left[\frac{\partial (y\phi\psi U)}{\partial \xi} + \frac{\partial (y\phi\psi V)}{\partial \eta} \right] \quad (\text{A.51})$$

adequando a equação genérica ao termo advectivo de interesse:

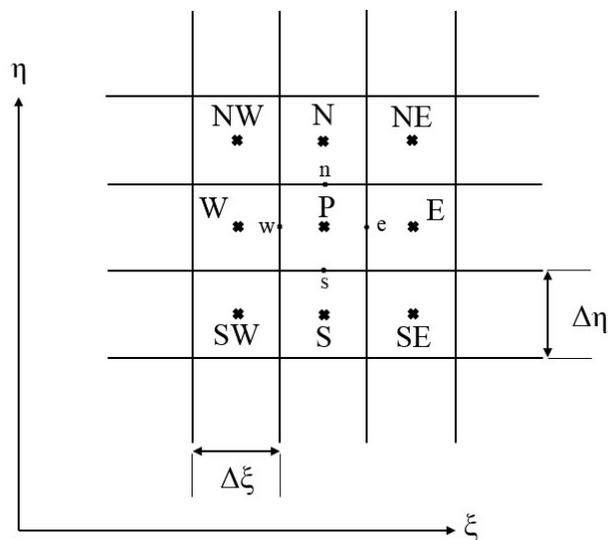
$$\nabla \cdot (\rho\hat{\nu}\vec{u}) = \frac{J}{y} \left[\frac{\partial (y\rho\hat{\nu}U)}{\partial \xi} + \frac{\partial (y\rho\hat{\nu}V)}{\partial \eta} \right] \quad (\text{A.52})$$

APÊNDICE B – DISCRETIZAÇÃO DOS OPERADORES DA EQUAÇÃO DIFERENCIAL DO MODELO SPALART-ALLMARAS EM VOLUMES FINITOS

Os termos ϕ e ψ presentes nas equações discretizadas são grandezas escalares quaisquer conforme dito anteriormente, entretanto, avaliando a equação do modelo, ϕ corresponde a \hat{v} e ψ a ρ . Outra variável que está presente em grande parte dos termos avaliados é y , que representa o raio ou distância da linha de simetria da tubeira até um volume ou a uma face.

Para seguir a mesma lógica descrita anteriormente, os subscritos em letras maiúsculas referem-se às propriedades avaliadas no centro dos volumes ao entorno do volume em questão P , onde N refere-se ao volume ao norte de P , S ao volume ao sul, W ao oeste, E ao leste, SE ao sudeste, SW ao sudoeste, NW ao noroeste e NE ao nordeste. Já as letras minúsculas w , e , n e s , referem-se às faces oeste, leste, norte e sul do volume P em questão, respectivamente. Para ilustrar esta notação, a Fig. B.1 representa um volume real em uma posição arbitrária do domínio curvilíneo.

FIGURA B.1 – VOLUME DE CONTROLE GENÉRICO NO SISTEMA DE COORDENADAS CURVILÍNEAS.



FONTE: O autor (2021).

O tamanho $\Delta\xi$ e $\Delta\eta$ dos elementos de volume podem assumir quaisquer valores. Sendo assim, considerou-se que ambos são unitários.

Para o processo de discretização, é importante ressaltar a importância da aplicação do Teorema de Gauss para transformar uma integração que seria em um volume fechado,

em uma integração que depende de uma área. Para isso, vale lembrar que:

$$\int_t \int_V (\phi) dV' dt' = \int_t \int_\xi \int_\eta 2\pi \frac{y}{J} (\phi) d\eta d\xi dt \quad (\text{B.1})$$

B.1 Termo temporal

O primeiro termo a ser discretizado é o termo temporal, originado da componente que no princípio foi uma derivada total de \hat{v} . Aplicando o teorema de Gauss:

$$\int_t \int_V \frac{\partial (\phi\psi)}{\partial t} dV' dt' = \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \left(2\pi \frac{y}{J} \frac{\partial (\phi\psi)}{\partial t} \right) d\eta d\xi dt \quad (\text{B.2})$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \left(2\pi \frac{y}{J} \frac{\partial (\phi\psi)}{\partial t} \right) d\eta d\xi dt = 2\pi \frac{y_p}{J_p} [(\phi\psi)_p - (\phi\psi)_p^*] \Delta\xi \Delta\eta \quad (\text{B.3})$$

Dividindo a Eq. B.3 por $2\pi\Delta t$ e sabendo que $\Delta\xi\Delta\eta$ é produto neutro na multiplicação, a equação discretizada resultante deste termo é:

$$\int_t \int_V \frac{\partial (\phi\psi)}{\partial t} dV' dt' = \frac{y_p}{J_p \Delta t} [(\phi\psi)_p - (\phi\psi)_p^*] \quad (\text{B.4})$$

o sobrescrito * corresponde a uma determinada variável avaliada na iteração anterior e o subscrito p , corresponde à propriedade avaliada no centro do volume em questão.

B.2 Termo difusivo

Considerando a Eq. A.22 e integrando-a no domínio de cálculo, obtém-se:

$$\begin{aligned} \int_t \int_V \frac{J}{y} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} [y\psi J (\phi_\xi \alpha - \phi_\eta \beta)] + \frac{\partial}{\partial \eta} [y\psi J (\phi_\eta \gamma - \phi_\xi \beta)] \right\} dV' dt' = \\ \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \int_{\eta_n}^{\eta_s} 2\pi \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} [y\psi J (\phi_\xi \alpha - \phi_\eta \beta)] + \frac{\partial}{\partial \eta} [y\psi J (\phi_\eta \gamma - \phi_\xi \beta)] \right\} d\eta d\xi dt \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Resolvendo as integrais do lado direito da Eq. B.5, chega-se em:

$$\begin{aligned} 2\pi \Delta t \left[(y\psi J \alpha \Delta \eta \phi_\xi)_e - (y\psi J \beta \Delta \eta \phi_\eta)_e - (y\psi J \alpha \Delta \eta \phi_\xi)_w + (y\psi J \beta \Delta \eta \phi_\eta)_w \right] + \\ 2\pi \Delta t \left[(y\psi J \gamma \Delta \xi \phi_\eta)_n - (y\psi J \beta \Delta \xi \phi_\xi)_n - (y\psi J \gamma \Delta \xi \phi_\eta)_s + (y\psi J \beta \Delta \xi \phi_\xi)_s \right] \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

As aproximações nas faces aqui consideradas são as fornecidas por Maliska (2004) nas páginas 287 e 288. Seus valores correspondem a:

$$\psi_e = \left(\frac{1}{2} + \alpha_e\right) \psi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e\right) \psi_E \quad (\text{B.7})$$

$$\psi_w = \left(\frac{1}{2} + \alpha_w\right) \psi_W + \left(\frac{1}{2} - \alpha_w\right) \psi_P \quad (\text{B.8})$$

$$\psi_n = \left(\frac{1}{2} + \alpha_n\right) \psi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_n\right) \psi_N \quad (\text{B.9})$$

$$\psi_s = \left(\frac{1}{2} + \alpha_s\right) \psi_S + \left(\frac{1}{2} - \alpha_s\right) \psi_P \quad (\text{B.10})$$

lembrando que as componentes do tensor métrico bidimensional, que são aplicadas em cada face é:

$$\alpha = x_\eta^2 + y_\eta^2 \quad (\text{B.11})$$

$$\beta = x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta \quad (\text{B.12})$$

$$\gamma = x_\xi^2 + y_\xi^2 \quad (\text{B.13})$$

As derivadas da Eq. B.6 também devem ser aproximadas. Estas aproximações são obtidas pelo esquema de aproximação CDS-2, também presentes em Maliska (2004), correspondem a:

$$\phi_\xi|_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta\xi} \quad (\text{B.14})$$

$$\phi_\xi|_w = \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta\xi} \quad (\text{B.15})$$

$$\phi_\xi|_n = \frac{\phi_E + \phi_{NE} - \phi_W - \phi_{NW}}{4\Delta\xi} \quad (\text{B.16})$$

$$\phi_\xi|_s = \frac{\phi_E + \phi_{SE} - \phi_W - \phi_{SW}}{4\Delta\xi} \quad (\text{B.17})$$

$$\phi_\eta|_n = \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta\eta} \quad (\text{B.18})$$

$$\phi_\eta|_s = \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta\eta} \quad (\text{B.19})$$

$$\phi_\eta|_e = \frac{\phi_N + \phi_{NE} - \phi_S - \phi_{SE}}{4\Delta\eta} \quad (\text{B.20})$$

$$\phi_\eta|_w = \frac{\phi_N + \phi_{NW} - \phi_S - \phi_{SW}}{4\Delta\eta} \quad (\text{B.21})$$

Substituindo as Eq. B.7 à Eq. B.10 e Eq. B.14 à B.21 na Eq. B.6, dividindo por $2\pi\Delta t$, sabendo que $\Delta\xi = \Delta\eta = 1$ e agrupando os termos na forma:

$$a_e\phi_E + a_p\phi_P + a_w\phi_W + a_n\phi_N + a_s\phi_S + a_{nw}\phi_{NW} + a_{ne}\phi_{NE} + a_{sw}\phi_{SW} + a_{se}\phi_{SE} \quad (\text{B.22})$$

encontra-se os seguintes coeficientes:

$$a_e = + (y_e J_e \alpha_e \psi_e) - \frac{(y_n J_n \beta_n \psi_n)}{4} + \frac{(y_s J_s \beta_s \psi_s)}{4} \quad (\text{B.23})$$

$$a_p = - (y_e J_e \alpha_e \psi_e) - (y_w J_w \alpha_w \psi_w) - (y_n J_n \gamma_n \psi_n) - (y_s J_s \gamma_s \psi_s) \quad (\text{B.24})$$

$$a_n = - \frac{(y_e J_e \beta_e \psi_e)}{4} + \frac{(y_w J_w \beta_w \psi_w)}{4} + (y_n J_n \gamma_n \psi_n) \quad (\text{B.25})$$

$$a_s = \frac{(y_e J_e \beta_e \psi_e)}{4} - \frac{(y_w J_w \beta_w \psi_w)}{4} + (y_s J_s \gamma_s \psi_s) \quad (\text{B.26})$$

$$a_w = + (y_w J_w \alpha_w \psi_w) + \frac{(y_n J_n \beta_n \psi_n)}{4} - \frac{(y_s J_s \beta_s \psi_s)}{4} \quad (\text{B.27})$$

$$a_{nw} = + \frac{(y_w J_w \beta_w \psi_w)}{4} + \frac{(y_n J_n \beta_n \psi_n)}{4} \quad (\text{B.28})$$

$$a_{ne} = - \frac{(y_e J_e \beta_e \psi_e)}{4} - \frac{(y_n J_n \beta_n \psi_n)}{4} \quad (\text{B.29})$$

$$a_{sw} = - \frac{(y_w J_w \beta_w \psi_w)}{4} - \frac{(y_s J_s \beta_s \psi_s)}{4} \quad (\text{B.30})$$

$$a_{se} = + \frac{(y_e J_e \beta_e \psi_e)}{4} + \frac{(y_s J_s \beta_s \psi_s)}{4} \quad (\text{B.31})$$

