



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Faculdade de Engenharia Química

ELMO DE SENA FERREIRA JÚNIOR

**Fundamentos do Esquema Essencialmente Não-Oscilatório
Ponderado Baseado no Número de Mach**

CAMPINAS

2019

ELMO DE SENA FERREIRA JÚNIOR

**FUNDAMENTOS DO ESQUEMA ESSENCIALMENTE NÃO-OSCILATÓRIO
PONDERADO BASEADO NO NÚMERO DE MACH**

Tese apresentada à Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química

Supervisor: Prof. Dr. Sávio Souza Venâncio Vianna

Co-Supervisor: Prof. Dr. Rogério Gonçalves dos Santos

ESTE TRABALHO CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA TESE
DEFENDIDA PELA ALUNO ELMO DE SENA FERREIRA JÚNIOR,
ORIENTADA PELO PROF. DR. SÁVIO SOUZA VENÂNCIO VI-
ANNA

**CAMPINAS
2019**

F413f Ferreira Júnior, Elmo de Sena, 1989-
Fundamentos do esquema essencialmente não-oscilatório ponderado baseado no número de mach / Elmo de Sena Ferreira Júnior. – Campinas, SP : [s.n.], 2019.

Orientador: Sávio Souza Venâncio Vianna.

Coorientador: Rogério Gonçalves dos Santos.

Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Métodos numéricos. 2. Simulação computacional. 3. Ondas de choque. I. Vianna, Sávio Souza Venâncio, 1975-. II. Santos, Rogério Gonçalves dos, 1978-. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: On the nature of weighted essentially non-oscillatory scheme based on mach number

Palavras-chave em inglês:

Numerical method

Computational simulation

Shock waves

Área de concentração: Engenharia Química

Titulação: Doutor em Engenharia Química

Banca examinadora:

Sávio Souza Venâncio Vianna [Orientador]

Maria Luísa Bambozzi de Oliveira

Maicon Ribeiro Correa

Nícolas Spogis

Roger Josef Zemp

Data de defesa: 19-11-2019

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)

- ORCID do autor: <https://orcid.org/0000-0003-4769-5922>

- Currículo Lattes do autor: <http://lattes.cnpq.br/2772665434199320>

Folha de Aprovação da Defesa de Tese de Doutorado defendida por Elmo de Sena Ferreira Júnior aprovada em 19 de novembro de 2019 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Sávio Souza Venâncio Vianna
FEQ/UNICAMP

Prof. Dr. Maicon Ribeiro Correa
IMECC/UNICAMP

Prof. Dr. Maria Luísa Bambozzi de Oliveira
Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

Prof. Dr. Nicolas Spogis
PUC-Campinas

Prof. Dr. Roger Josef Zemp
FEQ/UNICAMP

ATA da Defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria do Programa da Unidade.

Agradecimento

Nos últimos quatro anos deparei-me, sem dúvida, com as atividades acadêmicas mais desafiadoras da minha vida, e por isso, eu espero que o presente documento reflita todo esforço e dedicação. O seu completo desenvolvimento não seria possível sem o apoio de algumas pessoas muito importantes, e portanto, cabe o agradecimento.

Primeiro de tudo, gostaria de agradecer a Deus. Obrigado por tudo que fez por mim, obrigado porque sei que nunca me desamparou; por me guiar, iluminar e dar-me tranquilidade para seguir em frente com os meus objetivos e não desanimar com as dificuldades. Obrigado pela consciência que tenho de que tudo nesta vida depende unicamente de Ti e sem Ti não somos nada.

Eu não poderia ter tido um orientador melhor que o Prof. Sávio Vianna. Eu sempre serei grato por todo auxílio, sugestões e orientações assertivas durante o desenvolvimento deste trabalho. Bastante alerta, observador e extrovertido (assim eu o julgo), lembro de conversas e discursos motivadores sempre quando eu estava passando por momentos de preocupação, ansiedade, apreensão ou inquietude; eram revigorantes para mim. Você sempre me deu a sensação de que estávamos trabalhando juntos, em vez de você ser apenas um "orientador", no sentido literal.

Esta tese e diploma são dedicados aos meus pais, meu irmão e minha esposa. Obrigado por sempre acreditar em mim e pelo apoio incondicional. Essa é a minha família incrível! Agradeço aos meus pais Vitória de Jesus e Elmo Ferreira pela educação que me deram, pelo cuidado e por ter sido referência para eu seguir sempre em frente. Ao meu irmão João Pedro pelas brincadeiras e piadas, que faziam eu esquecer um pouco as atividades acadêmicas. A minha esposa Raissa Lopes, pela paciência, companheirismo e cuidado. Sempre ao meu lado, acompanhou-me em todas as etapas e desenvolvimento deste trabalho, tanto em circunstâncias de euforia como em momentos árduos. Uma menção especial à minha filha, Alice, que neste exato momento está com 4,5 meses dentro da barriguinha da mamãe. Felicidade sem igual, momento ímpar!

O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - código de Financiamento 001.

Resumo

A solução numérica de problemas de escoamento com altos gradientes de pressão, ondas de choque e descontinuidade transientes exige métodos de alta resolução e pouco dissipativo. Nesses casos, estratégias dependentes de parâmetros, tais como viscosidade artificial ou limitadores de fluxos, não são as melhores opções. Dentre os esquemas de alta resolução, destaca-se o esquema da família WENO (do inglês, *Weighted Essentially Non-Oscillatory*), sendo no mínimo de terceira ordem, essencialmente não oscilatório e dotado de um indicador de suavidade calculado a partir das características do escoamento. O esquema WENO de diferenças finitas, utilizado nesta tese, baseia-se na reconstrução por sub-estêncil, a partir de uma malha estruturada e uniforme. Neste trabalho, modificou-se o esquema WENO-Z+ e propôs-se um novo esquema WENO baseado no número de Mach, chamado de WENO-SV. A modificação seguiu a proposição geral do trabalho realizado por Acker et al. (2016) segundo a qual as contribuições para os sub-estêncis onde a solução é menos suave é mais relevante. O esquema WENO-SV foi validado com experimentos numéricos *benchmark* e aplicado em casos de escoamento em bocais. Além disso, foram propostos modelos físicos acoplados com o esquema WENO-SV para estudo de explosões físicas em ambientes abertos e tubulações. O esquema WENO-SV aumentou, efetivamente, o peso dos sub-estêncis menos suaves gerando melhores resultados do que aqueles apresentados pelo esquema WENO-Z+ para problemas *benchmark* unidimensionais. Em problemas bidimensionais, o esquema WENO-SV gerou resultados menos dissipativos, entretanto, menos simétricos. Os resultados em casos de escoamentos em bocais mostraram-se satisfatórios. O esquema WENO-SV mostrou-se mais robusto que o método tradicional *MacCormack* e ainda foi possível verificar uma redução significativa do tempo computacional para a simulação de escoamento em bocais ao modificar o método de integração. E, finalmente, os detalhes da onda de choque nas explosões físicas calculadas pelo modelo proposto mostraram-se de acordo com os dados experimentais e analíticos disponíveis.

Palavras-chaves: Métodos numéricos; Ondas de choque; Simulação.

Abstract

Numerical solution of flow problems with high pressure gradient, shock waves and transient discontinuity require high resolution and less dissipative methods for faithful representation. For such cases, numerical schemes coupled with artificial viscosity or flow limiters are not the best options. Among the high resolution schemes, WENO family scheme (Weighted Essentially Non-Oscillatory) stands out. The WENO finite difference scheme used in the present research is based on polynomial reconstruction from a uniform and structured mesh. In this work, WENO-Z+ scheme was modified and a new WENO scheme based on the Mach number, named WENO-SV, was proposed. The modification followed a general proposal by Acker et al. (2016) that to increase the weight of the less smooth sub-stencil led to a better WENO scheme resolution. The WENO-SV scheme has been validated with *benchmark* problems and applied in nozzle flow cases. In addition, physical models coupled with WENO-SV scheme for physical explosion study in open environments and pipelines were proposed. The WENO-SV scheme effectively increased the weight of less smooth sub-stencils more than those presented by the WENO-Z+ scheme for one-dimensional *benchmark* problems. In two-dimensional problems, the WENO-SV scheme yields less dissipative but less symmetrical results. The results in cases of nozzle flow are satisfactory. The WENO-SV scheme was more robust than the traditional *MacCormack* method and it was also possible to verify a significant reduction in computational time for the nozzle flow simulation by modifying the integration method. And finally, the details of the shock wave in the physical explosions calculated by the proposed model were in accordance with the available experimental and analytical data.

Keywords: Numerical methods; Shock waves; Simulation.

Lista de Figuras

1.1	Transporte convectivo unidimensional de uma quantidade conservada, ϕ , com velocidade de $u = 0.1m/s$ (a) e $u = 2m/s$ (b), calculada com o esquema numérico central (Versteeg, 2007).	21
1.2	Distribuição de um vórtice isentrópico convectivo. (a) Esquema numérico de segunda ordem computado em uma malha fina e (b) esquema numérico de quarta ordem computado em uma malha grosseira (Wang, 2014).	22
2.1	Malha computacional uniforme x_i e o estêncil S_5 de 5 pontos, composto de três estênceis de 3 pontos S_0 ; S_1 ; S_2 , usado para a etapa de reconstrução do método WENO de quinta ordem(Borges et al., 2008).	35
2.2	Definição da condição de contorno periódica (próprio autor).	40
2.3	Definição de condição de contorno fixa (próprio autor).	41
2.4	Definição de condição de contorno reflexiva (próprio autor).	42
2.5	Perfil estável da onda durante os tempos $0.1s$ (a), $0.3s$ (b) e $0.5s$ (b) com velocidade de propagação $c = -1$ da direita para esquerda (\leftarrow) (próprio autor).	44
2.6	Perfil instável da onda durante os tempos $0.1s$ (a) e $0.15s$ (b) com velocidade de propagação $c = 1$ da esquerda para a direita (\rightarrow) (próprio autor).	45
2.7	Perfil estável da onda durante os tempos $0.1s$ (a), $0.3s$ (b) and $0.5s$ (c) com velocidade de propagação $c = 1$ da esquerda para a direita (\rightarrow) depois da implementação do conceito de repartição de fluxo (próprio autor).	47

2.8	Representação de um bocal subsônico-supersônico (próprio autor).	51
2.9	Perfil da pressão adimensional em um bocal de escoamento subsônico-supersônico. Adaptado de Anderson (1995).	52
2.10	Perfil da número de Mach em um bocal de escoamento subsônico-supersônico. Adaptado de Anderson (1995).	52
2.11	Perfil de pressão adimensional em um bocal convergente-divergente puramente subsônico em três diferentes condições de entrada e saída: $(p_e)_a/p_0$, $(p_e)_b/p_0$ and $(p_e)_c/p_0$. Adaptado de (Anderson, 1995).	54
2.12	Perfil do número de Mach em um bocal convergente-divergente puramente subsônico em três diferentes condições de entrada e saída: $(p_e)_a/p_0$, $(p_e)_b/p_0$ and $(p_e)_c/p_0$. Adaptado de (Anderson, 1995).	54
2.13	Diagrama para eventos de explosão fornecidos no CCPS (CCPS, 1999).	57
2.14	Diagrama para eventos de explosão fornecidos no CCPS (CCPS, 1999).	59
2.15	Diagrama proposto para a classificação de explosões na indústria de processos químicos. Adaptado de (Abbasi et al., 2010).	60
2.16	Explosão gerada pelo disparo de armas de guerra. Fotografia da Marinha dos EUA por <i>Phan J Alan Elliott</i>	61
2.17	Diagrama de escoamento de ondas de explosão (Friedman, 1961)	62
3.1	Representação de uma malha de pontos bidimensional para discretização espacial (próprio autor).	64
3.2	Estêncil para o esquema de diferenças progressivas (próprio autor).	65
3.3	Estêncil para o esquema diferenças regressivas (próprio autor).	65
3.4	Estêncil para o esquema de <i>Leap-Frog</i> (próprio autor).	66
3.5	Estêncil para o esquema de <i>Leap-Frog</i> (próprio autor).	66
3.6	Estêncil para o esquema de <i>Lax-Friedrichs</i> (próprio autor).	67

3.7	Solução numérica calculada com o esquema de <i>Lax-Friedrichs</i> . Condição Inicial: $Q_0(x) = 1 - x $ se $ x \leq 1$ caso contrário $Q_0(x) = 0$ (Strikwerda, 2004).	68
3.8	Solução numérica calculada com o esquema de <i>Leap-Frog</i> . Condição Inicial: $Q_0(x) = 1 - x $ se $ x \leq 1$ caso contrário $Q_0(x) = 0$ (Strikwerda, 2004).	68
3.9	Impacto do ajuste nos parâmetros da viscosidade artificial C_x no perfil do número Mach de um escoamento sônico (próprio autor).	70
3.10	Perfis de concentração de um solvente durante um escoamento de um fluido monofásico incompressível, em um reservatório de petróleo. (a) Solução exata, (b) limitante de fluxo <i>MINMOD</i> e (c) limitante de fluxo <i>Superbee</i> . (Barbosa <i>et al.</i> , 2012).	72
3.11	Diagrama cronológico das contribuições relativas ao esquema de alta ordem da família Essencialmente Não-Oscilatória (próprio autor).	76
4.1	Solução numérica do perfil da massa específica, no tempo $t = 1,8s$, do problema de ondas de choque de entropia de <i>Shu-Osher</i> computada pelo esquema WENO-SV com diferentes parâmetros de ajuste, λ^{SV} (a). Ampliação de escala da solução numérica (b). Comparação entre os esquemas WENO-JS e WENO-SV (c) e o aumento em escala da solução numérica (d). Comparação entre os esquemas WENO-Z+ e WENO-SV (e). Malha computacional com $N = 300$ pontos e $CFL = 0.5$ (próprio autor).	82
4.2	Solução numérica do perfil da massa específica, no tempo $t = 5s$, do problema de ondas de choque de entropia de <i>Titarev-Toro</i> computada pelo esquema WENO-SV com diferentes parâmetros de ajuste, λ^{SV} (a). Ampliação de escala da solução numérica (b). Comparação entre os esquemas WENO-JS e WENO-SV (c) e entre os esquemas WENO-Z+ e WENO-SV (d). Malha computacional com $N = 1000$ pontos e $CFL = 0.5$ (próprio autor).	83

4.3	Avaliação do parâmetro do esquema WENO-Z+ ($\lambda^{z+} = \Delta x^{2/3}$) e do parâmetro do esquema WENO-SV ($\lambda^{SV} = M^{0.5}$) para diferentes tamanhos de malhas. (a) Problema de <i>Lax</i> avaliado no tempo $t = 1.3s$. (b) Problema da onda de choque de entropia de <i>Shu-Osher</i> avaliado no tempo $t = 1.8s$ (próprio autor).	85
4.4	Comparação entre os pesos ζ^{z+} e ζ^{SV} em uma malha de tamanho $\Delta x = 0.03$. (a) Problema de <i>Lax</i> and (b) Problema da onda de choque de entropia de <i>Shu-Osher</i> (próprio autor).	85
4.5	Comparação entre os pesos ζ^{z+} e ζ^{SV} em uma malha de tamanho $\Delta x = 0.008$. (a) Problema de <i>Lax</i> and (b) Problema da onda de choque de entropia de <i>Shu-Osher</i> (próprio autor).	86
4.6	Perfil da massa específica calculado pelos esquemas WENO-JS e WENO-SV com número de nós na malha $N = 100$ (a) and $N = 200$ (b). Problema da onde de choque de entropia de <i>Shu-Osher</i> no tempo $t = 1.8s$.	87
4.7	Perfil da massa específica calculado pelos esquemas WENO-Z+ e WENO-SV com número de nós na malha $N = 100$ (a) and $N = 200$ (b). Problema da onde de choque de entropia de <i>Shu-Osher</i> no tempo $t = 1.8s$.	87
4.8	Perfil da massa específica para o problema de <i>Riemman</i> de <i>Lax</i> . Malha computacional de $N = 200$ e tempo de simulação de $t = 1.3s$ (próprio autor).	88
4.9	Solução numérica do problema de choque de entropia bidimensional no tempo $t = 1.8s$; perfil da densidade computada pelos esquemas WENO-SV e WENO-JS. $CFL = 0.4$ (próprio autor).	89
4.10	Solução numérica para um problema de <i>Riemman</i> bidimensional. Perfil da massa específica calculada no tempo $t = 0.35s$. $CFL=0.3$. Malha computacional de 1500×1500 . (a) WENO-Z+ e (b) WENO-SV. (c) Zoom em $[0.4, 0.5] \times [0.6, 0.7]$ para os resultados do esquema WENO-Z+. (d) Zoom em $[0.4, 0.5] \times [0.6, 0.7]$ para os resultados do esquema WENO-SV (próprio autor).	90

4.11	Solução numérica para um problema de Riemman bidimensional. Perfil da massa específica calculada no tempo $t = 0.6s$. CFL=0.3. Malha computacional de 500×500 . (a) WENO-Z+ e (b) WENO-SV (próprio autor).	90
4.12	Solução numérica para o problema de instabilidade de <i>Rayleigh-Taylor</i> computado pelo esquemas WENO-JS, WENO-Z+ and WENO-SV. Perfil da massa específica avaliado no tempo $t = 1.95s$. CFL=0.3. Malha 480×500 (próprio autor).	92
4.13	Solução numérica para o problema de instabilidade de <i>Rayleigh-Taylor</i> computado pelo esquemas WENO-JS, WENO-Z+ and WENO-SV. Perfil da massa específica avaliado no tempo $t = 1.95s$. CFL=0.3. Malha de 950×1000 (próprio autor).	93
4.14	Solução numérica para o problema de instabilidade de <i>Rayleigh-Taylor</i> computado pelo esquema WENO-JS de nona ordem em malhas estruturadas de tamanho: $h = 1/124$, $h = 1/480$ e $h = 1/960$ (Shi et al., 2003).	94
4.15	Solução numérica para um vazamento em forma de jato computado pelo esquemas WENO-JS, WENO-Z+ and WENO-SV. A velocidade do vazamento no orifício (0.05m) é $340m/s$. Perfil de temperatura em três instantes de tempo (próprio autor).	95
4.16	Tamanho de malha não regular. A região mais fina da malha tem $dx_2 = 0.02$, enquanto que a região mais grossa tem $dx_1 = 0.04$ (próprio autor).	95
4.17	Comparação entre os esquemas WENO-Z+ e WENO-SV na solução do problema de onda de choque de entropia de Shu-Osher em uma malha não regular. Parâmetro $\lambda = dx_1^{2/3}$ (a) e parâmetro $\lambda = dx_2^{2/3}$ (b). Impacto na solução ao utilizar o parâmetro como sendo $\lambda = dx_1^{2/3}$ e o parâmetro como sendo $\lambda = dx_2^{2/3}$ (c) (próprio autor).	96
5.1	Esquema do bocal para estudo de um escoamento completamente subsônico (caso A); os pontos N_{min} e N_{max} são pontos fantasmas nos contornos de entrada e saída do bocal, respectivamente (próprio autor).	100

5.2	Esquema do bocal para estudo de um escoamento contendo choque normal (caso B); os pontos N_{min} e N_{max} são pontos fantasmas nos contornos de entrada e saída do bocal, respectivamente (próprio autor).	100
5.3	Perfil da solução do escoamento na garganta do bocal calculada por WENO-JS, WENOZ+ and WENO-SV. Perfil da massa específica (a), perfil de pressão (b) e perfil do número de Mach(c) (próprio autor).	102
5.4	Perfil da solução do escoamento na garganta do bocal calculada pelos esquemas MacCormack e WENO-SV. Perfil da massa específica (a), perfil de pressão (b) e perfil do número de Mach(c) (próprio autor).	103
5.5	Perfil de estado estacionário ao longo do bocal calculado pelos esquemas <i>MacCormack</i> e WENO-SV, formulações exatas. Perfil da massa específica (a), perfil de pressão (b) e perfil do número de Mach(c). Pressão na saída do bocal: $p_N = 0,93$ (próprio autor).	104
5.6	Perfil de estado estacionário ao longo do bocal calculado pelos esquemas <i>MacCormack</i> e WENO-SV, e formulações exatas. Pressão na saída do bocal: $p_N = 0,89$ (próprio autor).	105
5.7	Resultados numéricos dos esquemas MacCormack e WENO-SV para o perfil do número de Mach ao longo do bocal. Solução exata (círculos). Esquema MacCormack sem viscosidade artificial, $ad = 0.0$ (a). Esquema MacCormack com viscosidade artificial, $ad = 0.2$ (b) (próprio autor).	107
5.8	Resultados numéricos dos esquemas MacCormack e WENO-SV para o perfil a pressão ao longo do bocal. Solução exata (círculos). Esquema MacCormack sem viscosidade artificial, $ad = 0.0$ (a). Esquema MacCormack com viscosidade artificial, $ad = 0.2$ (b) (próprio autor).	107
5.9	Valores do número Mach na saída do bocal calculados considerando diferentes relações de pressão (p_N/p_1). Formulações exatas, esquemas WENO-SV e MacCormack são comparadas. O esquema MacCormack inclui viscosidade artificial, $ad = 0.1$ (a) , $ad = 0.2$ (b), e $ad = 0.3$. (c) (próprio autor).	108

5.10	Número de Mach computados para diferentes relações de pressão (p_ϕ/p_1) usando o esquema WENO-SV juntamente com o método SSP(3,3) (a) e SSP(2,2) (b) (próprio autor).	109
5.11	Tempo total de execução gasto pelo esquema WENO-SV de quinta ordem implementado com SSP(3,3) e SSP(2,2) (próprio autor).	109
6.1	Aplicação de condições de contorno para estudo de explosão física em ambiente aberto (próprio autor).	113
6.2	Fluxograma que sintetiza a ideia do acoplamento entre o modelo PVF e o esquema WENO-SV para estudo de explosão física (próprio autor).	113
6.3	Valores adimensionais da pressão interna e da massa específica, que causam ruptura da esfera de vidro, para os valores mínimo e máximo da força de tensão da esfera de vidro <i>soda-lime</i> (próprio autor).	115
6.4	Perfis de massa específica de uma explosão física resultante da simulação numérica de uma esfera de vidro calculada utilizando o modelo PVF/WENO-SV nos tempos adimensionais de $t = 0.2$, $t = 0.3$ e $t = 0.4$. (a) Perfil bidimensional. (b) Perfil unidimensional. Os choques identificados na figura (b) são: (1) choque principal, (2) choque secundário e (3) contato descontínuo.	116
6.5	Perfis de pressão de uma explosão física resultante da simulação numérica de uma esfera de vidro calculada utilizando o modelo PVF/WENO-SV nos tempos adimensionais de $t = 0.2$, $t = 0.3$ e $t = 0.4$. (a) Perfil bidimensional. (b) Perfil unidimensional. Os choques identificados na figura (b) são: (1) choque principal e (2) choque secundário (próprio autor).	117
6.6	Perfis de velocidade de uma explosão física resultante da simulação numérica de uma esfera de vidro calculada utilizando o modelo PVF/WENO-SV nos tempos adimensionais de $t = 0.2$, $t = 0.3$ e $t = 0.4$. (a) Perfil bidimensional. (b) Perfil unidimensional. Os choques identificados na figura (b) são: (1) choque principal e (2) choque secundário (próprio autor).	117

6.7	Perfis de massa específica (a), pressão (b) e velocidade (c) de uma explosão física resultante da simulação numérica de uma esfera de vidro calculada utilizando o modelo PVF/WENO-SV nos tempos adimensionais de $t = 0.6$, $t = 0.8$ e $t = 1.0$. Os choques identificados nas figuras são: (1) choque principal, (2) choque secundário e (3) contato descontínuo (próprio autor).	118
6.8	Perfis de massa específica (a), pressão (b) e velocidade (c) de uma explosão física resultante da simulação numérica de uma esfera de vidro calculada utilizando o modelo PVF/WENO-SV nos tempos adimensionais de $t = 1.65$, $t = 1.8$ e $t = 1.9$. Os choques identificados nas figuras são: (1) choque principal, (2) choque secundário e (3) contato descontínuo (próprio autor).	119
6.9	Comparação entre dados experimentais Boyer (1960), dados analíticos Brode (1957) e resultados do modelo PVF/WENO-SV para ondas originárias de uma explosão física de uma esfera de vidro. Comportamento das ondas de choque principal (a), choque secundário (b) e contato descontínuo (c) (próprio autor).	120
6.10	Comparação qualitativa entre a explosão física experimental e numérica de uma esfera de vidro. Resultado numérico do modelo PVF/WENO-SV e resultado experimental realizado por Boyer (1960) (próprio autor).	121
6.11	Aparato experimental para o estudo de ondas de choque ao longo de gasodutos. 1) gasoduto de baixa pressão, 2) membrana de alumínio, 3) vaso de alta pressão, 4) válvula. Adaptado de Skacel et al. (2013) (próprio autor).	122
6.12	Perfil da pressão ao longo do tempo em cada ponto de monitoramento do gasoduto (próprio autor).	124
6.13	Pico de pressão ao longo da posição dos pontos de monitoramento no gasoduto. Comparação entre os dados experimentais, o esquema WENO-SV e o modelo WENO-SV/pipelines (próprio autor).	125

Lista de Tabelas

3.1	Exemplo de alguns dos principais limitadores de fluxo.	71
5.1	Solução de captura de choque; respectivos valores adimensionais da massa específica, pressão e número de Mach na garganta do bocal calculada pelas formulação exata, esquema WENO-SV e esquema de MacCormark utilizando viscosidade artificial de $ad = 0.0$, $ad = 0.1$, $ad = 0.2$ e $ad = 0.3$ (próprio autor).	106
6.1	Características físicas da esfera de vidro do tipo <i>soda-lime</i> utilizada no experimento realizado por Boyer (1960).	114

Conteúdo

1	Introdução	20
1.1	Motivação	20
1.2	Objetivos	23
1.3	Estrutura do trabalho	24
2	Fundamentos teóricos	25
2.1	Equações de transporte para escoamentos viscido e invíscido	25
2.2	Equação de Euler em sua forma característica	29
2.3	O método WENO de diferenças finitas	33
2.3.1	Procedimento de reconstrução polinomial	33
2.3.2	Condições de contorno	39
2.3.2.1	Condição de contorno periódica	39
2.3.2.2	Condição de contorno fixa	40
2.3.2.3	Condição de contorno reflexiva	41
2.3.2.4	Condição de contorno de entrada e saída	42
2.3.3	Partição de fluxo	43
2.3.4	Runge-Kutta explícito de forte preservação de estabilidade	47
2.4	Submodelos para a equação governante do escoamento	49

2.4.1	Número de Mach	49
2.4.2	Escoamento em bocais	51
2.4.3	Explosão física	55
3	Revisão da Literatura	63
4	O esquema WENO-SV	78
4.1	Introdução	79
4.1.1	O novo parâmetro de ajuste λ^{SV}	80
4.1.2	Parâmetro de ajuste WENO-Z+ e WENO-SV	84
4.1.3	Refinamento da malha	86
4.2	Experimentos numéricos	87
4.2.1	Problema de <i>Riemman de Lax</i>	88
4.2.2	Problema do choque de entropia	88
4.2.3	Problema de <i>Riemman</i> bidimensional	89
4.2.4	Instabilidade de <i>Rayleigh-Taylor</i>	91
4.2.5	Vazamento de jato	94
4.2.6	Influência de malha não-regular	95
5	O esquema WENO-SV para escoamento em bocais	97
5.1	Modelagem de escoamentos em bocais	98
5.1.1	Estudo de caso	99
5.2	Resultados do escoamento do bocal	101
5.2.1	Escoamento completamente subsônico - Caso A	101
5.2.2	Escoamentos com choques normais - Caso B	105
5.2.3	Integração no tempo	108

6	O esquema WENO-SV para explosões físicas	110
6.1	Modelagem da explosão física	110
6.1.1	Singularidade e condição de contorno	112
6.2	O modelo PVF/WENO-SV	113
6.2.1	Princípio de acoplamento	113
6.2.2	Caso experimental	114
6.2.3	Experimento numérico	115
6.3	O modelo WENO-SV/pipelines	121
6.3.1	Princípio do acoplamento	121
6.3.2	Caso experimental	122
6.3.3	Experimento numérico	123
7	Conclusões e Trabalhos Futuros	126
7.1	Conclusões e Contribuições	126
7.2	Trabalhos futuros	129

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

A simulação numérica de escoamento de fluidos representa atualmente um campo de estudo de relevância para diferentes áreas da engenharia. Sua aplicação inclui desde a análise de escoamento ao redor de uma aeronave, automóveis, foguetes e edificações, até em escoamentos reativos, em previsões meteorológicas, na dispersão de poluentes na atmosfera, nas artérias do corpo humano, em tubulações em geral e entre outros.

É de suma importância a seleção adequada do esquema numérico de discretização para uma determinada aplicação. Um exemplo típico para essa avaliação é mostrado em uma das literaturas clássicas da Fluidodinâmica Computacional (do inglês, *Computational Fluid Dynamics - CFD*) (Versteeg, 2007). Versteeg (2007) evidencia a fragilidade do esquema de diferença central durante a resolução do transporte de uma quantidade conservada ϕ para um problema convectivo-difusivo unidimensional. De acordo com o problema em análise, o esquema de diferença central é estável para valores pequenos do termo convectivo, ou seja, para uma velocidade de $u = 0.1m/s$, enquanto que torna-se instável para uma maior intensidade do termo convectivo, isto é, para uma velocidade de $u = 2.5m/s$, como pode ser verificado na Figura 1.1. Para este último caso, o mais conveniente seria a utilização de esquemas *upwind*.

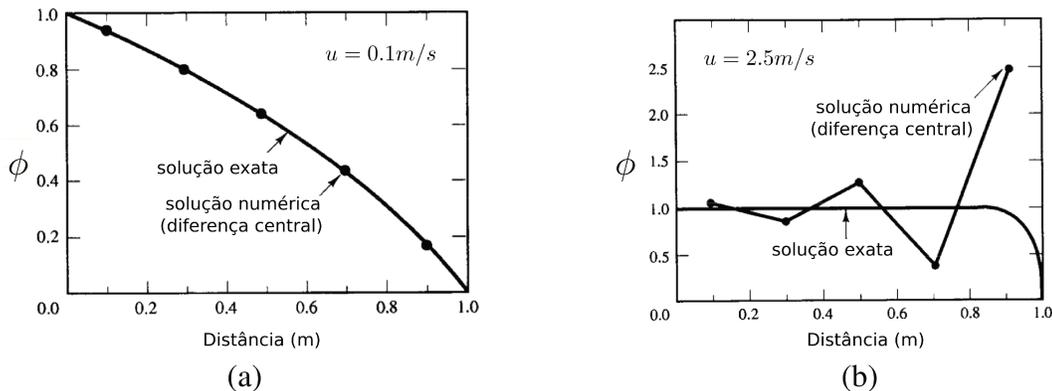


Figura 1.1: Transporte convectivo unidimensional de uma quantidade conservada, ϕ , com velocidade de $u = 0.1 \text{ m/s}$ (a) e $u = 2 \text{ m/s}$ (b), calculada com o esquema numérico central (Versteeg, 2007).

A maioria dos métodos de discretização foi desenvolvido nos últimos 50 anos, e normalmente oferece precisão espacial de segunda ordem, considerado pela comunidade da Fluidodinâmica Computacional (do inglês, *Computational Fluid Dynamics - CFD*), portanto, como esquemas de baixa ordem. Dentre esses métodos destacam-se *Lax-Friedrichs*, *MacCormack*, *Leapfrog* (Wang et al., 2012). Tais esquemas de baixa ordem formam a base de quase todos os softwares de Fluidodinâmica Computacional (Wang, 2014). Uma vez que todas as investigações numéricas do ponto de vista de CFD, durante trinta anos, foram baseadas em esquemas de primeira e/ou segunda ordem de precisão, os códigos CFD de alta ordem passaram a ser definidos como sendo de terceira ordem de precisão ou superior.

No entanto, apesar desse tempo dedicado a estudos e aplicações, há vários problemas de escoamento importantes em que esses métodos numéricos de baixa ordem não são adequados. Isso inclui regiões do escoamento contendo alto gradiente, interações entre ondas de choque e interações entre ondas de choque e vórtices. Os vórtices presentes em escoamentos, por exemplo, podem se deformar e se dissipar prematuramente, devido à excessiva difusão numérica presente na solução de esquemas de baixa ordem, principalmente se for considerada a estratégia numérica de dissipação artificial (ou viscosidade artificial) para evitar/reduzir oscilações espúrias (*Fenômeno de Gibbs*). A resolução de uma malha extremamente refinada seria uma alternativa na tentativa de capturar mais detalhes do escoamento. A Figura 1.2 mostra um vórtice isentrópico convectivo capturado com uma malha fina, utilizando um esquema de segunda ordem, e com uma malha mais grosseira, utilizando um esquema de

quarta ordem de precisão no espaço (Wang, 2014).

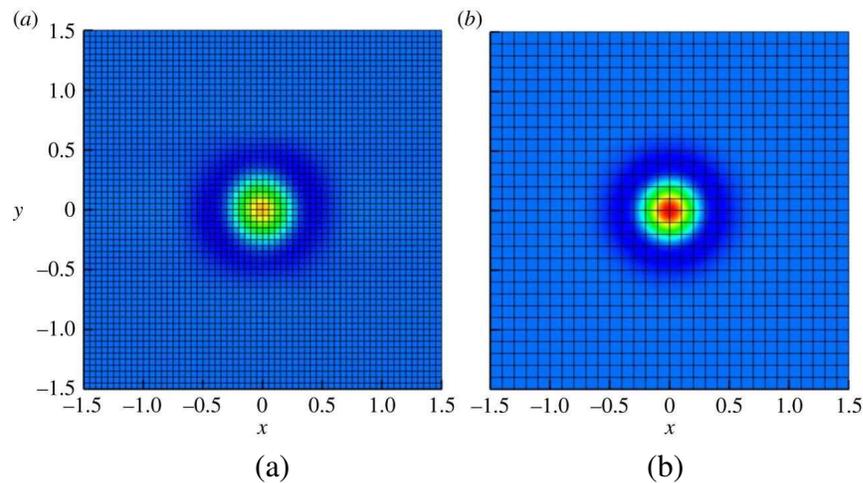


Figura 1.2: Distribuição de um vórtice isentrópico convectivo. (a) Esquema numérico de segunda ordem computado em uma malha fina e (b) esquema numérico de quarta ordem computado em uma malha grosseira (Wang, 2014).

O problema envolvendo esquemas de baixa ordem impõe novos desafios à análise numérica. Novas classes de esquemas numéricos surgiram para lidar com estruturas complexas do escoamento e descontinuidades acentuadas. No contexto dos métodos numéricos de alta ordem de precisão, os esquemas Essencialmente Não-Oscilatório (do inglês, *Essentially Non-Oscillatory* - ENO) e Essencialmente Não-Oscilatório Ponderado (do inglês, *Weighted Essentially Non-Oscillatory* - WENO) se destacam. O termo *Essentially Non-Oscillatory* implica dizer que o esquema evita o *Fenômeno de Gibbs*. Além disso, é dotado de indicadores de suavidade, auxiliando na aproximação da solução. A classe de esquemas WENO traz novas estratégias para calcular com alta ordem de precisão toda as regiões do escoamento, tanto em regiões suaves quanto em descontínuas, contendo fortes oscilações e estruturas complexas com um potencial cada vez menos dissipativo. Evidencia-se, neste ponto, apenas alguns esquemas WENO que promoveram grande melhoria na acurácia do método: WENO-JS (Jiang and Shu, 1996) , WENO-M (Henrick et al., 2005), WENO-Z (Borges et al., 2008) e WENO-Z+ (Acker et al., 2016).

1.2 Objetivos

O objetivo principal desta pesquisa é o desenvolvimento, a validação e a aplicação de um esquema do tipo Essencialmente Não-Oscilatório Ponderado (do inglês, *Weighted Essentially Non-Oscillatory* - WENO) de Diferenças Finitas.

Dada a complexidade na codificação do esquema WENO clássico de quinta ordem (WENO-JS), sua implementação ou modificação requer validação por meio da resolução de diversos problemas numéricos padronizados (solução conhecida), a fim de garantir sua correta implementação.

Os objetivos específicos seguem abaixo:

- Avaliar os métodos de alta ordem no contexto dos esquemas WENO e discutir as limitações do recente esquema WENO-Z+;
- Propor um novo parâmetro ao esquema WENO com base nas propriedades físicas do escoamento;
- Implementar os esquemas numéricos WENO-JS, WENO-Z e WENO-Z+ e validar o esquema proposto a partir resultados de problemas *benchmark*

Problema de *Riemann de Lax* (1-D e 2-D)

Interação entre um choque e uma onda de entropia de *Titarev-toro* (1-D)

Interação entre um choque e uma onda de entropia de *Shu-Osher* (1-D e 2-D)

Instabilidade de *Rayleigh-Taylor* (2-D)

Vazamento de jato gás (2-D)

- Avaliar o esquema numérico WENO proposto em aplicação de engenharia
 - Bocal completamente subsônico e com ondas de choque (quasi 1-D)
 - Explosões físicas (quasi 1-D e quasi 2-D).

1.3 Estrutura do trabalho

O capítulo 2 trata sobre alguns conceitos teóricos da equação de Euler da conservação em sua forma característica e do esquema WENO de diferenças finitas. Formulações matemáticas e procedimento de reconstrução do WENO de quinta ordem de precisão são apresentados. Exemplos práticos são utilizados para discutir conceitos importantes durante a implementação do método WENO, tais como a partição de fluxo de *Lax-Friedrichs* e pontos fictícios. O capítulo é finalizado com uma breve discussão sobre o esquema SSP-RK (*Strong Stability Preserve Runge-Kutta*). O capítulo 3 apresenta a revisão da literatura, destacando as principais contribuições dos esquemas WENO até sua versão mais recente, o WENO-Z+, a partir da qual é discutida a contribuição desta tese.

No capítulo 4, desenvolve-se o novo esquema WENO-SV de quinta ordem. Os resultados entre o parâmetro WENO-Z+ e o esquema proposto, WENO-SV, são comparados e discutidos. Uma variedade de casos de testes padronizados, regidos pelas equações de Euler, são utilizados como referência.

Os capítulos 5 e 6 são reservados para aplicação de engenharia do esquema WENO-SV. O capítulo 5 apresenta a modelagem e os resultados de escoamento em um bocal subsônico e com onda choque. A comparação entre os esquemas WENO-JS, WENO-Z+, WENO-SV e o esquema tradicional *MacCormack* é realizada. Por sua vez, o capítulo 6 trata sobre o acoplamento entre modelos físicos existentes e o esquema WENO-SV para o estudo de explosões físicas em vaso de pressão e gasodutos. Finalmente, no capítulo 7, tem-se as conclusões do presente trabalho e as sugestões para trabalhos futuros.

Nesta tese ainda há dois apêndices. O apêndice A contém informações detalhadas sobre os problemas de escoamento contendo descontinuidade, como o problema de *Riemman*, utilizado para teste de verificação dos esquemas WENO implementados com a linguagem de programação *fortran 90*. Além disso, há uma breve explicação sobre o entendimento físico desses problemas. Já o apêndice B mostra um procedimento para calcular as propriedades termodinâmicas adimensionais, utilizadas durante o estudo de explosões físicas.

Capítulo 2

Fundamentos teóricos

Este capítulo apresenta uma breve discussão sobre a equação governante do escoamento, destacando sua forma característica, a fim de tornar mais claro o tratamento numérico das Equações Diferenciais Parciais (EDP's) por um procedimento de reconstrução de fluxo. Além disso, conceitos intrínsecos relativos ao esquema WENO na resolução de problemas de escoamento são apresentados: repartição dos fluxos, condições de contorno e método de integração temporal. O comportamento físico do escoamento de bocais e cenários de explosões são introduzidos como submodelos da Equação da Conservação de Euler.

A primeira parte deste capítulo, seção 2.1, apresenta a equação de Euler do campo de fluxo em sua forma característica. Na seção 2.3, o procedimento de reconstrução do esquema WENO é detalhado. Na última parte deste capítulo, seção 2.4, submodelos de equações de Euler para escoamentos em bocais e estudos de explosões são apresentados.

2.1 Equações de transporte para escoamentos viscido e invíscido

As equações de transporte são uma representação matemática das leis de conservação da física, nas quais são observadas que a massa de um fluido é conservada, que a taxa de variação do momento é igual à soma de todas as forças que agem em uma partícula de fluido (segunda

lei de Newton) e que taxa de variação da energia é igual à soma taxa da adição de calor e à taxa do trabalho realizado em uma partícula de fluido (primeira lei da termodinâmica); ou seja, as equações de transporte são um sistema de Equações Diferenciais Parciais (EDP) que incluem a equação da conservação da massa, da espécie química, do momento (equação de *Navier-Stokes*) e da energia (Versteeg, 2007). Essas equações descrevem um escoamento de fluido contínuo, cuja análise segue a hipótese do contínuo, na qual abstrai-se da composição molecular e de sua consequente descontinuidade para que não haja vazios no interior do fluido, isto é, por menor que seja uma divisão de um fluido, esta deverá apresentar as mesmas propriedades que a matéria como um todo. Tratando o escoamento como viscido, incluem-se os fenômenos de atrito devido à viscosidade do fluido, à condução térmica e à difusão de massa. Esses fenômenos de transporte são ditos como fisicamente dissipativos. Para sintetizar a exposição do tema e torná-lo mais didático, a equação de difusão de massa não será apresentada. De forma resumida, a difusão de massa ocorre quando existem gradientes de concentração de diferentes espécies químicas no escoamento. Um exemplo é uma dispersão de gás tóxico ou inflamável em um ambiente industrial devido ao seu vazamento a partir de uma fratura presente nas paredes de um tanque de armazenamento.

As equações de conservação da massa, momento e energia (em termos da entalpia total), podem ser escritas, respectivamente, como

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \\ \frac{\rho D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \bar{\tau} + \mathbf{g} \\ \frac{\rho De}{Dt} = -\nabla p \mathbf{u} + \nabla [\bar{\tau} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{q}]. \end{array} \right. \quad (2.1)$$

O conjunto de equações acima está escrito na forma de derivada material, ou seja, escrito de acordo com a definição abaixo

$$\frac{\partial D}{\partial Dt}() \equiv \frac{\partial}{\partial t}() + \mathbf{v} \cdot \nabla() \quad (2.2)$$

e tem-se que ρ , p e e são a massa específica, a pressão e a energia total do fluido, respectivamente. Os vetores \mathbf{u} , \mathbf{q} e \mathbf{g} representam, respectivamente, o vetor de velocidade, o

vetor de fluxo de calor do fluido em um sistema cartesiano de coordenadas e o vetor de força de corpo, tal como a gravidade, por exemplo. O termo $\bar{\tau}$ é o tensor de tensões viscosas e t representa o tempo.

Para auxiliar na resolução do sistema de equação 2.1, recorre-se às relações constitutivas que contêm informações físicas adicionais sobre o fluido e o escoamento em análise. A primeira equação constitutiva, considerando que o fluido é um gás perfeito, é a equação de estado escrita abaixo

$$p = \rho RT = (\gamma - 1)(\rho e_i), \quad (2.3)$$

onde e_i é a energia interna específica obtida como

$$e_i = C_v T, \quad (2.4)$$

considerando que o valor da capacidade calorífica a volume constante, C_v , seja constante. O vetor de fluxo de calor, \mathbf{q} , é obtido por meio da lei de *Fourier* para condução de calor; portanto, a segunda equação constitutiva segue

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T. \quad (2.5)$$

A última equação constitutiva são os componentes do tensor de tensões para um fluido newtoniano, obtidos como

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda_\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (2.6)$$

Nas equações constitutivas mencionadas, T é a temperatura, C_v é o calor específico do gás a volume constante, R é a constante dos gases, γ é a razão de calores específicos, κ é o coeficiente de condutividade térmica, μ é o coeficiente de viscosidade dinâmica molecular, δ_{ij} é o delta de *Kronecker* e λ_μ é o segundo coeficiente de viscosidade dinâmica, definido pela hipótese de *Stokes* como

$$\lambda_\mu = \frac{-2}{3}\mu. \quad (2.7)$$

A entalpia total, utilizada na equação de conservação da energia, é definida pela relação abaixo

$$H = e_i + \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} \mathbf{u}^2. \quad (2.8)$$

Observe que as equações de transporte apresentadas em 2.1 estão escritas na forma não conservativa, o que pode resultar no surgimento de complicações numéricas em regiões do escoamento que apresentem descontinuidades ou até mesmo obtenção de resultados bastante diferentes em termos da velocidade da onda de choque, por exemplo; por outro lado, a forma conservativa é apropriada para resolver escoamentos contendo ondas de choque Anderson (1995). Portanto, a forma conservativa da equação 2.1 é dada por

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} = 0 \\ \frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [(e + p/\rho)u_j - \bar{\tau}_{ij}u_i + q] = 0 \end{cases} \quad (2.9)$$

onde a energia total por unidade de volume, e , é definida como

$$e = \rho \left(e_i + \frac{1}{2} \mathbf{u}^2 \right). \quad (2.10)$$

Sabendo que um escoamento invíscido, por definição, é um escoamento em que os fenômenos dissipativos de transporte envolvendo viscosidade, difusão de massa e condutividade térmica são negligenciados, todos os termos que envolvem atrito e condução térmica presentes nas equações listadas acima (equações 2.9) podem, simplesmente, ser eliminados. Nesse caso, tem-se as equações para um escoamento invíscido, também conhecida com equação da conservação de Euler,

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_i} = 0 \\ \frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [(e + p/\rho)u_j] = 0. \end{cases} \quad (2.11)$$

2.2 Equação de Euler em sua forma característica

Os experimentos numéricos contidos no presente trabalho consideram escoamentos envolvendo choque/descontinuidades e com números de *Reynolds* elevados, isto é, situações em que os efeitos difusivos devido ao transporte do fluido são desprezíveis. Sendo assim, os termos viscoso, difusão mássica e de calor da equação de transporte podem ser desprezados, e portanto, será considerado que as equações de Euler são um modelo adequado para os escoamentos em estudo.

As equações de Euler são uma classe muito importante de EDP não-lineares, também conhecida como equação de conservação hiperbólica (Anderson, 1995). As EDP's hiperbólicas estão associadas a problemas de propagação envolvendo ondas de choques e quando não há difusão/dissipação física. As equações de conservação hiperbólicas têm algumas características que as tornam muito singulares para estudo utilizando o esquema numérico WENO, como será descrito mais adiante.

As equações de Euler em uma dimensão, em forma conservativa vetorial, podem ser abreviadamente representadas por

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \quad (2.12)$$

onde

$$Q = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ e \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(e + p/\rho) \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

sendo que Q representa as variáveis conservadas, enquanto f representa os fluxos (fluxos de massa, momento e energia).

Uma vez que a equação 2.12 é um sistema hiperbólico, a matriz 3×3 do jacobiano $A = \frac{\partial f}{\partial Q}$ possui três autovalores reais,

$$\{\lambda_1(Q), \lambda_2(Q), \lambda_3(Q)\},$$

e um conjunto completo de autovetores à direita independentes

$$\{r_1(Q), r_2(Q), r_3(Q)\},$$

sendo que cada autovetor r_i possui um autovalor correspondente λ_i , sendo para este caso, $i = 1, 2, 3$. Define-se a matriz dos autovetores à direita R como,

$$R = (r_1, r_2, r_3),$$

portanto,

$$A = \frac{\partial f}{\partial Q} = L\Lambda R, \quad L = R^{-1}$$

onde Λ é matriz diagonal dos autovalores $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$, R e L são as matrizes dos autovetores à direita e à esquerda, respectivamente. As linhas da matriz dos autovetores à esquerda, $L = (l_1, l_2, l_3)$, são os autovetores à esquerda da matriz jacobiana A , isto é,

$$l_i A = \lambda_i l_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.14)$$

Perceba que as matrizes R , L e Λ estão em função das variáveis conservadas, Q , que por sua vez é função do espaço, x , e do tempo, t . Elas podem ser diferentes em diferentes espaços e tempos, uma vez que a solução de Q modifica no espaço e no tempo.

A equação 2.12 pode ser escrita na forma *quasi-linear*, aplicando a regra de *Chen* no segundo termo:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial Q} \frac{\partial Q}{\partial x} = 0, \quad (2.15)$$

sabendo que $A = \frac{\partial f}{\partial Q}$ é a matriz jacobiana, a equação 2.12 torna-se

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + A \frac{\partial Q}{\partial x} = 0. \quad (2.16)$$

Perceba que os fluxos, f , presentes na equação 2.13, estão escritos em termos das variáveis primitivas, ρ , ρu e p . A matriz jacobiana de f escrita em termos de H , c e u para a equação de Euler unidimensional torna-se,

$$A = \frac{\partial f}{\partial Q} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ u_2(\gamma - 3) & u(3 - \gamma) & (\gamma - 1) \\ u[u_2(\gamma - 1) - H] & H - u^2(\gamma - 1) & \gamma u \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

observando algumas relações entre as variáveis

$$u_2 = \frac{1}{2}u^2, \quad H = \frac{e + p}{\rho} = \frac{c^2}{\gamma - 1}, \quad p = \frac{\rho c^2}{\gamma}, \quad e = \frac{\rho}{\gamma} [H + u_2(\gamma + 1)],$$

onde c é a velocidade do som, H a entalpia específica, u_2 é a energia cinética específica.

Ao escrever a equação 2.16 linha a linha, isto é,

$$\begin{cases} (q_1)_t + a_{11}(q_1)_x + a_{12}(q_2)_x + a_{13}(q_3)_x = 0 \\ (q_2)_t + a_{21}(q_1)_x + a_{22}(q_2)_x + a_{23}(q_3)_x = 0 \\ (q_3)_t + a_{31}(q_1)_x + a_{32}(q_2)_x + a_{33}(q_3)_x = 0, \end{cases} \quad (2.18)$$

nota-se que cada linha depende de mais de uma variável, o que impede que o método que será desenvolvido na próxima seção, o método WENO, seja usado de maneira trivial. Entretanto, se cada linha tivesse informações de apenas uma variável, isto é, se o sistema fosse desacoplado, o método WENO poderia ser utilizado para resolver o sistema de equação; portanto, deseja-se diagonalizar a matriz A para alcançar o sistema desacoplado. A matriz A é diagonalizável e possui autovalores, uma vez que as equações de Euler são um sistema

hiperbólico. Os autovalores da matriz A são descritos abaixo:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \lambda_3 \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

$$\lambda_1 = u - c, \quad \lambda_2 = u, \quad \lambda_3 = u + c,$$

onde a velocidade u está associada à convecção do fluido e os autovalores $u + c$ e $u - c$ estão associados às ondas sonoras, ou seja, os autovalores representam a velocidade de propagação da informação (Leveque, 1992; Toro, 1999).

Os autovetores à direita e à esquerda da matriz A são, respectivamente, as matrizes abaixo:

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ u - a & u & u + a \\ H - ua & u_2 & H + ua \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

$$R^{-1} = L = \frac{1}{2a^2} \begin{pmatrix} au + (\gamma - 1)u_2 & -c - (\gamma - 1)u & (\gamma - 1) \\ 2a^2 - 2(\gamma - 1)u_2 & 2(\gamma - 1)u & -2(\gamma - 1) \\ -cu + (\gamma - 1)u_2 & c - (\gamma - 1)u & (\gamma - 1) \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

A matriz jacobiana, os autovalores e os autovetores para a equação de Euler bidimensional e tridimensional podem ser consultados no capítulo 3 de Toro (1999).

Uma vez que os autovalores da matriz Jacobiana da equação de Euler são todos reais, a matriz A é diagonalizável (Leveque, 1992; Toro, 1999); portanto, podemos escrever

$$\Lambda = L A R, \quad (2.22)$$

relembrando que Λ é uma matriz diagonal contendo os autovalores de A , R é a matriz de autovetores à direita de A e L é a matriz de autovetores à esquerda de A . Multiplicando a

equação 2.16 por L , tem-se

$$\frac{\partial LQ}{\partial t} + \frac{\partial LAQ}{\partial x} = 0, \quad (2.23)$$

agora, multiplicando a equação 2.23 por $L \cdot R$ e sabendo que o produto matricial $L \cdot R$ resulta em uma matriz identidade, obtém-se

$$\frac{\partial LQ}{\partial t} + \frac{\partial \overbrace{LAR}^{\Lambda} LQ}{\partial x} = 0. \quad (2.24)$$

Finalmente, definindo $w = LQ$, a equação 2.24 torna-se

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial w}{\partial x} = 0. \quad (2.25)$$

A equação 2.25 é a forma característica de uma equação hiperbólica que foi dissociada em 3 equações escalares considerando as variáveis de conservação de massa, momento e energia da equação de Euler unidimensional. Quando escrevemos equação 2.25 linha a linha, chega-se a

$$\begin{cases} (w_1)_t + \lambda_1(w_1)_x + 0 + 0 = 0 \\ (w_2)_t + 0 + \lambda_2(w_2)_x + 0 = 0 \\ (w_3)_t + 0 + 0 + \lambda_3(w_3)_x = 0. \end{cases} \quad (2.26)$$

Dessa forma, o esquema WENO pode ser utilizado para reconstrução individual dos fluxos de massa, momento e energia, linha a linha.

2.3 O método WENO de diferenças finitas

2.3.1 Procedimento de reconstrução polinomial

Para efeito de simplificação, uma formulação genérica da lei de conservação hiperbólica unidimensional será considerada para apresentar o procedimento de reconstrução polinomial do método WENO, que segue

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial f(Q)}{\partial x} = 0. \quad (2.27)$$

Considere uma malha uniforme definida pelo pontos no centro da célula como $x_i = i\Delta x$, $i = 0, \dots, N$ e os pontos na fronteiras das células como $x_{i+1/2} = x_i + \frac{\Delta x}{2}$, onde Δx é o espaçamento da malha. A forma semi-discretizada da equação 2.27, utilizando o método das linhas, resulta em um sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\frac{dQ_i}{dt} = -\frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x=x_i}. \quad (2.28)$$

Uma formulação conservativa de diferenças finitas para leis de conservação hiperbólicas requer fluxos numéricos consistentes de alta ordem nas fronteiras das células, a fim de obter as diferenças de fluxos através das células uniformemente espaçadas. A propriedade conservativa da discretização espacial é obtida pela definição implícita de fluxo numérico $h(x)$, que é uma função que satisfaz

$$f(x) = \int_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{x+\frac{\Delta x}{2}} h(\xi) d\xi, \quad (2.29)$$

de tal forma que a derivada espacial em 2.28 é exatamente aproximada por uma fórmula de diferença finita conservativa nas fronteiras da célula,

$$\frac{dQ_i}{dt} = \frac{1}{\Delta x} (h_{i+1/2} - h_{i-1/2}). \quad (2.30)$$

Uma vez que nada se sabe nada sobre $h(x_{1/2})$, aproxima-se seu valor utilizando interpolações polinomiais de alta ordem, por meio dos valores conhecidos de f , $f_i = f(x_i)$ para representá-lo. Esse processo de reconstrução polinomial é a essência do método WENO. O método WENO de quinta ordem usa um estêncil de 5 pontos (daqui em diante representado por S_5), composto por três sub-estênceis de 3 pontos (representados por S_0 , S_1 e S_2), como mostrado na Figura 2.1, e pode ser desenvolvido usando a abordagem de interpolação tradicional, por exemplo, a *interpolação Lagrangeana*.

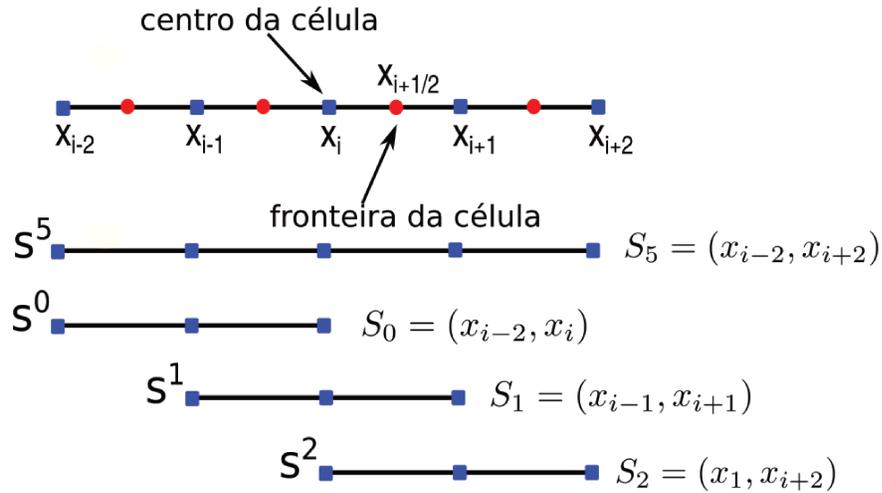


Figura 2.1: Malha computacional uniforme x_i e o estêncil S_5 de 5 pontos, composto de três estêncios de 3 pontos S_0 ; S_1 ; S_2 , usado para a etapa de reconstrução do método WENO de quinta ordem (Borges et al., 2008).

Assim, é possível encontrar um polinômio de no máximo segundo grau, ou seja, $p_0(x)$, que interpola a função $f(x)$ nos pontos da malha do sub-estêncil $S_0 = (x_{i-2}, x_{i-1}, x_i)$. Uma aproximação para o valor de $f(x_{i+1/2})$ pode ser obtida usando $f_{i+1/2}^{(0)} \equiv p_0(x_{i+1/2})$, que é dado como

$$f_{i+1/2}^{(0)} = \frac{1}{3}f_{i-2} - \frac{7}{6}f_{i-1} + \frac{11}{6}f_i.$$

A expressão polinomial acima é de precisão de terceira ordem, considerando que a função $f(x)$ seja suave no sub-estêncil, S_0

$$f_{i+1/2}^{(0)} - f(x_{i+1/2}) = O(\Delta x^3).$$

De maneira semelhante, se outro sub-estêncil, $S_1 = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$, for selecionado, um polinômio de interpolação diferente, $p_1(x)$, será encontrado. Portanto, uma aproximação diferente de $f(x_{i+1/2})$ é obtida, tal que $f_{i+1/2}^{(1)} \equiv p_1(x_{i+1/2})$ é dado por

$$f_{i+1/2}^{(1)} = -\frac{1}{6}f_{i-1} + \frac{5}{6}f_i + \frac{1}{3}f_{i+1}$$

que também é de terceira ordem, desde que a função $f(x)$ seja suave no estêncil S_1

$$f_{i+1/2}^{(1)} - f(x_{i+1/2}) = O(\Delta x^3).$$

Finalmente, um terceiro sub-estêncil, $S_2 = (x_i, x_{i+1}, x_{i+2})$, leva a outro polinômio diferente, $p_2(x)$, que satisfaz $f_{i+1/2}^{(2)} \equiv p_2(x_{i+1/2})$ representado por

$$f_{i+1/2}^{(2)} = \frac{1}{3}f_i + \frac{5}{6}f_{i+1} - \frac{1}{6}f_{i+2},$$

que também é de terceira ordem, desde que a função $f(x)$ seja suave no estêncil S_2

$$f_{i+1/2}^{(2)} - f(x_{i+1/2}) = O(\Delta x^3).$$

Para o caso em que a função $f(x)$ seja globalmente suave, todos os três polinômios, $f_{i+1/2}^{(0)}$, $f_{i+1/2}^{(1)}$, $f_{i+1/2}^{(2)}$ são de terceira ordem. A seleção adequada da expressão para $f(x_{i+1/2})$ calculada poderia ser baseada em outros aspectos, como o menor erro ou a estabilidade local.

Agora, se o estêncil de cinco pontos, $S_5 = (x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2})$, isto é, uma união dos sub-estêncis de terceira ordem, S_0 , S_1 e S_2 é considerada, um polinômio de interpolação $p_5(x)$ de grau no máximo quatro que satisfaz $p_5(x_j) = f_j$ para $j = i - 2, \dots, i + 2$ pode ser expresso como

$$f_{i+1/2}^{(5)} = \frac{2}{60}f_{i-2} - \frac{13}{60}f_{i-1} + \frac{47}{60}f_i + \frac{27}{60}f_{i+1} - \frac{3}{60}f_{i+2}$$

que é de quinta ordem precisão, com base em que a função $f(x)$ é suave no estêncil S_5

$$f_{i+1/2}^{(5)} - f(x_{i+1/2}) = O(\Delta x^5).$$

Nesse ponto, é interessante notar que a última equação, baseada no maior estêncil S_5 , pode ser escrita como uma combinação convexa linear das três expressões de aproximação de terceira ordem para $f_{i+1/2}^{(0)}$, $f_{i+1/2}^{(1)}$ e $f_{i+1/2}^{(2)}$, que foram desenvolvidos com base no pequeno estêncil, S_0 , S_1 e S_2 ,

$$\hat{f}_{i+1/2}^{(5)} = d_0 f_{i+1/2}^{(0)} + d_1 f_{i+1/2}^{(1)} + d_2 f_{i+1/2}^{(2)}$$

onde d_0 , d_1 e d_2 são os pesos ideais e devem satisfazer $d_0 + d_1 + d_2 = 1$. No caso particular abordado aqui, eles são constantes

$$d_0 = \frac{1}{10}; \quad d_1 = \frac{3}{5}; \quad d_2 = \frac{3}{10}.$$

Em geral, os pesos ideais d_k podem ser encontrados com a seguinte fórmula (Arandiga et al., 2011):

$$d_k = \frac{\binom{r}{k} \binom{r-1}{k}}{\binom{2r-1}{r}}, \quad k = 0, \dots, r-1,$$

onde

$$\binom{n}{m} = \frac{n!}{m!(n-m)!},$$

sendo $k = 0, \dots, r-1$ é o número de sub-estênceis; cada sub-estêncil contendo r pontos da malha e o valor de $2r-1$ define a ordem do método WENO. A título de exemplo, um esquema WENO de quinta ordem, ou seja, usa o estêncil de 5 pontos subdividido em três sub-estêncil de 3 pontos, e os valores de r e k são, respectivamente, $r = 3$, $k = 0, 1, 2$.

No que diz respeito à abordagem ENO sugerida por (Harten et al., 1987), uma das três expressões, $f_{i+1/2}^{(0)}$, $f_{i+1/2}^{(1)}$ e $f_{i+1/2}^{(2)}$, pode ser selecionada com base na suavidade local. Tal abordagem garantiria a precisão de terceira ordem e um comportamento essencialmente não oscilatório se $f(x)$ fosse suave em pelo menos um dos três sub-estêncil, S_0 , S_1 , S_2 . É importante lembrar, portanto, que o princípio WENO (diferentemente do ENO) é escolher a aproximação final utilizando uma combinação convexa das três expressões de terceira ordem, $f_{i+1/2}^{(0)}$, $f_{i+1/2}^{(1)}$ e $f_{i+1/2}^{(2)}$, de tal forma que

$$\hat{f}_{i+1/2} = \omega_0 f_{i+1/2}^{(0)} + \omega_1 f_{i+1/2}^{(1)} + \omega_2 f_{i+1/2}^{(2)},$$

onde ω_k são definidos aqui como pesos normalizados, sendo $\omega_k \geq 0$ e $\omega_0 + \omega_1 + \omega_2 = 1$. para o caso de um esquema WENO de quinta ordem. Adicionalmente, os pesos normalizados ω_k devem satisfazer:

- $\omega_k \approx d_k$, se $f(x)$ for suave no estêncil S_5 .
- $\omega_k \approx 0$, se $f(x)$ tiver descontinuidade em um sub-estêncil S_k , mas for suave em pelo menos um dos outros dois sub-estênceis.

Calculam-se os pesos normalizados, ω_k , como

$$\omega_k = \frac{\alpha_k}{\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2}, \quad (2.31)$$

onde α_k são os pesos não-normalizados. A fórmula utilizada para o cálculo dos pesos não-normalizados define os diversos esquemas WENO. Abaixo, lista-se a definição de α_k pelo esquema clássico WENO-JS de *Jiang-Shu*, esquema WENO-Z de *Borges et al. (2008)*, esquema WENO-Z+ de *Acker et al. (2016)*, respectivamente, como

$$\alpha_k^{JS} = \frac{d_k}{(\beta_k + \epsilon)^p} \quad (2.32)$$

$$\alpha_k^Z = d_k \left[1 + \left(\frac{\tau}{\beta_k + \epsilon} \right)^p \right] \quad (2.33)$$

$$\alpha_k^{Z+} = d_k \left[1 + \left(\frac{\tau}{\beta_k + \epsilon} \right)^p + \lambda \left(\frac{\beta_k + \epsilon}{\tau + \epsilon} \right) \right] \quad (2.34)$$

onde $\epsilon = 10^{-6}$ são os parâmetros de sensibilidade (usados para evitar divisões por zero na formulação de pesos) e a potência é tipicamente dada por $p = 2$. O indicador de suavização global é $\tau = |\beta_0 - \beta_2|$ e um parâmetro de ajuste é dependente de malha, $\lambda = \Delta x^{2/3}$. O indicador de suavidade β_k é calculado de acordo com a sugestão de *Jiang and Shu (1996)*, isto é,

$$\beta_k = \sum_{l=1}^k \Delta x^{2l-1} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(\frac{d^l}{dx^l} p_k(x) \right)^2 dx. \quad (2.35)$$

Na expressão acima, o indicador de suavidade é o somatório de todas as derivadas do polinômio de interpolação pertencente ao intervalo $[x_{i-2}, x_{i+2}]$. Considerando o exemplo discutido aqui ($r = 5$), a expressão explícita para a suavidade β_k é

$$\beta_0 = \frac{1}{4} (f_{i-2} - 4f_{i-1} + 3f_i)^2 + \frac{13}{12} (f_{i-2} - 2f_{i-1} + f_i)^2 \quad (2.36)$$

$$\beta_1 = \frac{1}{4} (-f_{i-1} + f_{i+1})^2 + \frac{13}{12} (f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1})^2 \quad (2.37)$$

$$\beta_2 = \frac{1}{4} (-3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2})^2 + \frac{13}{12} (f_i - 2f_{i+1} + f_{i+2})^2. \quad (2.38)$$

2.3.2 Condições de contorno

No contexto de aproximação numérica de alta ordem, normalmente, estende-se o domínio computacional e incluem-se células adicionais nas suas extremidades. Elas são denominadas de células fictícias ou pontos fictícios, cujos valores são definidos no início de cada iteração durante a simulação. Uma implementação inadequada pode resultar em uma simulação imprecisa do problema analisado. No método WENO de quinta ordem, três conjuntos de células fictícias são necessários para se obter valores precisos reconstruídos de quinta ordem nas fronteiras do domínio computacional. No **Apêndice C**, há um pseudo-código que mostra a implementação de uma condição de contorno e como e quanto as células fictícias são utilizadas. As células fictícias podem ser implementadas, por exemplo, como condição de contorno periódica, condição de contorno fixa (*Dirichlet*), condição de contorno sólido (*Neumann*). E ainda pode-se combinar a implementação das células fictícias com condições de contorno de entrada e saída para um análise de escoamento em bocais.

2.3.2.1 Condição de contorno periódica

A condição de contorno periódica pode ser considerada como pertencente à categoria de condição de contorno livre, ou seja, que elimina superfícies. Ela é utilizada, principalmente, quando a solução do escoamento tem uma natureza de repetição periódica. Nesse caso, um contorno periódico localizado em um extremo da malha é tratado como se fosse um vizinho

direto dos pontos adjacentes localizados no outro extremo do contorno periódico da malha. Assim, quando as variáveis do escoamento estão sendo calculadas em uma célula adjacente a um contorno periódico, os valores dessas variáveis do contorno periódico oposto são usados. A Figura 2.2 mostra mais claramente a definição da condição de contorno periódica com três pontos fictícios alocados em cada fronteira. Os círculos vermelhos representam as células fictícias e os círculos pretos são o domínio computacional "real". Os círculos pretos enumerados como 1, 2 e 3 são copiados para um novo domínio, após o último ponto (n_x) do domínio "real", surgindo os círculos vermelhos enumerados com 1, 2 e 3. Os três últimos pontos do domínio real, $n_x - 2$, $n_x - 1$ e n_x , são alocados antes do primeiro ponto no círculo preto, surgindo os círculos vermelhos enumerados com $n_x - 2$, $n_x - 1$ e n_x . Essa realocação de pontos define uma nova variável que contém tanto os pontos reais, como os pontos fictícios.

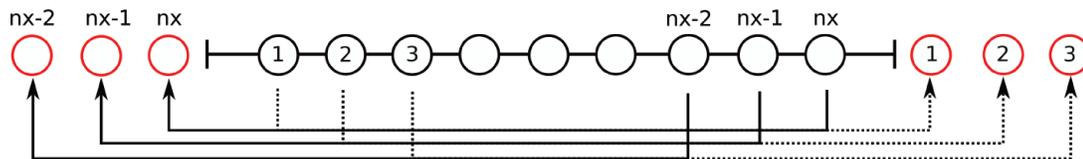


Figura 2.2: Definição da condição de contorno periódica (próprio autor).

2.3.2.2 Condição de contorno fixa

Na condição de contorno fixa (condição de contorno de *Dirichlet*), as células fictícias são simplesmente definidas para um valor prescrito, no qual a solução precisa ter no limite do domínio computacional; em outras palavras, extrapola-se o valor da célula, que é adjacente ao contorno, para as células fictícias, da forma como é mostrada na Figura 2.3. Essa condição de contorno impõe ao domínio computacional características não reflexivas, e permite que quaisquer ondas que saíam do domínio, desapareçam sem gerar oscilações espúrias.

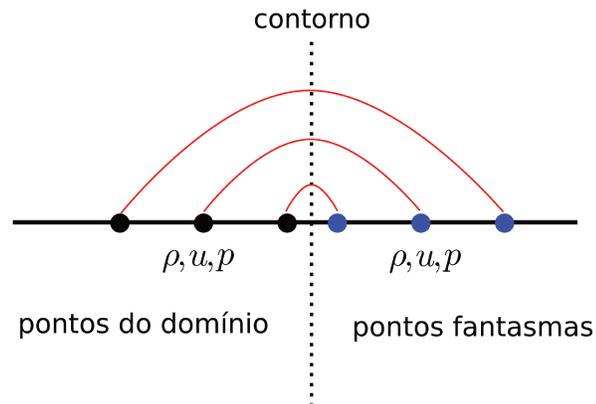


Figura 2.3: Definição de condição de contorno fixa (próprio autor).

2.3.2.3 Condição de contorno reflexiva

A condição de contorno reflexiva também é conhecida como condição de contorno simétrica. Se o escoamento tiver um comportamento simétrico, a primeira condição a ser satisfeita é que não haja fluxo através das fronteiras computacionais, ou seja, a fronteira deve ser tratada como um espelho; na fronteira, quando a velocidade é definida como $u = 0$, há uma mudança no sinal de u , enquanto que a condição $\frac{du}{dx} = 0$ reflete perfeitamente a onda (Blazek, 2015). Assim, quando uma onda atinge a fronteira e é refletida, aplica-se a condição

$$\frac{\partial u}{\partial n} \equiv n \cdot \nabla u = 0$$

onde u é o vetor de velocidade e n são os três componentes da unidade de saída normal na fronteira. É comum, também, tratar a condição de contorno reflexiva invertendo a direção do componente normal da velocidade das células da fronteira e atribuindo os valores nas células fictícias. A Figura 2.4 resume o conceito de condição de contorno reflexiva.

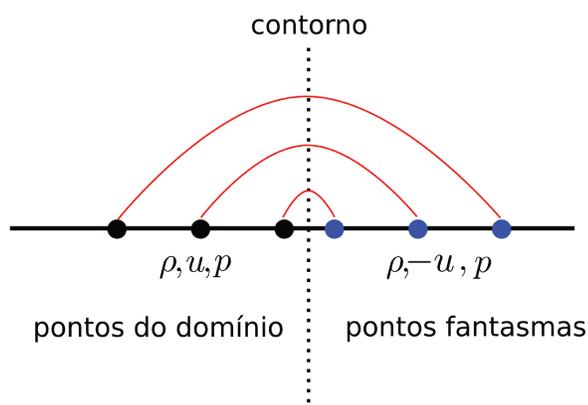


Figura 2.4: Definição de condição de contorno reflexiva (próprio autor).