B.3 Termo advectivo

Considerando a Eq. A.51 e integrando-a no domínio de cálculo, obtém-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_V \left\{ \frac{J}{y} \left[\frac{\partial (y\phi\psi U)}{\partial \xi} + \frac{\partial (y\phi\psi V)}{\partial \eta} \right] \right\} dV' dt' = \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \int_{\eta_n}^{\eta_s} \left\{ 2\pi \left[\frac{\partial (y\phi\psi U)}{\partial \xi} + \frac{\partial (y\phi\psi V)}{\partial \eta} \right] \right\} d\eta d\xi dt \quad (\text{B.32})$$

Resolvendo o lado direito da Eq. B.32, chega-se em:

$$2\pi\Delta t [(y\phi\psi U)_e \Delta\eta - (y\phi\psi U)_w \Delta\eta + (y\phi\psi V)_n \Delta\xi - (y\phi\psi V)_s \Delta\xi] \quad (\text{B.33})$$

Dividindo a Eq. B.33 por $2\pi\Delta t$, aplicando as aproximações nas faces para ϕ , uma vez que esta é a variável principal, aplicando as considerações para $\Delta\xi$ e $\Delta\eta$ e reescrevendo os termos como feito na Eq. B.22, ou seja:

$$a_e\phi_E + a_p\phi_P + a_w\phi_W + a_n\phi_N + a_s\phi_S \quad (\text{B.34})$$

os coeficientes do termo advectivo podem ser calculados através de:

$$a_s = - (y_s\alpha_s\psi_s V_s) - \frac{(y_s\psi_s V_s)}{2} \quad (\text{B.35})$$

$$a_w = - (y_w\alpha_w\psi_w U_w) - \frac{(y_w\psi_w U_w)}{2} \quad (\text{B.36})$$

$$a_e = - (y_e\alpha_e\psi_e U_e) + \frac{(y_e\psi_e U_e)}{2} \quad (\text{B.37})$$

$$a_n = - (y_n\alpha_n\psi_n V_n) + \frac{(y_n\psi_n V_n)}{2} \quad (\text{B.38})$$

$$a_p = + (y_w\alpha_w\psi_w U_w) - \frac{(y_w\psi_w U_w)}{2} + (y_s\alpha_s\psi_s V_s) - \frac{(y_s\psi_s V_s)}{2} + (y_n\alpha_n\psi_n V_n) + \frac{(y_n\psi_n V_n)}{2} + (y_e\alpha_e\psi_e U_e) + \frac{(y_e\psi_e U_e)}{2} \quad (\text{B.39})$$

B.4 Operador $\nabla\psi \cdot \nabla\phi$

Considerando a Eq. A.28 e integrando-a no domínio de cálculo, obtém-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_V \left\{ J^2 [\phi_\xi \psi_\xi \alpha + \phi_\eta \psi_\eta \gamma - \psi_\eta \phi_\xi \beta - \psi_\xi \phi_\eta \beta] \right\} dV' dt' = \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \int_{\eta_n}^{\eta_s} \{ 2\pi J y [\phi_\xi \psi_\xi \alpha + \phi_\eta \psi_\eta \gamma - \psi_\eta \phi_\xi \beta - \psi_\xi \phi_\eta \beta] \} d\eta d\xi dt \quad (\text{B.40})$$

Resolvendo as integrais do lado direito da Eq. B.40, após dividir por $2\pi\Delta t$ e considerando que $\Delta\eta = \Delta\xi = 1$, chega-se em:

$$J_p y_p [\alpha_p (\phi_e - \phi_w) (\psi_e - \psi_w) + \gamma_p (\phi_n - \phi_s) (\psi_n - \psi_s)] + J_p y_p [-\beta_p (\phi_e - \phi_w) (\psi_n - \psi_s) - \beta_p (\phi_n - \phi_s) (\psi_e - \psi_w)] \quad (\text{B.41})$$

Lembrando que as componentes do tensor métrico são avaliadas no centro de cada volume de controle. Podendo ser representadas como:

$$\alpha_p = (x_n - x_s)^2 + (y_n - y_s)^2 \quad (\text{B.42})$$

$$\beta_p = (x_e - x_w) (x_n - x_s) + (y_e - y_w) (y_n - y_s) \quad (\text{B.43})$$

$$\gamma_p = (x_e - x_w)^2 + (y_e - y_w)^2 \quad (\text{B.44})$$

Considerando ϕ igual a \hat{v} e ψ igual a ρ na Eq. B.41, obtém-se a equação discretizada para $\nabla\rho \cdot \nabla\hat{v}$. Para obter $(\nabla\hat{v})^2$, basta considerar $\phi = \psi = \hat{v}$ na mesma equação. Tanto $\nabla\rho \cdot \nabla\hat{v}$, quanto $(\nabla\hat{v})^2$ são computados como integrandos do termo fonte na solução do sistema linear, descrito na próxima seção.

B.5 Composição do sistema linear

Combinando as formas discretizadas para o termo temporal e advectivo:

$$\frac{y_p}{J_p \Delta t} \left[(\rho\hat{v})_p - (\rho\hat{v})_p^* \right] + (a_e \hat{v}_E + a_p \hat{v}_P + a_w \hat{v}_W + a_n \hat{v}_N + a_s \hat{v}_S)_{adv} \quad (\text{B.45})$$

ou

$$a_{tp} \hat{v}_p + (a_e \hat{v}_E + a_p \hat{v}_P + a_w \hat{v}_W + a_n \hat{v}_N + a_s \hat{v}_S)_{adv} - a_{tp^*} \hat{v}_{p^*} \quad (\text{B.46})$$

A Eq. B.46 possui dois coeficientes avaliados no volume P , $(a_p)_{adv}$ e a_{tp} , que podem ser somados em um único termo, a_{pLHS} . A componente sobressalente do termo temporal $-a_{tp*}\hat{\nu}_{p*}$, é adicionada ao termo fonte. Portanto, ainda pode ser reescrita como:

$$(a_e\hat{\nu}_E + a_p\hat{\nu}_P + a_w\hat{\nu}_W + a_n\hat{\nu}_N + a_s\hat{\nu}_S)_{LHS} \quad (B.47)$$

O mesmo por ser feito para a combinação dos termos difusivos, termos fonte (dividindo os termos de transformação de energia do campo médio para a turbulência e transformação de energia cinética em energia interna por $2\pi\Delta t$ assim como foi feito para todos as outras componentes), produtos entre gradientes e contribuição temporal da iteração anterior. Resultando em:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sigma} (a_e\hat{\nu}_E + a_p\hat{\nu}_P + a_w\hat{\nu}_W + a_n\hat{\nu}_N + a_s\hat{\nu}_S + a_{nw}\hat{\nu}_{NW} + a_{ne}\hat{\nu}_{NE} + a_{sw}\hat{\nu}_{SW} + a_{se}\hat{\nu}_{SE})_{dif} \\ & - \frac{(\nu + \hat{\nu})}{\sigma} \nabla\rho \cdot \nabla\hat{\nu} + \frac{c_{b2}}{\sigma} \rho (\nabla\hat{\nu})^2 + \frac{\rho c_{b1} (1 - f_{t2}) \tilde{S}\hat{\nu}}{2\pi\Delta t} \\ & - \frac{\rho}{2\pi\Delta t} \left(c_{w1}f_{wall} - \frac{c_{b1}f_{t2}}{\kappa^2} \right) \left(\frac{\hat{\nu}}{d} \right)^2 + \frac{y_p}{J_p\Delta t} (\rho\hat{\nu})_p^* \end{aligned} \quad (B.48)$$

sendo que os termos $\nabla\rho \cdot \nabla\hat{\nu}$ e $(\nabla\hat{\nu})^2$ da Eq. B.48 correspondem, respectivamente, a:

$$\begin{aligned} \nabla\rho \cdot \nabla\hat{\nu} = & J_p y_p [\alpha_p (\hat{\nu}_e - \hat{\nu}_w) (\rho_e - \rho_w) + \gamma_p (\hat{\nu}_n - \hat{\nu}_s) (\rho_n - \rho_s)] + \\ & J_p y_p [-\beta_p (\hat{\nu}_e - \hat{\nu}_w) (\rho_n - \rho_s) - \beta_p (\hat{\nu}_n - \hat{\nu}_s) (\rho_e - \rho_w)] \end{aligned} \quad (B.49)$$

$$\begin{aligned} (\nabla\hat{\nu})^2 = & J_p y_p [(\hat{\nu}_e - \hat{\nu}_w) \alpha_p (\hat{\nu}_e - \hat{\nu}_w) + (\hat{\nu}_n - \hat{\nu}_s) \gamma_p (\hat{\nu}_n - \hat{\nu}_s)] + \\ & J_p y_p [-(\hat{\nu}_e - \hat{\nu}_w) \beta_p (\hat{\nu}_e - \hat{\nu}_w) - (\hat{\nu}_n - \hat{\nu}_s) \beta_p (\hat{\nu}_n - \hat{\nu}_s)] \end{aligned} \quad (B.50)$$

Pode-se perceber que o primeiro termo da Eq. B.48 é multiplicado por σ^{-1} e também, que existem diversos outros termos que são calculados no centro de cada volume. Tais termos são parte do termo fonte do sistema linear. Considerando a multiplicação distributiva de σ^{-1} para os coeficientes do termo difusivo e a inserção de um novo termo, $STSA$, a Eq. B.48 é reescrita como:

$$(a_e\hat{\nu}_E + a_p\hat{\nu}_P + a_w\hat{\nu}_W + a_n\hat{\nu}_N + a_s\hat{\nu}_S + a_{nw}\hat{\nu}_{NW} + a_{ne}\hat{\nu}_{NE} + a_{sw}\hat{\nu}_{SW} + a_{se}\hat{\nu}_{SE})_{RHS} + STSA \quad (B.51)$$

Igualando B.47 com B.51, encontra-se:

$$\begin{aligned}
 (a_e \hat{\nu}_E + a_p \hat{\nu}_P + a_w \hat{\nu}_W + a_n \hat{\nu}_N + a_s \hat{\nu}_S)_{LHS} &= (a_e \hat{\nu}_E + a_p \hat{\nu}_P + a_w \hat{\nu}_W + a_n \hat{\nu}_N + a_s \hat{\nu}_S)_{RHS} \\
 &+ (a_{nw} \hat{\nu}_{NW} + a_{ne} \hat{\nu}_{NE} + a_{sw} \hat{\nu}_{SW} + a_{se} \hat{\nu}_{SE})_{RHS} \\
 &+ STSA
 \end{aligned}
 \tag{B.52}$$