2.3.2.4 Condição de contorno de entrada e saída

As condições de contorno de entrada e saída não são utilizadas para calcular pontos fictícios, mas podem ser implementadas para estudos de escoamentos em bocais. Para a condição de contorno de entrada e saída de bocais, deve-se verificar se o escoamento é subsônico ou supersônico. Para isso, utiliza-se a teoria das variáveis características, isto é, dependendo do sinal (positivo ou negativo) dos autovalores do fluxo convectivo, a onda é transportada para fora ou para dentro do domínio computacional (Blazek, 2015). Por exemplo, no caso de um bocal bidimensional com uma entrada subsônica, há três variáveis características de entrada e uma de saída.

Há quatro tipos diferentes de condições de contorno a serem verificados, dependendo do valor do número de Mach na entrada e saída do bocal.

- Entrada subsônica

Neste caso, duas características entram (se for um caso unidimensional) e uma característica deixa o domínio físico. Portanto, duas variáveis características (eg. massa específica e pressão) devem ser prescritas com base nos valores de escoamento, enquanto que uma variável característica (eg. velocidade) deve ser calculada (extrapolação) a partir das informações do interior do domínio físico e definidas na entrada do bocal.

- Saída subsônica

No caso de um escoamento subsônico na saída do bocal, duas variáveis do escoamento têm que ser calculadas a partir das informações do interior do domínio físico, enquanto que a terceira variável deve ser especificada.

- Entrada e saída supersônica

Nestes casos, todas as características estão entrando ou saindo do bocal. Portanto, todas as variáveis do escoamento devem ser prescritas na entrada e calculadas a partir das informações do escoamento na saída do bocal.

2.3.3 Partição de fluxo

O conceito de partição de fluxo será apresentado utilizando uma equação hiperbólica muito simples, a equação de onda, que é dada por

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + c \frac{\partial Q}{\partial x} = 0, \quad (2.39)$$

onde uma onda, Q , mantendo sua forma inicial, move-se à velocidade c . A condição inicial é definida como $Q = \sin(2\pi \cdot x)$ e o fluxo é calculado como sendo $f = c \cdot \sin(2\pi \cdot x)$. Para fins didáticos, dois valores distintos serão atribuídos para a velocidade da onda: o primeiro será $c = -1$ e o segundo, $c = 1$. Com esses valores, a onda se propagará para a esquerda (\leftarrow) e para a direita (\rightarrow), respectivamente.

A equação 2.39 é solucionada utilizando o método WENO tradicional de quinta ordem, com condição de contorno periódica e de acordo com a condição inicial reportada no parágrafo anterior. A Figura 2.5 mostra o resultado do perfil da onda durante o tempo de 0, 1s, 0,3s e 0,5s com a velocidade da onda definida como $c = -1$. A onda propaga-se da direita para a esquerda (\leftarrow) de forma estável. Entretanto, quando a velocidade da onda é definida como $c = 1$, a onda propaga-se da esquerda para a direita (\rightarrow) de forma instável, como pode ser observado na Figura 2.6 durante os tempos de 0, 1s e 0,15s.

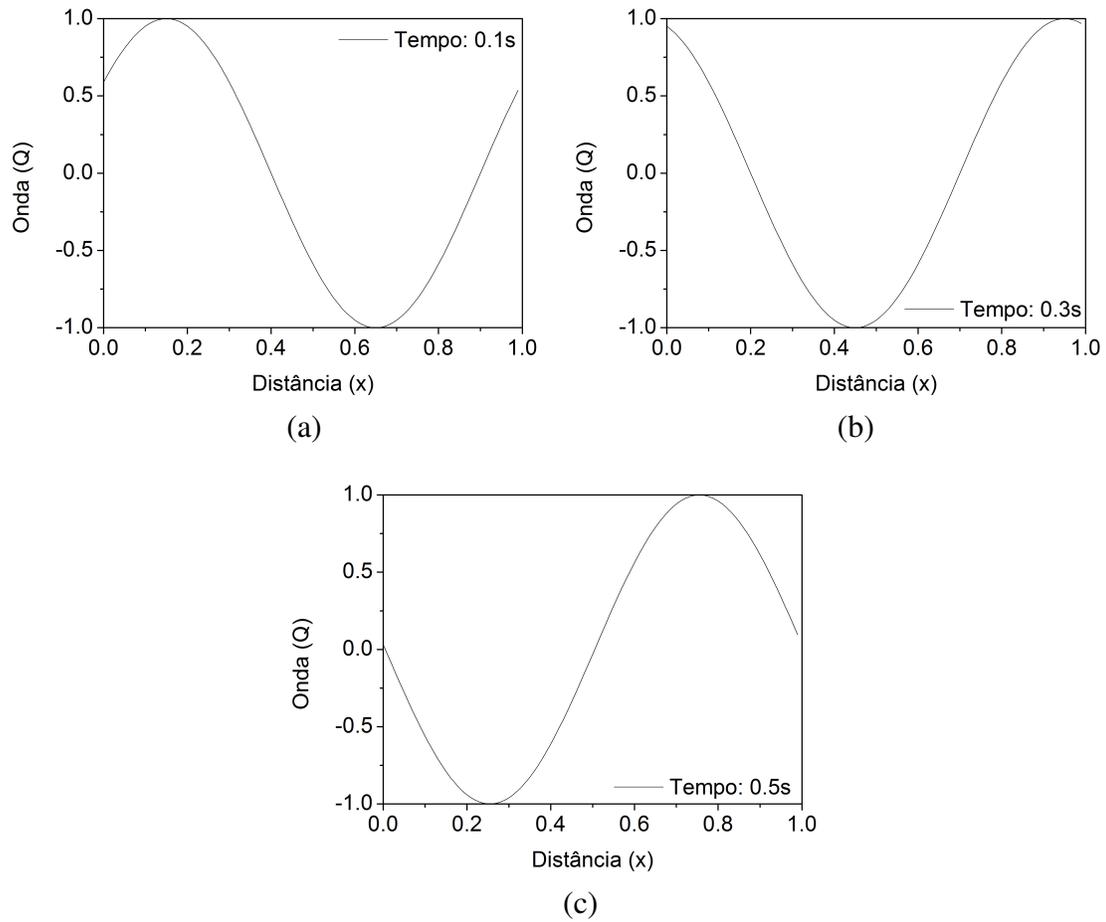


Figura 2.5: Perfil estável da onda durante os tempos 0.1s (a), 0.3s (b) e 0.5s (b) com velocidade de propagação $c = -1$ da direita para esquerda (\leftarrow) (próprio autor).

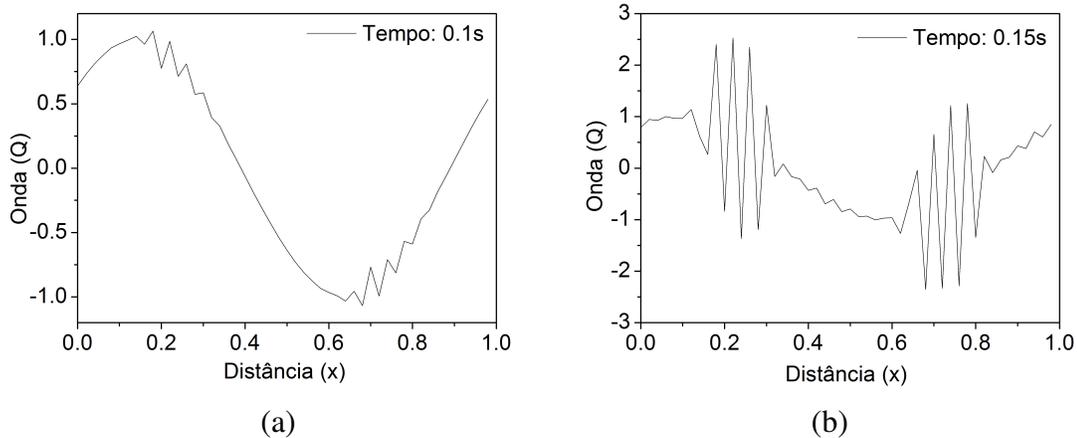


Figura 2.6: Perfil instável da onda durante os tempos 0.1s (a) e 0.15s (b) com velocidade de propagação $c = 1$ da esquerda para a direita (\rightarrow) (próprio autor).

O método WENO de quinta ordem desenvolvido anteriormente é central de diferenças finitas a montante de um ponto, que é um algoritmo estável para resolver problemas de escoamento (ou propagação de ondas) no sentido negativo $c < 0$. Assim, a mesma formulação WENO para resolver propagação de ondas com velocidade de onda positiva, $c > 0$, falhará. Considerando a equação de Euler (como exemplo, uma condição inicial arbitrária), a velocidade de onda será variável e, portanto, c torna-se velocidade de um escoamento, $v(x, t)$, que pode ter um valor positivo ou negativo, dependendo do sinal da solução desconhecida da variável em qualquer espaço x e tempo t . Isso significa que a estrutura do algoritmo WENO desenvolvido não é recomendada para resolver qualquer tipo de escoamento a partir da equação de Euler. Felizmente, este problema pode ser solucionado com o conceito de partição de fluxo.

A partição de fluxo faz com que o fluxo f (veja equação 2.12) seja dividido em um fluxo positivo f^+ e fluxo negativo f^- , ou seja,

$$f = f^+ + f^-, \quad (2.40)$$

o fluxo positivo f^+ considera apenas o componente Q positivo, fazendo o uso de $\frac{df^+}{dQ} > 0$. Da mesma forma, o fluxo negativo f^- deve consistir apenas no componente Q negativo, fazendo

o uso de $\frac{df^-}{dQ} < 0$. A partição de fluxo de *Lax-Friedrichs* é a alternativa comumente usada, definida como

$$f^\pm = \frac{1}{2} (f \pm \alpha Q), \quad \alpha = \max \left| \frac{\partial f}{\partial Q} \right|, \quad (2.41)$$

onde α é o valor absoluto máximo da matriz jacobiana. Com a partição de fluxo de *Lax-Friedrichs*, a equação de Euler torna-se

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \left(\frac{\partial f^+}{\partial x} + \frac{\partial f^-}{\partial x} \right) = 0. \quad (2.42)$$

O procedimento de reconstrução polinomial utilizando o esquema WENO, explorado na seção anterior, deve ser aplicado para reconstruir o fluxo positivo f^+ . Para obter a reconstrução do fluxo negativo f^- , no entanto, faz-se uma mudança na variável independente e define-se uma nova função; isto é, dada $f^-(x, t)$, faz-se $g(y, t) = f^-(-x, t)$; logo em seguida, aplica-se o procedimento de reconstrução do esquema WENO na nova variável $g(y, t)$ no domínio y . Após a reconstrução, modifica-se o valor reconstruído para o domínio original x .

Em um pseudo-código, assumindo que o mesmo número de células fictícias r esteja incluído nos dados original $f_{minus}(-r : r)$, tem-se as seguintes etapas para reconstrução do fluxo negativo f^- :

1. Defina uma nova variável $f_{minus-flip}(-r : r) = f_{minus}(r : -r : -1)$;
2. Aplique o procedimento de reconstrução do método WENO em $f_{minus-flip}(-r : r)$ para obter $\hat{g}_{minus}(-r : r)$;
3. Retorne ao domínio original $\hat{f}_{minus}(-r : r) = \hat{g}_{minus}(r : -r : -1)$.

A forma discretizada da equação 2.42 é escrita como

$$\frac{dQ}{dt} = L(Q) \quad (2.43)$$

onde

$$L(Q) = - \left[\frac{1}{\Delta x} (\hat{f}_{i+1/2}^+ - \hat{f}_{i-1/2}^+) + \frac{1}{\Delta x} (\hat{f}_{i+1/2}^- - \hat{f}_{i-1/2}^-) \right]$$

O conceito de repartição de fluxo e o procedimento de cálculo dos fluxos são aplicados na equação de onda utilizada como exemplo no início desta seção. Agora, a Figura 2.7 mostra o perfil de onda durante os tempos de 0, 1s, 0,3s e 0,5s com a velocidade de onda $c = 1$, propagando-se da esquerda para a direita (\rightarrow) de forma estável.

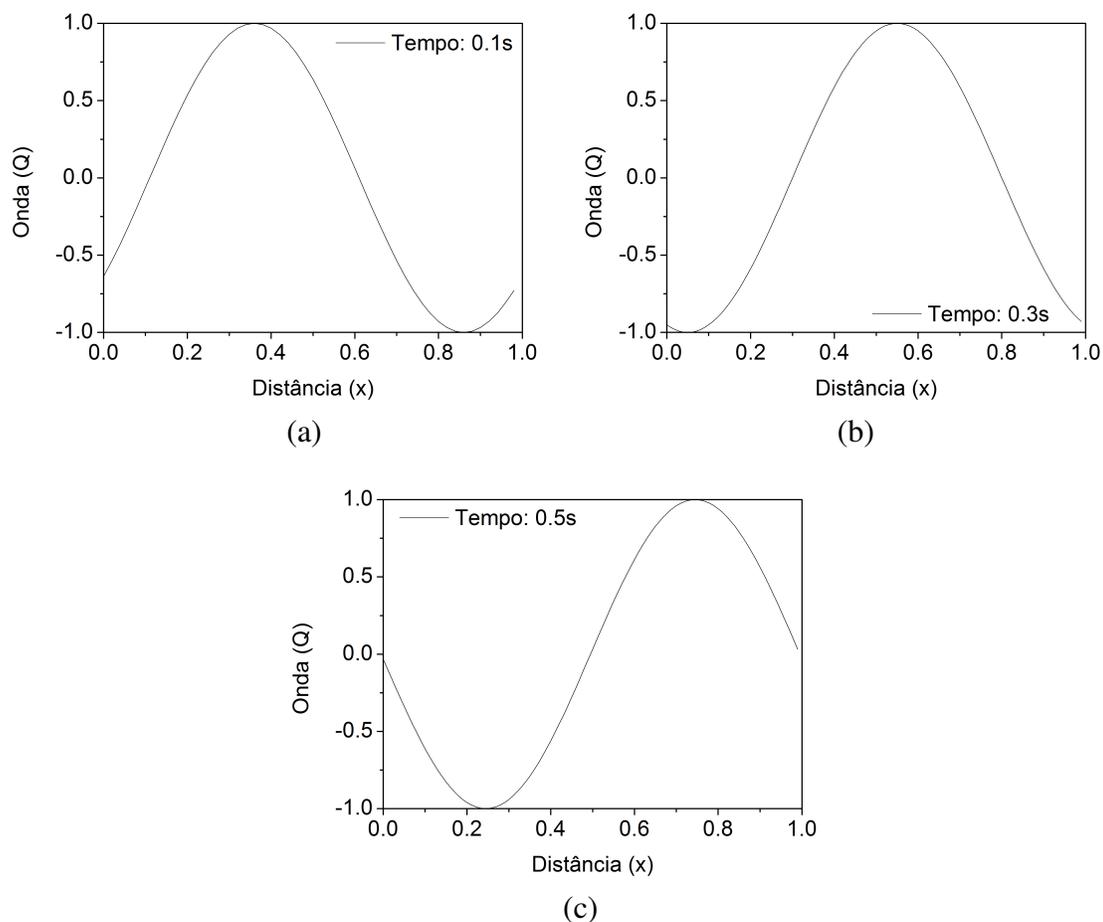


Figura 2.7: Perfil estável da onda durante os tempos 0.1s (a), 0.3s (b) and 0.5s (c) com velocidade de propagação $c = 1$ da esquerda para a direita (\rightarrow) depois da implementação do conceito de repartição de fluxo (próprio autor).

2.3.4 Runge-Kutta explícito de forte preservação de estabilidade

A alta ordem do esquema de discretização espacial também determina a necessidade de uma alta ordem de precisão na discretização temporal. O esquema Runge-Kutta explícito de

forte preservação de estabilidade (do inglês, *Strong Stability-Preserving Runge-Kutta* - SSP-RK) é usado para encaminhar a solução no tempo de uma equação diferencial ordinária do tipo como na equação 2.43.

O método SSP-RK de segunda ordem é definido como

$$\begin{cases} Q^{(1)} = Q^{(n)} + \Delta t L(Q^{(n)}) \\ Q^{n+1} = \frac{1}{2}Q^{(n)} + \frac{1}{2}Q^{(1)} + \frac{1}{2}\Delta t L(Q^{(1)}) \end{cases} \quad (2.44)$$

O método SSP-RK de terceira ordem é definido como

$$\begin{cases} Q^{(1)} = Q^{(n)} + \Delta t L(Q^{(n)}) \\ Q^{(2)} = \frac{3}{4}Q^{(n)} + \frac{1}{4}Q^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t L(Q^{(1)}) \\ Q^{n+1} = \frac{1}{3}Q^{(n)} + \frac{1}{3}Q^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t L(Q^{(2)}) \end{cases} \quad (2.45)$$

O uso de tal esquema explícito requer o cálculo de um intervalo de tempo Δt . O passo de tempo deve cumprir a condição de *Courant-Friedrichs-Lewy* (CFL) para garantir estabilidade (Courant et al., 1967). O CLF, em simulação numérica unidimensional, pode ser calculado como

$$\Delta t = CFL \frac{\Delta x}{\max |\Lambda|}, \quad (2.46)$$

onde $\frac{\Delta x}{\max |\Lambda|}$ representa o tempo necessário para propagar informações sobre o tamanho da célula Δx com a velocidade $\max |\Lambda|$. Note que $\max |\Lambda|$ corresponde ao valor máximo do fluxo convectivo jacobiano. A magnitude do número de CFL depende do tipo e dos parâmetros do esquema de escalonamento de tempo, bem como da forma do esquema de discretização espacial. As experiências obtidas por meio de estudos com esquemas WENO sugerem $CFL \leq 0.5$, para manter a estabilidade durante uma simulação numérica.

2.4 Submodelos para a equação governante do escoamento

Nesta seção, apresentam-se os conceitos matemático e físico do número de Mach a partir de sua influência na compressibilidade do escoamento e exploram-se os submodelos da equação de Euler que lidam com escoamentos em bocais e explosões físicas.

2.4.1 Número de Mach

A compressibilidade de um escoamento mensura a variação relativa da massa específica devido aos gradientes de pressão originados no escoamento. Curiosamente, essa propriedade do escoamento está inseparavelmente vinculada ao número Mach, M , que é definido como a velocidade u dividida pela velocidade local do som c ,

$$M = \frac{u}{c}. \quad (2.47)$$

A magnitude das flutuações da pressão de um escoamento invíscido origina-se a partir de dois princípios físicos: conservação de energia e inércia. Por um lado, a interação do escoamento com um obstáculo leva a uma aceleração local do fluido. O princípio de *Bernoulli* exige que as flutuações da pressão resultantes sejam da mesma ordem de magnitude que a energia cinética, o que causa essas perturbações. A equação de Bernoulli pode ser escrita, de forma geral, como

$$\int \frac{dp}{\rho} + \frac{u^2}{2} = const., \quad (2.48)$$

que, uma vez expressa na forma diferencial, torna-se

$$\frac{dp}{\rho} + u du = 0. \quad (2.49)$$

Na equação 2.48, o primeiro termo pode ser expandido de acordo com a regra da cadeia, resultando em

$$\frac{dp}{\rho} = \left(\frac{dp}{d\rho} \right) \frac{d\rho}{\rho}. \quad (2.50)$$

As propagações de velocidade de pequenas perturbações – que é a velocidade do som, considerando um processo adiabático e reversível, isto é, isentrópico – podem ser definidas na forma diferencial como

$$c^2 = \left(\frac{dp}{d\rho} \right)_s. \quad (2.51)$$

Combinando as equações 2.49, 2.50 e 2.51, obtém-se

$$\frac{d\rho}{\rho} = \frac{u}{c^2} du = M^2 \frac{du}{u} \quad (2.52)$$

A equação 2.52 relaciona a variação relativa da massa específica com o quadrado do número de Mach. De forma geral, a magnitude da variação relativa da massa específica para um escoamento em torno de um obstáculo é dada pelas relações de proporcionalidade a seguir:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} \sim \frac{\Delta p}{p} \sim \frac{\frac{1}{2}\rho u^2}{p} \sim \frac{u^2}{c^2} = M^2, \quad (2.53)$$

onde, da esquerda para a direita, tem-se: uma lei de compressibilidade padrão para um fluido, princípio de Bernoulli, a velocidade do som em gases $c^2 \sim p/\rho$, e a definição de número de Mach. De uma outra forma, forças de inércia I nos vórtices são proporcionais ao quadrado da velocidade do escoamento fluxo: $I \sim \rho u^2/L$, onde L é tamanho do vórtice, resultando em uma relação semelhante para a mudança relativa de massa específica nos vórtices

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} \sim \frac{\Delta p}{p} \sim \frac{\nabla p L}{p} \sim \frac{IL}{p} \sim \frac{u^2}{a^2} = M^2, \quad (2.54)$$

em outras palavras, o quadrado do número Mach é uma medida direta da compressão causada pelo escoamento, permitindo uma classificação dos regimes de escoamento: se o número Mach for menor que 0.3, considera-se o escoamento incompressível; se for maior, tem-se um escoamento compressível e, portanto, a massa específica não poderá ser considerada com um valor constante. Em algumas aplicações, os escoamentos ocorrem com velocidades bem abaixo da velocidade do som. Matematicamente falando, isso é expresso pelo número Mach tendendo a 0. Fisicamente, diz-se que as ondas de pressão, que ocorrem na velocidade do som, são bem mais velozes do que a advecção do escoamento. A nível de comparação física e para estimativas de velocidades, usualmente dividem-se os níveis de velocidades de acordo com o número de Mach como sendo:

- subsônica: $M < 1$
- transônica: $0.8 < M < 1.2$
- sônica: $M = 1$
- supersônica: $1.2 < M < 3$
- hipersônica: $M > 3$.

2.4.2 Escoamento em bocais

Uma configuração usual de um bocal é mostrada na Figura 2.8, sendo o ponto 1 e o ponto N os extremos do bocal na direção x . O ponto 1 representa o reservatório, enquanto o ponto N é o limite do bocal na saída. O ponto 1 tem propriedades termodinâmicas, considerando os valores de estagnação para a pressão, massa específica, temperatura e velocidade, indicadas respectivamente por, p_0, ρ_0, T_0 e V_0 . O escoamento expande-se isentropicamente, a partir do reservatório, com uma velocidade subsônica, na seção convergente do bocal, até a velocidade supersônica, na seção divergente do bocal. No ponto N , a pressão, a temperatura, a massa específica e o número de Mach são indicados por p_e, T_e, ρ_e e M_e , respectivamente.

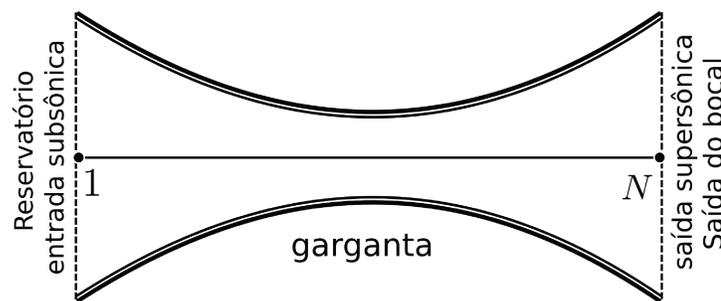


Figura 2.8: Representação de um bocal subsônico-supersônico (próprio autor).

Considere que um gás (mais precisamente ar) sai do reservatório (condição de estagnação) e flui através do bocal, acelera devido à força exercida por uma alta pressão p_0 , que se torna cerca da metade da pressão de estagnação na garganta do bocal, e continua diminuindo ao longo da distância até obter a pressão mais baixa na condição de saída, p_e . O perfil da pressão

adimensional é esboçado na Figura 2.9. Já o número de Mach tem o valor próximo de zero ($M \approx 0$), na condição de estagnação, torna-se sônico na garganta do bocal ($M = 1$) e atinge a condição supersônica na condição de saída. O perfil do número de Mach é esboçado na Figura 2.10.

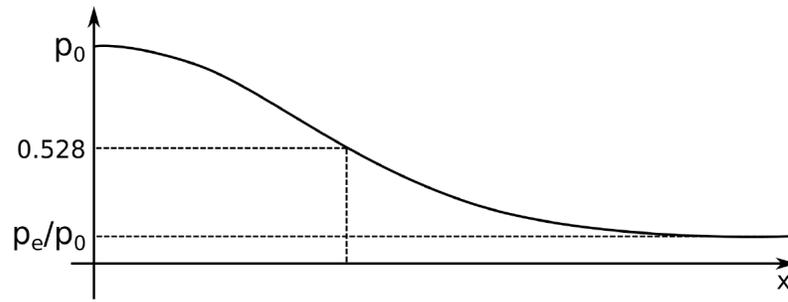


Figura 2.9: Perfil da pressão adimensional em um bocal de escoamento subsônico-supersônico. Adaptado de Anderson (1995).

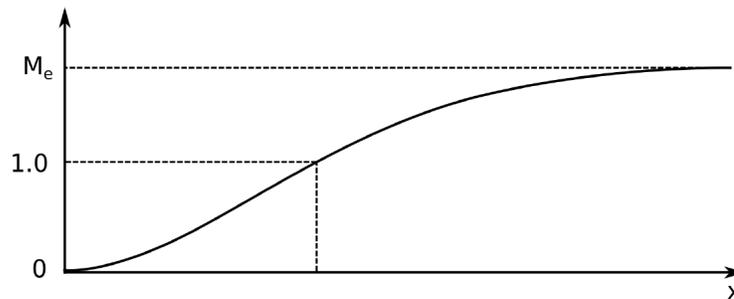


Figura 2.10: Perfil do número de Mach em um bocal de escoamento subsônico-supersônico. Adaptado de Anderson (1995).

A equação governante para um escoamento de bocal pode ser escrita como

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = S(Q), \quad (2.55)$$

ou

$$\begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{bmatrix}_t + \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(e + p) \end{bmatrix}_x = -\frac{A_x}{A} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ u(e + p) \end{bmatrix}, \quad (2.56)$$

O termo fonte $S(Q)$ considera a variação de área do bocal. A área transversal do bocal é representada por $A = A(x)$ and $A_x = \frac{dA}{dx}$.

A condição de contorno é de suma importância para definir o aspecto físico de qualquer problema de escoamento com o qual estamos lidando. A verdade é que, sem a implementação fisicamente adequada da condição de contorno, não há possibilidade de se obter uma solução correta. A condição de contorno na entrada de um bocal subsônico considera que duas variáveis dependentes do escoamento devem ser especificadas e uma outra variável deve ser calculada (eg. extrapolação dos dados do escoamento). Já em uma condição de contorno na saída de um bocal subsônico, duas variáveis do escoamento devem ser calculadas, enquanto uma deve ser especificada. As equações abaixo sintetizam a forma de determinar as condições de contorno de um escoamento subsônico na saída de um bocal:

$$p_N = \text{valor especificado} \quad (2.57)$$

$$T_N = 2T_{N-1} - T_{N-2} \quad (2.58)$$

$$V_N = 2V_{N-1} - V_{N-2}. \quad (2.59)$$

A massa específica adimensional, ρ_N , pode ser calculada usando a equação de estado dos gases ideais:

$$\rho_N = \frac{p_N}{T_N} = \frac{\text{valor especificado}}{T_N}. \quad (2.60)$$

No caso de um escoamento supersônico na saída de um bocal, todas as variáveis dependentes devem ser calculadas com base nas informações do escoamento.

Existem três soluções de problemas em bocais esboçadas na Figura 2.11 e na Figura 2.12. Para o primeiro caso, chamado de *caso a*, a pressão de saída é $(p_e)_a$, onde $(p_e)_a$ é apenas um pouco menor que a pressão do reservatório p_0 . Este pequeno gradiente de pressão presente entre os extremos do bocal faz com que o gás se desloque com um número de Mach local e acelere ao longo da seção convergente do bocal, atingindo um valor máximo na seção de área mínima (na garganta) e diminuindo progressivamente seu valor na seção divergente, resultando no valor do número Mach de saída do bocal $(M_e)_a$. No segundo caso, chamado de

caso b, se a pressão de saída do bocal for menor, ou seja $(p_e)_b < (p_e)_a$, o escoamento através do bocal será mais rápido e, portanto, o valor do número Mach na garganta do bocal torna-se maior no *caso b* do que no *caso a*, isto é, $(M_e)_b > (M_e)_a$. Caso tenham-se valores de pressão de saída pequenos o suficiente para obter uma pressão crítica, quer dizer $(p_e)_c < (p_e)_b < (p_e)_a$, haverá um número de Mach crítico na garganta do bocal mais próximo de uma unidade, e neste caso ainda tem-se um escoamento puramente subsônico.

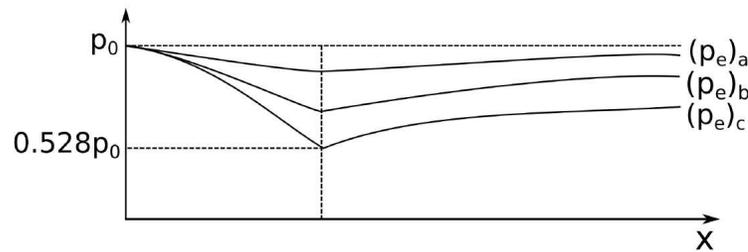


Figura 2.11: Perfil de pressão adimensional em um bocal convergente-divergente puramente subsônico em três diferentes condições de entrada e saída: $(p_e)_a/p_0$, $(p_e)_b/p_0$ and $(p_e)_c/p_0$. Adaptado de (Anderson, 1995).

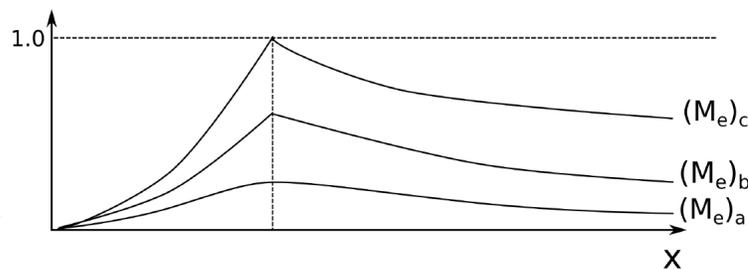


Figura 2.12: Perfil do número de Mach em um bocal convergente-divergente puramente subsônico em três diferentes condições de entrada e saída: $(p_e)_a/p_0$, $(p_e)_b/p_0$ and $(p_e)_c/p_0$. Adaptado de (Anderson, 1995).

Como $(p_e)_c$ tem um valor bem baixo, uma região de escoamento supersônico se forma logo após a garganta do bocal que pode ser desacelerada uma onda de choque normal. A onda de choque produz uma desaceleração instantânea do escoamento para a velocidade subsônica. Um valor de pressão de saída abaixo de $(p_e)_c$ cada vez menor, aumenta-se o comprimento do escoamento supersônico na seção divergente antes que a onda de choque normal apareça.

Seja qual for a o tipo de escoamento em um bocal, os valores das propriedades termodinâmicas são muito maiores na direção x do que na direção y e, portanto, a suposição

de que as propriedades do escoamento variam apenas com a direção x é válida. Tal escoamento é definido como *Quase-Unidimensional*, como já mostrada na equação 2.56. As equações de continuidade, de momento e de energia para um escoamento isotrópico, quase-unidimensional, podem ser resolvidas analiticamente. A variação do número Mach ao longo do bocal depende exclusivamente da razão de área, dada por

$$\frac{A}{A^*} = \frac{1}{M^2} \left[\frac{2}{\gamma + 1} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right) \right]^{\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}}, \quad (2.61)$$

onde $\gamma = c_p/c_v$ é a razão entre os calores específicos. O número de Mach pode ser implicitamente calculado como função da distância, x , usando a equação 2.61. Uma vez o perfil do número de Mach calculado, os perfis da temperatura, pressão e massa específica podem ser obtidos a partir das correlações abaixo.

$$\frac{p}{p_0} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right)^{\frac{-\gamma}{\gamma - 1}} \quad (2.62)$$

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right)^{\frac{-1}{\gamma - 1}} \quad (2.63)$$

$$\frac{T}{T_0} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right)^{-1} \quad (2.64)$$

2.4.3 Explosão física

Nesta seção, aborda-se o conceito de explosão física e sua classificação a partir das observações apontadas por Abbasi et al. (2010) em contraponto com as literaturas tradicionais (Lees, 1996; Mannan, 2005; CCPS, 1999).

As explosões físicas diferem das explosões químicas exclusivamente pelo fato de não haver uma reação química em andamento durante o fenômeno. O que há, na verdade, é uma rápida liberação de energia, mas não devido a uma reação química. O termo *física* em explosão física refere-se à forma como a energia é acumulada após uma explosão. Essa retenção de energia pode ser devido ao aquecimento de um líquido volátil ou de um gás em

um equipamento fechado (eg. vaso de pressão), causando aumento progressivo da pressão interna, ou simplesmente pela compressão de um gás causado por uma falha mecânica de uma válvula. Ou seja, uma explosão física ocorre quando a energia acumulada é subitamente liberada a partir de uma rápida mudança física, como a expansão de um gás comprimido ou a vaporização de um líquido superaquecido. As reações químicas, de alguma forma, podem ocorrer após a explosão física, mas se a causa da explosão for energia puramente mecânica, ela é definida como explosão física.

A explosão pode ser classificada seguindo a literatura de Lees (1996) ou o manual CCPS (Centro de Segurança de Processos Químicos) do AIChE (Instituto Americano de Engenheiros Químicos) (CCPS, 1999) ou a mais recente abordagem de Abbasi et al. (2010).

Segundo Lees (1996), a explosão é classificada em sete itens:

1. *Explosões físicas*
 - (a) Falha mecânica do sistema de pressão
 - (b) Sobrepressão do sistema de pressão
 - (c) Sob-pressão do sistema de pressão
 - (d) Excesso de temperatura do sistema de pressão
 - (e) Baixa temperatura do sistema de pressão
2. *Explosões de fase condensada*
 - (a) Altamente explosivos
 - (b) Nitrato de amônio
 - (c) Peróxidos orgânicos
 - (d) Clorato de sódio
3. *Explosões de nuvem de vapor*
4. *Explosões de vapor em expansão de líquido em ebulição (BLEVEs)*
5. *Explosões confinadas com reação*
 - (a) Explosão envolvendo combustão de vapor
 - (b) Explosões de reatores
 - (c) Outras explosões envolvendo reações em fase líquida

6. *O vapor escapa e explode em edifícios (VEEBs)*

7. *Explosões de pó.*

O manual do CCPS já classifica as explosões de acordo com o seguinte diagrama:

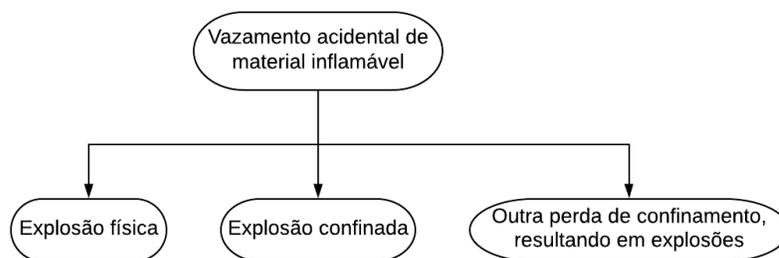


Figura 2.13: Diagrama para eventos de explosão fornecidos no CCPS (CCPS, 1999).

Sabe-se que situações de uma Explosão de Gás/Vapor Comprimido (do inglês, *Compressed gas/vapour explosion* - CG/VE), uma Explosão de Vapor em Expansão Líquida em Ebulição (do inglês, *Boiling liquid expanding* - BLEVE) e uma Explosão de Transição de Fase Rápida (do inglês, *Rapid phase transition explosion* - RPT) são resultados de uma liberação repentina de energia sem ocorrência de reação química. A CG/VE diz respeito à ruptura catastrófica de um tanque pressurizado cheio de gás. Para ocorrer uma explosão do tipo CG/VE, pode haver, em um recipiente completamente cheio com um gás ou contendo algum líquido a uma temperatura abaixo de seu ponto de ebulição, uma falha na válvula de regulação de pressão, ou uma redução na espessura da parede do vaso causada pela corrosão, ou uma diminuição na resistência da parede do vaso devido ao superaquecimento, ou a defeitos de material ou qualquer outro problema mecânico. Um acidente devido uma explosão do tipo CG/VE ocorreu em *Natchitoches*, Louisiana, em 1965; lá, um gasoduto de alta pressão explodiu, não havendo evidências de combustão na tubulação. A explosão produziu uma cratera de 3 m de profundidade. O gás inflamável liberado formou uma nuvem de vapor, ocasionando outra explosão que devastou uma área de 55,8 hectare, matando 17 pessoas (Lewis, 1980). Outro acidente devido a uma explosão do tipo CG/VE ocorreu em *Worms*, Alemanha, 1988; naquela ocasião, o dióxido de carbono, excessivamente pressurizado em um tanque de armazenamento, escapou através de válvula de alívio e atingiu

seu ponto crítico, formando gelo seco, travando a válvula e ocasionando uma explosão tão grave que os fragmentos do tanque (que pesava mais de 100 kg) foram encontrados a 500m do local do acidente (Khan, 1999).

Ao contrário da CG/VE, a explosão do tipo BLEVE ocorre quando um recipiente que contém uma quantidade significativa de um líquido superaquecido sob pressão é repentinamente despressurizado. Esse líquido é armazenado bem acima do seu ponto de ebulição, ocorrendo uma vaporização bem rápida, e pode forçar o vaso a explodir catastróficamente, causando um BLEVE. O principal fator contribuinte para a CG/VE é uma expansão adiabática de um gás, enquanto que para um BLEVE é uma vaporização adiabática de um líquido. Uma explosão do tipo BLEVE ocorreu na Cidade do México, em 1984; na ocasião, um incêndio instantâneo causado por um vazamento acidental de GLP na refinaria e no posto de abastecimento de *San Juan Ixhaautepec* fez com que um dos tanques sofresse um BLEVE. Os fragmentos resultantes, envoltos em propano em chamas, ocasionaram vários outros BLEVES. O incêndio espalhou-se para moradias próximas. Cerca de 500 pessoas morreram (Abbasi and Abbasi, 2007).

A explosão do tipo RPT ocorre quando uma substância em temperatura extramente baixa entra em contato com algo à temperatura elevada e, de uma maneira muito rápida, há uma transformação de uma fase líquida para uma fase de vapor. Na mudança de fase do líquido para vapor, se ocorrer vaporização significativa em um curto período de tempo, o processo pode, e normalmente se assemelha a, uma explosão. Se o líquido estiver em grandes quantidades, as ondas de choque concomitantes que emanam do local de formação de vapor podem resultar em ferimentos pessoais ou em danos ao equipamento. Um incidente de GLP, no qual este vaporiza-se violentamente ao entrar em contato com a água, é um exemplo comum de explosão do tipo RPT.

De acordo com o Abbasi et al. (2010), a classificação de explosão apresentada na literatura de Lees (1996) está em desacordo, uma vez que a explosão de vapor por expansão de líquido em ebulição (do inglês, *Boiling liquid expanding vapour explosions* - BLEVE), que é essencialmente uma explosão física, foi classificada como uma categoria separada de explosões físicas. Além disso, as categorias listadas nos sub-itens "c" e "e" do item explosões físicas têm seus mecanismos físicos caracterizados como implosões e não como explosões. Abbasi et al. (2010) também chama a atenção da classificação apresentada em CCPS, no

qual o diagrama lógico para eventos de explosão dá a impressão de que "explosões físicas" e "explosões confinadas" são duas categorias distintas, como mostrado na Figura 2.14.

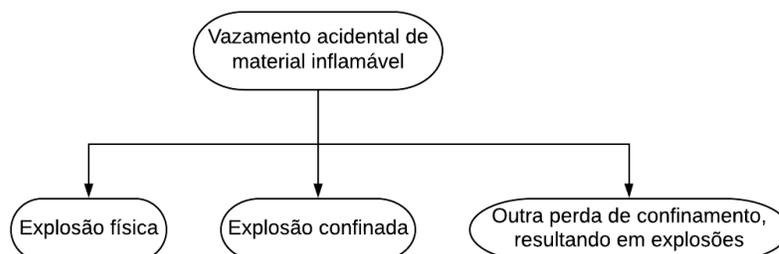


Figura 2.14: Diagrama para eventos de explosão fornecidos no CCPS (CCPS, 1999).

Nesse contexto, a compreensão das categorias de explosão na indústria de processos, proposta por Abbasi et al. (2010), pode ser dividida em explosão física e explosão química, conforme Figura 2.15.

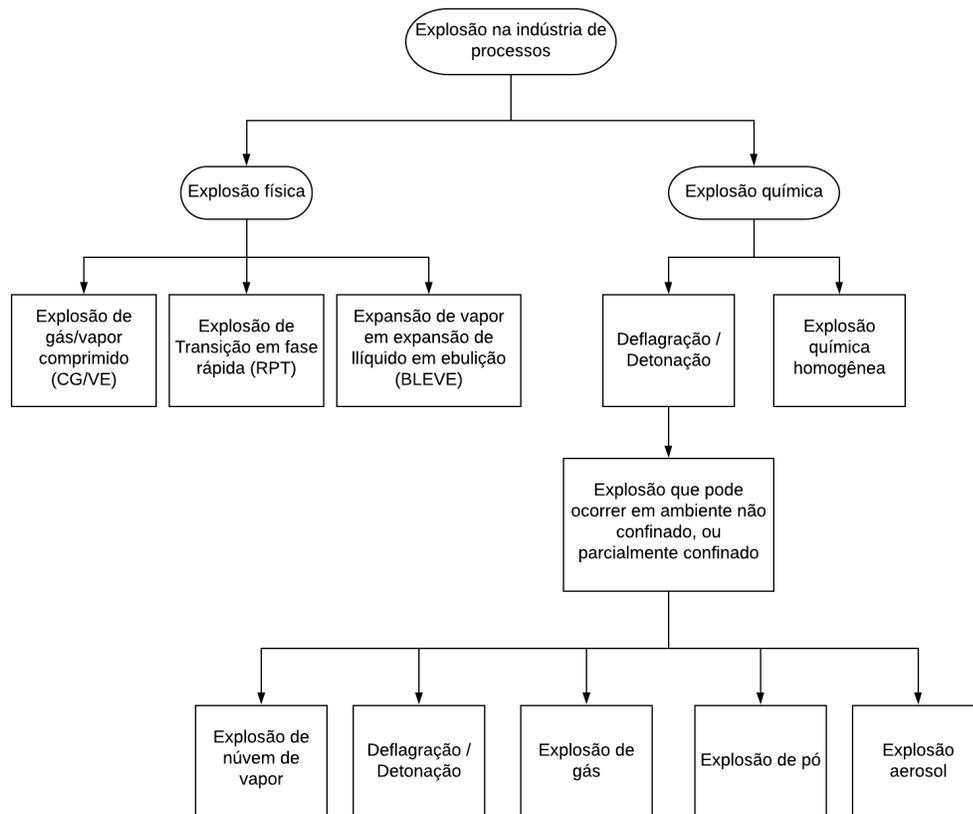


Figura 2.15: Diagrama proposto para a classificação de explosões na indústria de processos químicos. Adaptado de (Abbasi et al., 2010).

Uma explosão física de um vaso com um gás pressurizado pode ser modelada pela equação de Euler com um termo fonte

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = S(Q), \quad (2.65)$$

onde

$$Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{bmatrix}, F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \end{bmatrix}, S(Q) = -\frac{\theta}{r} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ u(E + p) \end{bmatrix} \quad (2.66)$$

O termo fonte $S(Q)$ diz respeito à forma geométrica do objeto explodido. Na equação

2.66, o valor $\theta = 1$ e $\theta = 2$ indica uma explosão simétrica de um cilindro e uma esfera, respectivamente.

Devido à singularidade presente na origem da explosão, ou seja, quando $r = 0$, usa-se a equação de Euler sem termo fonte, e velocidade igual a zero, como mostrada na equação abaixo

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F(Q)}{\partial r} = 0, \quad u = 0. \quad (2.67)$$

Quando uma contenção explode repentinamente, ondas de choque surgem, como pode ser visto na Figura 2.16, após o disparo das enormes armas em um campo aberto.



Figura 2.16: Explosão gerada pelo disparo de armas de guerra. Fotografia da Marinha dos EUA por *Phan J Alan Elliott*.

Onda de choque seguindo o comportamento mostrado na Figura 2.17 como observado por Friedman (1961). A região (0) refere-se ao ar que não é ultrapassado pelo choque principal e região (1) ar comprimido envolvido pelo choque principal; as duas regiões são separadas pela onda de choque principal. Existe uma interface denominada descontinuidade de contato, inicialmente movendo-se para trás do choque principal que separa o ar na região (1) do gás na região (2). A região (2) refere-se à região quase uniforme fora da expansão principal, enquanto a região (3) é a principal região de expansão ou rarefação, e (4) é o gás ainda não perturbado pela expansão centralizada. As regiões de separação de superfície (1) e (2) são uma descontinuidade de contato em que a pressão e a velocidade da partícula são contínuas, enquanto a temperatura sofre um salto de densidade.

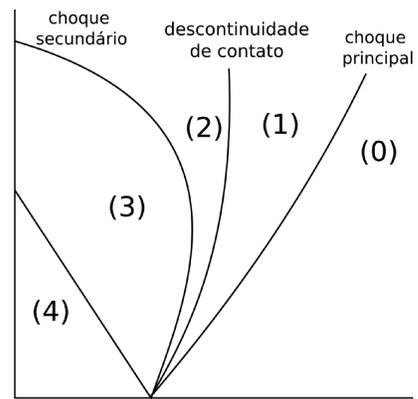


Figura 2.17: Diagrama de escoamento de ondas de explosão (Friedman, 1961)

Capítulo 3

Revisão da Literatura

Neste capítulo, apresenta-se uma revisão da literatura sobre esquemas Essencialmente Não-Oscilatório Ponderado (do inglês, *Weighted Essentially Non-Oscillatory* - WENO) de diferenças finitas mais relevantes e os que orientam o desenvolvimento desta tese.

As soluções analíticas de equações diferenciais parciais envolvem expressões que fornecem a variação das variáveis dependentes ao longo do domínio. Por outro lado, soluções numéricas podem dar respostas apenas em pontos discretos no domínio, chamados de pontos da malha (ou malha numérica, ou malha discreta, ou somente malha). Considere a Figura 3.1, que mostra uma seção de uma malha discreta no plano xy . Por conveniência, supõe-se que o espaçamento dos pontos da malha na direção x seja uniforme e dado por Δx e que o espaçamento dos pontos na direção y também seja uniforme e dado Δy . Poderia ser considerado um espaçamento totalmente desigual em ambas as direções, onde Δx teria um valor diferente entre cada ponto da malha e da mesma forma para Δy . No entanto, prefere-se uma malha que contém espaçamento uniforme em cada direção, porque isso simplifica muito a programação da solução, economiza espaço de armazenamento e geralmente resulta em maior precisão (Anderson, 1995).

Ainda na Figura 3.1, os pontos da malha são identificados por um índice i que varia na direção x e um índice j que varia na direção y . Portanto, se (i, j) são os índices do ponto P , então o ponto imediatamente à direita de P é identificado como $(i + 1, j)$, o ponto imediatamente à esquerda é $(i - 1, j)$, o ponto diretamente acima é $(i, j + 1)$ e o ponto

diretamente abaixo de P é $(i, j - 1)$.

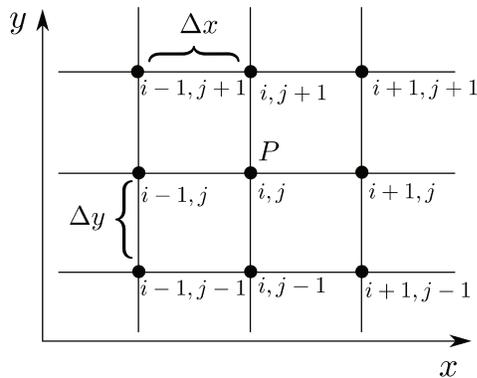


Figura 3.1: Representação de uma malha de pontos bidimensional para discretização espacial (próprio autor).

Os métodos tradicionais de Diferenças Finitas são baseados na aproximação por estêncil fixo (arranjo geométrico de um grupo nodal) (Anderson, 1995; Strikwerda, 2004). Isto é, para obter uma aproximação numérica no ponto i da malha, os arranjos entre os nós $i - 1$, i e $i + 1$ podem ser usados para construir uma formulação matemática de diferenças finitas. As fórmulas das diferenças progressivas, diferenças regressivas, diferenças centrais, *Leap-Frog* ou *Lax-Friedrichs*, são exemplos de aproximações numéricas. Vamos verificar a discretização desses esquemas a partir da equação de transporte da onda unidimensional, que além de ter propriedades que variam no espaço, também evoluem no tempo. Considere novamente a equação de transporte de uma onda, escrita como:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + c \frac{\partial Q}{\partial x} = 0, \quad (3.1)$$

utilizando o esquema de diferenças progressivas, a forma discretizada da equação 3.1 é:

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta x c}{\Delta t} (Q_{i+1}^n - Q_i^n) \quad (3.2)$$

A Figura 3.2 mostra o estêncil, destacado em vermelho, para o esquema de diferenças progressivas. O índice n varia no tempo t , sendo que $n + 1$ diz respeito ao tempo avançado, $t^{n+1} = t^n + \Delta t$.

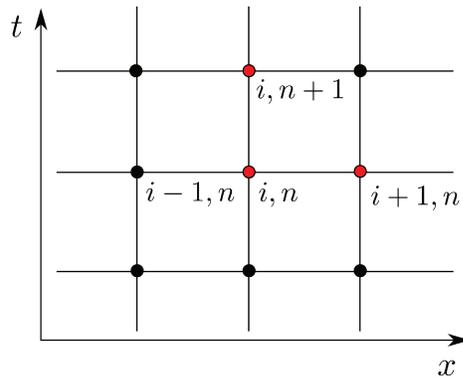


Figura 3.2: Estêncil para o esquema de diferenças progressivas (próprio autor).

Empregando o esquema de diferenças regressivas, a forma discretizada da equação 3.1 torna-se:

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta x c}{\Delta t} (Q_i^n - Q_{i-1}^n) \quad (3.3)$$

A Figura 3.3 mostra o estêncil, destacado em vermelho, para o esquema de diferenças regressivas.

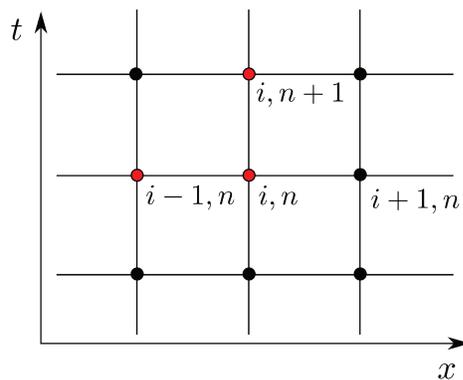


Figura 3.3: Estêncil para o esquema de diferenças regressivas (próprio autor).

Aplicando o esquema de diferenças centrais, a forma discretizada da equação 3.1 equivale a:

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta x c}{2\Delta t} (Q_{i+1}^n - Q_{i-1}^n) \quad (3.4)$$

A Figura 3.4 mostra o estêncil, destacado em vermelho, para o esquema de diferenças centrais.

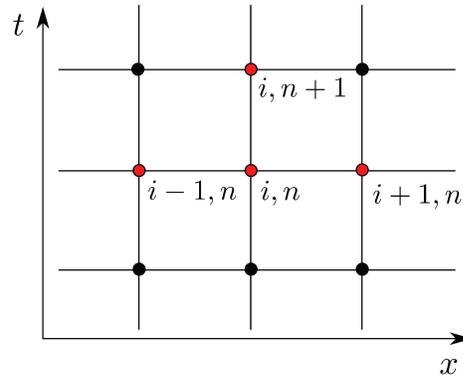


Figura 3.4: Estêncil para o esquema de *Leap-Frog* (próprio autor).

Utilizando o esquema de *Leap-Frog* a forma discretizada da equação 3.1 torna-se:

$$Q_i^{n+1} = Q_i^{n-1} - \frac{\Delta x c}{\Delta t} (Q_i^n - Q_{i-1}^n) \quad (3.5)$$

A Figura 3.5 mostra o estêncil, destacado em vermelho, para o esquema *Leap-Frog*.

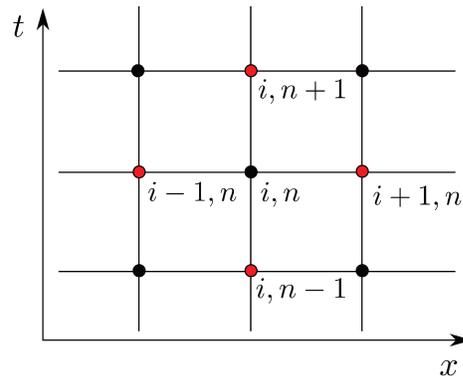


Figura 3.5: Estêncil para o esquema de *Leap-Frog* (próprio autor).

utilizando o esquema de *Lax-Friedrichs*, a forma discretizada da equação 3.1 torna-se:

$$Q_i^{n+1} = \frac{1}{2}(Q_{i+1}^n + Q_{i-1}^n) - \frac{\Delta x c}{2\Delta t} (Q_{i+1}^n - Q_{i-1}^n). \quad (3.6)$$

A Figura 3.6 mostra o estêncil, destacado em vermelho, para o esquema *Lax-Friedrichs*.

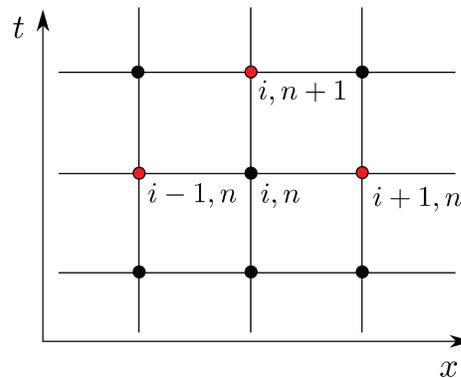


Figura 3.6: Estêncil para o esquema de *Lax-Friedrichs* (próprio autor).

As equações 3.2 e 3.3 são as fórmulas das diferenças progressivas e regressivas, respectivamente, ou apenas esquemas *upwind*. Da mesma forma, a equação 3.4 é conhecida como fórmula das diferenças centrais. O esquema 3.5 é chamado de esquema de *Leap-Frog*, enquanto 3.6 é dito esquema de *Lax-Friedrichs*. Sabe-se que a fórmula das diferenças centradas é um método instável na resolução de problemas convectivos. Alternativamente, os esquemas numéricos de *Lax-Friedrichs* e *Leap-Frog* podem lidar com problemas convectivos (Strikwerda, 2004). A Figura 3.7 mostra que o esquema de *Lax-Friedrichs* fornece, no geral, uma boa solução numérica ao problema convectivo; no entanto, os ângulos formados pela solução exata não são bem representados. O esquema de *Leap-Frog*, por sua vez, fornece resultados muito melhores para os ângulos da solução exata (regiões com máximos e mínimos), uma vez que tem características menos dissipativas que o esquema de *Lax-Friedrichs*; em contrapartida, há pequenas oscilações na região mais suave da solução, como pode ser visto na Figura 3.8. Os exemplos que constam nas Figuras 3.7 e 3.8 foram extraídos de Strikwerda (2004) e dizem respeito a um transporte de uma onda com a condição inicial $Q_0(x) = 1 - |x|$ se $|x| \leq 1$ caso contrário $Q_0(x) = 0$.

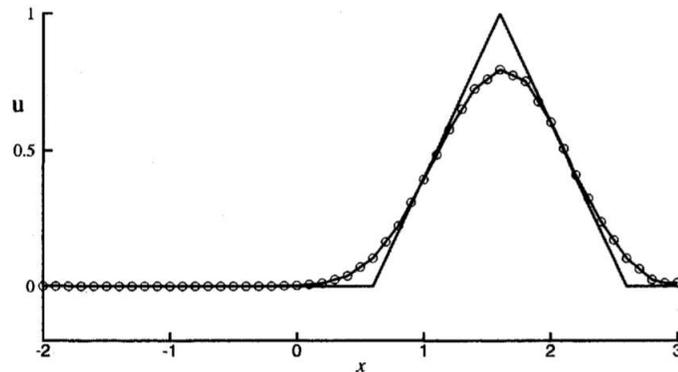


Figura 3.7: Solução numérica calculada com o esquema de *Lax-Friedrichs*.
Condição Inicial: $Q_0(x) = 1 - |x|$ se $|x| \leq 1$ caso contrário $Q_0(x) = 0$ (Strikwerda, 2004).

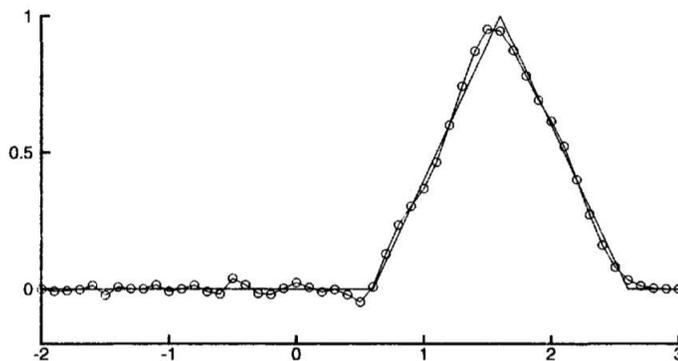


Figura 3.8: Solução numérica calculada com o esquema de *Leap-Frog*.
Condição Inicial: $Q_0(x) = 1 - |x|$ se $|x| \leq 1$ caso contrário $Q_0(x) = 0$ (Strikwerda, 2004).

É importante ressaltar que a interpolação de estêncil fixa de segunda ou de maior ordem de precisão é necessariamente oscilatória próxima de uma descontinuidade. O teorema de *Godunov* (Leveque, 1992; Wesseling, 2009) implica que esquemas lineares com ordem de precisão maior que 1 geram oscilações, em geral. Essas oscilações são qualitativamente erradas e aumentam de tamanho quando a malha é refinada; elas podem ser amplificadas com o passar do tempo (no caso de leis de conservação não lineares), e muitas vezes levam a instabilidades numéricas. Tais oscilações são chamadas de *fenômenos de Gibbs* (Shu, 1998).

Duas principais maneiras de reduzir ou eliminar o *fenômeno de Gibbs* em aproximações

por estêncil fixa são conhecidas como viscosidade artificial e limitadores de fluxo. Em 1987, Harten et al. (1987) trouxe a ideia de estêncil adaptativo, que será objeto de discussão mais adiante.

A viscosidade artificial representa uma adição explícita de difusão em uma solução numérica (Neumann and Richtmyer, 1950). A adição de mais viscosidade artificial implica uma solução mais dissipativa, ou seja, torna a solução mais imprecisa; por outro lado, ao adicioná-la, possibilita-se a obtenção de uma solução estável. Uma desvantagem dessa abordagem é que o ajuste do parâmetro que controla a quantidade da dissipação depende das características do escoamento. Isso significa que haveria a necessidade de ajustar um valor adequado para o parâmetro da viscosidade artificial, a depender do problema de escoamento em estudo; por sua vez, sem a utilização desse parâmetro, nenhuma solução viável seria possível para problemas de escoamento envolvendo ondas de choques e altos gradientes. A Figura 3.9 mostra o perfil do número de Mach de um escoamento sônico ao longo de um canal que contém uma variação em sua área transversal (estrangulamento na parte inferior) calculado pelo esquema *Lax-Wendroff* com viscosidade artificial. Devido à diminuição da área, a pressão diminui bruscamente, enquanto a velocidade aumenta. Imediatamente após a passagem do gás por essa região estrangulada, a pressão aumenta bruscamente, ocasionando um choque. Diferentes parâmetros da viscosidade artificial (C_x) foram utilizados para avaliar a presença do choque (destacado em vermelho na Figura 3.9) e, como consequência, observou-se que os perfis do número Mach comportaram-se diferentemente para todos os casos avaliados, ou seja, valores distintos de C_x resultaram em discordantes estruturas do escoamento.

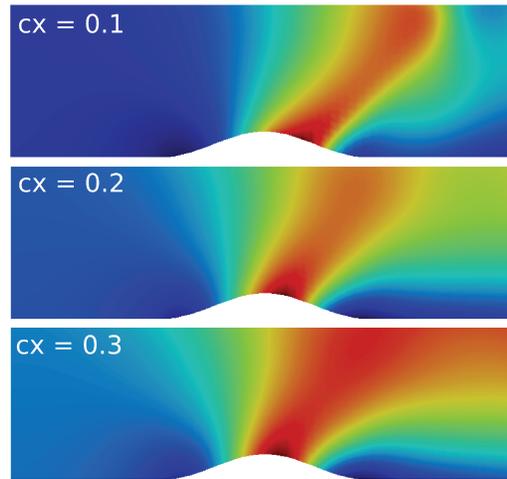


Figura 3.9: Impacto do ajuste nos parâmetros da viscosidade artificial C_x no perfil do número Mach de um escoamento sônico (próprio autor).

A abordagem do limitador de fluxo também evita oscilações espúrias tipicamente encontradas nas soluções numéricas fornecidas pelos esquemas clássicos. Basicamente, combina-se um esquema de baixa ordem com um esquema de alta ordem ponderado por um limitador de fluxo (Leveque, 1992; Toro, 1999). O esquema resultante fornece uma alta ordem de precisão na região mais suave do escoamento e baixa ordem de precisão perto de choque ou descontinuidades, conforme equação abaixo:

$$F = L + \phi(H - L)$$

em que L e H são fluxos numéricos de esquemas conservativos de baixa e alta ordem (ou maior ordem), respectivamente, enquanto o limitante de fluxo ϕ é definido de tal modo que ϕ seja aproximadamente 1 nas regiões mais suaves da solução ($F \approx H$) e aproximadamente 0 nas regiões que apresentam altos gradientes ou descontinuidades ($F \approx L$) (Toro, 1999). Como exemplo, pode-se dizer que o termo L é a função de fluxo numérico associada ao esquema de primeira ordem FTBS (do inglês, *Forward Time-Backward Space* - FTBS), e H é a função associada com o esquema de *Lax-Wendroff*. Uma vez que ϕ precisa mensurar o nível de suavidade da região do escoamento, dentre várias formas, escreve-se $\phi(\Theta)$, em que Θ_i é conhecido como um parâmetro de suavidade e pode ser definido como:

$$\Theta_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{u_{i+1} - u_i}$$

Se Θ_i estiver próximo de 1, então os dados provavelmente serão próximos de u_i (velocidade no ponto i da malha), caso contrário, se Θ_i estiver longe de 1, haverá algum tipo de perturbação nos dados em u_i . Na literatura, há diversos limitadores de fluxos; alguns dos principais estão destacados na Tabela 3.1 abaixo:

Tabela 3.1: Exemplo de alguns dos principais limitadores de fluxo.

Função $\phi(\Theta)$	Denominação
$\phi(\Theta) = \max\{0, \min(1, \Theta)\}$	MINMOD
$\phi(\Theta) = \max\{0, \min(1, 2\Theta), \min(\Theta, 2)\}$	Superbee
$\phi(\Theta) = \max\{0, \min(2, \Theta)\}$	Osher
$\phi(\Theta) = \max\{0, \min[2\Theta, (r + 1)/2, 2]\}$	MUSCL

Entretanto, assim como a viscosidade artificial, os limitadores de fluxo devem ser cuidadosamente testados antes de serem aplicados em alguma análise de escoamento, uma vez que cada limitador de fluxo pode fornecer um melhor ou pior resultado, dependendo do tipo de problema. A título de exemplo, Barbosa *et al.* (2012) analisam de forma comparativa os resultados de uma família de esquemas de diferenças finitas com limitadores de fluxo na simulação de um escoamento miscível em meios porosos. Para cada limitador de fluxo escolhido para a simulação, diferentes resultados são obtidos, como pode ser visto a partir da Figura 3.10, na qual os perfis de concentração de um solvente durante um escoamento de um fluido monofásico incompressível, em um reservatório de petróleo, são calculados com os limitadores de fluxo do tipo *MINMOD* e *Superbee*. Nota-se que o limitador *Superbee* apresentou a menor difusão numérica, gerando uma solução com perfil mais próximo da solução analítica.

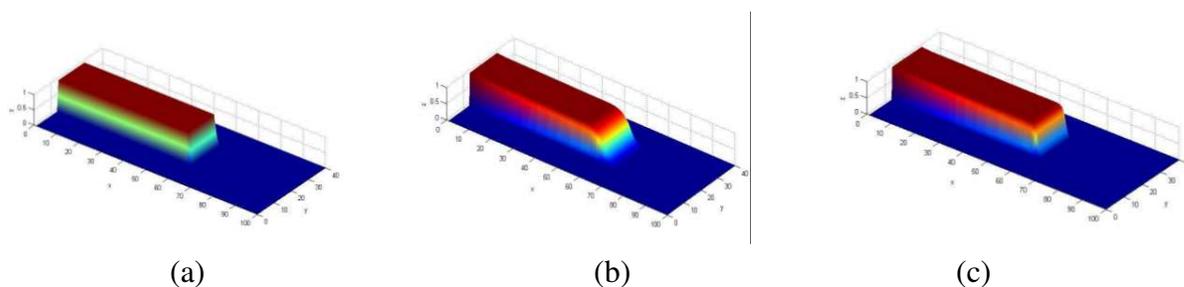


Figura 3.10: Perfis de concentração de um solvente durante um escoamento de um fluido monofásico incompressível, em um reservatório de petróleo. (a) Solução exata, (b) limitante de fluxo *MINMOD* e (c) limitante de fluxo *Superbee*. (Barbosa *et al.*, 2012).

A resolução de problemas de escoamento utilizando esquemas numéricos de alta ordem é um grande desafio. Alguns anos atrás, Ekaterinaris (2005) advertiu que poucas pesquisas sobre métodos numéricos de alta ordem utilizados em códigos de Dinâmica dos Fluidos Computacional (do inglês, *Computational Fluid Dynamics* - CFD) foram desenvolvidas. Anos depois, da mesma maneira, Wang et al. (2012) encorajou mais pesquisas com esquemas de alta ordem para aplicação nas áreas da engenharia e da ciência. Tanto Ekaterinaris (2005) quanto Wang et al. (2012) tentaram mitigar algumas impressões negativas em relação aos esquemas de alta ordem, discutindo um contraponto, no que tange a sua complexidade (muitas vezes o primeiro contato com a técnica não é amigável), seu custo computacional elevado e sua não necessidade para melhorar a acurácia de problemas de engenharia.

Motivados pela perspectiva do desenvolvimento de códigos CFD de alta ordem, membros do *Grupo de Discussão de Algoritmos CFD* e outros pesquisadores se reuniram no Comitê Técnico de Fluidodinâmica do Instituto Americano de Aeronáutica e Astronáutica (do inglês, *American Institute of Aeronautics and Astronautics* - AIAA) para definir o que pode ser considerado um esquema de alta ordem (Wang et al., 2012). Do ponto de vista de CFD, durante trinta anos, todas as investigações numéricas foram baseadas em esquemas de primeira e/ou segunda ordem de precisão, por isso, os códigos CFD de alta ordem passaram a ser definidos como sendo de terceira ordem de precisão ou superior. No contexto dos métodos numéricos de alta ordem de precisão, os esquemas Essencialmente Não-Oscilatório (do inglês, *Essentially Non-Oscillatory* - ENO) e Essencialmente Não-Oscilatório Ponderado (do inglês, *Weighted Essentially Non-Oscillatory* - WENO) destacam-se.

O método ENO surgiu a partir das notáveis propostas sugeridas por (Harten et al., 1987; Shu and Osher, 1988, 1989). O método ENO possibilita obter uma discretização das equações de conservação hiperbólicas (um exemplo são as equações de Euler que descrevem o movimento de um fluido compressível não viscoso) com alta ordem de precisão em todo o domínio computacional, incluindo descontinuidades, sendo que a principal característica do esquema ENO é escolher o sub-estêncil mais suave e, ao mesmo tempo, evitar oscilações espúrias; ou seja, para cada ponto i da malha de discretização, dentre todos os sub-estêncis disponíveis para a discretização, o mais suave é escolhido para aproximar o campo de escoamento. O método ENO foi a primeira tentativa bem sucedida na obtenção de um método numérico de alta ordem, essencialmente não-oscilatório próximo a descontinuidades e sem necessidade do uso de parâmetros ajustáveis (tais como viscosidade artificial ou limitador de fluxo) antes de serem aplicados efetivamente na resolução de um problema de escoamento.

Entretanto, o método WENO é a versão melhorada do método ENO e, ao longo dos anos, novas contribuições tornaram o método WENO muito mais robusto e eficiente. Novas propostas de modificações surgiram com o objetivo de alcançar resultados mais precisos e características numéricas menos dissipativas (Jiang and Shu, 1996; Shu, 1998; Borges et al., 2008; Acker et al., 2016; Board et al., 2016). Nesta tese, serão destacados apenas os esquemas WENO mais relevantes e contribuições que orientaram as discussões aqui presentes. O esquema WENO surgiu a partir do trabalho apresentado por Liu et al. (1994), que trouxe à tona a ideia de combinação convexa entre os sub-estêncis disponíveis para calcular a aproximação do fluxo numérico, diferentemente do ENO, que escolhe o sub-estêncil mais suave. A combinação convexa foi obtida pela atribuição de pesos a cada sub-estêncil, ou seja, de acordo com a suavidade do escoamento, um maior ou menor peso era atribuído aos sub-estêncis. Resumidamente, se um sub-estêncil cruzasse uma região do escoamento com descontinuidade, ele teria um peso zero, alcançando assim a propriedade não oscilatória. Anos depois, o denominado esquema WENO clássico (comumente escrito como WENO-JS), Jiang and Shu (1996) propôs uma nova maneira de medir a suavidade do escoamento, minimizando a variação total para a aproximação do fluxo numérico na forma semi-discreta das leis de conservação. Isso possibilitou generalizar a discretização do método WENO, de tal forma que se tornou mais simples sua implementação de quinta ordem e ordens superiores.

Acontece, no entanto, que o esquema WENO-JS demonstrou ter resultados muito

dissipativos e com baixa precisão em funções de alta frequência, próximo a pontos mínimos e máximos e perto de pontos críticos do escoamento (eg. descontinuidades). A fim de superar esse problema, Henrick et al. (2005) sugeriu o esquema WENO-M, que utiliza uma função mapeada aplicada aos pesos não normalizados do esquema WENO-JS (Henrick et al., 2005). O esquema WENO-M consegue recuperar a ordem ótima de convergência nos pontos críticos; no entanto, a função mapeada amplifica demais os valores dos pesos não normalizados dos sub-estênceis menos suaves e produz soluções instáveis perto de regiões de elevado gradiente. Por isso, Feng et al. (2012, 2014) sugeriram uma função mapeada aprimorada para superar esse defeito. Não obstante, o mapeamento proposto demonstrou ser computacionalmente mais custoso do que o esquema WENO-JS. O esquema WENO-M foi o primeiro a obter melhorias significativas em comparação ao esquema WENO-JS nas regiões de suavidade e descontinuidade e, por isso, inspirou o desenvolvimento de novos conjuntos de pesos não normalizados para melhorar o esquema WENO-JS clássico.

Mantendo o custo computacional original do WENO-JS e conservando a boa resolução do WENO-M, Borges et al. (2008) modificou o indicador de suavidade local do WENO-JS e introduziu uma nova ideia: o indicador de suavidade global, surgindo o esquema WENO-Z. O indicador de suavidade global foi definido como uma combinação linear do indicador de suavidade local, e foi incluído na formação dos pesos não normalizados do WENO-JS. A melhora relevante do WENO-Z sobre o WENO-JS foi pelo fato de que se impunha um peso maior nos sub-estênceis menos suaves da solução.