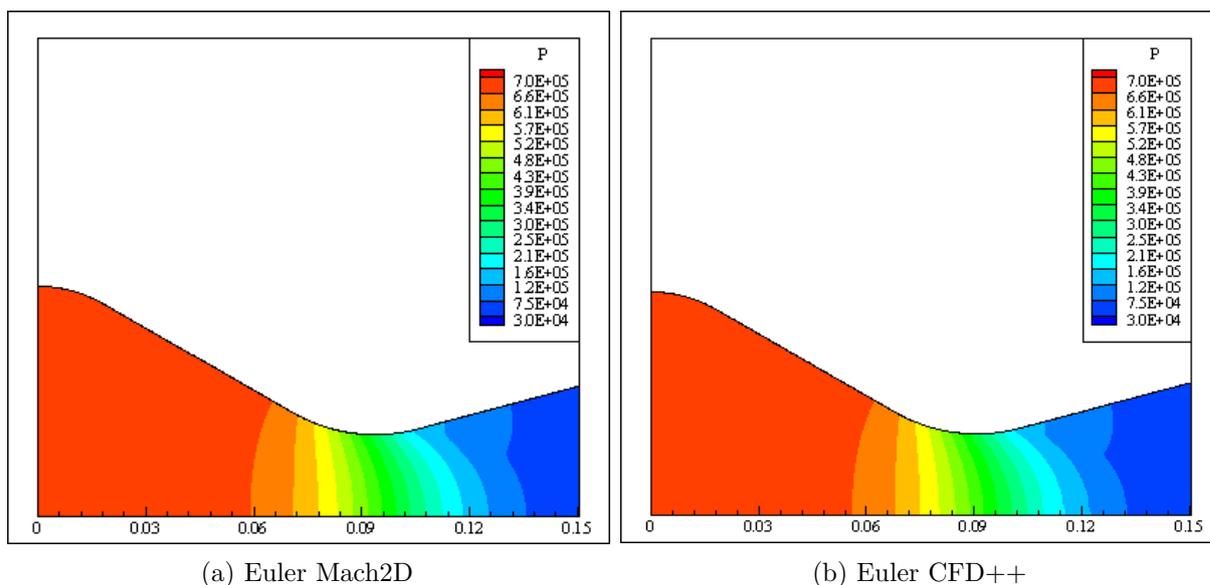
Finalmente, eliminando o produto do vetor das incógnitas e passando os coeficientes do lado direito da Eq. B.52 para o lado esquerdo com o sinal negativo e efetuando a operação, chega-se em um novo conjunto de coeficientes. Rearranjando os termos chega-se no sistema linear, Eq. B.53, que deve ser resolvido para que a variável de trabalho possa ser devidamente calculada e com ela, posteriormente, possa ser obtida a viscosidade cinemática turbulenta, ν_{turb} .

$$[a]_{SA} \hat{\nu} = \overrightarrow{STSA}
 \tag{B.53}$$

APÊNDICE C – CAMPOS DE PROPRIEDADES DAS SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS COM O MACH2D E CFD++

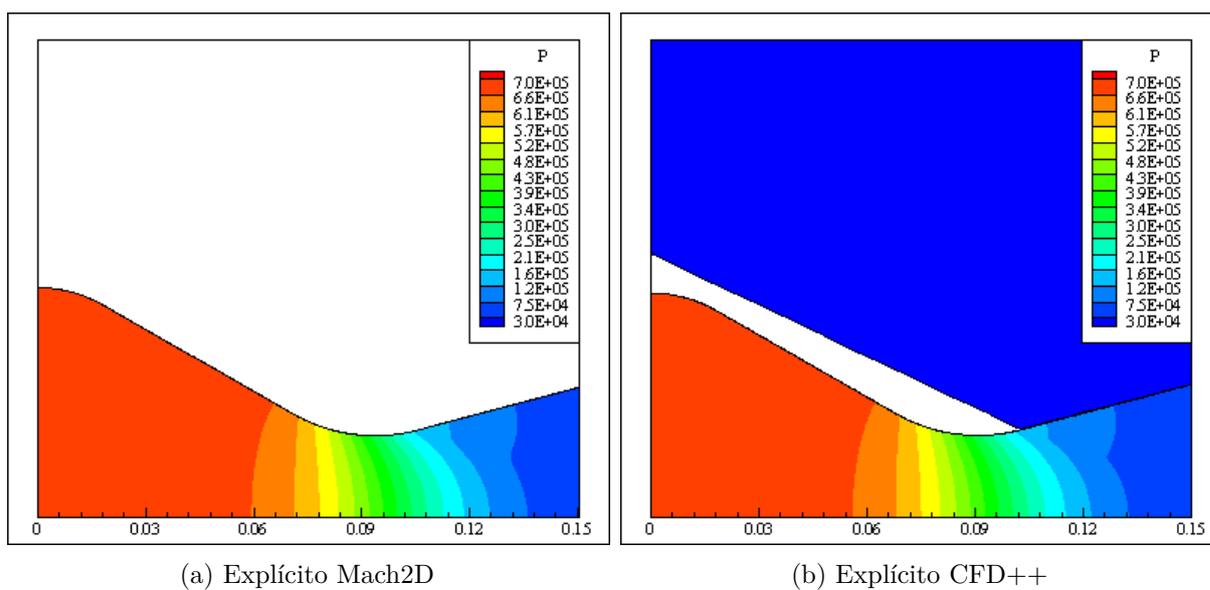
C.1 Campos de distribuição de pressão [kPa]

FIGURA C.1 – CAMPOS DE PRESSÃO OBTIDOS COM O MODELO DE EULER.



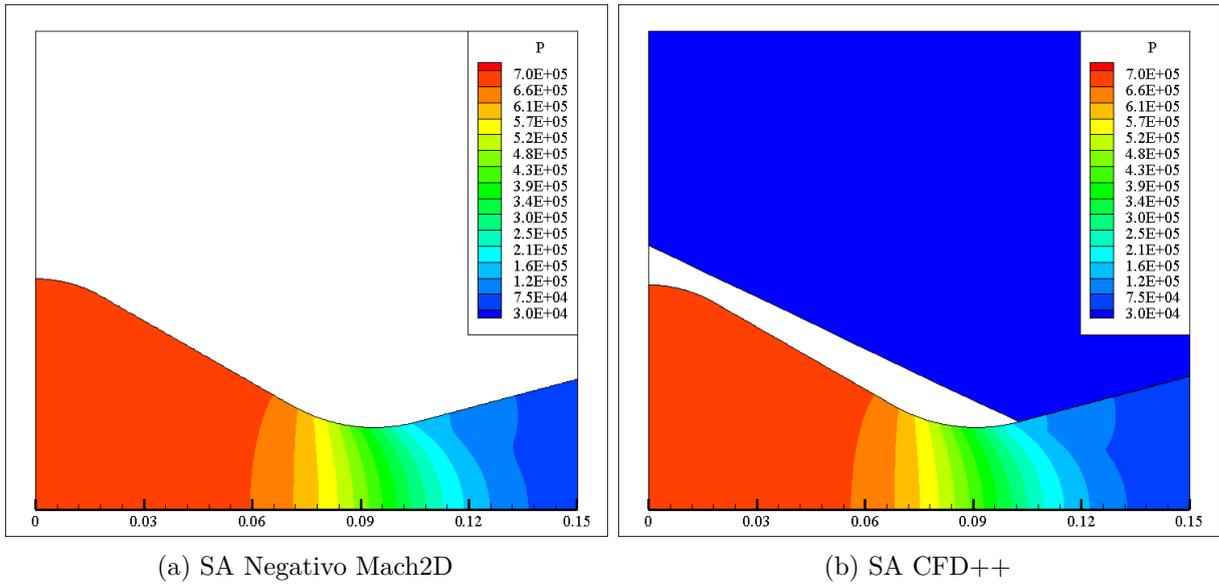
FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.2 – CAMPOS DE PRESSÃO OBTIDOS COM O MODELO EXPLÍCITO.



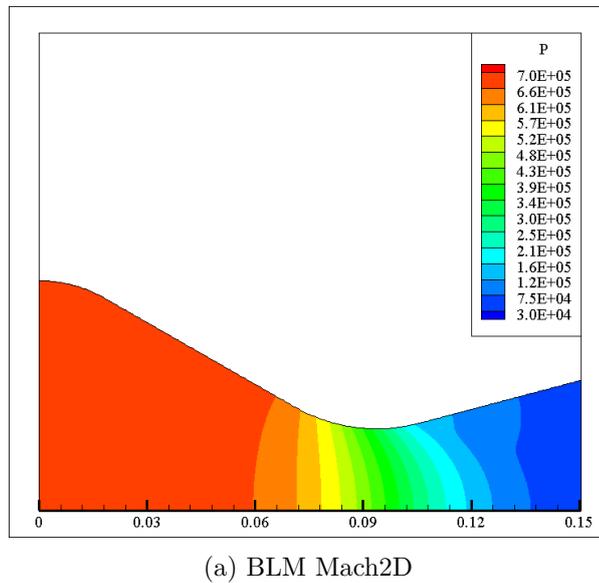
FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.3 – CAMPOS DE PRESSÃO OBTIDOS COM O MODELO SA.



FONTE: O autor (2021).

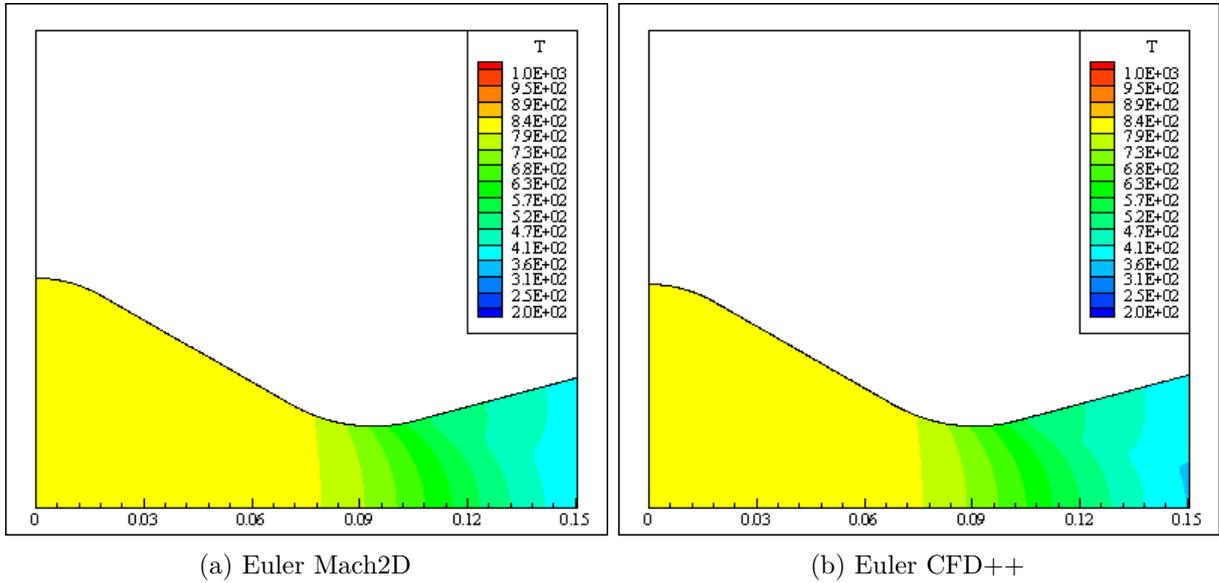
FIGURA C.4 – CAMPO DE PRESSÃO OBTIDO COM O MODELO BLM.



FONTE: O autor (2021).

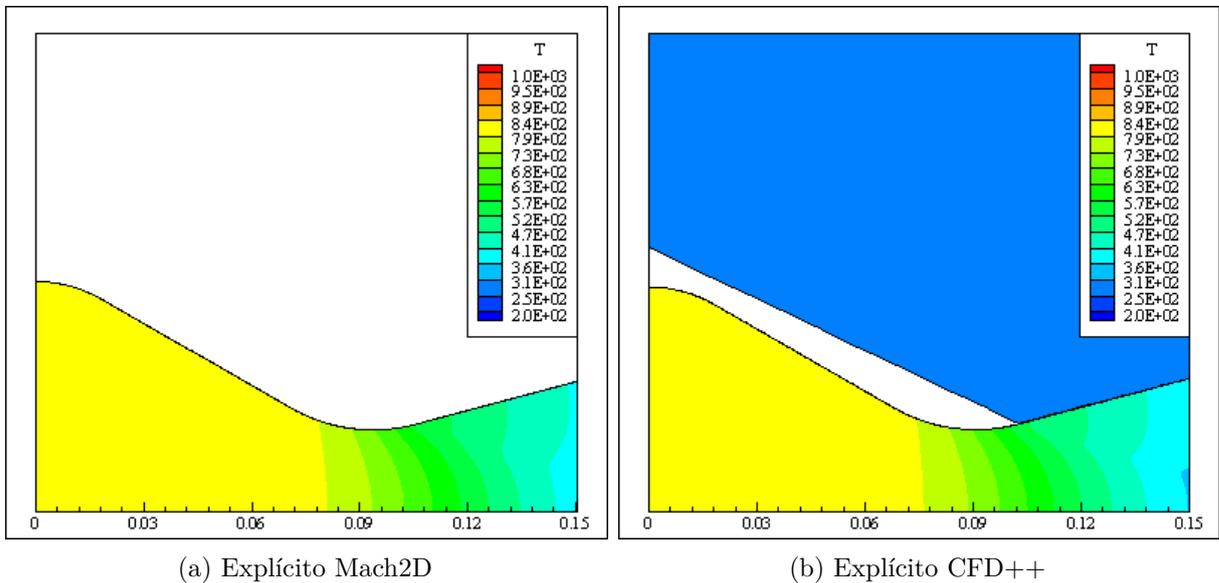
C.2 Campos de distribuição de temperatura [K]

FIGURA C.5 – CAMPOS DE TEMPERATURA OBTIDOS COM O MODELO DE EULER.



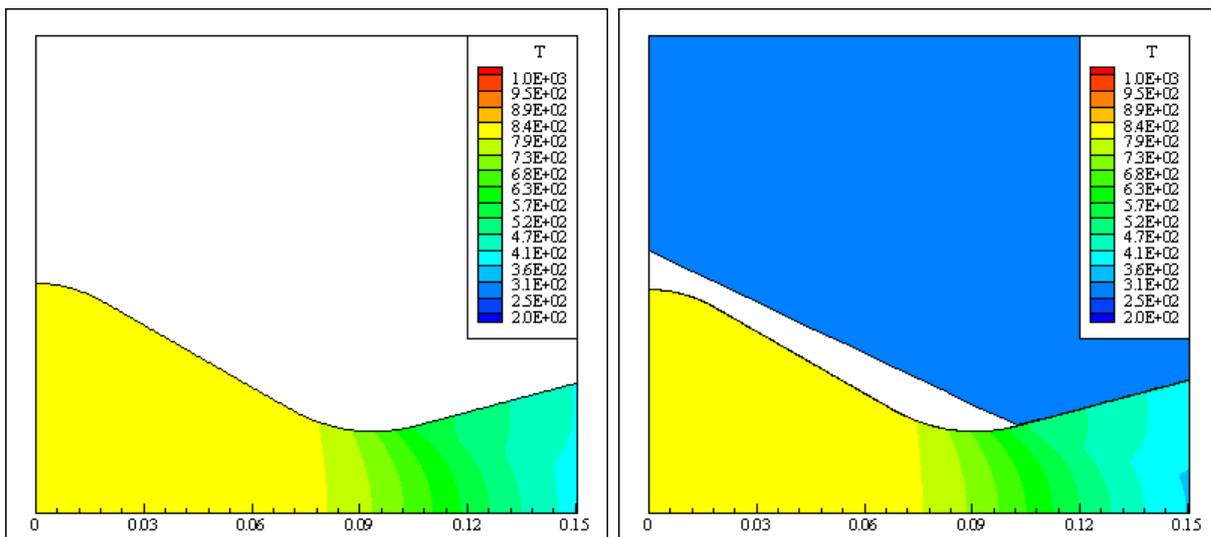
FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.6 – CAMPOS DE TEMPERATURA OBTIDOS COM O MODELO EXPLÍCITO.



FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.7 – CAMPOS DE TEMPERATURA OBTIDOS COM O MODELO SA.

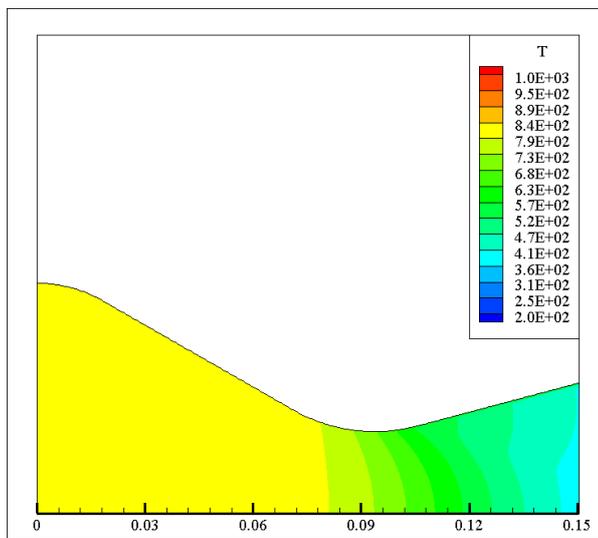


(a) SA Negativo Mach2D

(b) SA CFD++

FONTE: O autor (2021).

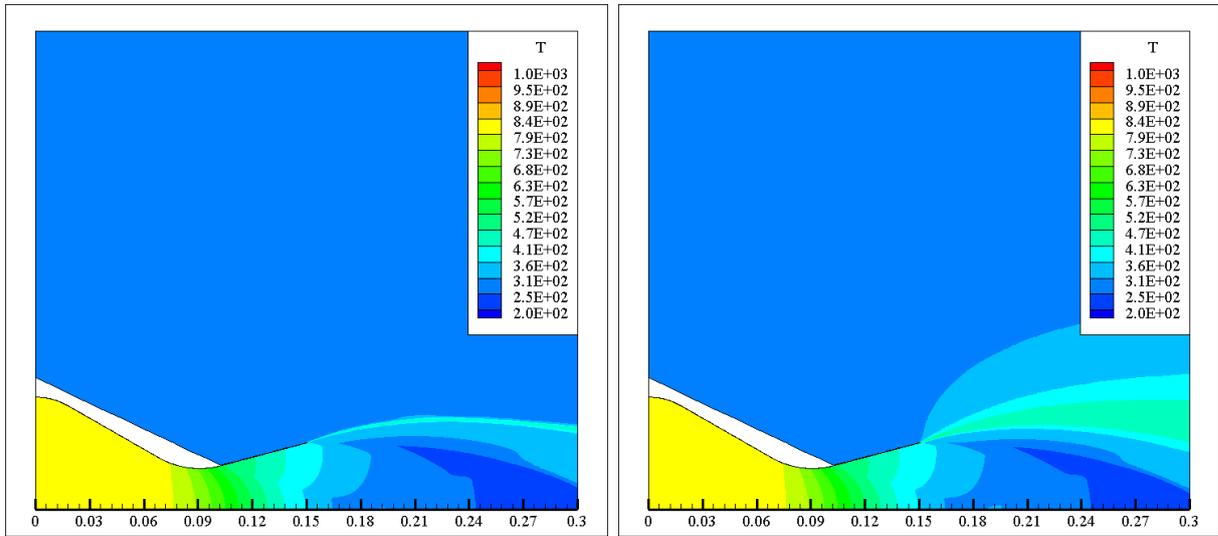
FIGURA C.8 – CAMPO DE TEMPERATURA OBTIDO COM O MODELO BLM.



(a) BLM Mach2D

FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.9 – CAMPOS DE DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURA COM MODELOS EXPLÍCITO E SA FORA DA TUBEIRA.



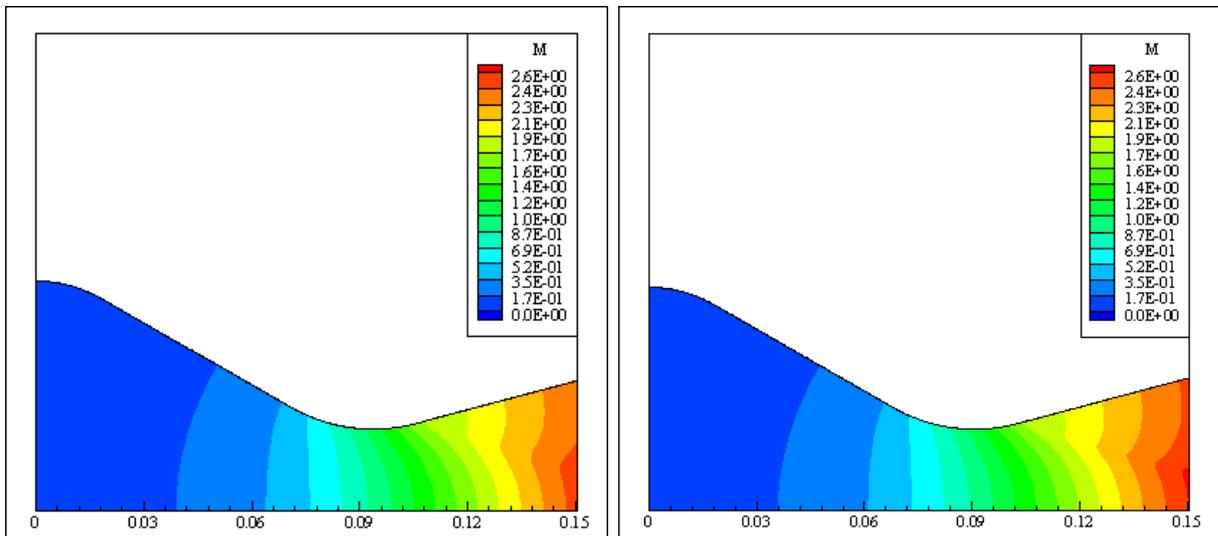
(a) Explicito CFD++

(b) SA CFD++

FONTE: O autor (2021).

C.3 Campos de distribuição de número de Mach

FIGURA C.10 – CAMPOS DE MACH OBTIDOS COM O MODELO DE EULER.

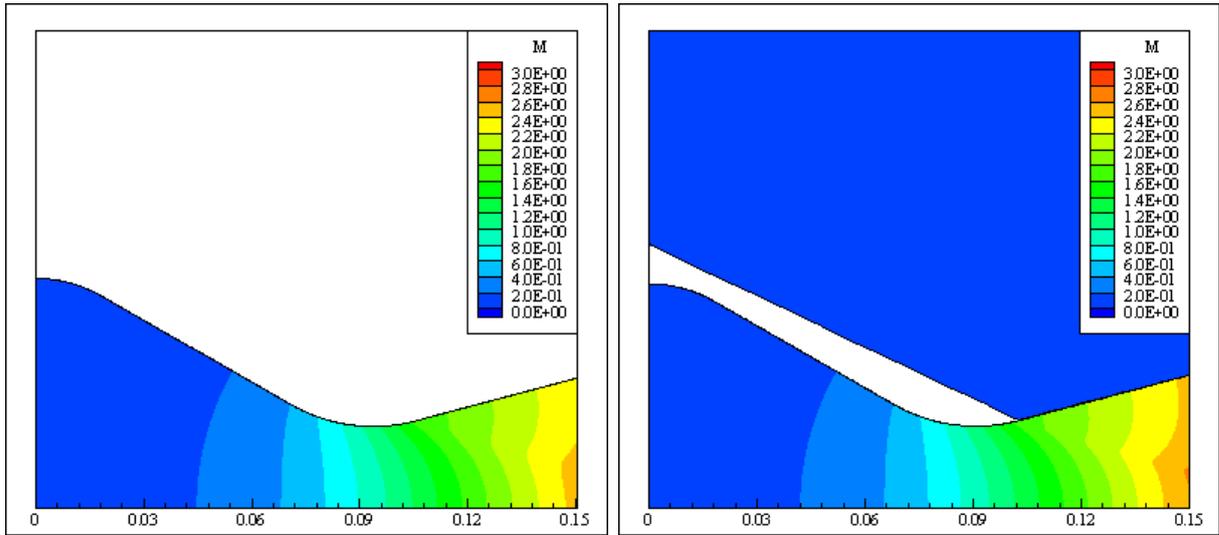


(a) Euler Mach2D

(b) Euler CFD++

FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.11 – CAMPOS DE MACH OBTIDOS COM O MODELO EXPLÍCITO.