Recentemente, sabendo do motivo da melhora do WENO-Z em relação ao WENO-JS, Acker et al. (2016) propuseram aumentar ainda mais a importância dos sub-estênceis menos suaves, gerando resultados inéditos ainda mais acurados e menos dissipativos. Denominou-se o novo esquema de WENO-Z+. Este inclui um termo extra (ζ^{z+}) nos pesos não normalizados do esquema WENO-Z, que aumenta ainda mais a contribuição de sub-estênceis menos suaves. O novo termo, ζ^{z+} , é diretamente proporcional ao indicador local suave para melhorar a resolução em ondas suaves e diminui com o indicador de suavidade global perto da descontinuidade para evitar oscilações e instabilidade (matematicamente é uma razão entre os indicadores de suavidade local e global). O impacto do valor de ζ^{z+} nos estênceis menos suaves é regulado por um *parâmetro de ajuste*, denominado λ^{z+} . O esquema WENO-Z+ demonstrou ter alcançado resultados significativamente melhores e comportamento menos

dissipativo do que o WENO-Z. Pode-se considerar que esse esquema encontra-se no estado da arte sobre o desenvolvimento de esquemas WENO. Apesar disso, acredita-se que há espaço para melhorias. Como já dito, o novo parâmetro, ζ^{z+} , é ponderado por um parâmetro de ajuste (λ^{z+}), que por sua vez foi definido como o tamanho da malha. Essa definição pode ser um problema em manter a acurácia do esquema WENO-Z+, uma vez que o tamanho da malha é independente das características de tipo de escoamento; em outras palavras, a física do escoamento não tem impacto em λ^{z+} , como tem em ζ^{z+} . Da mesma forma, em uma malha computacional não regular ou em uma malha não-estruturada ou uma malha adaptativa, o valor de (λ^{z+}) parece não ter valor trivial. Um trabalho científico desenvolvido por Borges (2017) concluiu que o parâmetro λ^{z+} foi corroborado por testes empíricos, podendo estar longe de ser ideal e, portanto, sugere pesquisar uma nova maneira de definir o valor para (λ^{z+}).

A Figura 3.11 mostra um diagrama cronológico de contribuições sobre o esquema de alta ordem da família Essencialmente Não-Oscilatória, conforme descrito nesta tese.

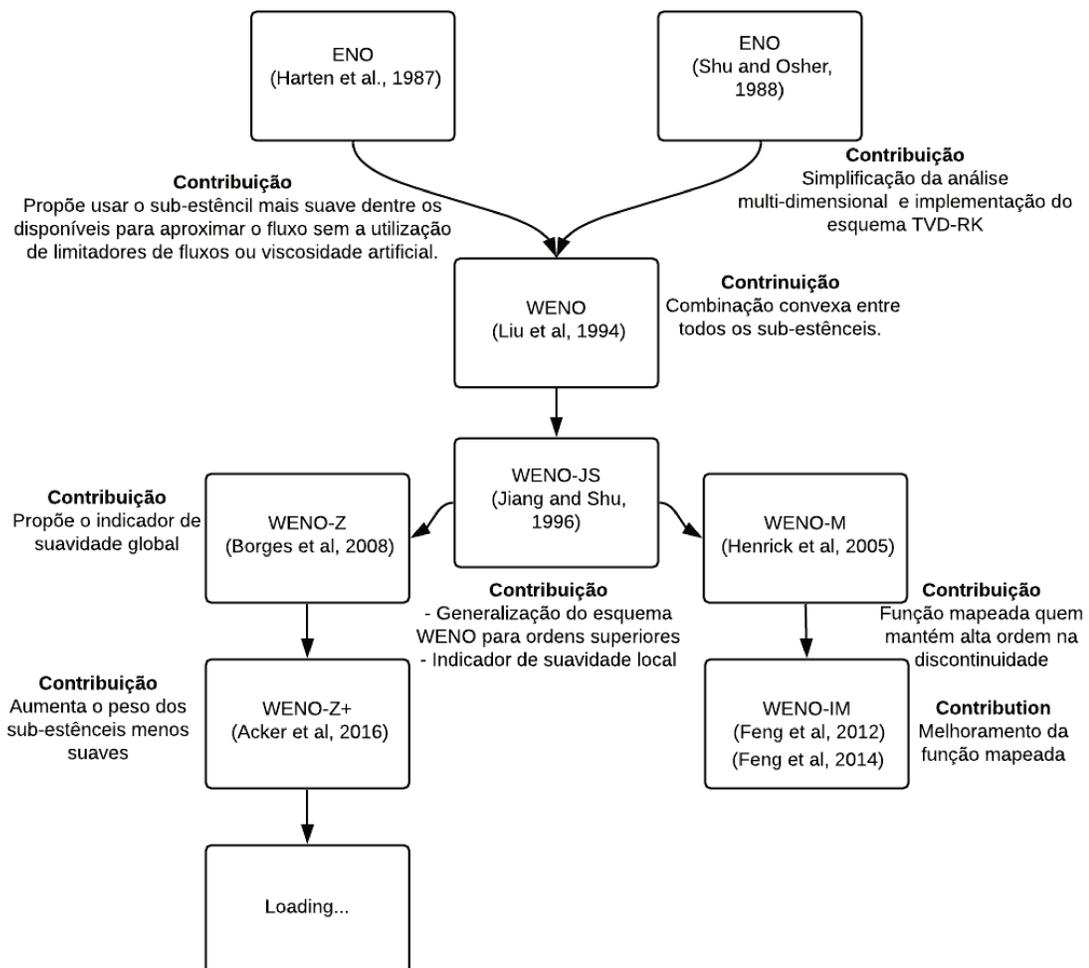


Figura 3.11: Diagrama cronológico das contribuições relativas ao esquema de alta ordem da família Essencialmente Não-Oscilatória (próprio autor).

Todas as questões colocadas até aqui trazem motivação para investigar esquemas de alta ordem, da família WENO, tomando como desafio aprimorá-lo em termos de acurácia na resolução de problemas complexos de escoamento e, ao mesmo tempo, obviamente, demonstrando uma forma alternativa e eficaz de resolver problemas de engenharia. Vale ressaltar que, em comparação às extensas pesquisas e aplicações em simulações realísticas, o uso dos esquemas WENO são menos estudados e ainda não dominaram a investigação numérica em uma aplicação de engenharia (Su et al., 2011). Como exemplo, tem-se as investigações de engenharia recentes sobre problemas de escoamento em bocais realizadas

por (Sun et al., 2016; Zhang et al., 2017; Raman and Kim, 2018; Sankesh et al., 2018; Li et al., 2017) usando *solvers* comerciais e/ou de código aberto dotados de esquemas numéricos tradicionais e de baixa ordem acoplados com viscosidade artificial ou conceitos de limitantes de fluxo. Li et al. (2017) reconstrói os valores de fluxo nas faces das células com o limitador MINMOD e usa o esquema *Crank-Nicholson* para obter uma precisão de segunda ordem no espaço e no tempo, a fim de resolver o fluxo característico de um jato sub-expandido em diferentes geometrias de bocais. Sun et al. (2016) avaliou o efeito da temperatura do gás no amortecimento do bocal em motores de foguete, usando uma discretização de segunda ordem no espaço e no tempo.

Por sua vez, a modelagem e a simulação de escoamentos em bocais usando o esquema WENO de alta ordem são escassas. Um desses pouquíssimos estudos é reportado por Xing and Shu (2006). Os autores usaram a equação de Euler do escoamento com o termo fonte para representar vários tipos de problemas como onda elástica, movimento quimiossensível e, finalmente, escoamento em bocal. O termo fonte é generalizado e decomposto em dois termos, que foram discretizados individualmente.

A revisão da literatura demonstra que o estudo sobre esquemas WENO ainda é muito ativo e que há espaço para mais melhorias. Identifica-se que o esquema WENO-Z+ tem um parâmetro de ajuste dependente de malha (λ^{z+}), que deve ser cuidadosamente reavaliado, como também salientado Borges (2017). Sendo assim, o termo λ^{z+} é o principal parâmetro de investigação nesta tese. Portanto, conjectura-se que um novo parâmetro de ajuste presente na física do escoamento, tanto em partes suaves como em regiões contendo choque/descontinuidade, deve ser o mais apropriado; isto é, o número Mach. Este pode ser capaz de aumentar o peso no sub-estêncil menos suave e torna o método WENO muito mais preciso e menos dissipativo, além de ser uma boa alternativa para aplicação de engenharia.

Capítulo 4

O esquema WENO-SV

O acoplamento de um parâmetro físico, pertencente ao campo de escoamento, para aumentar o peso dos sub-estênceis menos suaves, o torna ainda menos dissipativo. Esta hipótese será testada neste capítulo.

O número Mach local é o parâmetro físico do escoamento implícito na frase acima. É um novo parâmetro de ajuste para o método WENO, surgindo o novo esquema WENO-SV. Lembre-se que o esquema WENO-Z+ foi desenvolvido a partir da consideração de um parâmetro de ajuste dependente da malha, nos pesos não-normalizados, para aumentar a contribuição dos sub-estênceis menos suaves na aproximação do fluxo, isto é, $\lambda^{Z+} \sim \Delta x$. Apresenta-se, entretanto, um parâmetro de ajuste dependente do problema de escoamento, ou seja, $\lambda^{SV} \sim Mach\ number$.

Neste capítulo, o número Mach local é cuidadosamente analisado como parâmetro de ajuste do esquema WENO-SV. A contribuição imposta por ambos os parâmetros, λ^{Z+} e λ^{SV} , nos sub-estênceis menos suaves é comparada. Diversos experimentos numéricos são realizados a fim de investigar a estabilidade e acurácia do esquema WENO-SV. Tais experimentos numéricos foram calculados utilizando as equações de Euler na forma característica, o esquema SSP-RK(3,3) para a discretização de tempo com $CFL = 0.5$ e a partição dos fluxos via *Lax-Friedrichs*. A configuração e a descrição geral de cada problema numérico utilizado para estudo estão detalhadamente comentadas no **Apêndice A**.

O capítulo está organizado da seguinte forma: a seção 4.1 apresenta a ideia principal

do novo esquema WENO-SV; além disso, demonstra-se que o novo parâmetro de ajuste aumenta o peso do sub-estêncis menos suave significativamente, mantendo a estabilidade. Na seção 4.2, resultados para o esquema WENO-SV na resolução de experimentos numéricos desafiadores são realizados, sempre comparando com métodos WENO bem estabelecidos.

4.1 Introdução

O esquema WENO-SV proposto baseia-se na ideia de que o aumento da contribuição dos sub-estêncis menos suaves conduz à melhoria do método WENO. Lembre-se: o WENO-Z+ calcula os pesos não-lineares normalizados, diferentemente do WENO-Z. Aquele considera um termo extra para aumentar ainda mais a contribuição dos sub-estêncis menos suaves, isto é

$$\alpha_k^{Z+} = d_k \left[1 + \left(\frac{\tau}{\beta_k + \xi} \right)^p + \zeta^{Z+} \right], \quad \tau = |\beta_2 - \beta_0|, \quad (4.1)$$

onde

$$\zeta^{Z+} = \lambda^{Z+} \left(\frac{\beta_k + \epsilon}{\tau + \epsilon} \right). \quad (4.2)$$

A ideia de acrescentar o termo ζ^{Z+} nos pesos não-lineares normalizados para melhorar a resolução do esquema WENO-Z foi sugerida e demonstrada por Acker et al. (2016). Por meio da equação 4.2, verifica-se que o termo ζ^{Z+} é diretamente proporcional ao indicador de suavidade local, β_k ; isso significa que o comportamento menos suave em um sub-estêncil (maior o valor de β_k) levaria a uma maior contribuição para ζ^{Z+} . O termo indicador de suavidade global, τ , diminui perto de descontinuidade, aumentando a contribuição para ζ^{Z+} . Verifica-se também, a partir da equação 4.2, que o termo ζ^{Z+} tem um parâmetro de ajuste, λ^{Z+} , cujo objetivo é controlar o incremento da contribuição do sub-estêncil menos suave. O valor de λ^{Z+} considera o tamanho da malha computacional, baseando-se no fato de que $\lambda^{Z+} = \Delta x^{2/3}$, já que o valor $\lambda^{Z+} = \Delta x^{1/2}$ faz com que a solução ultrapasse a solução exata, exageradamente, indicando ocorrência de amplificação, enquanto que o valor $\lambda^{Z+} = \Delta x$ torna o esquema WENO-Z+ demasiadamente dissipativo, de acordo com as observações de Acker et al. (2016).

A fim de contribuir ainda mais com o desenvolvimento do método WENO, investigou-se o número de Mach local como o novo parâmetro λ , denominado, portanto, de λ^{SV} . Acredita-se que um parâmetro físico para controlar o tamanho da contribuição do sub-estêncil menos suave seja o mais apropriado, ou seja, faz-se λ^{SV} ser proporcional ao número Mach local, $\lambda^{SV} \sim M$.

O esquema WENO-SV utiliza o seguinte peso não-normalizado,

$$\alpha_k = d_k \left[1 + \left(\frac{\tau}{\beta_j + \epsilon} \right)^p + \sqrt{M} \left(\frac{\beta_k + \epsilon}{\tau + \epsilon} \right) \right]. \quad (4.3)$$

O peso não-normalizado do esquema WENO-SV baseia-se na estrutura do esquema WENO-Z+. Mesmo com essa nova formulação, são garantidas as três condições fundamentais:

- Convexidade
- Ordem ideal
- Propriedade ENO

A condição de convexidade garante consistência e estabilidade. A condição de ordem ideal garante que a aproximação dos fluxos seja de ordem máxima em regiões suaves. E a condição propriedade ENO permite que a natureza não-oscilatória do esquema proposto seja mantida.

4.1.1 O novo parâmetro de ajuste λ^{SV}

O comportamento do esquema WENO-SV foi investigado considerando três diferentes valores do parâmetro de ajuste, isto é, $\lambda^{SV} = [M, M^{0.5}, M^{0.25}]$. Para tanto, considerou-se uma onda severamente oscilatória interagindo com o choque a partir de dois problemas da onda de choque de entropia, sendo o primeiro denominado de *Shu-Osher* e o segundo de *Titarev-Toro*. Recordar-se que a equação 4.1 indica que quanto maior o valor de λ^{SV} , maior a contribuição de ζ^{SV} para o sub-estêncil menos suave. Portanto, espera-se que λ^{SV} tenha um maior peso nas regiões com números de Mach mais elevados.

A Figura 4.1 (a) compara os resultados para o problema de ondas de choque de entropia de *Shu-Osher*, considerando os três valores do parâmetro de ajuste, λ^{SV} , no esquema WENO-SV. Observa-se uma pequena diferença entre os valores de λ^{SV} a partir da ampliação dos dados mostrados na Figura 4.1 (b).

A Figura 4.1 (c) mostra a comparação entre os esquemas WENO-SV, WENO-JS e a solução de referência. A Figura 4.1 (d) é uma ampliação da Figura 4.1 (c). Já a Figura 4.1 (e) compara o esquema WENO-SV, o esquema WENO-Z+ e a solução de referência. A análise das Figuras 4.1 (c) (d) (e) mostram que o esquema WENO-SV é menos dissipativo e mais acurado do que o esquema WENO-JS e o esquema WENO-Z+.

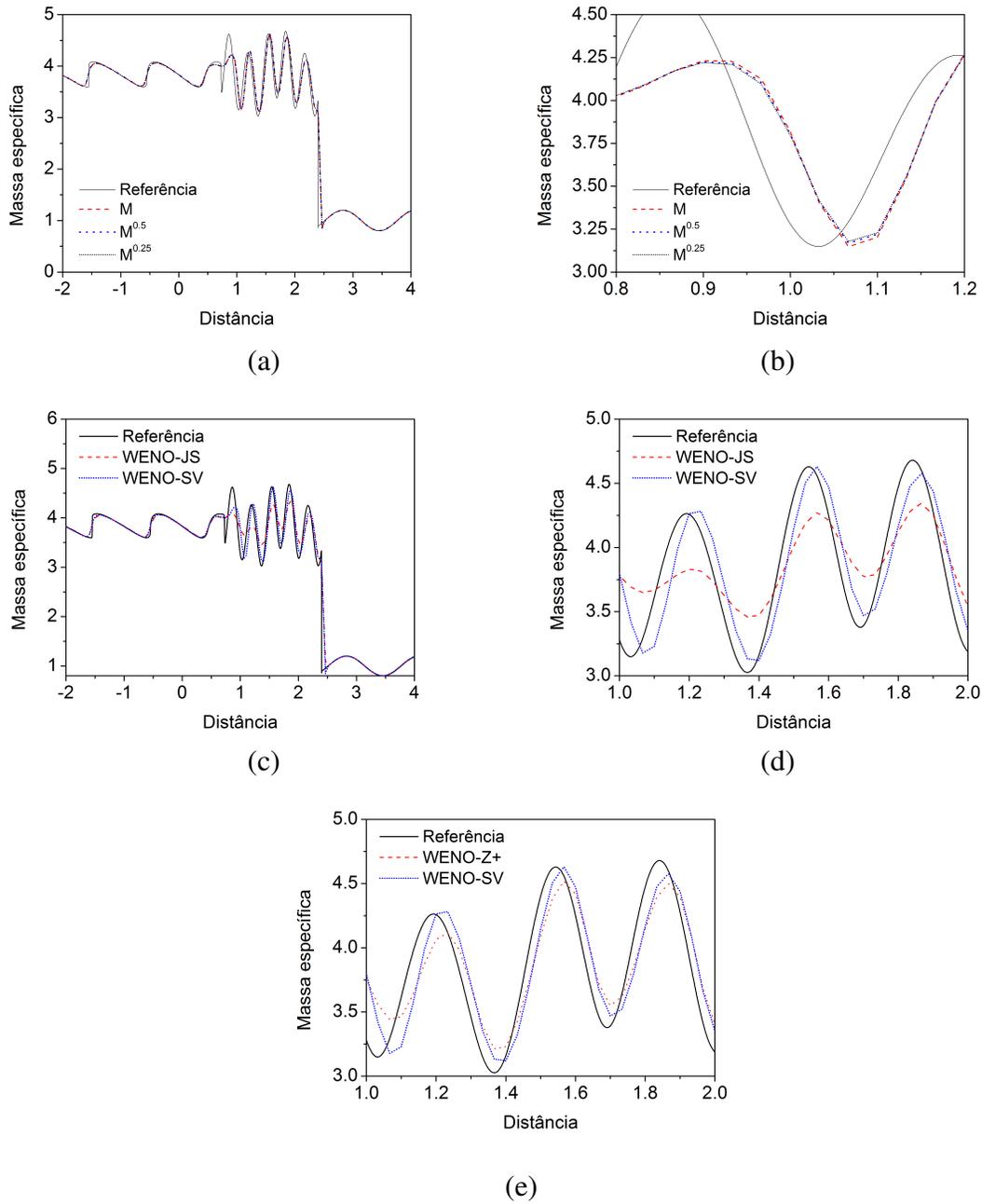


Figura 4.1: Solução numérica do perfil da massa específica, no tempo $t = 1,8s$, do problema de ondas de choque de entropia de *Shu-Osher* computada pelo esquema WENO-SV com diferentes parâmetros de ajuste, λ^{SV} (a). Ampliação de escala da solução numérica (b). Comparação entre os esquemas WENO-JS e WENO-SV (c) e o aumento em escala da solução numérica (d). Comparação entre os esquemas WENO-Z+ e WENO-SV (e). Malha computacional com $N = 300$ pontos e $CFL = 0.5$ (próprio autor).

As Figuras 4.2 (a) e (b) apresentam a comparação dos resultados do problema de onda de choque de entropia de *Titarev-Toro* para o esquema WENO-SV, considerando os três valores o parâmetro λ^{SV} . Novamente, verifica-se que não há diferença significativa entre os valores de λ^{SV} investigados. Além disso, os resultados da Figura 4.2 (c) e (d) mostram uma característica menos dissipativa e uma melhor resolução do esquema WENO-SV do que os esquemas WENO-JS e WENO-Z+, respectivamente.

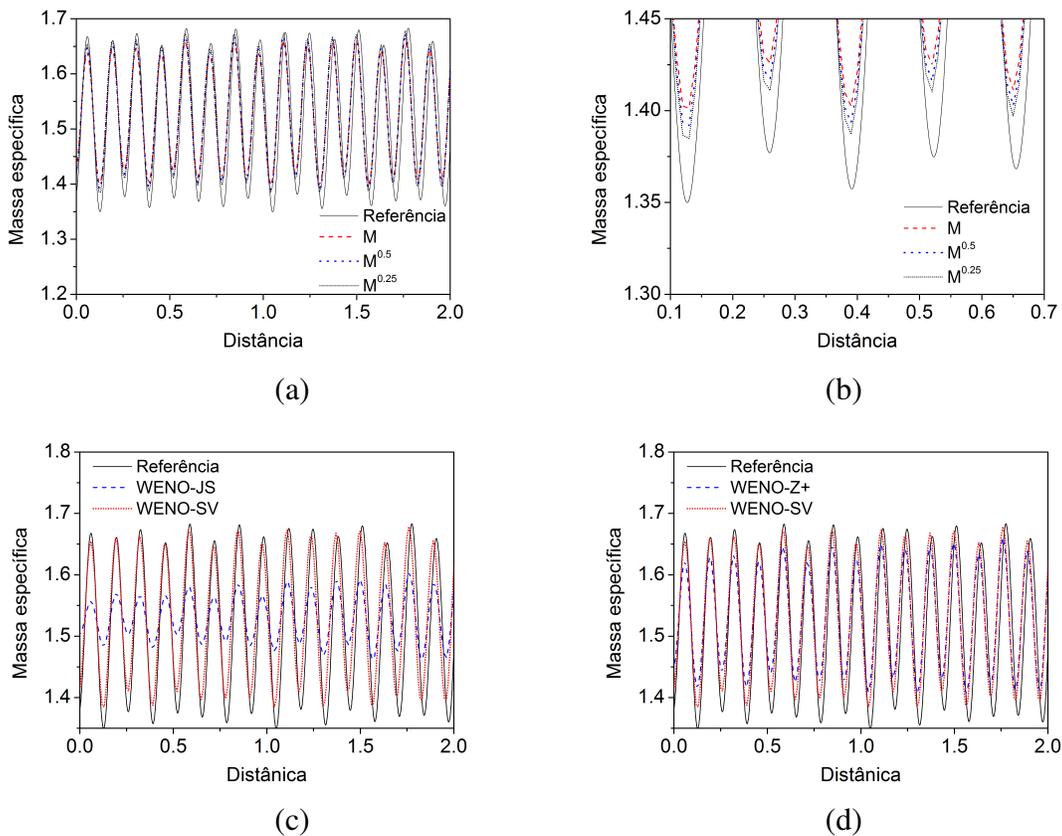


Figura 4.2: Solução numérica do perfil da massa específica, no tempo $t = 5s$, do problema de ondas de choque de entropia de *Titarev-Toro* computada pelo esquema WENO-SV com diferentes parâmetros de ajuste, λ^{SV} (a). Ampliação de escala da solução numérica (b). Comparação entre os esquemas WENO-JS e WENO-SV (c) e entre os esquemas WENO-Z+ e WENO-SV (d). Malha computacional com $N = 1000$ pontos e $CFL = 0.5$ (próprio autor).

Os resultados mostram que todos os parâmetros avaliados, $\lambda^{SV} = [M, M^{0.5}, M^{0.25}]$, mantiveram a estabilidade e a acurácia das soluções numéricas dos problemas durante as investigações. No entanto, o parâmetro intermediário, $M^{0.5}$, foi o escolhido para tornar-se o

parâmetro de ajuste do esquema WENO-SV.

4.1.2 Parâmetro de ajuste WENO-Z+ e WENO-SV

As Figuras 4.3 (a) e (b) mostram os valores do parâmetro de ajuste do esquema WENO-Z+ ($\lambda^{Z+} = \Delta x^{2/3}$) e do esquema WENO-SV ($\lambda^{SV} = M^{0.5}$) em diferentes tamanhos de malha, tanto para o problema de *Riemman* de *Lax* quanto para o problema de onda de choque de entropia de *Shu-Osher*, respectivamente. Observa-se que o parâmetro de ajuste λ^{Z+} é completamente dependente da malha, enquanto λ^{SV} é dependente do problema de escoamento em análise. A maior parte dos resultados mostra que λ^{SV} tem maior valor que λ^{Z+} , isto é, λ^{SV} impõe maior peso ao sub-estêncil menos suave. Além disso, as Figuras 4.3 (a) e (b) também mostram que a resolução do problema *Riemman* de *Lax* e da onda de choque de entropia de *Shu-Osher* utilizando o esquema WENO-Z+ (ou seja, o parâmetro de ajuste λ^{Z+}) em malhas cada vez mais refinadas diminui o peso ao sub-estêncil menos suave. No problema *Riemman* de *Lax*, verifica-se que $\lambda^{SV} > \lambda^{Z+}$ (Figura 4.3 (a)). No problema onda de choque de entropia de *Shu-Osher*, também tem-se, em grande parte do escoamento, $\lambda^{SV} > \lambda^{Z+}$ (Figura 4.3 (b)); no entanto, devido às altas frequências de velocidade ao longo do escoamento, $\lambda^{Z+} > \lambda^{SV}$, é encontrado em algumas regiões do escoamento.

Observações adicionais são dadas ao comparar os termos ζ^{Z+} e ζ^{SV} , como pode ser visto na Figura 4.4. No problema de *Lax*, o termo ζ^{SV} é muito maior que ζ^{Z+} (Figura 4.4 (a)) e torna-se ainda maior para malhas menores, como pode ser visto na Figura 4.5 (a). No problema da onda de choque de entropia de *Shu-Osher*, o termo ζ^{SV} é maior que ζ^{Z+} em algumas regiões e um pouco menor em outras, como pode ser visto na Figura ref param2 (b). Novamente, o refinamento das malhas torna ζ^{SV} cada vez maior do que ζ^{Z+} (Figura ref param3 (b)).

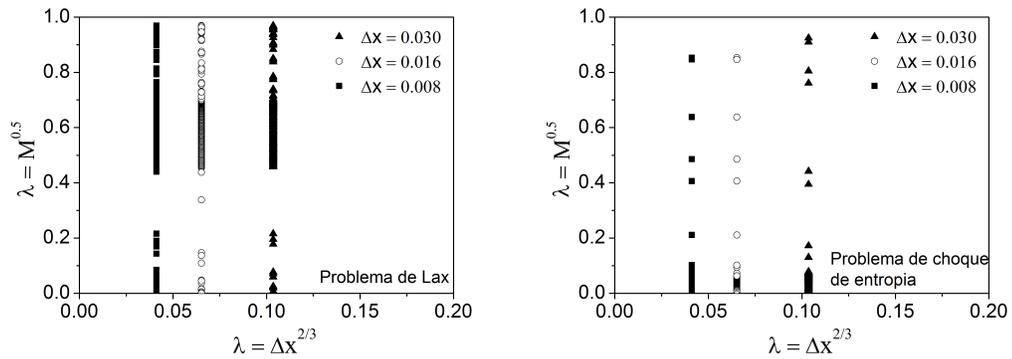


Figura 4.3: Avaliação do parâmetro do esquema WENO-Z+ ($\lambda^{z+} = \Delta x^{2/3}$) e do parâmetro do esquema WENO-SV ($\lambda^{SV} = M^{0.5}$) para diferentes tamanhos de malhas. (a) Problema de *Lax* avaliado no tempo $t = 1.3s$. (b) Problema da onda de choque de entropia de *Shu-Osher* avaliado no tempo $t = 1.8s$ (próprio autor).

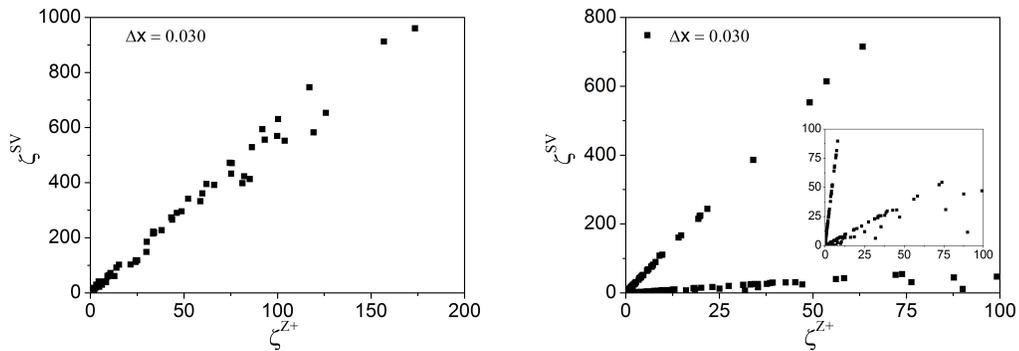


Figura 4.4: Comparação entre os pesos ζ^{z+} e ζ^{SV} em uma malha de tamanho $\Delta x = 0.03$. (a) Problema de *Lax* and (b) Problema da onda de choque de entropia de *Shu-Osher* (próprio autor).

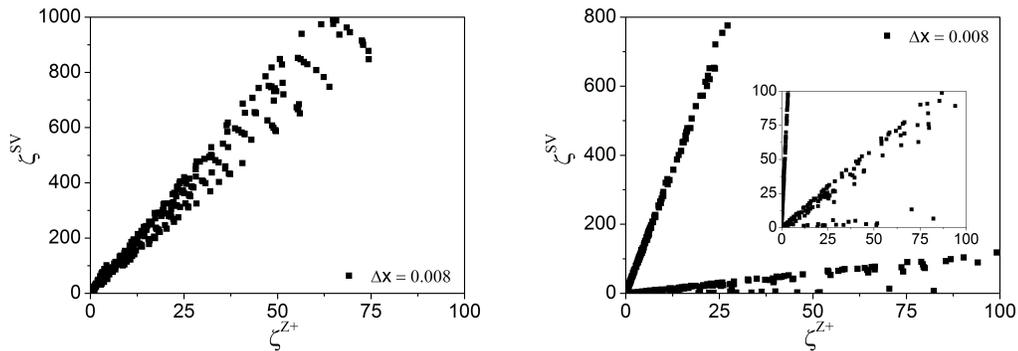


Figura 4.5: Comparação entre os pesos ζ^{z+} e ζ^{SV} em uma malha de tamanho $\Delta x = 0.008$. (a) Problema de *Lax* and (b) Problema da onda de choque de entropia de *Shu-Osher* (próprio autor).

4.1.3 Refinamento da malha

Soluciona-se, novamente, o problema da onda de choque de entropia de *Shu-Osher* no tempo de $t = 1.8s$ para uma análise de refinamento de malha. Verifica-se que ao refinar a malha de uma quantidade de nós $N = 100$ para $N = 200$, o esquema WENO-SV captura detalhes do escoamento com melhor resolução quando se compara com os resultados obtidos pelos esquemas WENO-JS e WENO-Z+.

A Figura 4.6 (a) (b) compara os resultados do perfil da massa específica calculada pelo esquema WENO-JS e WENO-SV com o número de nós $N = 100$ e $N = 200$, respectivamente. Há uma aproximação significativa obtida pelo esquema WENO-SV do resultado de referência após o refinamento da malha. Observa-se, entretanto, que o melhoramento da solução obtida pelo esquema WENO-JS, após o refinamento da malha, é sutil. De modo similar, a Figura 4.7 (a) (b) compara a solução do perfil da massa específica computada agora pelos esquemas WENO-Z+ e WENO-SV com o número de nós $N = 100$ e $N = 200$. Diferentemente do esquema WENO-SV, há pouca melhora na solução obtida pelo esquema WENO-Z+ após o refinamento da malha.

Resultados utilizando o número de nós de $N = 300$, comumente utilizado para estudo do problema da onda de choque de entropia de *Shu-Osher* com esquemas WENO, podem ser verificados na Figura 4.1.

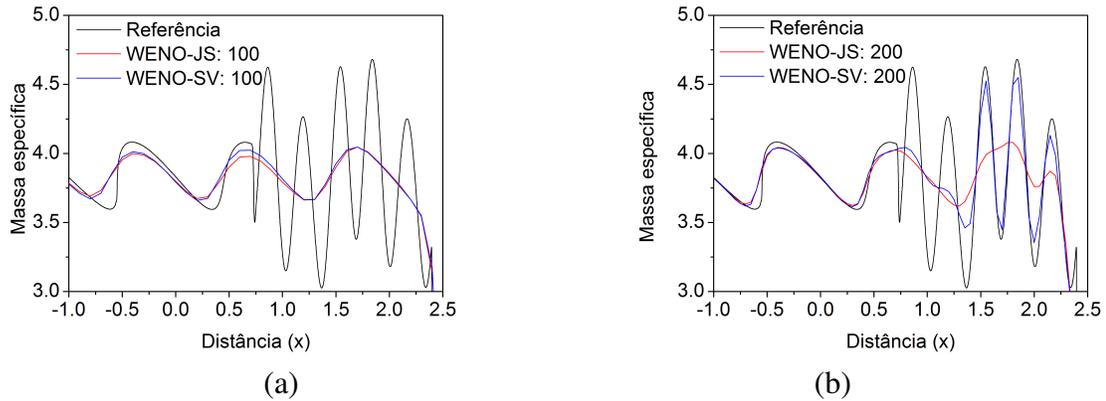


Figura 4.6: Perfil da massa específica calculado pelos esquemas WENO-JS e WENO-SV com número de nós na malha $N = 100$ (a) and $N = 200$ (b). Problema da onda de choque de entropia de *Shu-Osher* no tempo $t = 1.8s$.

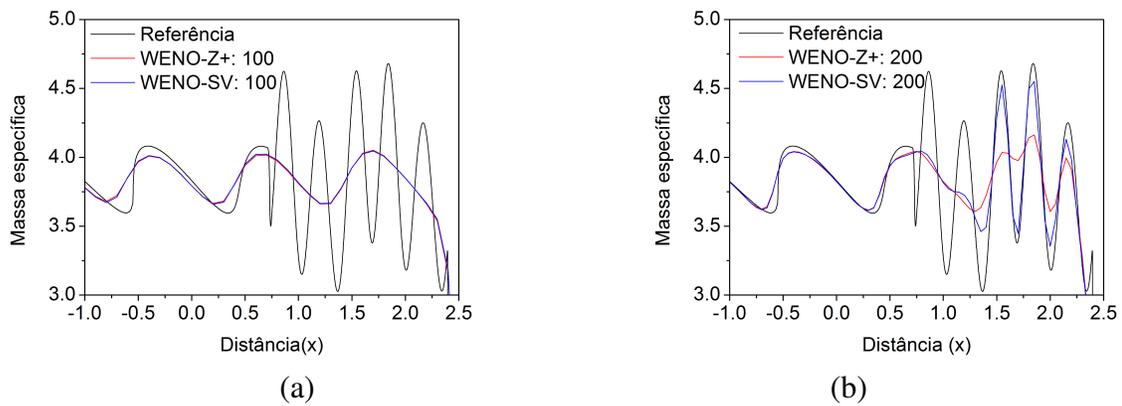


Figura 4.7: Perfil da massa específica calculado pelos esquemas WENO-Z+ e WENO-SV com número de nós na malha $N = 100$ (a) and $N = 200$ (b). Problema da onda de choque de entropia de *Shu-Osher* no tempo $t = 1.8s$.

4.2 Experimentos numéricos

Os resultados dos testes numéricos padrões são apresentados nesta seção. A comparação entre os esquemas WENO-JS, WENO-Z+ e WENO-SV é discutida. Detalhes dos problemas numéricos estão descritos no **Apêndice A**.

4.2.1 Problema de *Riemman de Lax*

A Figura 4.8 mostra o perfil de massa específica para o problema de Riemman de *Lax* no tempo $t = 1.3s$. Este experimento numérico foi realizado utilizando-se 200 pontos da malha ($N = 200$) com a condição de contorno fixa e $CFL = 0.5$. Os resultados dos esquemas WENO-JS e WENO-SV são mostrados no mesmo gráfico da solução de referência para o perfil da massa específica.

A análise da Figura 4.8 mostra que o esquema WENO-SV apresentou um comportamento menos dissipativo que o WENO-JS quando comparado com a solução de referência.