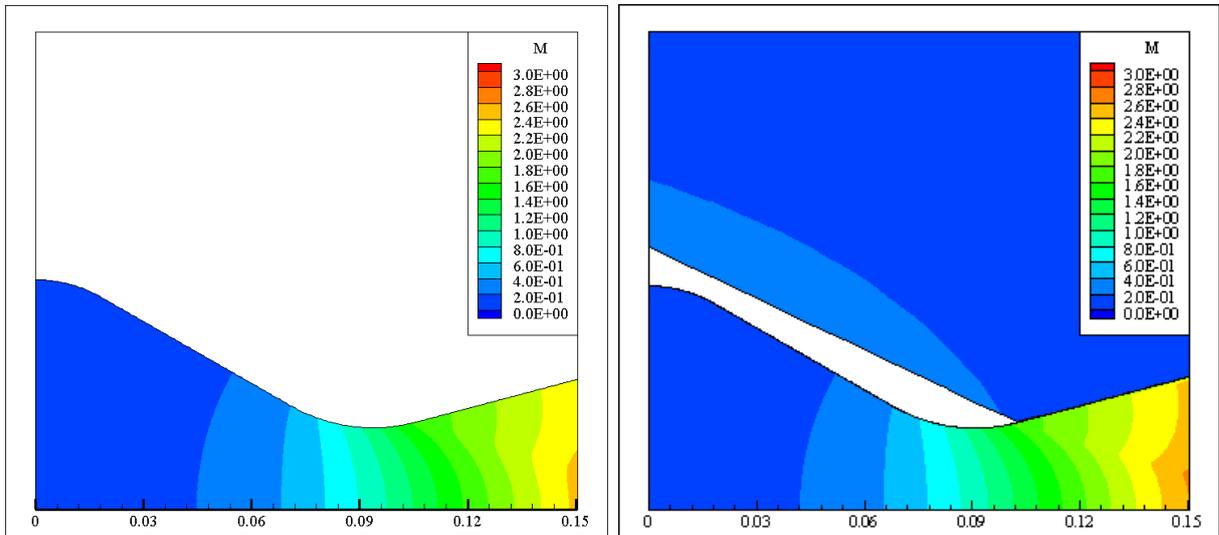


(a) Explicito Mach2D

(b) Explicito CFD++

FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.12 – CAMPOS DE MACH OBTIDOS COM O MODELO SA.

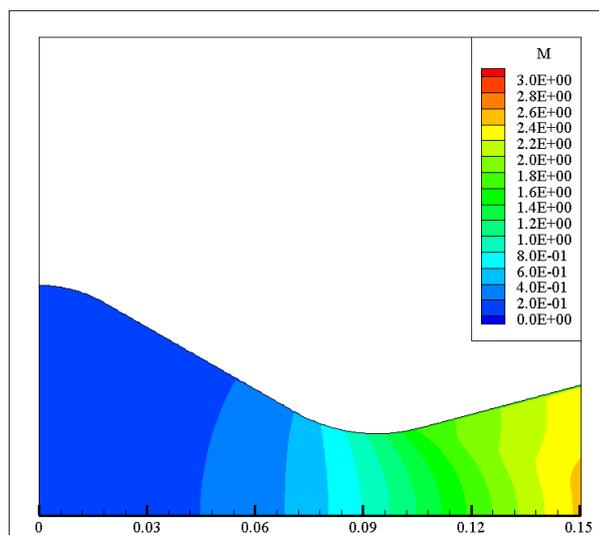


(a) SA Negativo Mach2D

(b) SA CFD++

FONTE: O autor (2021).

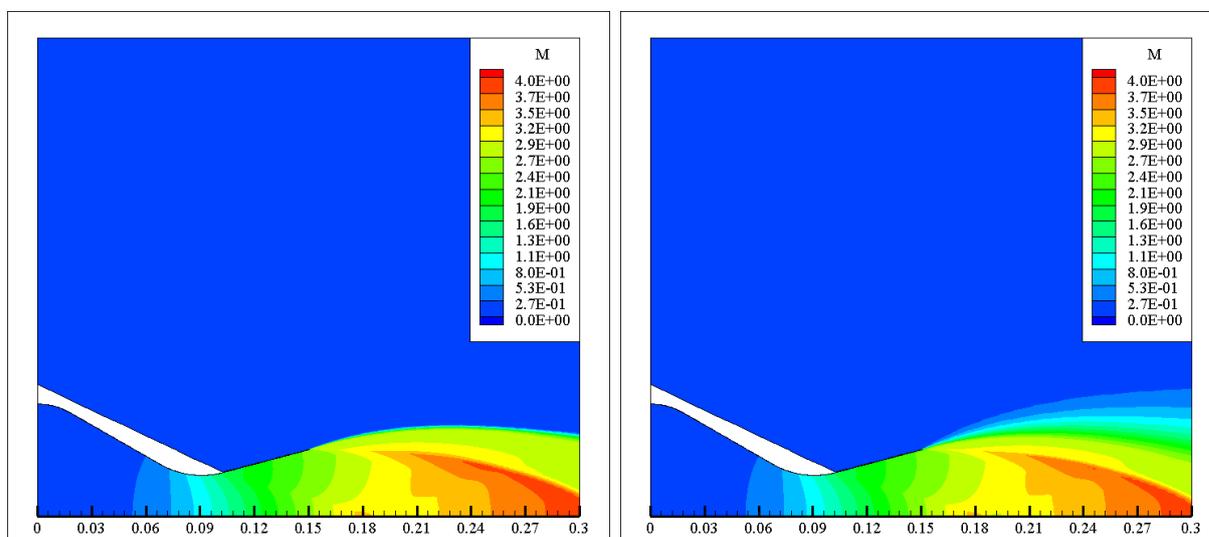
FIGURA C.13 – CAMPO DE MACH OBTIDO COM O MODELO BLM.



(a) BLM Mach2D

FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.14 – CAMPOS DE DISTRIBUIÇÃO DE MACH PARA EXPLÍCITO E SA FORA DA TUBEIRA.



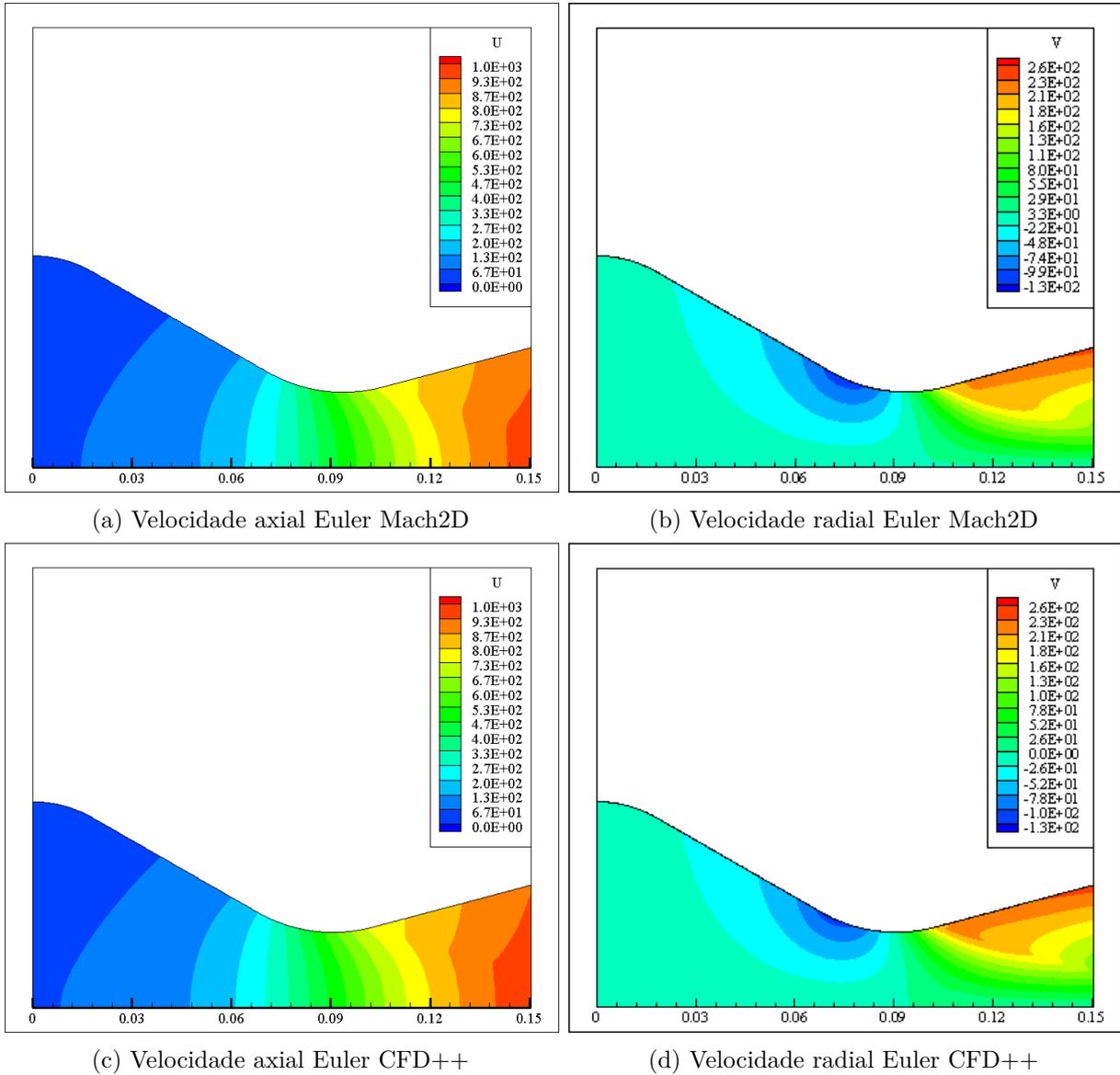
(a) Explícito CFD++

(b) SA CFD++

FONTE: O autor (2021).

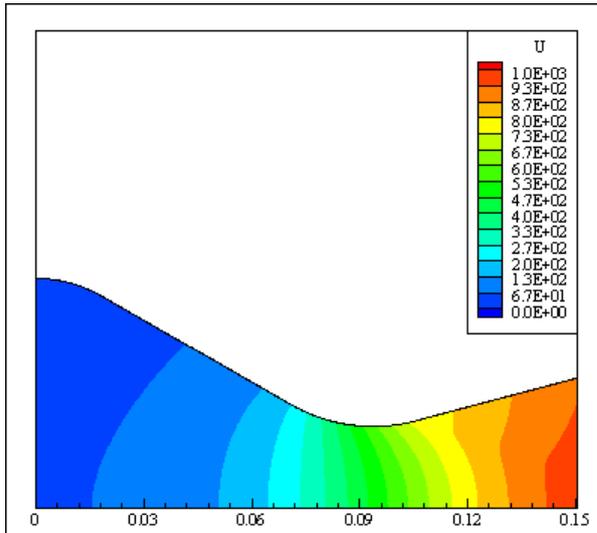
C.4 Campos de distribuição de velocidades [m/s]

FIGURA C.15 – CAMPOS DE VELOCIDADES COM O MODELO DE EULER.

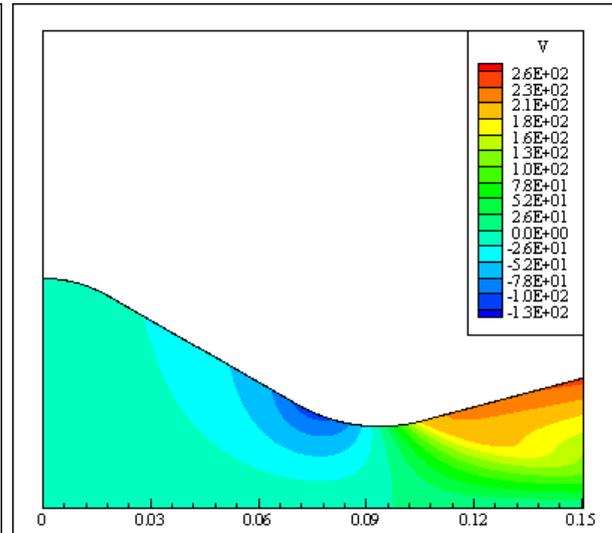


FONTE: O autor (2021).

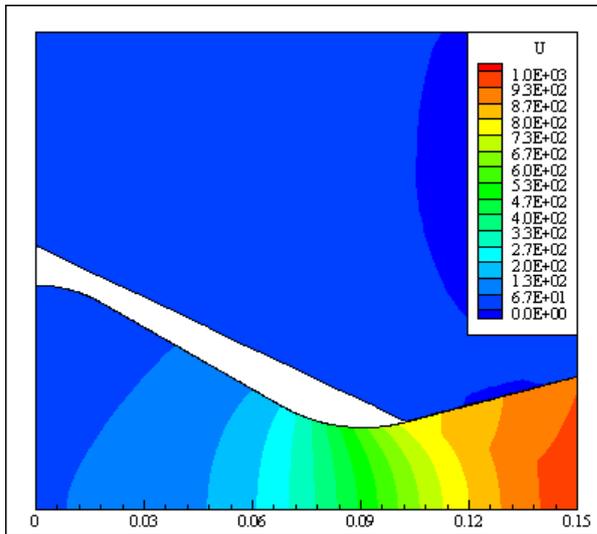
FIGURA C.16 – CAMPOS DE VELOCIDADES COM O MODELO EXPLÍCITO.



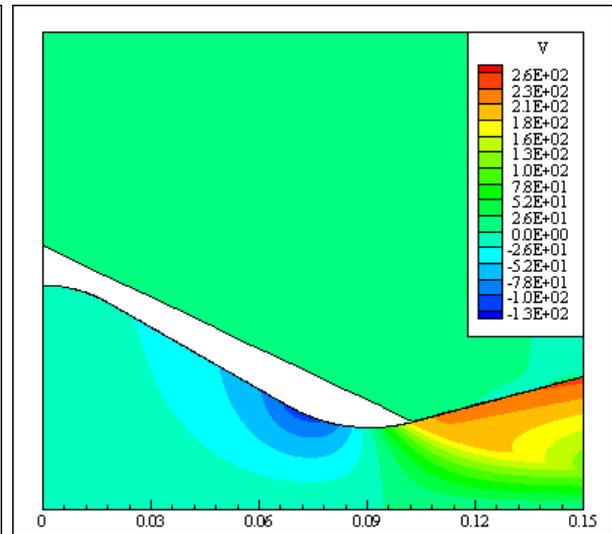
(a) Velocidade axial modelo Explícito Mach2D



(b) Velocidade radial modelo Explícito Mach2D



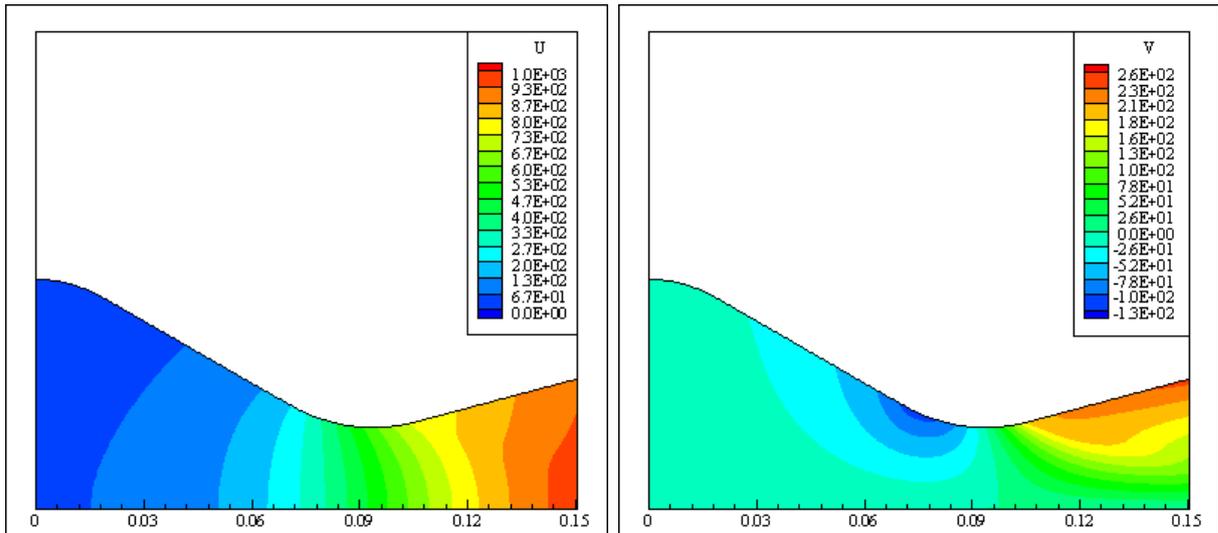
(c) Velocidade axial modelo Explícito CFD++



(d) Velocidade radial modelo Explícito CFD++

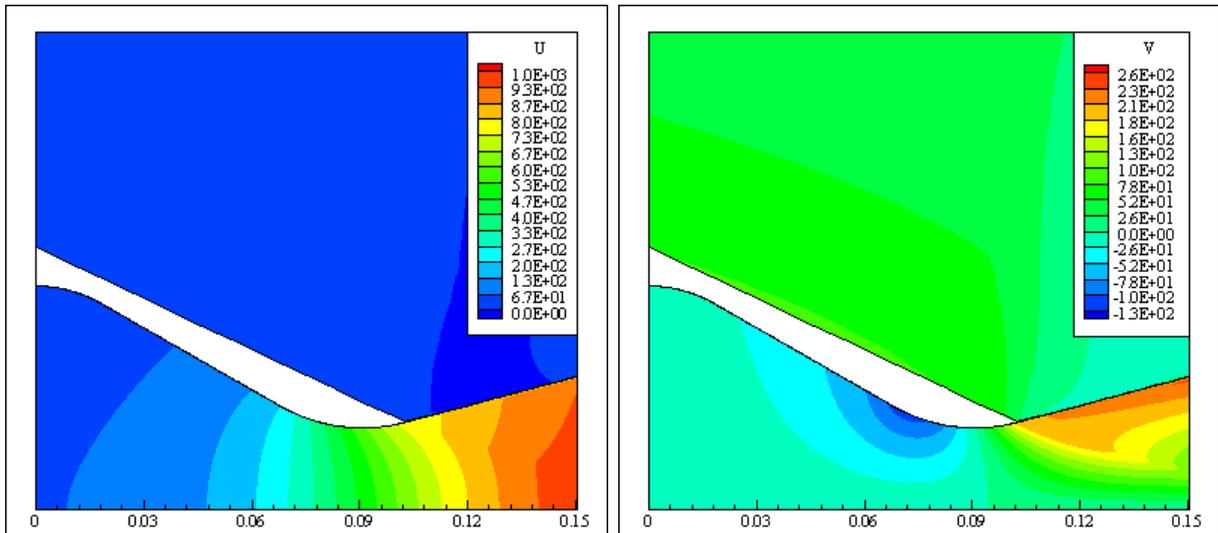
FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.17 – CAMPOS DE VELOCIDADES COM O MODELO SA.



(a) Velocidade axial SA Negativo Mach2D

(b) Velocidade radial SA Negativo Mach2D

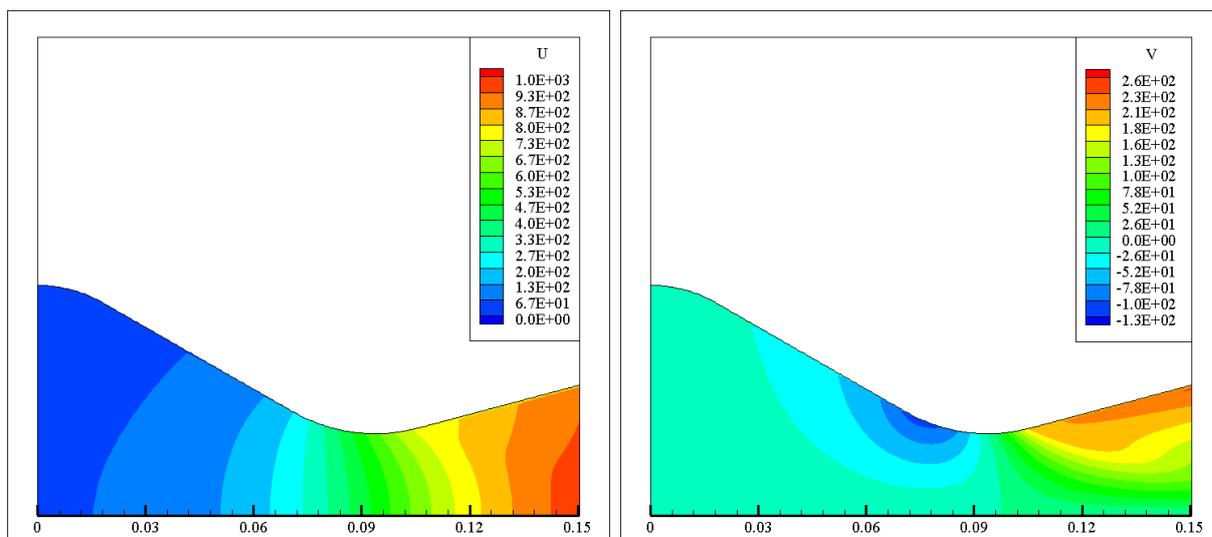


(c) Velocidade axial SA CFD++

(d) Velocidade radial SA CFD++

FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.18 – CAMPOS DE VELOCIDADES COM O MODELO BLM.