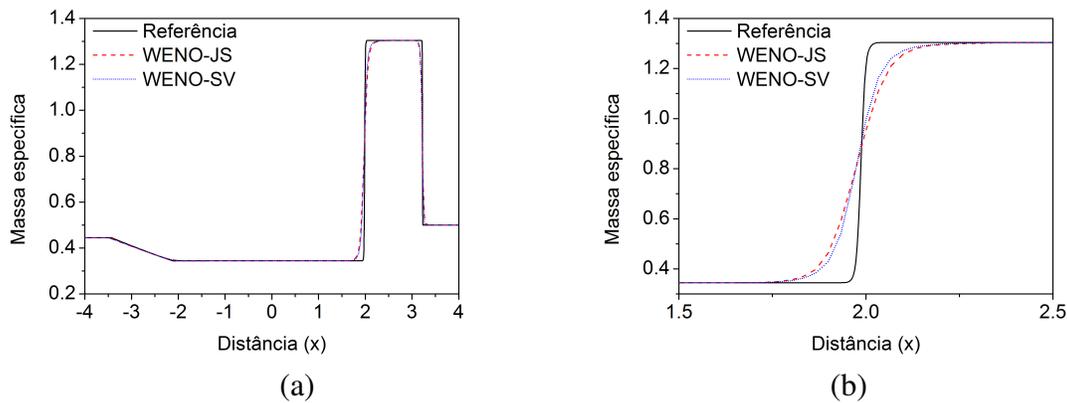


Figura 4.8: Perfil da massa específica para o problema de *Riemman de Lax*. Malha computacional de $N = 200$ e tempo de simulação de $t = 1.3s$ (próprio autor).

4.2.2 Problema do choque de entropia

Consideram-se problemas típicos nos quais os esquemas WENO foram utilizados para verificar o desempenho da abordagem proposta em problemas dominantes por choque.

A Figura 4.9 compara o comportamento da massa específica para o problema da onda de choque. As experiências numéricas consideraram 250×50 pontos da malha. A análise da Figura 4.9 mostra que os choques e estruturas de escalas finas, logo atrás do choque principal, são melhor capturadas por esse esquema WENO-SV.

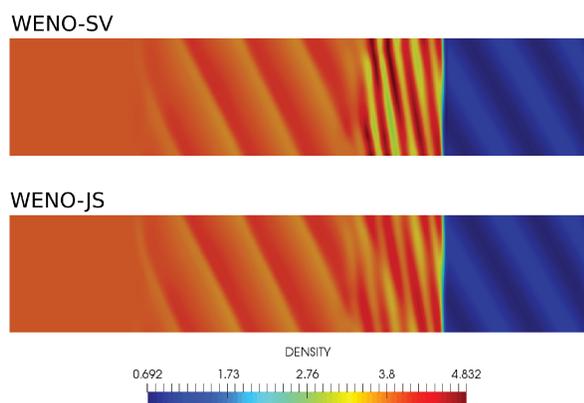


Figura 4.9: Solução numérica do problema de choque de entropia bidimensional no tempo $t = 1.8s$; perfil da densidade computada pelos esquemas WENO-SV e WENO-JS. $CFL = 0.4$ (próprio autor).

4.2.3 Problema de *Riemman* bidimensional

Dois problemas de *Riemman* bidimensionais são utilizados para comparar os resultados entre os esquemas WENO-SV e WENO-Z+. O primeiro deles está apresentado na Figura 4.10 (a) e na Figura 4.10 (b), cujos perfis da massa específica foram obtidos utilizando-se os esquemas WENO-Z+ e WENO-SV, respectivamente. O tempo da simulação foi de $t = 0.35s$ com malha computacional de 1500×1500 . Observa-se que um vórtice é capturado por ambos os esquemas. Entretanto, visualiza-se mais detalhadamente, a partir da Figura 4.11, que o vórtice capturado pelo esquema WENO-SV (Figura 4.11 (d)) apresenta menos efeito numérico dissipativo do que aquele resultante do esquema WENO-Z+ (Figura 4.11 (c)). O segundo problema de *Riemman* é apresentado na Figura 4.11 (a) e na Figura 4.11 (b), cujos resultados dos perfis da massa específica foram obtidos utilizando-se os esquemas WENO-Z+ e WENO-SV, respectivamente. Nesse problema, também é possível verificar que o esquema WENO-SV apresentou um comportamento numérico menos dissipativo do que o esquema WENO-Z+.

Entretanto, também observa-se que o esquema WENO-SV obteve resultados com padrões de escoamento sutilmente assimétrico – vide Figura 4.11 (b). Este pode ser um indicativo da pouca dissipação numérica presente no esquema WENO-SV.

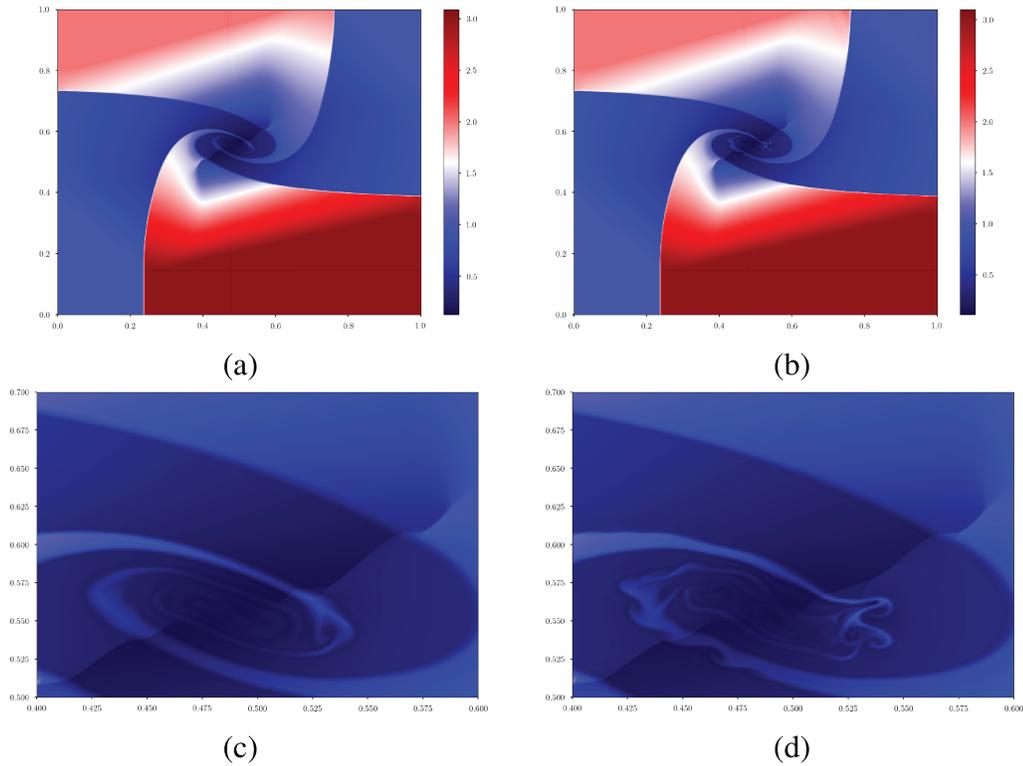


Figura 4.10: Solução numérica para um problema de *Riemman* bidimensional. Perfil da massa específica calculada no tempo $t = 0.35s$. CFL=0.3. Malha computacional de 1500×1500 . (a) WENO-Z+ e (b) WENO-SV. (c) Zoom em $[0.4, 0.5] \times [0.6, 0.7]$ para os resultados do esquema WENO-Z+. (d) Zoom em $[0.4, 0.5] \times [0.6, 0.7]$ para os resultados do esquema WENO-SV (próprio autor).

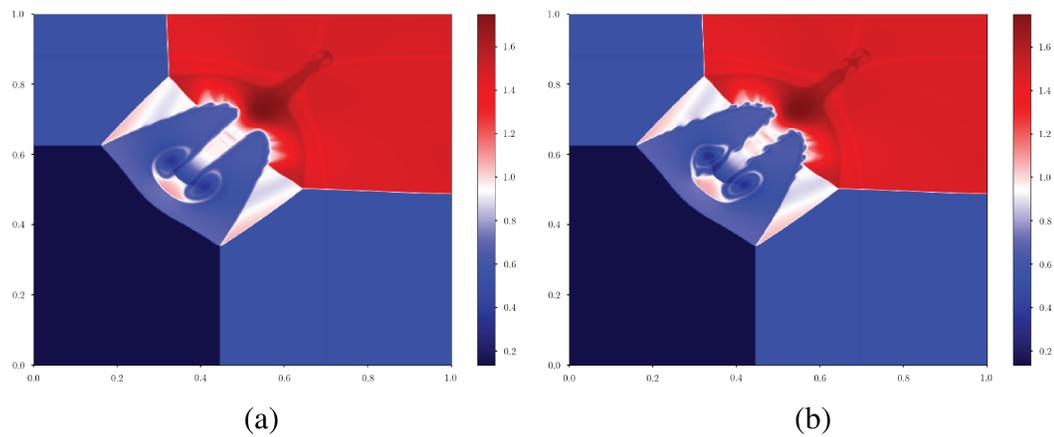


Figura 4.11: Solução numérica para um problema de Riemman bidimensional. Perfil da massa específica calculada no tempo $t = 0.6s$. CFL=0.3. Malha computacional de 500×500 . (a) WENO-Z+ e (b) WENO-SV (próprio autor).

4.2.4 Instabilidade de *Rayleigh-Taylor*

As Figuras 4.12 (a) (b) (c) mostram os resultados obtidos pelos esquemas WENO-JS, WENO-Z+ e WENO-SV, respectivamente, para o problema da instabilidade de *Rayleigh-Taylor*. A análise da Figura 4.12 mostra resultados numéricos mais dissipativos computados pelos esquemas WENO-JS e WENO-Z+. A solução numérica calculada utilizando o esquema WENO-SV demonstra características menos dissipativas, e portanto, mais detalhes dos escoamento são capturados. Este comportamento do esquema WENO-SV também pode ser verificado a partir da análise das Figuras 4.13 (a) (b) (c), que mostra os resultados de instabilidade de *Rayleigh-Taylor* utilizando uma malha mais refinada, malha computacional de 950×100 , para os esquemas WENO-JS, WENO-Z+ e WENO-SV, respectivamente.

Resultados relatados por Shi et al. (2003) para o mesmo problema de instabilidade de *Rayleigh-Taylor* em análise nesta seção, assemelham-se ao padrão de escoamento mostrado na Figura 4.12 (c) e Figura 4.13 (c). Ressalta-se que Shi et al. (2003) utilizou o esquema WENO-JS de nona ordem em diferentes tipos de malhas, como reportado na Figura 4.14.

Entretanto, também observa-se que o esquema WENO-SV obteve resultados com regiões assimétricas para um problema com características simétricas. Novamente, este comportamento pode indicar pouca dissipação numérica presente no esquema WENO-SV.

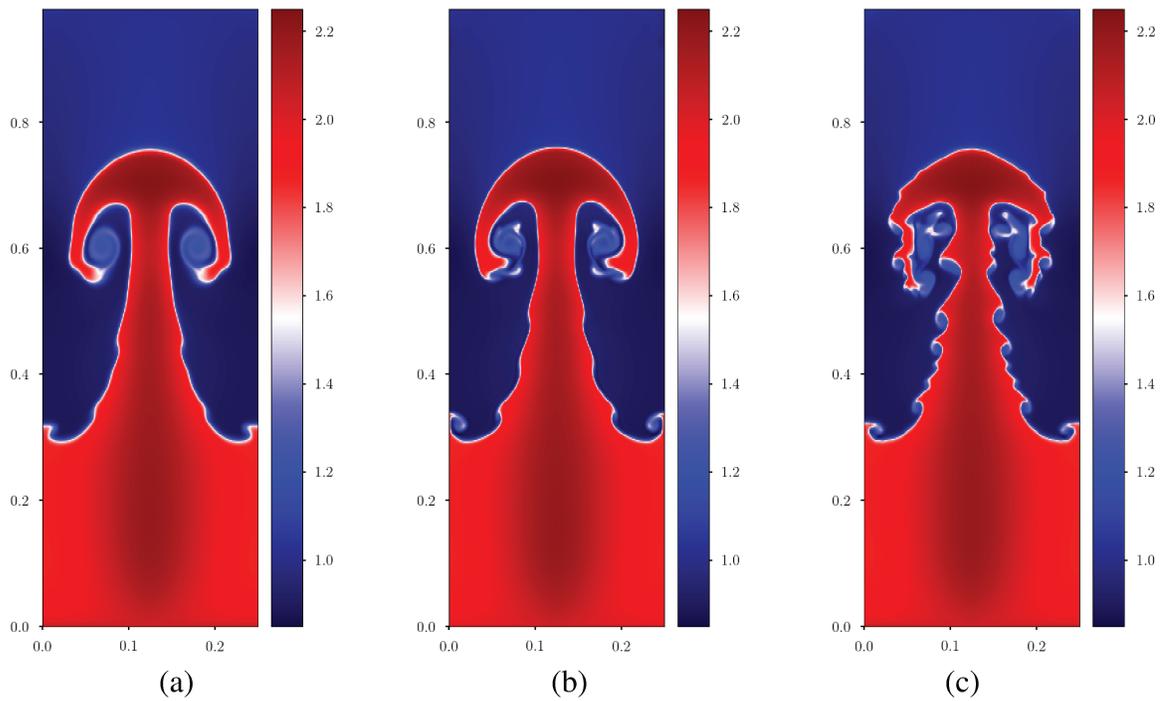


Figura 4.12: Solução numérica para o problema de instabilidade de *Rayleigh-Taylor* computado pelo esquemas WENO-JS, WENO-Z+ and WENO-SV. Perfil da massa específica avaliado no tempo $t = 1.95s$. CFL=0.3. Malha 480×500 (próprio autor).

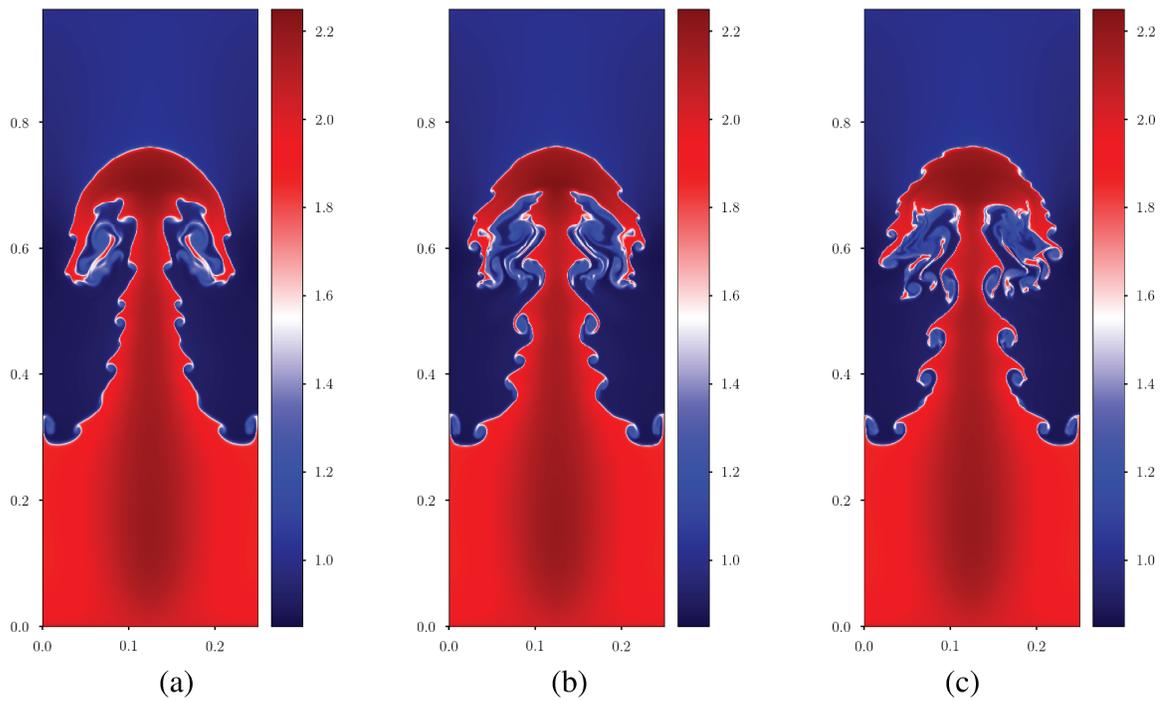


Figura 4.13: Solução numérica para o problema de instabilidade de *Rayleigh-Taylor* computado pelo esquemas WENO-JS, WENO-Z+ and WENO-SV. Perfil da massa específica avaliado no tempo $t = 1.95s$. CFL=0.3. Malha de 950×1000 (próprio autor).

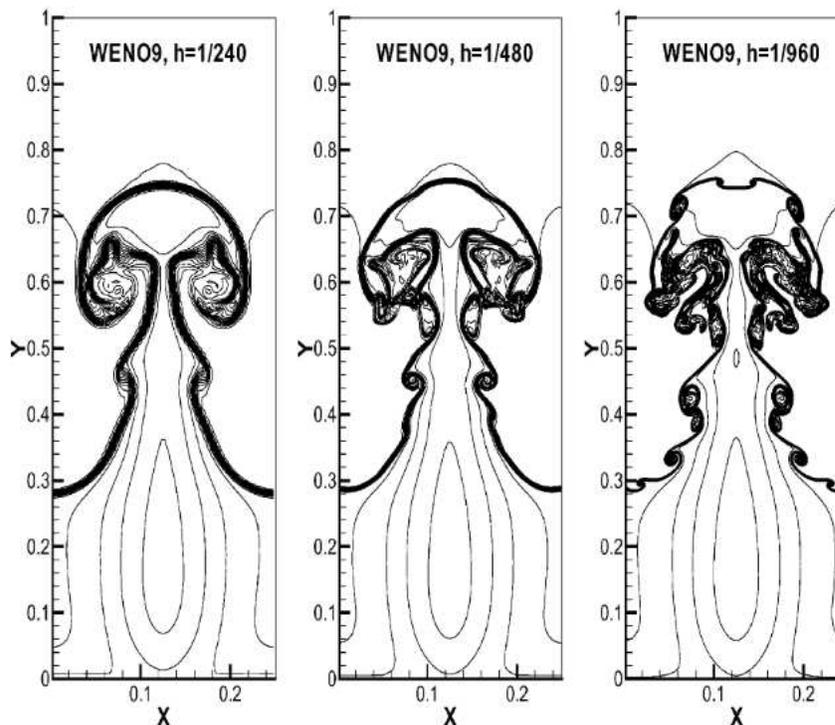


Figura 4.14: Solução numérica para o problema de instabilidade de *Rayleigh-Taylor* computado pelo esquema WENO-JS de nona ordem em malhas estruturadas de tamanho: $h = 1/240$, $h = 1/480$ e $h = 1/960$ (Shi et al., 2003).

4.2.5 Vazamento de jato

A liberação sônica de um jato também foi computada usando o esquema WENO-SV. A análise da Figura 4.15 mostra que os recursos detalhados do escoamento são capturados pelo WENO-SV, usando o mesmo tamanho de malha aplicado ao WENO-JS e WENO-Z+.

Da mesma forma que no caso de teste de *Rayleigh-Taylor*, o WENO-SV conseguiu reproduzir detalhes das instabilidades no fluxo que os outros esquemas não foram capazes de calcular considerando o mesmo tamanho de malha.

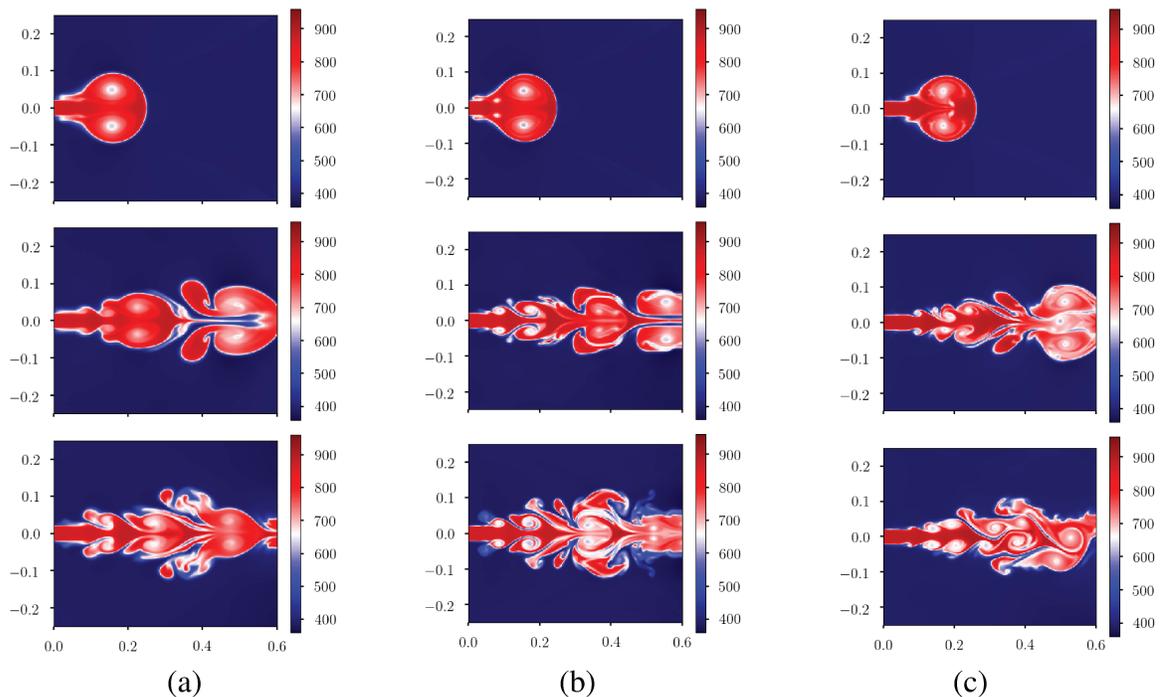


Figura 4.15: Solução numérica para um vazamento em forma de jato computado pelo esquemas WENO-JS, WENO-Z+ and WENO-SV. A velocidade do vazamento no orifício (0.05m) é 340m/s. Perfil de temperatura em três instantes de tempo (próprio autor).

4.2.6 Influência de malha não-regular

O aumento dos pesos dos sub-estêncis menos suaves é altamente influenciado pelo parâmetro λ , conforme pode ser verificado na equação 4.1, discutida anteriormente. A dependência deste parâmetro, em malhas não-regulares, para os esquemas WENO-Z+ e WENO-SV foi verificada a partir do problema de choque de entropia. Para tanto, considerou-se uma malha não-regular, cujos tamanhos de malha foram definidos como $dx1 = 0.02$ e $dx2 = 0.04$, conforme mostra a Figura 4.16.

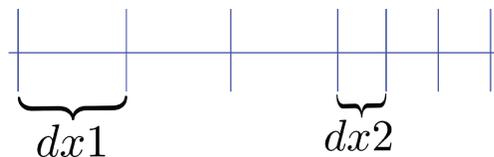


Figura 4.16: Tamanho de malha não regular. A região mais fina da malha tem $dx2 = 0.02$, enquanto que a região mais grossa tem $dx1 = 0.04$ (próprio autor).

A partir da Figura 4.17, verifica-se que o esquema WENO-Z+ torna-se menos acurado para capturar oscilações de alta frequência quando uma malha não-regular é considerada. Por outro lado, o esquema WENO-SV, que baseia-se no número Mach local, foi capaz de capturar as oscilações acuradamente, sem ser impactado pela estrutura da malha não-regular.

Uma análise mais detalhada a partir da Figura 4.17 c mostra que há diferença entre os resultados obtidos pelo esquema WENO-Z+. A utilização do parâmetro λ^{z+} considerando o menor espaçamento da malha, isto é, $\lambda^{z+} = dx_2^{2/3}$, apresentou resultados mais dissipativos do que aqueles calculados considerando o maior espaçamento da malha, ou seja, $\lambda^{z+} = dx_1^{2/3}$.

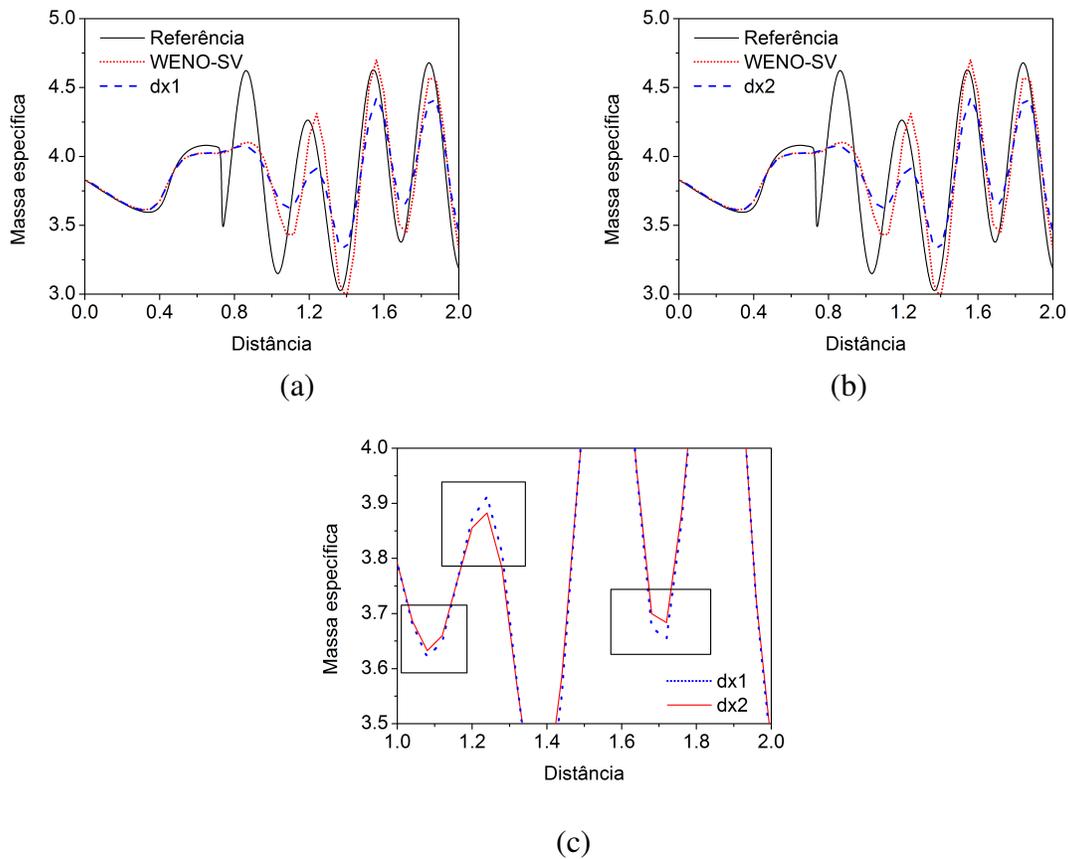


Figura 4.17: Comparação entre os esquemas WENO-Z+ e WENO-SV na solução do problema de onda de choque de entropia de Shu-Osher em uma malha não regular. Parâmetro $\lambda = dx_1^{2/3}$ (a) e parâmetro $\lambda = dx_2^{2/3}$ (b). Impacto na solução ao utilizar o parâmetro como sendo $\lambda = dx_1^{2/3}$ e o parâmetro como sendo $\lambda = dx_2^{2/3}$ (c) (próprio autor).

Capítulo 5

O esquema WENO-SV para escoamento em bocais

Neste capítulo, apresenta-se uma forma alternativa de lidar com escoamento em bocais por meio do esquema WENO-SV. Também é demonstrado que o esquema WENO-SV resolve problemas de bocais com resultados praticamente idênticos aos esquemas WENO-JS e WENO-Z+. Além disso, o esquema numérico *MacCormack* (esquema numérico tradicionalmente utilizado com viscosidade artificial) é utilizado para resolver os problemas de bocais. O seu resultado é comparado com os resultados obtidos pelo esquema WENO-SV. Ao final do capítulo, demonstra-se que o método de segunda ordem SSP-RK(2,2) (do inglês, *Strong Stability Preserving Properties high order Runge-Kutta* - SSP-RK), utilizado para a integração temporal, é uma excelente alternativa para lidar com os escoamento em bocais, em vez do método de terceira ordem SSP-RK(3,3), comumente utilizado devido sua estabilidade junto a esquemas WENO. Conceitos fundamentais sobre o método WENO podem ser revistos nos capítulos 2 e 3.

5.1 Modelagem de escoamentos em bocais

O escoamento ao longo de bocais é representado por meio da equação de Euler com variação de área, como mostrado abaixo

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F(Q)}{\partial x} = S(Q) \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{bmatrix}_t + \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \end{bmatrix}_x = -\frac{A_x}{A} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ u(E + p) \end{bmatrix}, \quad (5.1)$$

lembrando que ρ , u , P e E são a massa específica, velocidade, pressão e energia total, respectivamente. O primeiro termo da equação A área transversal do bocal é representado por $A = A(x)$, sendo $A_x = \frac{dA}{dx}$ a derivada da área ao longo da distância do bocal. Ressalta-se ainda que o primeiro termo da equação 5.1 é da derivada temporal, que o segundo termo diz respeito à derivada espacial e que o terceiro, após o sinal de igualdade, é o termo fonte.

A equação que governa o escoamento em bocais, equação 5.1, foi discretizada em uma malha estruturada, usando-se a metodologia de diferenças finitas. O esquema WENO-SV foi aplicado tanto para a reconstrução espacial, como para a reconstrução do termo fonte. Reconstruíram-se os fluxos espaciais, (ρu) , $(\rho u^2 + p)$, $(u(E + p))$, utilizando o mesmo procedimento de cálculo empregado para resolver a equação de Euler regular (equação de Euler com o termo fonte igual a zero). Para a reconstrução do termo fonte, utilizaram-se os fluxos espaciais de massa, momento e energia já reconstruídos, ponderando-se pela razão entre a derivada de área e a área transversal do bocal $(-A_x/A)$. O fluxo de momento reconstruído $(\rho u^2 + p)$, no entanto, foi subtraído da pressão (p) para, finalmente, obter o termo fonte correspondente (ρu^2) . Um algoritmo simplificado na linguagem de programação *Fortran* apresentado na Tabela 1 esclarece como o termo fonte foi implementado no código desenvolvido. Os termos fonte para a massa, o momento e a energia são representados, respectivamente, por $s(1, i)$, $s(2, i)$ e $s(3, i)$, enquanto as variáveis $flux(1, i)$, $flux(2, i)$ e $flux(3, i)$ referem-se aos fluxos de massa, de momento e de energia reconstruídos pelo

WENO-SV, respectivamente.

Algoritmo 1: Implementação do termo fonte para resolução de escoamentos em bocais.

```

1 for i ← 1 to ni do
2   s(1,i) = -dA(i)/A(i)*flux(1,i) ;
3   s(2,i) = -dA(i)/A(i)*(flux(2,i) - p(i)) ;
4   s(3,i) = -dA(i)/A(i)*flux(3,i) ;
5 end

```

A discretização do fluxos espaciais, mais o termo fonte reconstruído, foram incorporados nas variáveis $L(1, i)$, $L(2, i)$, $L(3, i)$, de acordo com as instruções da Tabela 2 abaixo

Algoritmo 2: Discretização do fluxo mais o termo fonte.

```

1 for i ← 1 to ni do
2   L(1,i) = (flux(1,i+1)-flux(1,i))/dx + (s(1,i)+s(1,i+1))*0.5 ;
3   L(2,i) = (flux(2,i+1)-flux(2,i))/dx + (s(2,i)+s(2,i+1))*0.5 ;
4   L(3,i) = (flux(3,i+1)-flux(3,i))/dx + (s(3,i)+s(3,i+1))*0.5 ;
5 end

```

Sendo assim, a equação 5.1 torna-se

$$\frac{dQ}{dt} = L(q) \quad (5.2)$$

A equação 5.2 foi integrada utilizando-se o esquema explícito de vários estágios dos tipos SSP-RK(2,2) e SSP-RK(3,3). O intervalo de tempo Δt garantiu a estabilidade durante a solução numérica, considerando a condição de *Courant-Friedrichs-Lewy* (CFL), tomando $CFL \leq 0,5$.

5.1.1 Estudo de caso

Consideram-se dois tipos de escoamento em bocais: um escoamento em bocal totalmente subsônico (denominado de caso A) e um escoamento em bocal com choque normal na parte

divergente (denominado de caso B). As Figuras 5.1 e 5.2 mostram o esquema do bocal e as condições de contorno adimensionais para casos de escoamentos totalmente subsônicos e com choques normais, respectivamente.

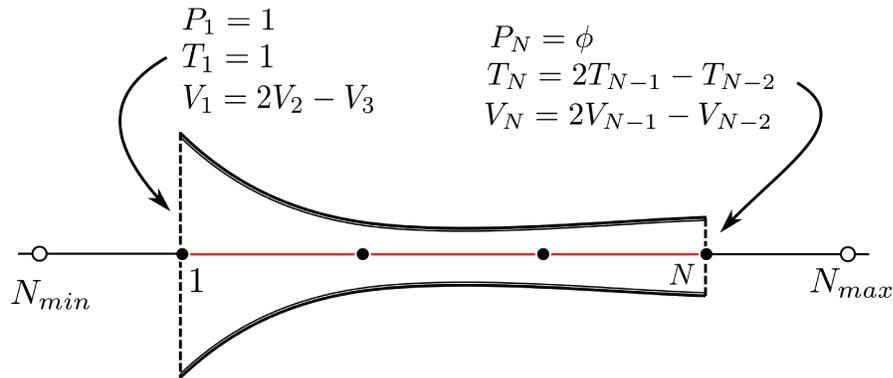


Figura 5.1: Esquema do bocal para estudo de um escoamento completamente subsônico (caso A); os pontos N_{min} e N_{max} são pontos fantasmas nos contornos de entrada e saída do bocal, respectivamente (próprio autor).

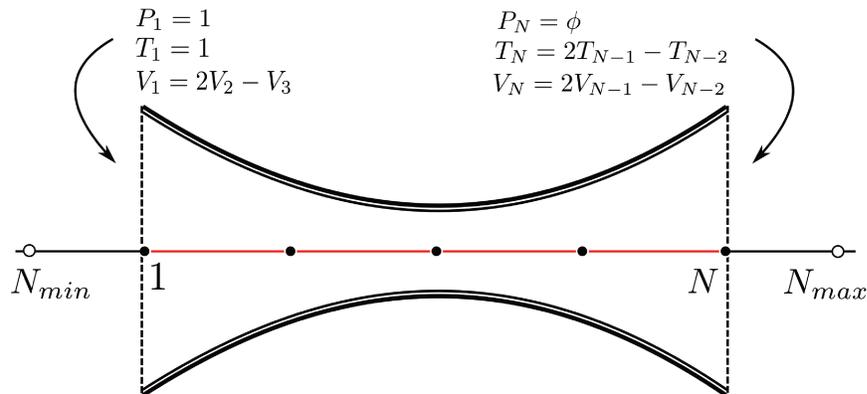


Figura 5.2: Esquema do bocal para estudo de um escoamento contendo choque normal (caso B); os pontos N_{min} e N_{max} são pontos fantasmas nos contornos de entrada e saída do bocal, respectivamente (próprio autor).

A variação de área do bocal para o caso A e caso B são calculados de acordo com as equações mostradas abaixo:

1. Case A

$$\frac{A}{A_t} = \begin{cases} 1 + 2.2000 \left(\frac{x}{L} - 1.5\right)^2 & \text{para } 0 \leq \frac{x}{L} \leq 1.5, \\ 1 + 0.2223 \left(\frac{x}{L} - 1.5\right)^2 & \text{para } 1.5 \leq \frac{x}{L} \leq 3.0, \end{cases} \quad (5.3)$$

2. Case B

$$A = 1 + 2.2 \left(\frac{x}{L} - 1.5\right)^2 \quad 0 \leq \frac{x}{L} \leq 3.0. \quad (5.4)$$

O comprimento adimensional do bocais é 3.0. A garganta do bocal está localizada em $\frac{x}{L} = 1.5$; a seção convergente está presente em $\frac{x}{L} < 1.5$, enquanto que a seção divergente está em $\frac{x}{L} > 1.5$.

As condições de contorno na entrada (ponto 1) e na saída (ponto N) foram implementadas de acordo com a teoria dos autovalores. Admitem-se diferentes valores de pressão na saída do bocal, $P_N = \phi$, para obter diferentes perfis de escoamento. Os valores adimensionais de pressão no contorno de saída estão descritos ao longo do texto. O conceito de pontos fictícios também é considerado no nó N_{min} e no nó N_{max} como condição de contorno fixa.

A seguinte condição inicial em termos das variáveis adimensionais segue,

$$\begin{cases} \rho = 1.0 - 0.023x, \\ T = 1.0 - 0.009333x, \\ V = 0.579/\rho A, \end{cases} \quad (5.5)$$

5.2 Resultados do escoamento do bocal

5.2.1 Escoamento completamente subsônico - Caso A

Os resultados deste tópico consideram um escoamento completamente subsônico, definindo uma pequena diferença de pressão entre a entrada e a saída do bocal ($p_N = 0.93p_1$). Diferentes formulações do método WENO (como WENO-JS, WENO-Z+ e o esquema WENO-SV) foram utilizadas para o cálculo de perfis de propriedades do escoamento, como na Figura 5.3, que mostra o perfil da massa específica, da pressão e do número

Mach na garganta do bocal. Observou-se que o esquema WENO-SV conseguiu resultados praticamente idênticos aos esquemas WENO-JS e WENO-Z+. Todos os esquemas WENO utilizados nesta análise (WENO-JS, WENO-Z+ e WENO-SV) atingiram a solução de estado estacionário na garganta do bocal em menos de 5000 passos de tempo. Agora, a Figura 5.4 demonstra que o esquema WENO-SV comportou-se de maneira mais eficiente que o esquema *MacCormack*, uma vez que o esquema *MacCormack* atingiu a solução de estado estacionário somente em torno de 11000 passos de tempo. Além disso, o esquema WENO-SV foi o que mais se aproximou da solução exata da garganta (linha reta na cor preta). Mesmo assim, a solução do esquema *MacCormack* ao longo do bocal mostra uma boa concordância com a solução exata para um escoamento em bocais totalmente subsônicos para os perfis de massa específica, pressão e número de Mach, como mostrado na Figura 5.5.

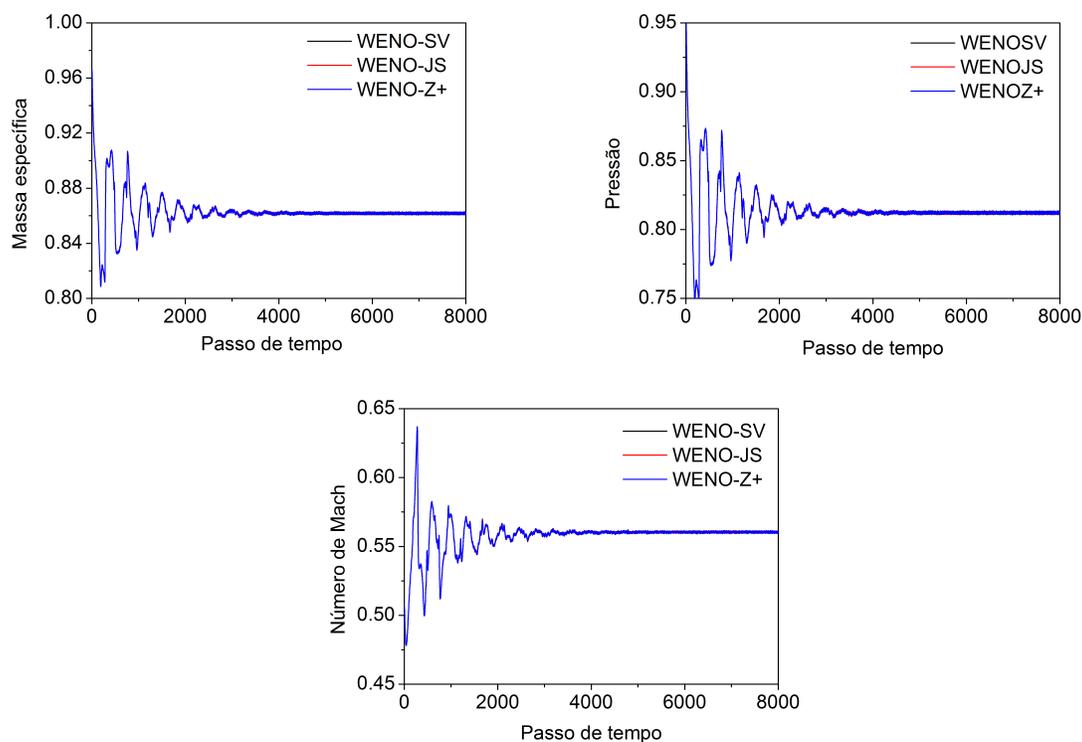


Figura 5.3: Perfil da solução do escoamento na garganta do bocal calculada por WENO-JS, WENOZ+ and WENO-SV. Perfil da massa específica (a), perfil de pressão (b) e perfil do número de Mach(c) (próprio autor).

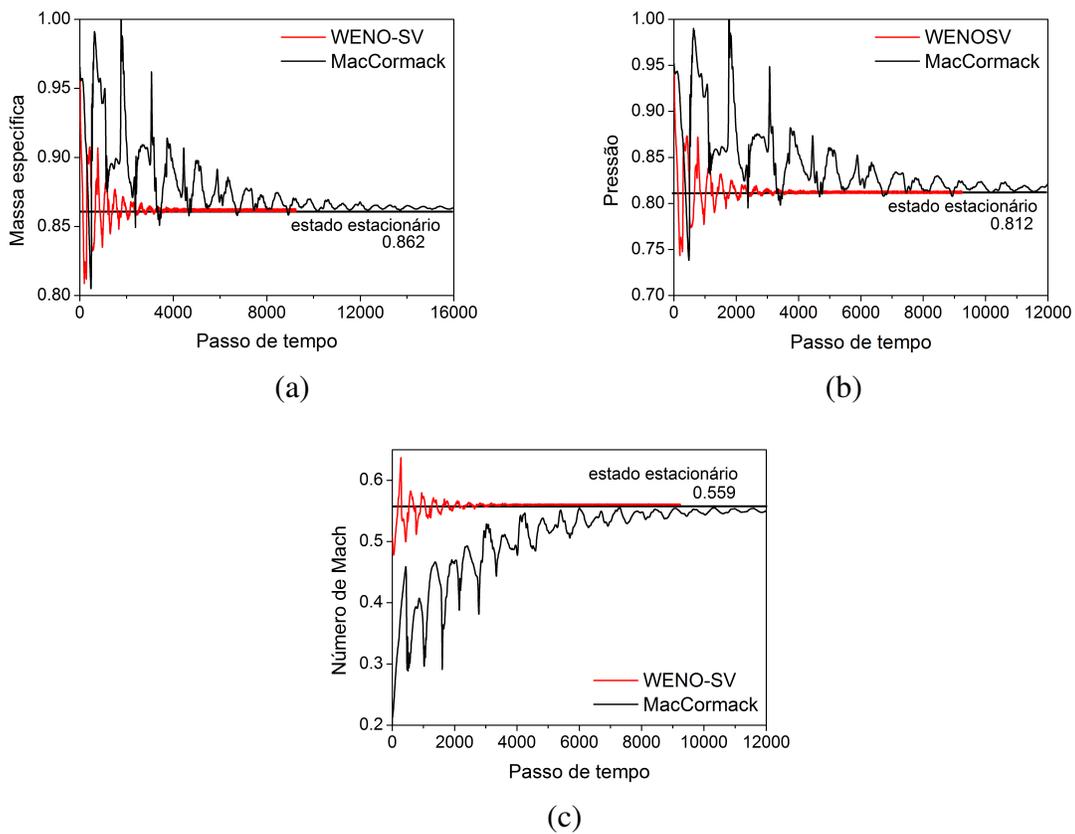


Figura 5.4: Perfil da solução do escoamento na garganta do bocal calculada pelos esquemas MacCormack e WENO-SV. Perfil da massa específica (a), perfil de pressão (b) e perfil do número de Mach(c) (próprio autor).

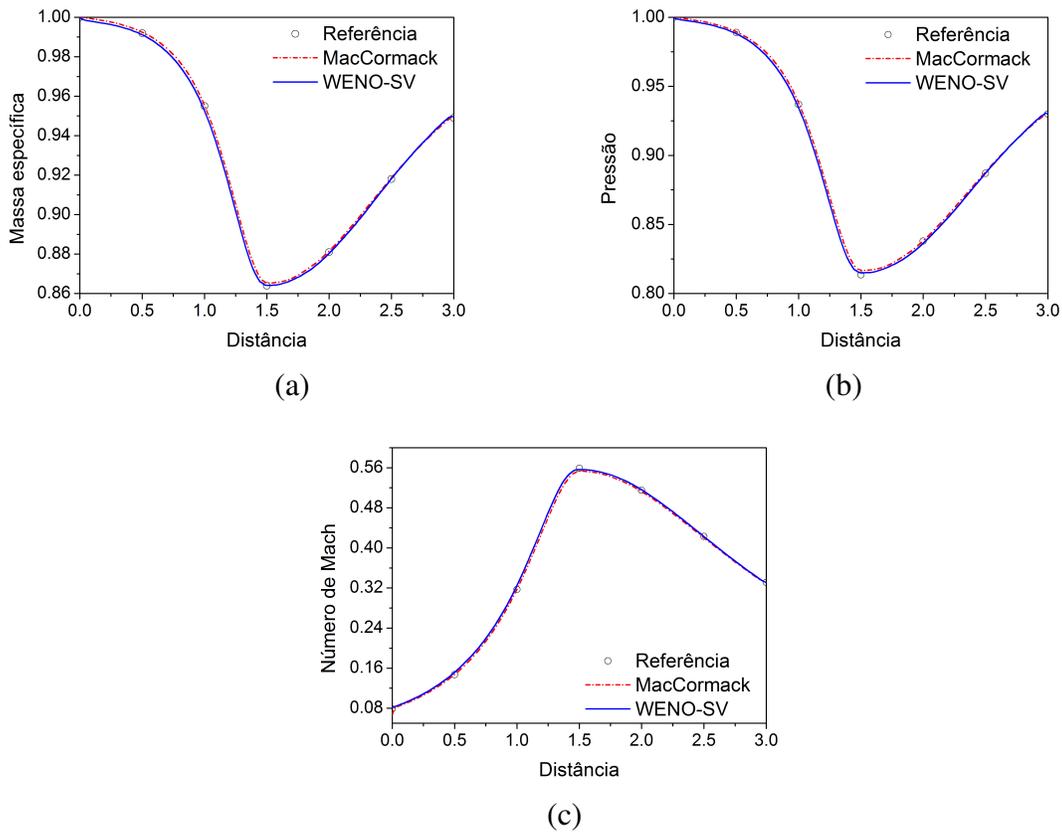


Figura 5.5: Perfil de estado estacionário ao longo do bocal calculado pelos esquemas *MacCormack* e *WENO-SV*, formulações exatas. Perfil da massa específica (a), perfil de pressão (b) e perfil do número de Mach (c). Pressão na saída do bocal: $p_N = 0,93$ (próprio autor).

Alterando a pressão no contorno de saída para ($p_N = 0,89p_1$), alteram-se os perfis de escoamento ao longo do bocal. Nessa situação, ainda há um escoamento totalmente subsônico sem presença de choque. Apesar disso, o *MacCormack*, sem viscosidade artificial, torna-se instável, e oscilações aparecem na solução numérica. O esquema *WENO-SV*, entretanto, permanece estável, sem oscilação e com boa concordância. Veja a Figura 5.6.

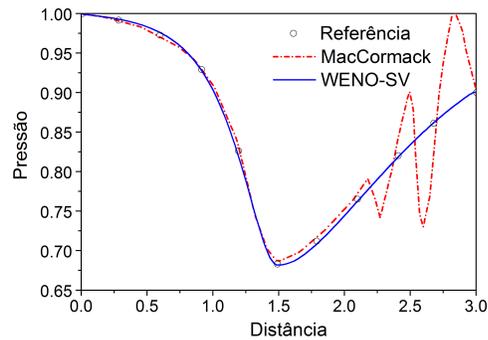


Figura 5.6: Perfil de estado estacionário ao longo do bocal calculado pelos esquemas *MacCormack* e WENO-SV, e formulações exatas. Pressão na saída do bocal: $p_N = 0,89$ (próprio autor).

5.2.2 Escoamentos com choques normais - Caso B

Os esquemas WENO-SV e *MacCormack* também são considerados para a modelagem do caso de escoamento em bocais com a presença de choque. Tal caso considerou a pressão no contorno de saída como sendo $P_N = 0,6784P_1$. A Tabela 5.1 mostra os valores de ρ/ρ_0 , p/p_0 e M na garganta do bocal calculada pelas equações exatas e pelos esquemas numéricos WENO-SV e *MacCormack*. Nesse caso, o esquema *MacCormack* fez o uso da viscosidade artificial com valores de $ad = 0,0$, $ad = 0,1$, $ad = 0,2$ e $ad = 0,3$. Nota-se que o esquema WENO-SV alcançou bons resultados, enquanto o *MacCormack* falhou em capturar a física do problema quando $ad = 0$. Ao considerar a viscosidade artificial como $ad = 0,1$, $ad = 0,3$ ou $ad = 0,2$, os resultados tornam-se mais apropriados quando se compara com a solução exata. A partir dessa comparação, pode-se sugerir que o valor de $ad = 0,2$ é o mais correto, já que, com exceção no número de Mach, os resultados da massa específica e da pressão são os mais próximos dos valores exatos.

Entretanto, encontrar o melhor valor para a viscosidade artificial é sempre um grande desafio, uma vez que a maioria dos problemas práticos da mecânica dos fluidos não contém uma solução exata. Imagine que não se sabe nada sobre os resultados exatos apresentados na Tabela 5.1. O que se sabe *a priori*, no entanto, a partir da teoria do escoamento em bocais com choques, é que o valor do número de Mach na garganta deve ser igual a 1. Assim, ao observar todos os resultados dos números Mach obtidos pelo esquema *MacCormack* na Tabela

5.1, o menor erro é encontrado quando $ad = 0,3$. Todavia, sabe-se o valor exato, e $ad = 0,3$ apresenta os piores resultados daqueles obtidos por $ad = 0,1$ e $ad = 0,2$.

Tabela 5.1: Solução de captura de choque; respectivos valores adimensionais da massa específica, pressão e número de Mach na garganta do bocal calculada pela formulação exata, esquema WENO-SV e esquema de MacCormark utilizando viscosidade artificial de $ad = 0,0$, $ad = 0,1$, $ad = 0,2$ e $ad = 0,3$ (próprio autor).

	$\frac{\rho}{\rho_0}$	$\frac{p}{p_0}$	M
Solução exata	0.634	0.528	1.000
WENO-SV	0.632	0.525	1.014
MacCormark ($ad = 0,0$)	0.735	0.646	0.836
MacCormark ($ad = 0,1$)	0.629	0.523	1.016
MacCormark ($ad = 0,2$)	0.633	0.527	1.009
MacCormark ($ad = 0,3$)	0.640	0.535	0.997

A Figura 5.7 e a Figura 5.8 mostram os comportamentos do número Mach e da pressão no escoamento com um choque na zona divergente do bocal. O esquema WENO-SV alcançou bons resultados, enquanto o esquema *MacCormack*, sem viscosidade artificial, não conseguiu captar a física do problema, e notou-se a presença de oscilações, como podem ser observadas na Figura 5.7 (a) e Figura 5.8 (a). Para o esquema *MacCormack*, uma solução mais estável e menos dissipativa é observada para $ad = 0,2$, embora pequenas oscilações sejam apresentadas no final do choque e a dissipação da solução desvie-se dos resultados exatos, como são mostrados na Figura 5.7 (b) e Figura 5.8 (b).

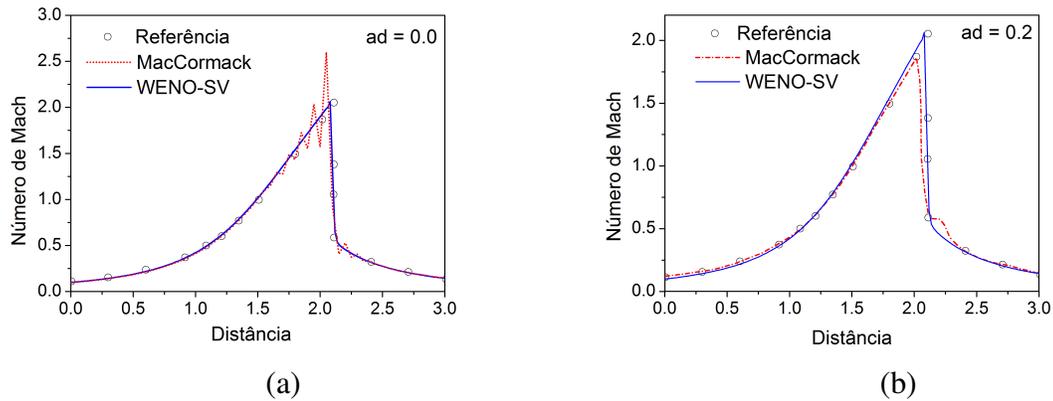


Figura 5.7: Resultados numéricos dos esquemas MacCormack e WENO-SV para o perfil do número de Mach ao longo do bocal. Solução exata (círculos). Esquema MacCormack sem viscosidade artificial, $ad = 0.0$ (a). Esquema MacCormack com viscosidade artificial, $ad = 0.2$ (b) (próprio autor).

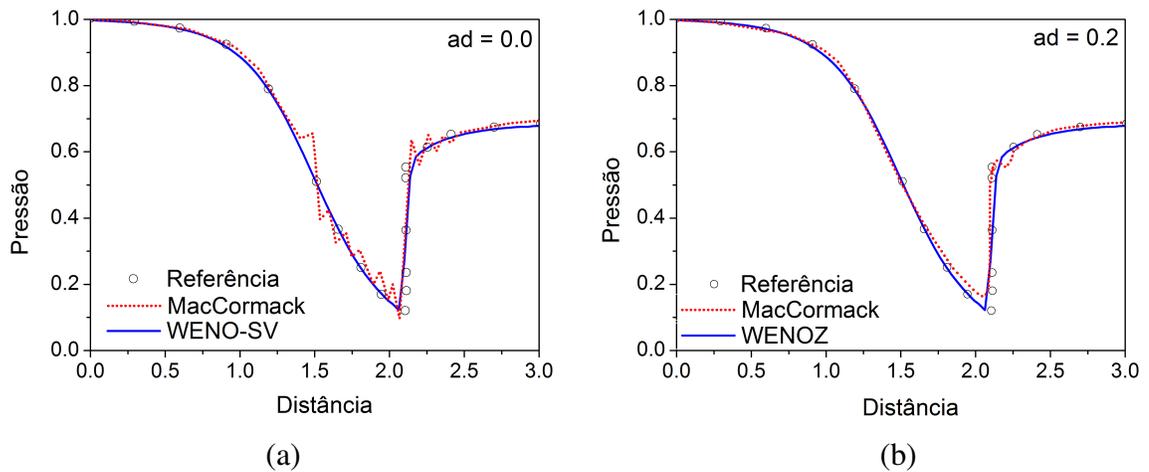


Figura 5.8: Resultados numéricos dos esquemas MacCormack e WENO-SV para o perfil a pressão ao longo do bocal. Solução exata (círculos). Esquema MacCormack sem viscosidade artificial, $ad = 0.0$ (a). Esquema MacCormack com viscosidade artificial, $ad = 0.2$ (b) (próprio autor).

O número Mach na saída do bocal também foi analisado. A Figura 5.9 mostra a solução exata do número Mach e a solução obtida usando os esquemas WENO-SV e *MacCormack* em diferentes gradientes de pressão (p_N/p_1) entre a entrada e a saída do bocal. Observe-se que o esquema WENO-SV computa os valores do número Mach na saída do bocal com

precisão, independentemente do gradiente de pressão aplicado. O número Mach avaliado pelo esquema *MacCormack* diverge da solução exata. O resultado mais próximo da solução exata foi encontrado para $p_N = 0,8p_1$, enquanto o mais distante foi calculado para $p_N = 0,3p_1$. Essa tendência de comportamento foi constatada para todos os valores de viscosidade artificial analisado, $ad = 0,1$, $ad = 0,2$, $ad = 0,3$

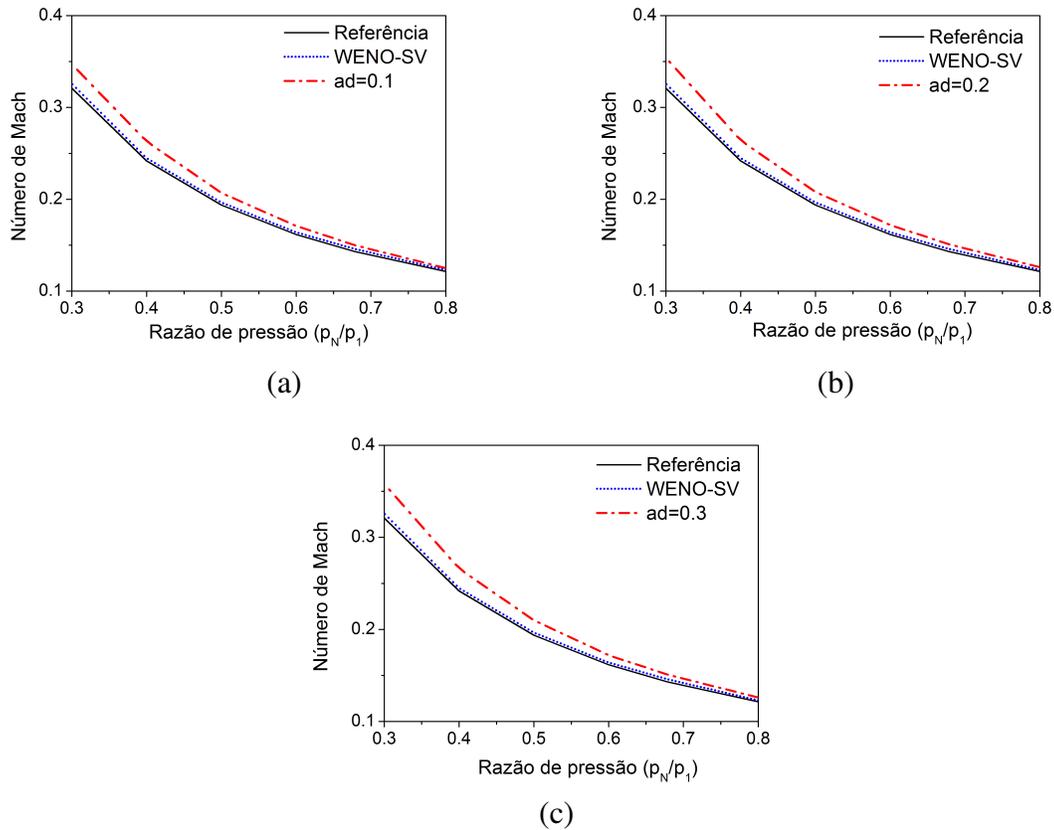


Figura 5.9: Valores do número Mach na saída do bocal calculados considerando diferentes relações de pressão (p_N/p_1). Formulações exatas, esquemas WENO-SV e MacCormack são comparadas. O esquema MacCormack inclui viscosidade artificial, $ad = 0.1$ (a) , $ad = 0.2$ (b), e $ad = 0.3$. (c) (próprio autor).

5.2.3 Integração no tempo

A Figura 5.10 mostra os perfis do número Mach ao longo da distância do bocal para diversos valores de gradientes de pressão, calculados pelo esquema WENO-SV com os

métodos SSP-RK(2,2) e SSP-RK(3,3) para avançar a solução no tempo. Ambos os métodos integradores no tempo alcançaram resultados praticamente iguais: estáveis, sem oscilações espúrias em todas as faixas de pressão sob investigação. Observou-se, entretanto, que o tempo total da simulação numérica foi mais rápido quando se considerou o método SSP-RK(2,2). Numericamente, a simulação numérica para um problema de 50s, com o método SSP-RK(2,2), durou 12,5s, enquanto com o método SSP-RK(3,3) gastou-se 20s; veja a Figura 5.11.

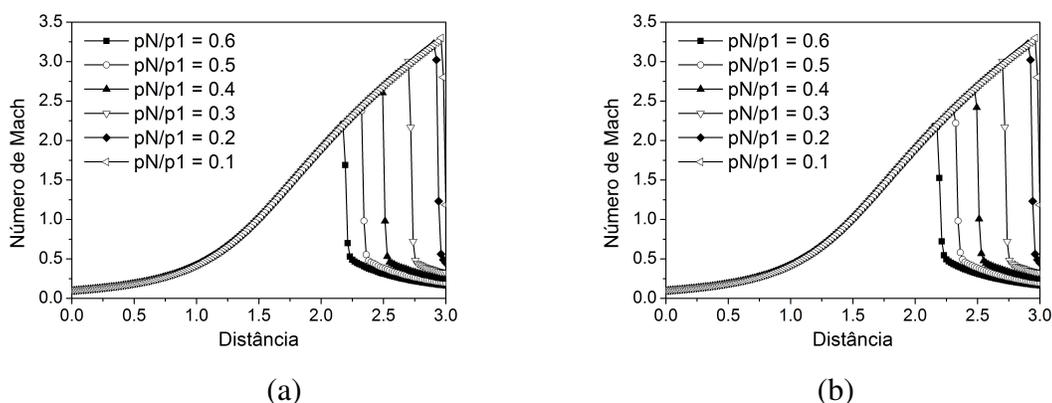


Figura 5.10: Número de Mach computados para diferentes relações de pressão (p_ϕ/p_1) usando o esquema WENO-SV juntamente com o método SSP(3,3) (a) e SSP(2,2) (b) (próprio autor).

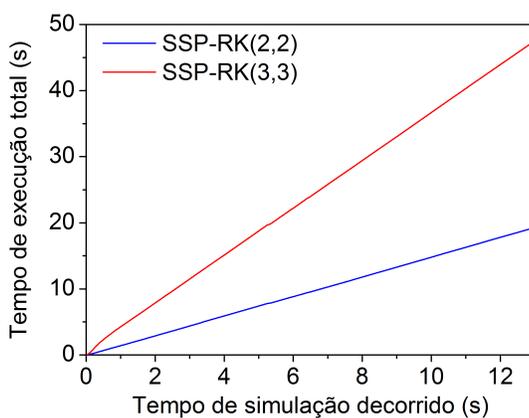


Figura 5.11: Tempo total de execução gasto pelo esquema WENO-SV de quinta ordem implementado com SSP(3,3) e SSP(2,2) (próprio autor).

Capítulo 6

O esquema WENO-SV para explosões físicas

Neste capítulo, propõem-se dois modelos a partir da junção entre esquema numérico e modelos físicos. O primeiro diz respeito ao acoplamento entre o esquema WENO-SV e o modelo de Falha no Vaso de Pressão (do inglês, *Pressure Vessel Failure model* - PVF) para lidar com explosões físicas de cilindro ou esfera. A denominação deste leva o nome de modelo PVF/WENO-SV. O segundo refere-se à junção entre o esquema WENO-SV e o modelo de *Colebrook-White* modificado para resolver problemas de propagação de ondas de choque ao longo de gasodutos. Neste caso, o nome dado é modelo WENO-SV/pipeline.

6.1 Modelagem da explosão física

A equação de Euler com termo fonte foi considerada para modelar a explosão física de uma esfera, isto é,

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F(Q)}{\partial x} = S(Q) \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{bmatrix}_t + \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \end{bmatrix}_x = -\frac{\theta}{r} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ u(E + p) \end{bmatrix}. \quad (6.1)$$

relembrando que ρ , u , P e E são a massa específica, velocidade, pressão e energia total,

respectivamente. O primeiro termo da equação 6.1 diz respeito à derivada temporal, o segundo termo refere-se a derivada espacial e o terceiro, após o sinal de igualdade, é o termo fonte.

A equação que governa o deslocamento das ondas de choques geradas por explosões físicas, equação 6.1, foi discretizada em uma malha estruturada usando a metodologia de diferenças finitas. O esquema WENO-SV foi aplicado tanto para a reconstrução espacial como para a reconstrução do termo fonte. Reconstruíram-se os fluxos espaciais, (ρu) , $(\rho u^2 + p)$, $(u(E + p))$, utilizando-se o mesmo procedimento de cálculo empregado para resolver a equação de Euler regular (equação de Euler com o termo fonte igual a zero). Para a reconstrução do termo fonte, utilizaram-se os fluxos espaciais de massa, momento e energia já reconstruídos e os escalonaram pela forma geométrica do objeto a ser explodido $(-\theta/r)$, sendo $\theta = 2$ para uma esfera, $\theta = 1$ para um cilindro e r é o raio da explosão. O fluxo de momento reconstruído $(\rho u^2 + p)$, no entanto, foi subtraído da pressão (p) para, finalmente, ser obtido o termo fonte correspondente (ρu^2) . Um algoritmo simplificado na linguagem de programação *Fortran* apresentado na Tabela 3 esclarece como o termo fonte foi implementado no código desenvolvido. O termo fonte para a massa, o momento e a energia são representados, respectivamente, por $s(1, i)$, $s(2, i)$ e $s(3, i)$, enquanto as variáveis $flux(1, i)$, $flux(2, i)$ e $flux(3, i)$ referem-se aos fluxos de massa, de momento e de energia reconstruídos pelo WENO-SV, respectivamente.

Algoritmo 3: Implementação do termo fonte para resolução de explosões físicas
(próprio autor).

```

1 for  $i \leftarrow 1$  to  $n_i$  do
2    $s(1,i) = -\theta(i)/r(i)*flux(1,i)$  ;
3    $s(2,i) = -\theta(i)/r(i)*(flux(2,i) - p(i))$  ;
4    $s(3,i) = -\theta(i)/r(i)*flux(3,i)$  ;
5 end
```

A discretização do fluxos espaciais mais o termo fonte reconstruído foram incorporados

nas variáveis $L(1, i)$, $L(2, i)$, $L(3, i)$, de acordo com as instruções da Tabela 4 abaixo

Algoritmo 4: Discretização do fluxos espaciais mais o termo fonte reconstruído (próprio autor).

```

1 for  $i \leftarrow 1$  to  $n_i$  do
2    $L(1,i) = (\text{flux}(1,i+1) - \text{flux}(1,i))/dx + (s(1,i) + s(1,i+1))*0.5$  ;
3    $L(2,i) = (\text{flux}(2,i+1) - \text{flux}(2,i))/dx + (s(2,i) + s(2,i+1))*0.5$  ;
4    $L(3,i) = (\text{flux}(3,i+1) - \text{flux}(3,i))/dx + (s(3,i) + s(3,i+1))*0.5$  ;
5 end

```

6.1.1 Singularidade e condição de contorno

A solução da Equação 6.1 no centro da explosão, isto é, em $r = 0$, é calculada a partir da equação regular da conservação e considerando a velocidade, u , com o valor zero, conforme escrita abaixo

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{Q})}{\partial r} = 0, \quad u = 0 \quad (6.2)$$

Na medida em que o esquema WENO-SV é essencialmente um esquema de alta ordem, pontos fantasmas nas fronteiras da malha computacional são implementados. Considerando um comportamento simétrico da explosão, a condição de contorno reflexiva é empregada na origem da explosão, enquanto que a condição de contorno fixa é aplicada nas fronteiras. A Figura 6.1 retrata a aplicação das condições de contorno em um cenário explosão física simétrica

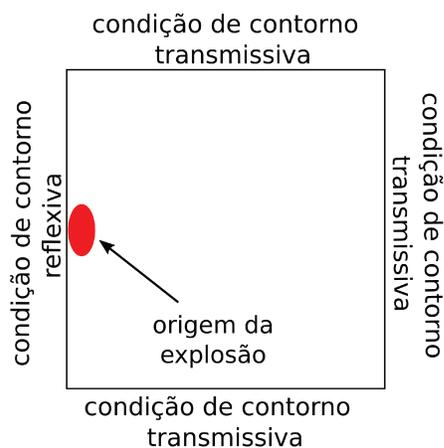


Figura 6.1: Aplicação de condições de contorno para estudo de explosão física em ambiente aberto (próprio autor).

6.2 O modelo PVF/WENO-SV

6.2.1 Princípio de acoplamento

A ideia criada pelo modelo PVF/WENO-SV proposto é bastante simples. Trata-se de estimar uma condição termodinâmica inicial apropriada que culmine em uma explosão física e, em seguida, que as ondas de choque geradas sejam devidamente capturadas, sem oscilações espúrias; isto é, o modelo PVF é aquele que estima o valor da pressão de ruptura de um vaso de pressão, considerando sua dimensão, sua forma (geometria) e seu material de construção, enquanto que o esquema WENO-SV computa o campo de escoamento, capturando as ondas de choque em uma atmosfera aberta ao longo do espaço e do tempo de uma maneira não-oscilatória. Um fluxograma que simplifica a ideia do modelo PVF/WENO-SV é mostrado na Figura 6.2.



Figura 6.2: Fluxograma que sintetiza a ideia do acoplamento entre o modelo PVF e o esquema WENO-SV para estudo de explosão física (próprio autor).

O modelo PVF considera que a pressão interna necessária para a ruptura de um vaso esférico pode ser calculada considerando a diferença de pressão ($P - P_0$), não excedendo 0,665 vezes a resistência mecânica do material (Crowl and Louvar, 2002), como sendo

$$P = P_0 + \frac{2S_M z}{r_0 + 0.2z} \quad (6.3)$$

no caso de exceder o valor 0,665 o cálculo é feito como

$$P = P_0 + \frac{2S_M \left(\frac{z}{r_0} + 1\right)^2 - 2S_M}{\left(\frac{z}{r_0} + 1\right)^2 + 1} \quad (6.4)$$

onde P é a pressão absoluta interna (Pa) que cause a ruptura do vaso, P_0 é a pressão atmosférica (Pa), S_M é a resistência à tração do material (Pa), r_0 é o raio interno vaso esférico (m) e z é a espessura da parede do vaso (m).

6.2.2 Caso experimental

O experimento de explosão física realizado por Boyer (1960) e o modelo analítico desenvolvido por Brode (1957) foram usados para verificar a validade o modelo PVF/WENO-SV. Durante o experimento, Boyer (1960) realizou uma explosão de um material esférico de vidro do tipo *soda-lime*. A força de tensão (S_M) do material de vidro utilizado no experimento encontra-se em um intervalo de $19MPa$ a $41MPa$. As características físicas da esfera de vidro estão disponíveis na Tabela 6.1. A partir das características física do vidro, calculou-se a pressão interna de ruptura, indicada por $P = 1.42 MPa$ no caso de $S_M = 19 MPa$, e $P = 2.95 MPa$ no caso de $S_M = 41 MPa$. A pressão necessária para a ruptura do vidro *soda-lime* foi calculada pela Equação 6.3.

Tabela 6.1: Características físicas da esfera de vidro do tipo *soda-lime* utilizada no experimento realizado por Boyer (1960).

Características	valores
espessura (z)	$0.89 m$
força de tensão (S_M)	$19 - 41 MPa$
raio interno (r_0)	$0.051 m$

A explosão de vidro ocorreu à pressão atmosférica, $P_0 = 0.1 \text{ MPa}$, e em temperatura ambiente $T_0 = 25.85^\circ\text{C}$. A temperatura dentro da esfera de vidro também foi a mesma da temperatura ambiente, $T = 25.85^\circ\text{C}$.

6.2.3 Experimento numérico

As condições iniciais utilizadas para a simulação numérica de explosões físicas foram calculadas de acordo com as características físicas da esfera de vidro do tipo *soda-lime* utilizadas no experimento de Boyer (1960). Os valores adimensionais das condições iniciais (eg. pressão interna, massa específica), que causam a ruptura da esfera de vidro, são mostradas na Figura 6.3, para o valor mínimo e para o valor máximo de força de tensão da esfera de vidro *soda-lime*. O procedimento de cálculo utilizado para obter as quantidades adimensionais está descrito no **Apêndice B**.

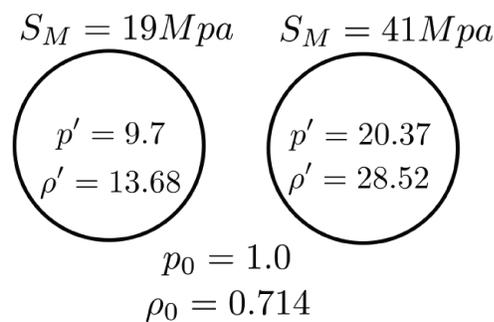


Figura 6.3: Valores adimensionais da pressão interna e da massa específica, que causam ruptura da esfera de vidro, para os valores mínimo e máximo da força de tensão da esfera de vidro *soda-lime* (próprio autor).