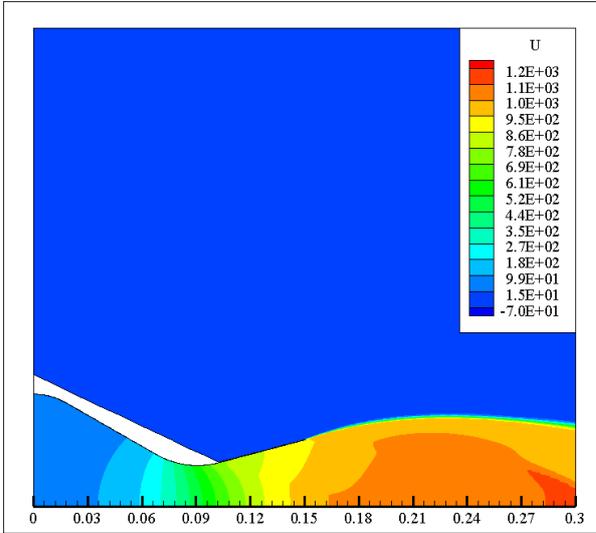


(a) Velocidade axial BLM Mach2D

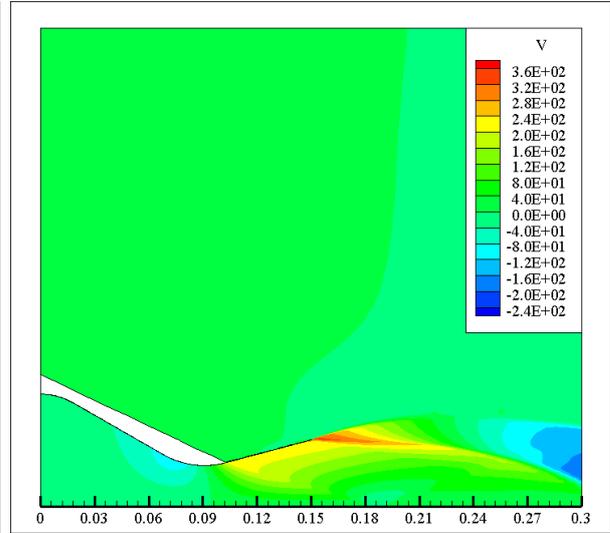
(b) Velocidade radial BLM Mach2D

FONTE: O autor (2021).

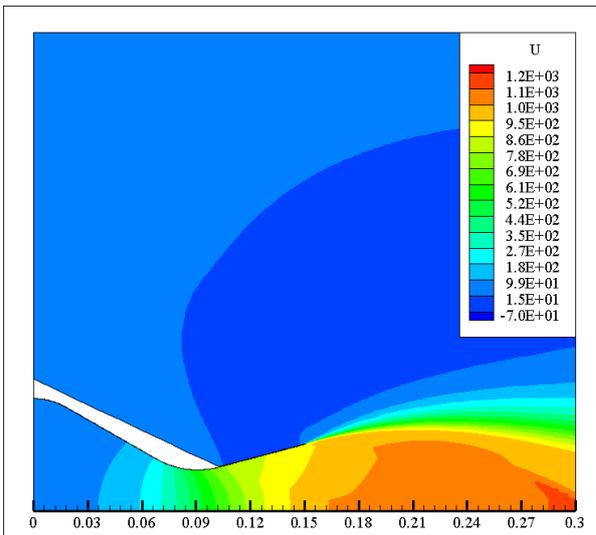
FIGURA C.19 – CAMPOS DE VELOCIDADES PARA MODELO EXPLÍCITO E MODELO SA FORA DA TUBEIRA.



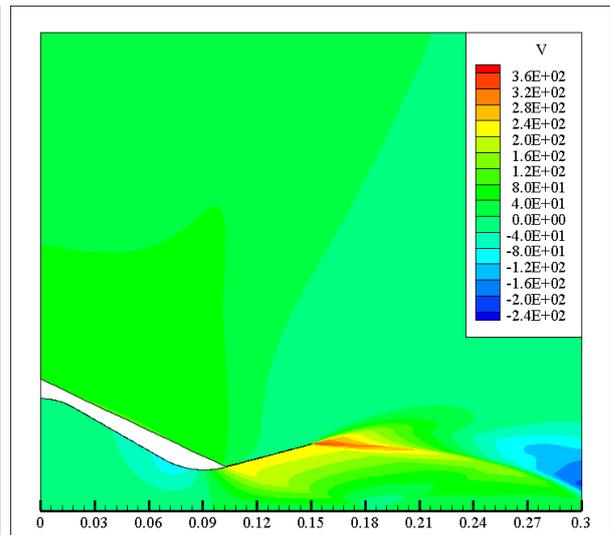
(a) Velocidade axial modelo Explícito CFD++



(b) Velocidade radial modelo Explícito CFD++



(c) Velocidade axial SA CFD++

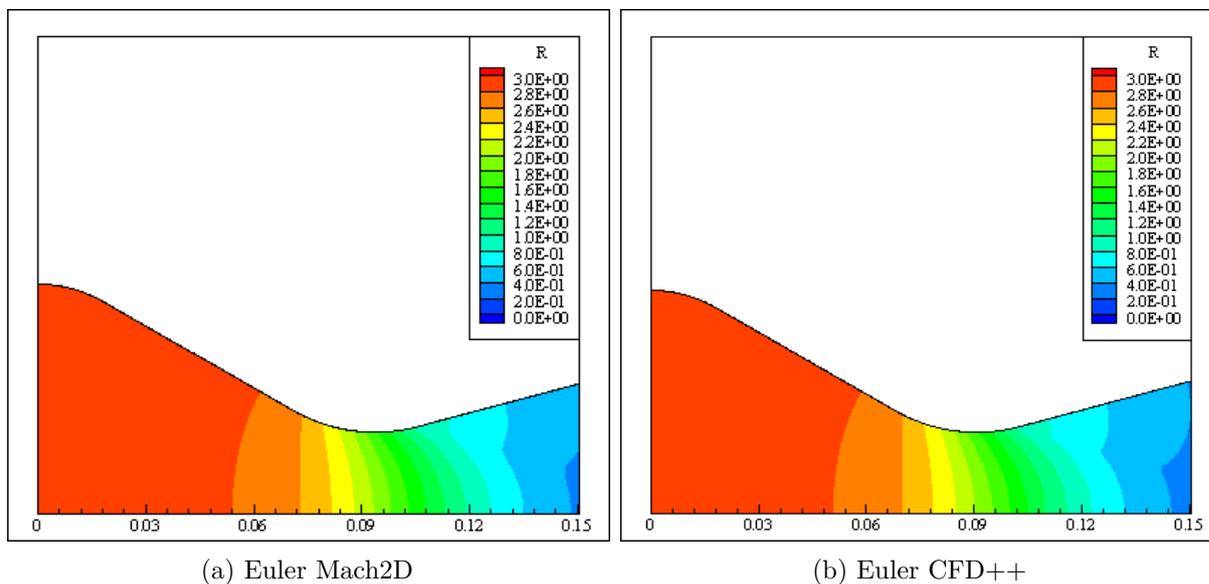


(d) Velocidade radial SA CFD++

FONTE: O autor (2021).

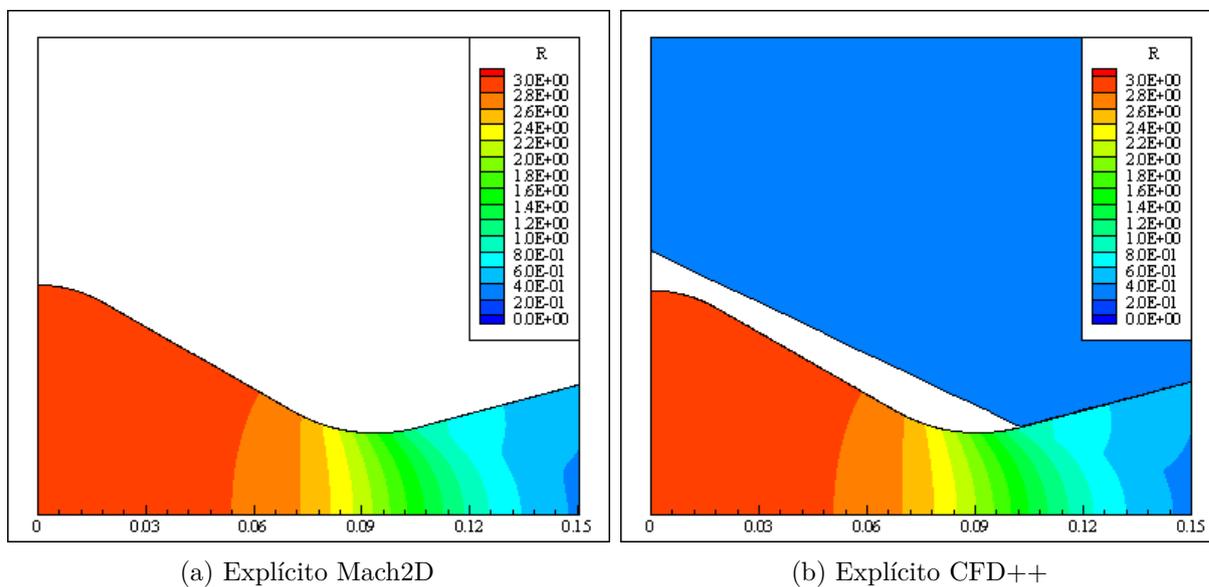
C.5 Campos de distribuição de massa específica [kg/m³]

FIGURA C.20 – CAMPOS DE MASSA ESPECÍFICA COM MODELO DE EULER.



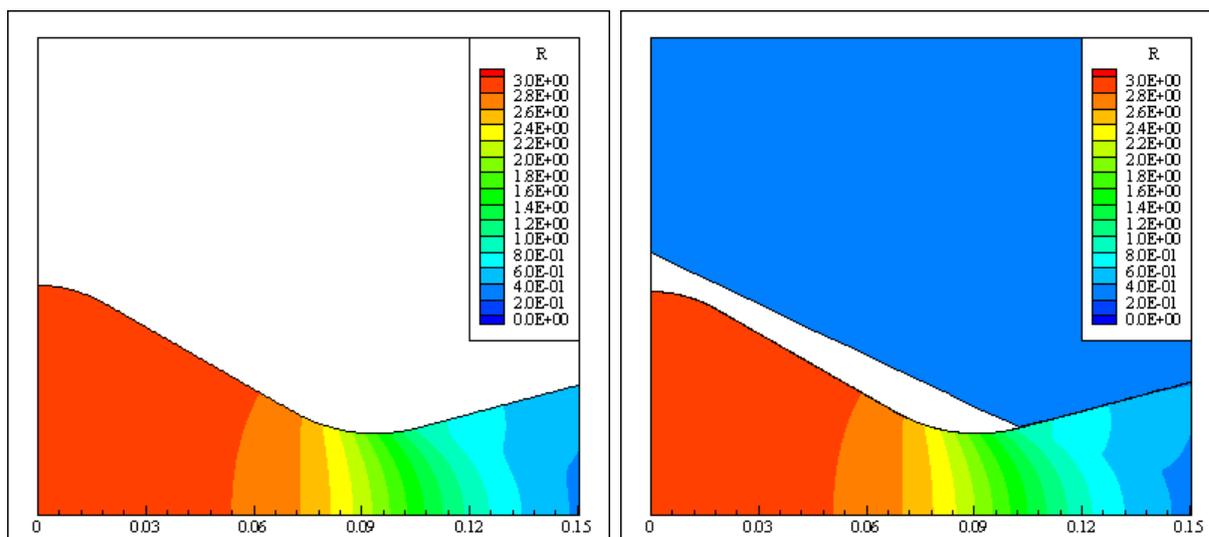
FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.21 – CAMPOS DE MASSA ESPECÍFICA COM MODELO EXPLÍCITO.



FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.22 – CAMPOS DE MASSA ESPECÍFICA COM MODELO SA.

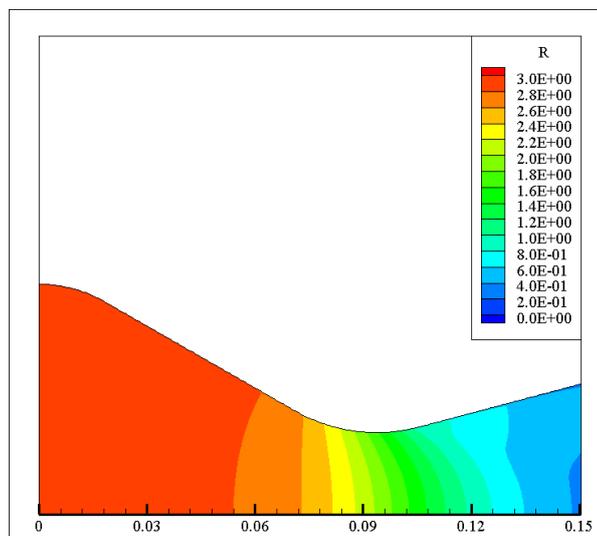


(a) SA Negativo Mach2D

(b) SA CFD++

FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.23 – CAMPO DE MASSA ESPECÍFICA COM MODELO BLM.

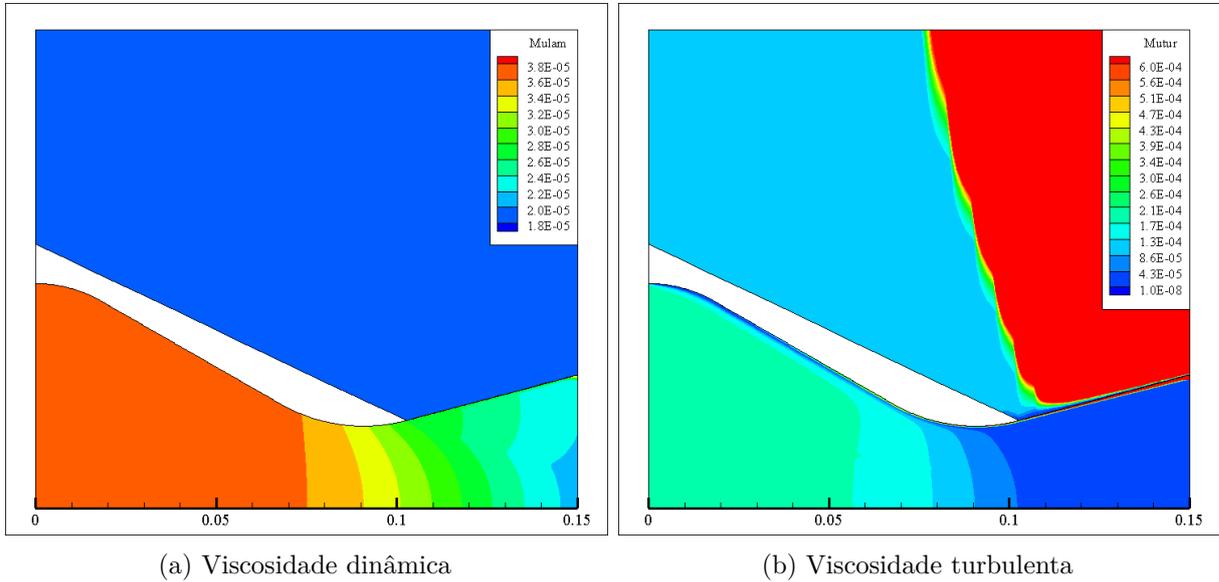


(a) BLM Mach2D

FONTE: O autor (2021).

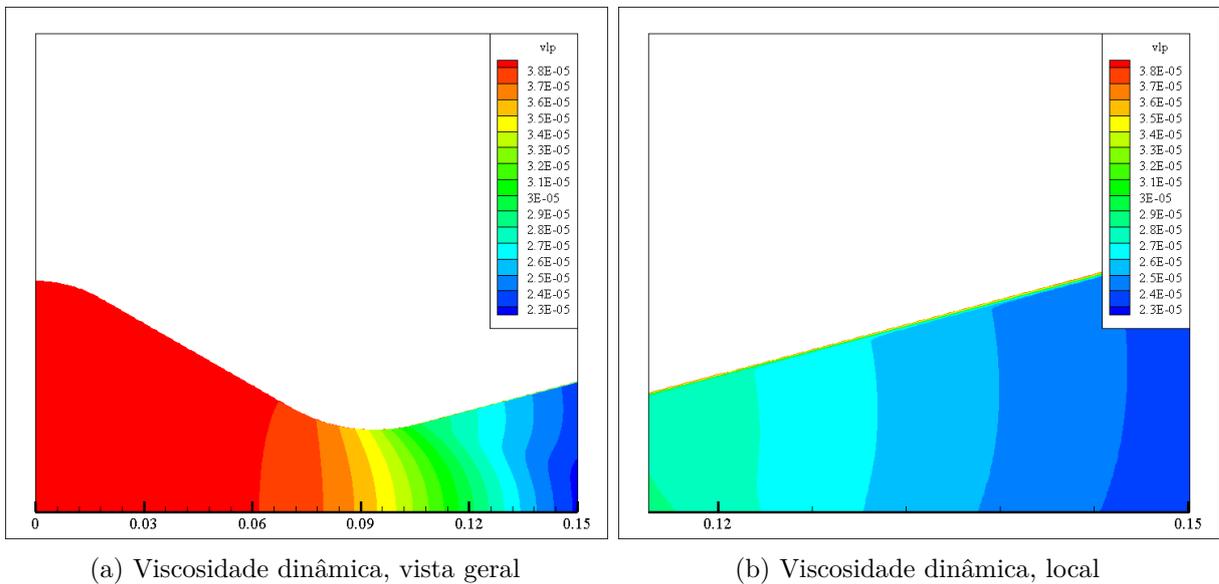
C.6 Campos de distribuição de viscosidade [Pa.s]

FIGURA C.24 – CAMPOS DE VISCOSIDADE DINÂMICA E VISCOSIDADE TURBULENTA COM O CFD++ PARA O MODELO SA.



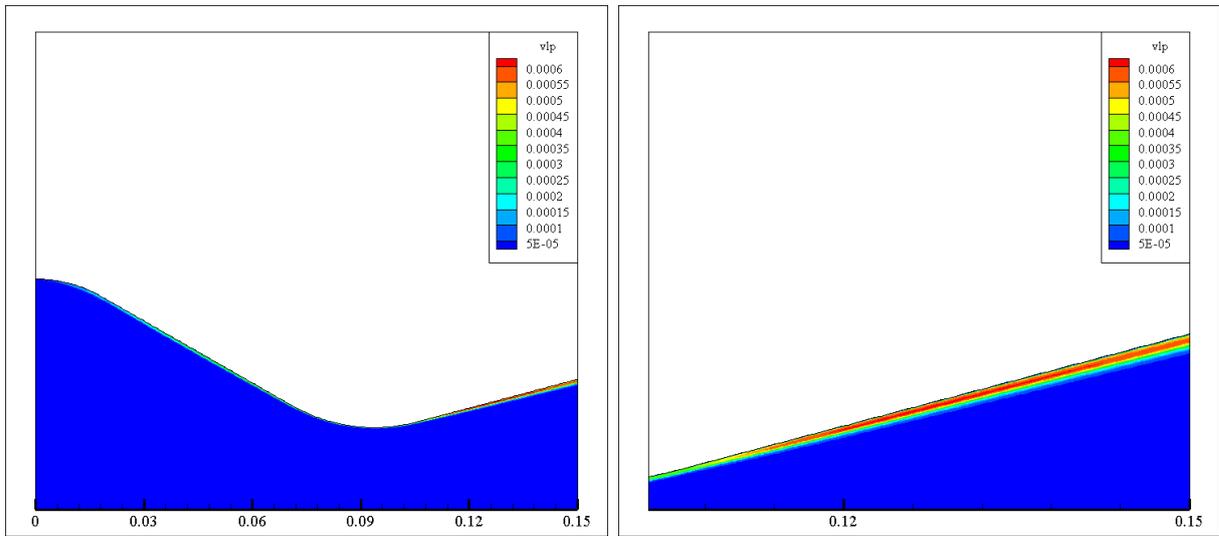
FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.25 – CAMPOS DE VISCOSIDADE DINÂMICA CALCULADA PELO MACH2D PARA O MODELO EXPLÍCITO.



FONTE: O autor (2021).

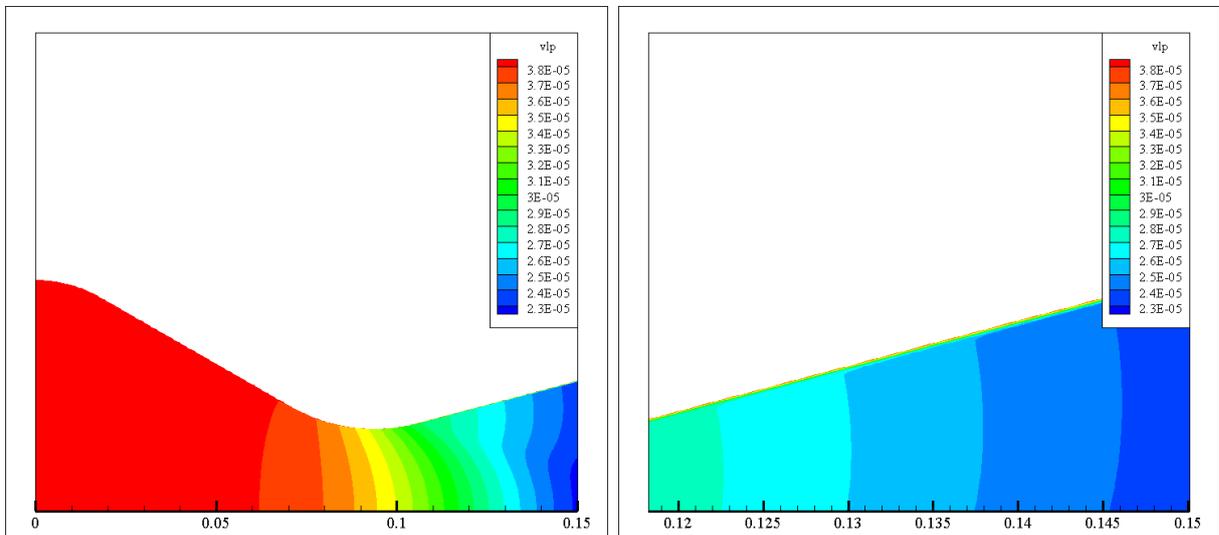
FIGURA C.26 – CAMPOS DE VISCOSIDADE DINÂMICA MAIS VISCOSIDADE TURBULENTO CALCULADA PELO MACH2D PARA O MODELO BLM.



(a) Viscosidade dinâmica + turbulenta, vista geral (b) Viscosidade dinâmica + turbulenta, local

FONTE: O autor (2021).

FIGURA C.27 – CAMPOS DE VISCOSIDADE DINÂMICA MAIS TURBULENTO CALCULADA PELO MACH2D PARA O MODELO SA NEGATIVO.



(a) Viscosidade dinâmica + turbulenta, vista geral (b) Viscosidade dinâmica + turbulenta, local

FONTE: O autor (2021).