As Figuras 6.4, 6.5 e 6.6 mostram os perfis das ondas de choque, adimensionais, representadas pela massa específica, pela pressão e pela velocidade após o tempo, também adimensional, de $t = 0.2$, $t = 0.3$ e $t = 0.4$, respectivamente. À medida que o choque principal se afasta da origem da explosão, torna-se mais fraco. A velocidade da onda de choque aumenta, a partir da origem da explosão, de zero até o início do segundo choque e, imediatamente depois, diminui até o choque principal.

A Figura 6.7 mostra os perfis das ondas de choque, adimensionais, representadas pela massa específica, pela pressão e pela velocidade após o tempo de $t = 0,6$, $t = 0,8$ e $t = 1,0$,

respectivamente. Nessa faixa, observa-se claramente que uma onda de descontinuidade de contato separa o gás expandido do gás comprimido pelo choque principal. Visualiza-se, também, que o segundo choque reverte sua propagação para o centro da explosão e aumenta sua intensidade. Ao findar esse fenômeno, o segundo choque reverte novamente sua propagação, agora a partir da origem para o ambiente exterior, durante os tempos $t = 1,65$, $t = 1,8$ e $t = 1,9$, como pode ser visto na Figura 6.8.

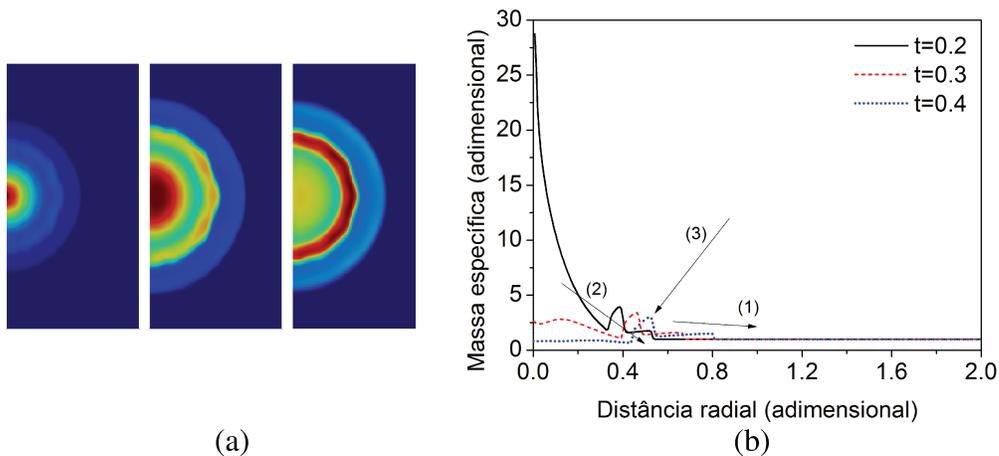


Figura 6.4: Perfis de massa específica de uma explosão física resultante da simulação numérica de uma esfera de vidro calculada utilizando o modelo PVF/WENO-SV nos tempos adimensionais de $t = 0.2$, $t = 0.3$ e $t = 0.4$. (a) Perfil bidimensional. (b) Perfil unidimensional. Os choques identificados na figura (b) são: (1) choque principal, (2) choque secundário e (3) contato descontínuo.

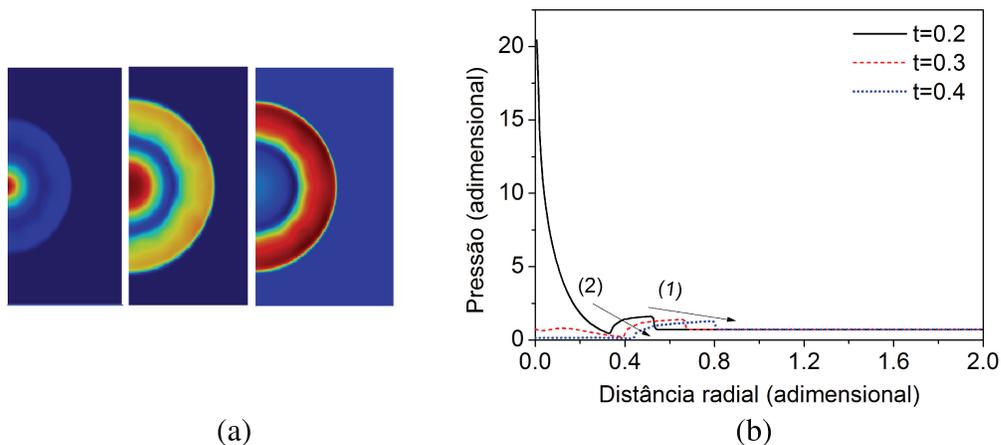


Figura 6.5: Perfis de pressão de uma explosão física resultante da simulação numérica de uma esfera de vidro calculada utilizando o modelo PVF/WENO-SV nos tempos adimensionais de $t = 0.2$, $t = 0.3$ e $t = 0.4$. (a) Perfil bidimensional. (b) Perfil unidimensional. Os choques identificados na figura (b) são: (1) choque principal e (2) choque secundário (próprio autor).

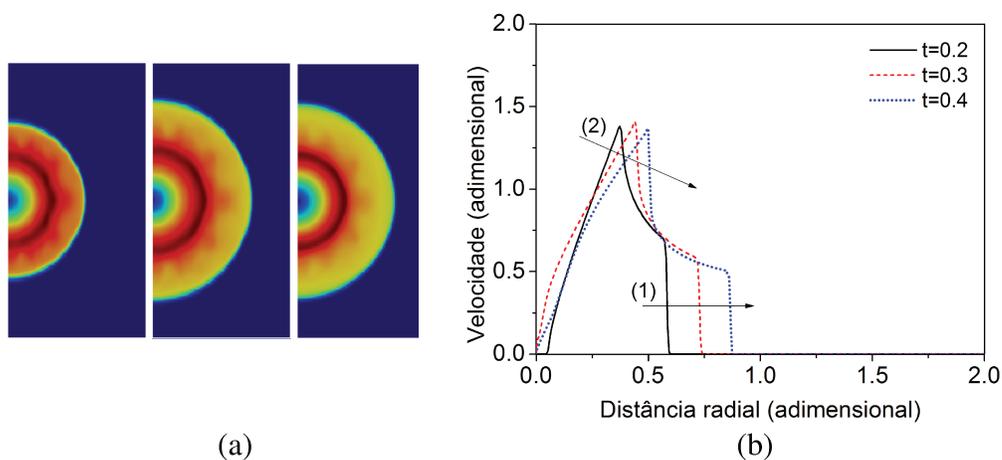


Figura 6.6: Perfis de velocidade de uma explosão física resultante da simulação numérica de uma esfera de vidro calculada utilizando o modelo PVF/WENO-SV nos tempos adimensionais de $t = 0.2$, $t = 0.3$ e $t = 0.4$. (a) Perfil bidimensional. (b) Perfil unidimensional. Os choques identificados na figura (b) são: (1) choque principal e (2) choque secundário (próprio autor).

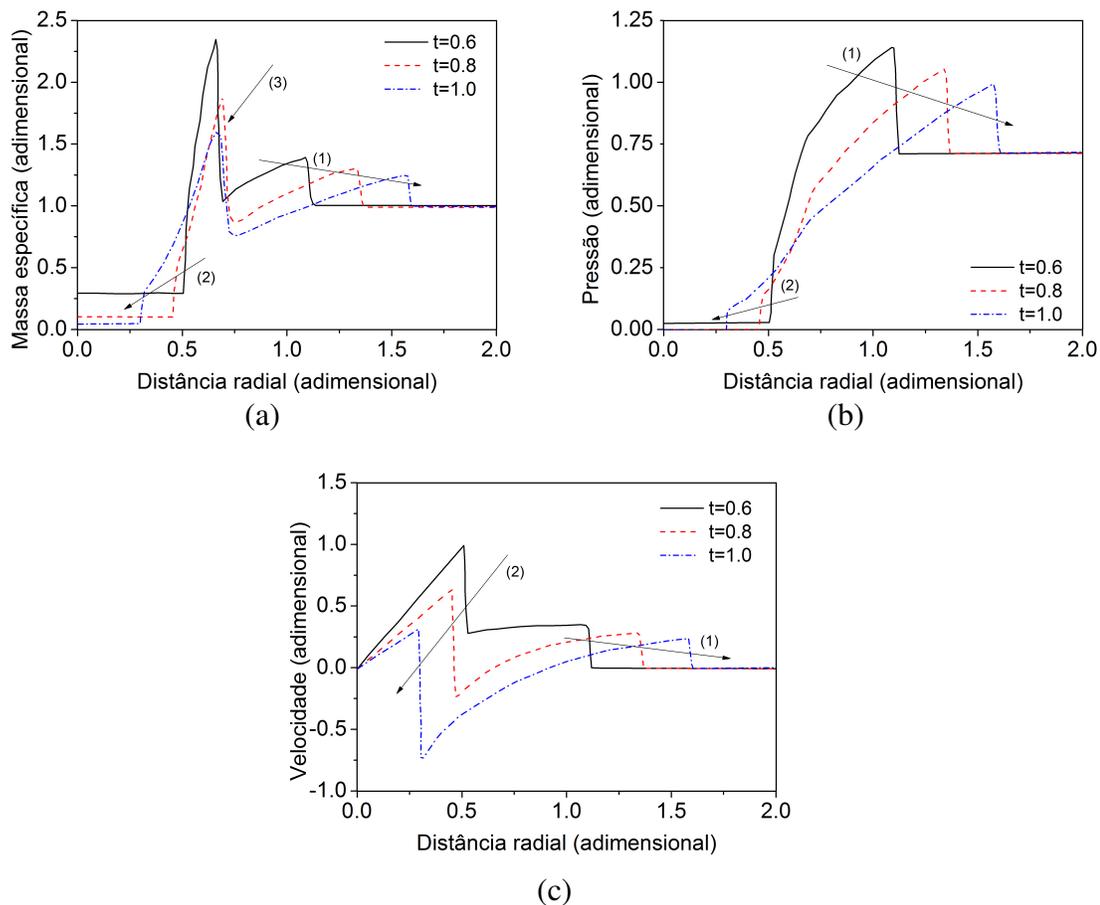


Figura 6.7: Perfis de massa específica (a), pressão (b) e velocidade (c) de uma explosão física resultante da simulação numérica de uma esfera de vidro calculada utilizando o modelo PVF/WENO-SV nos tempos adimensionais de $t = 0.6$, $t = 0.8$ e $t = 1.0$. Os choques identificados nas figuras são: (1) choque principal, (2) choque secundário e (3) contato descontínuo (próprio autor).

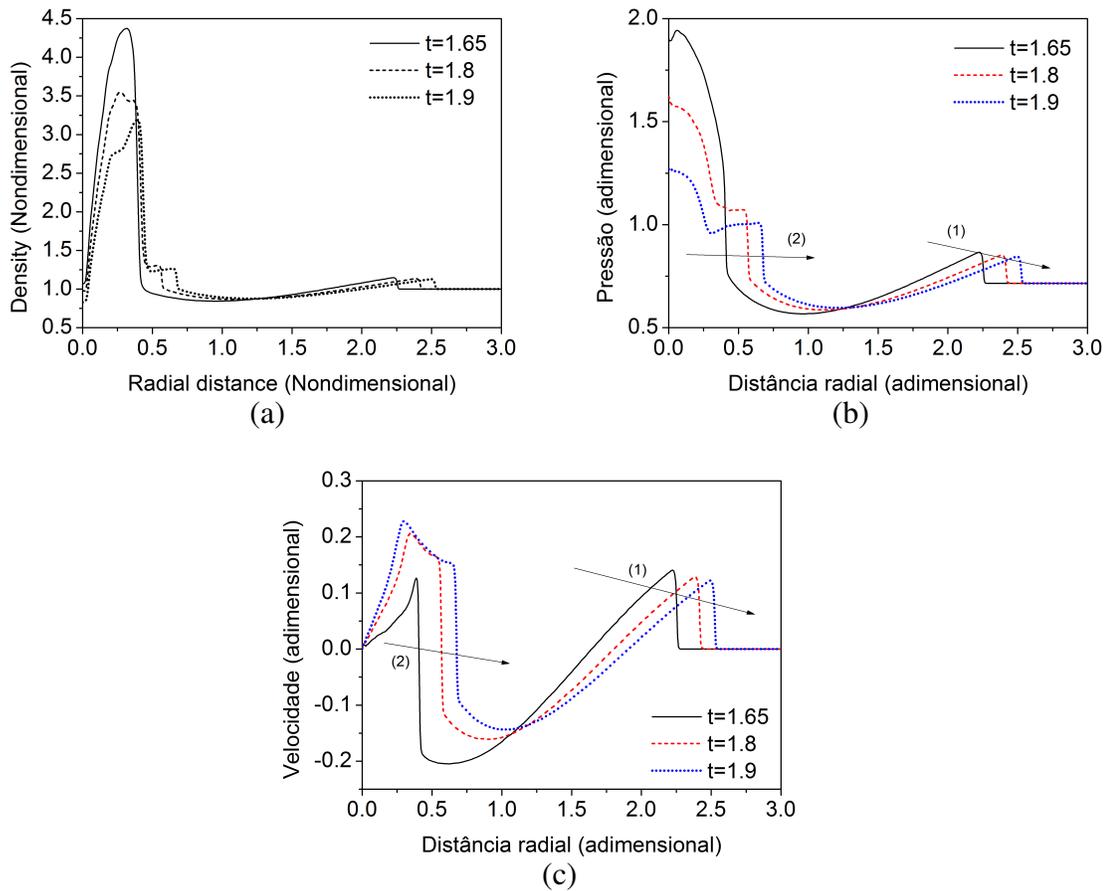


Figura 6.8: Perfis de massa específica (a), pressão (b) e velocidade (c) de uma explosão física resultante da simulação numérica de uma esfera de vidro calculada utilizando o modelo PVF/WENO-SV nos tempos adimensionais de $t = 1.65$, $t = 1.8$ e $t = 1.9$. Os choques identificados nas figuras são: (1) choque principal, (2) choque secundário e (3) contato descontínuo (próprio autor).

Os perfis de ondas capturados pelo modelo PVF/WENO-SV estão de acordo com os resultados relatados por Friedman (1961); Boyer (1960); Brode (1957). A Figura 6.9 mostra a comparação entre os dados experimentais, o cálculo analítico e os resultados numéricos do PVF/WENO-SV para a propagação da onda principal, segunda onda e onda de descontinuidade de contato. A uma boa concordância entre os dados experimentais ou analíticos com os resultados numéricos, independente da força de tensão utilizada para a determinação da condição inicial do problema de explosão da esfera de vidro investigado.

Uma comparação qualitativa entre a explosão física experimental e numérica da explosão

da esfera de vidro mostra a região de massa específica no centro da explosão e uma propagação de onda de choque radial através da região de baixa pressão, como na Figura 6.10.

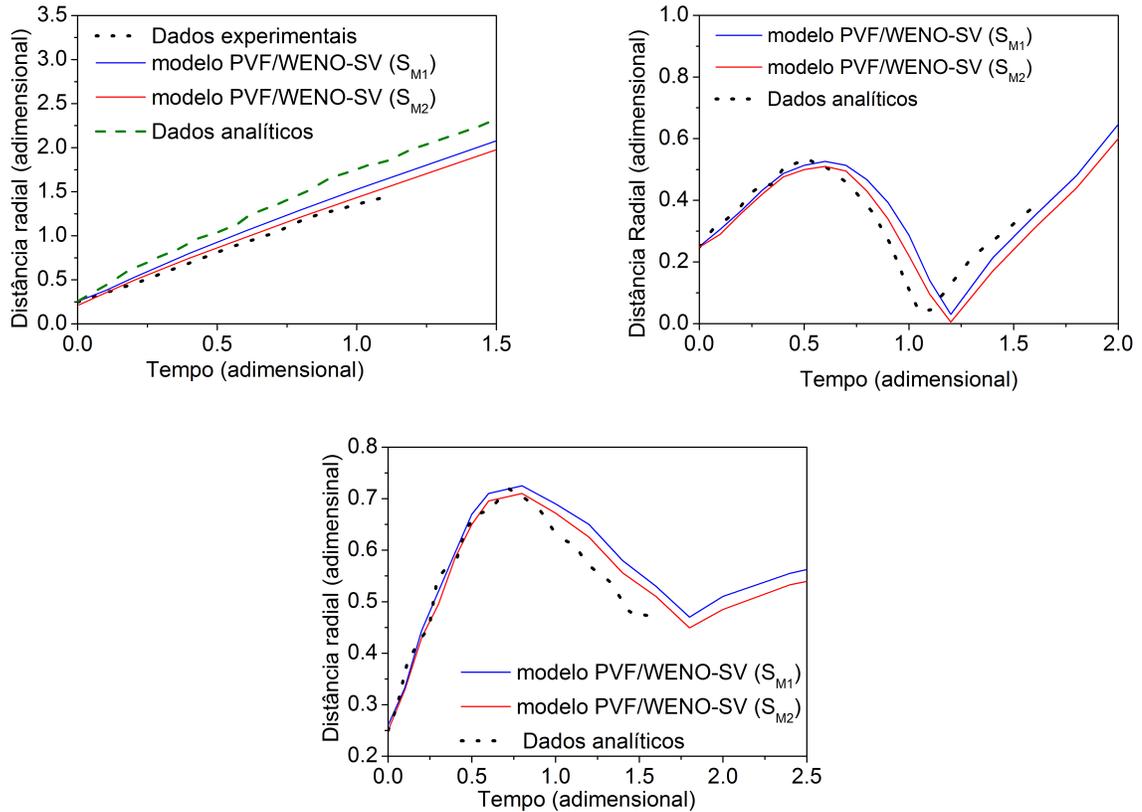


Figura 6.9: Comparação entre dados experimentais Boyer (1960), dados analíticos Brode (1957) e resultados do modelo PVF/WENO-SV para ondas originárias de uma explosão física de uma esfera de vidro. Comportamento das ondas de choque principal (a), choque secundário (b) e contato descontínuo (c) (próprio autor).

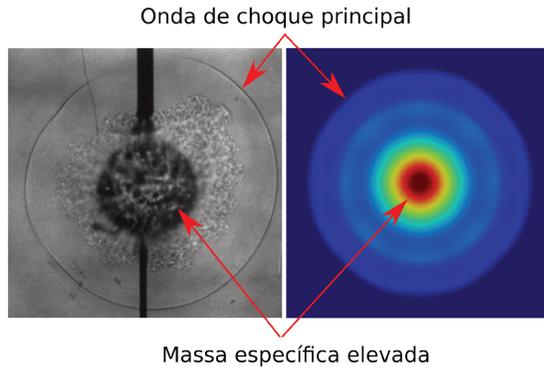


Figura 6.10: Comparação qualitativa entre a explosão física experimental e numérica de uma esfera de vidro. Resultado numérico do modelo PVF/WENO-SV e resultado experimental realizado por Boyer (1960) (próprio autor).

6.3 O modelo WENO-SV/pipelines

6.3.1 Princípio do acoplamento

Se a onda de choque gerada por uma explosão física deslocar-se, não mais em uma atmosfera aberta, mas através de um gasoduto, a perda de energia causada pelo atrito deve ser considerada. A explosão física de um vaso libera uma quantidade de energia calculada pelo esquema WENO-SV e essa energia diminui ao longo do espaço e do tempo. A redução da energia é ainda mais efetiva à medida que a onda de choque transporta-se ao longo de um gasoduto. A queda de energia de um escoamento gasoso ao longo de uma tubulação pode ser calculada pelo modelo de *Colebrook-White* modificado.

$$P_1^2 - P_2^2 = \frac{q L s T Z P_{st}^2}{176.85 D^5 T_{st}^2 \bar{U}}, \quad \bar{U} = -2 \log \left(\frac{\epsilon}{3.7 D} + \frac{2.825 L}{Re \sqrt{f}} \right) \quad (6.5)$$

onde q é a vazão gás, o comprimento do gasoduto é L , s é a densidade relativa, T é a temperatura absoluta, Z é o fator de compressibilidade do gás, o diâmetro do gasoduto é D . P_{st} é a pressão padrão, $1,01325 \cdot 10^5 Pa$ e T_{st} é a temperatura padrão, $288,15 K$. O fator de fricção, f , modelado pela modelo *Colebrook-White* é definido pela equação abaixo

$$\frac{1}{f} = -2\log\left(\frac{\epsilon}{3.7D} + \frac{2.5L}{Re\sqrt{f}}\right), \quad Re = \frac{\rho VD}{\mu}$$

onde ϵ é a rugosidade do material, μ é a viscosidade, ρ representa a densidade e Re é o número de Reynolds

6.3.2 Caso experimental

Skacel et al. (2013) realizaram um procedimento experimental de uma explosão física em um vaso acoplado a um gasoduto. O vaso foi preenchido com nitrogênio. A partir da Figura 6.11, verifica-se que o aparato experimental consistia em um vaso de alta pressão (local de explosão física) e um gasoduto de baixa pressão, ambos com diâmetro de 100 mm, separados por uma membrana de alumínio. O vaso de alta pressão atingiu 700 kPa quando a membrana se rompeu e as ondas de pressão liberadas deslocaram-se através do gasoduto. Sensores foram posicionados ao longo do gasoduto com as distâncias de 1,21; 3,34; 5,84; 8,34 e 10,84 m a partir da membrana de alumínio.

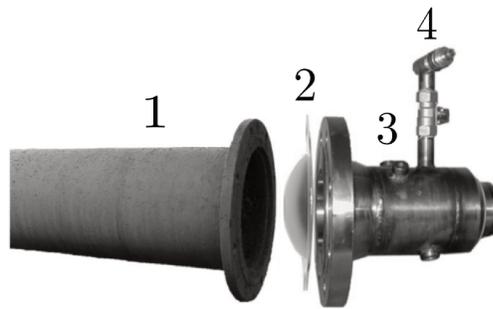


Figura 6.11: Aparato experimental para o estudo de ondas de choque ao longo de gasodutos. 1) gasoduto de baixa pressão, 2) membrana de alumínio, 3) vaso de alta pressão, 4) válvula. Adaptado de Skacel et al. (2013) (próprio autor).

Os parâmetros utilizados neste trabalho foram:

- diâmetro do gasoduto - $D = 100 \text{ mm}$;
- aceleração da gravidade - $g = 9,81 \text{ m/s}^2$;

- velocidade local do som - $V = 347 \text{ m/s}$;
- rugosidade do tubo de aço - $\epsilon = 45 \cdot 10^{-4}$.

O comprimento do tubo foi definido de acordo com as posições dos medidores no experimento, que foram de $L = 1, 21, 3, 34, 5, 84, 8, 34, 10, 84\text{m}$. O fator de fricção, f , foi calculado pela formulação de *Colebrook-White*, considerando o material do tubo de aço. Além disso, as propriedades do nitrogênio considerados foram $\rho = 1.1455\text{kg/m}^3$, $\mu = 17.78 \cdot 10^{-6}\text{Pa} \cdot \text{s}$, $Z = 1$ e $s = 0.9$.

A investigação experimental foi tratada numericamente pelo esquema WENO-SV acoplado a uma formulação de queda de pressão de gás *Modified Colebrook-White* (MCW). De fato, a energia total devido à explosão física, calculada pelo esquema WENO-SV, estava diminuindo à medida que a onda de choque avançava ao longo do tubo, que por sua vez era calculada pela formulação Modificada de Colebrook-White.

6.3.3 Experimento numérico

Nesta subseção, o pico de pressão na onda de choque que passa pelos dutos é realizado utilizando o acoplamento entre o esquema WENO-SV de alta ordem e a formulação MCW descrita anteriormente. A partir das ondas de choque geradas pela explosão física do vaso de alta pressão, capturou-se o perfil de pressão de acordo com as posições dos medidores no gasoduto, como pode ser visto na Figura 6.12. Do ponto de vista físico, tais perfis correspondem a uma explosão física em um campo aberto, cujo tratamento é exclusivamente pelo esquema WENO-SV.

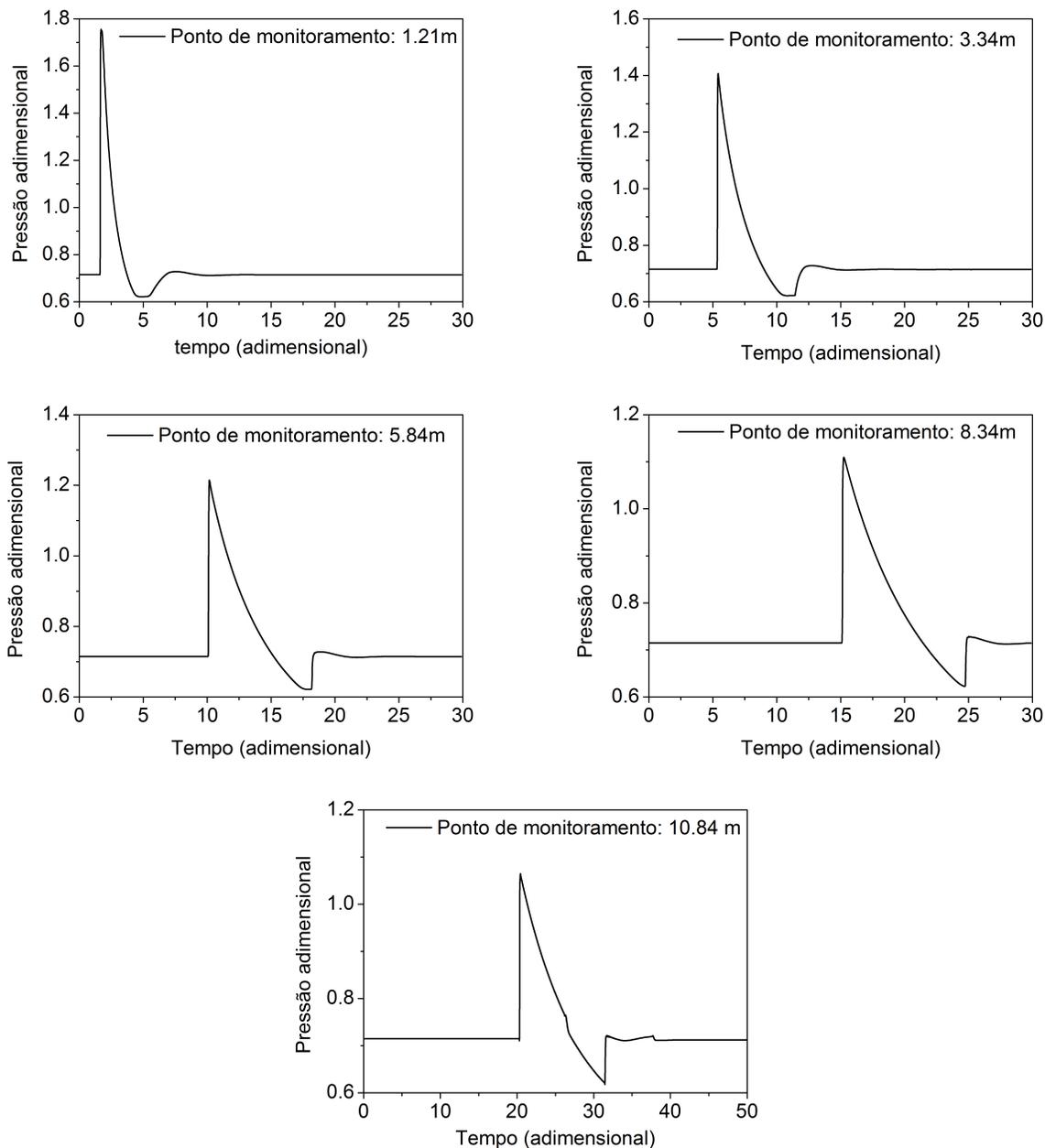


Figura 6.12: Perfil da pressão ao longo do tempo em cada ponto de monitoramento do gasoduto (próprio autor).

Uma vez considerado o modelo de *Colebrook-White* modificado, a perda de carga devido ao atrito entre o escoamento da onda de choque e a parede do tubo é incorporada

automaticamente nos perfis de explosão. Como consequência, a energia total da onda de choque diminui de acordo com o modelo *Colebrook-White* modificado, com a distância e o tempo. O pico de pressão foi computado numericamente com boa concordância com os dados experimentais, de acordo com Skacel et al. (2013), somente após a consideração do modelo *Colebrook-White* modificado ao longo do tubo. É possível observar claramente o perfil do pico de pressão ao longo da distância do gasoduto, na Figura 6.13. Verifica-se que o modelo WENO-SV/pipelines torna a queda do pico de pressão ao longo de gasodutos mais abrupta, efetivamente, e aproxima-se dos dados experimentais.

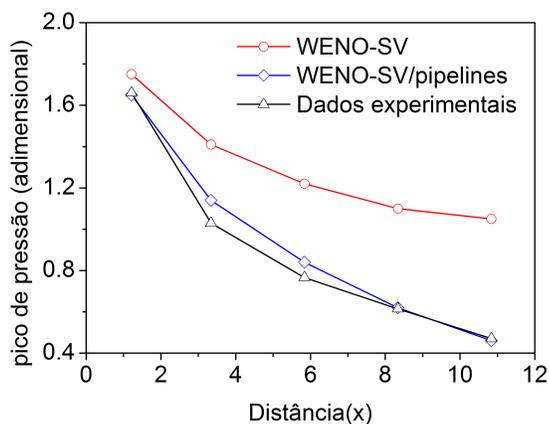


Figura 6.13: Pico de pressão ao longo da posição dos pontos de monitoramento no gasoduto. Comparação entre os dados experimentais, o esquema WENO-SV e o modelo WENO-SV/pipelines (próprio autor).

Capítulo 7

Conclusões e Trabalhos Futuros

7.1 Conclusões e Contribuições

Este trabalho apresenta um estudo sobre o esquema essencialmente Não-Oscilatório Ponderado (do inglês, *Weighted Essentially Non-Oscillatory* - WENO) e o desenvolvimento, validação e aplicação de um esquema WENO de diferenças finitas baseado no número de Mach. A importância destes esquemas surge da necessidade de se capturar fenômenos do escoamento que, de outra forma, seriam dissipados por esquemas de baixa ordem de precisão.

Dentre várias estratégias para tornar o método WENO menos dissipativo e mais preciso para capturar choques e descontinuidades, identificou-se que os esquemas WENO-Z e o WENO-Z+ possuem precisão e robustez elevados e custo computacional semelhante ao esquema clássico WENO-JS. Para tanto, o esquema WENO-Z trouxe a ideia do indicador de suavidade global para calcular os pesos não-normalizados, fazendo com que os sub-estêncis menos suaves tivessem maior peso. Já o esquema WENO-Z+ aumentou ainda mais o peso dos sub-estêncis menos suaves ao adicionar um parâmetro de ajuste, $\lambda \propto \Delta x$, para controlar o valor da razão entre os indicadores de suavidade local e global. Demonstrou-se que tal parâmetro de ajuste é dependente da malha computacional, e pode tornar o esquema mais dissipativo, principalmente em malhas não regulares.

Sendo assim, um novo parâmetro de ajuste dependente do campo de escoamento, como

é o número Mach, $\lambda \propto M$, mostrou-se uma alternativa relevante para substituir $\lambda \propto \Delta x$, surgindo o esquema WENO-SV. Essa nova abordagem tornou o esquema WENO-SV exclusivamente dependente do problema de escoamento, e não mais da malha computacional, como é considerado no WENO-Z+. Testes numéricos da onda de choque de entropia de *Shu-Osher* e *Titarev-Toro* foram considerados com o intuito de avaliar o melhor termo para $\lambda \propto M$. Os valores $\lambda = M^{0.25}$, $\lambda = M^{0.5}$ e $\lambda = M$ demonstraram bons resultados e o esquema WENO-SV permaneceu estável. O parâmetro de ajuste, entretanto, foi definido como sendo $\lambda = M^{0.5}$, valor intermediário. A escolha por $\lambda = M^{0.5}$ aumentou o peso do sub-estêncil menos suave, principalmente em regiões contendo choques, altos gradientes e descontinuidades.

Todos os experimentos numéricos unidimensionais realizados neste trabalho demonstraram resultados menos dissipativos do esquema WENO-SV em relação aos esquemas WENO-JS e WENO-Z+. Entretanto, nos casos bidimensionais, mesmo com a aparente captura de mais detalhes do escoamento, observou-se um comportamento não simétrico nos resultados do esquema WENO-SV. Conjectura-se que o resultado verificado surge devido à pouca dissipação numérica.

O esquema WENO-SV também foi utilizado para simular problemas de engenharia, como escoamentos em bocais completamente subsônicos, subsônicos com choques internos, explosões físicas em ambientes abertos e gasodutos. A modelagem proposta para esses casos baseou-se no submodelo das equações de Euler, calculadas pela versão de diferenças finitas do esquema WENO-SV. O termo fonte do submodelo também foi reconstruído com base no esquema WENO-SV. A modelagem desenvolvida garantiu resultados satisfatórios para ambos os estudos: escoamentos em bocais e explosões físicas.

Para a investigação do escoamento em bocais, os esquemas WENO-JS, WENO-Z+, WENO-SV e a técnica numérica tradicional *MacCormack* foram utilizados. Em geral, para os casos de escoamento em bocais, todos os esquemas WENO forneceram resultados bastante semelhantes, enquanto a técnica numérica *MacCormack* gerou oscilações espúrias. No caso específico de escoamento em um bocal completamente subsônico, o esquema WENO-SV alcançou a solução de estado estacionário mais rapidamente que a técnica numérica *MacCormack*; no entanto, ambos esquemas numéricos tiveram resultados muito precisos. Já no caso de escoamento em um bocal com choques internos, o esquema WENO-SV demonstrou uma melhor resolução, enquanto que a técnica numérica *MacCormack* desviou-

se do perfil de escoamento do bocal esperado e, novamente, oscilações espúrias surgiram. Uma vez que o método WENO é dotado de indicador de suavidade, não há necessidade da adição de viscosidade artificial. Essa é uma questão importante a ser destacada, uma vez que pesquisas recentes sobre escoamentos em bocais foram desenvolvidas utilizando técnicas numéricas tradicionais, nas quais houve a necessidade de adição explícita viscosidade artificial.

O método *Strong stability preserving methods* para levar a solução de escoamento de bocal a tempo também foi investigado durante o escoamento em bocais. A partir da literatura, é demonstrado que o esquema SSP-RK3 de terceira ordem associado ao esquema WENO é a abordagem mais indicada e estável para avançar um problema de escoamento ao longo do tempo. No entanto, verificou-se que o integrador de tempo SSP-RK2 demonstrou ser estável, alcançando exatamente os mesmos resultados daqueles observados utilizando o método SSP-RK3. Entretanto, o método SSP-RK2 tornou a solução muito mais rápida que o SSP-RK3 para a investigação do escoamento do bocal.

O esquema WENO-SV foi acoplado a modelos físicos já existentes para que, alternativamente, possibilitasse o estudo de explosões físicas de vasos esféricos e de escoamentos de ondas de choque ao longo de tubulações. O acoplamento proposto entre o modelo de Falha de Vasos de Pressão (do inglês, *Pressure Vessel Failure model* - modelo PVF) e o esquema WENO-SV (definido como modelo PVF/WENO-SV) proporcionou lidar com explosões físicas de vasos esféricos a partir do conhecimento das seguintes características físicas do vaso (tanque): dimensões e resistência à tração. O modelo PVF/WENO-SV simulou uma explosão física de uma esfera de vidro, também realizado experimentalmente. O modelo capturou a propagação das ondas de choque com valores bem próximos daqueles realizados pelo experimento e previstos com equações analíticas. Já o acoplamento proposto entre o modelo *Colebrook-White* modificado e o esquema WENO-SV (definido como WENO-SV/pipelines) possibilitou calcular o pico de pressão de ondas de choque ao longo de gasodutos. Assim, enquanto o modelo *Colebrook-White* modificado calcula a queda de pressão de um escoamento de gás em gasodutos, o esquema WENO-SV captura as ondas de choques. Uma explosão de gás em gasodutos realizada por um estudo experimental foi reproduzida numericamente pelo modelo proposto, WENO-SV/pipelines. O perfil de pressão foi capturado sem oscilações espúrias. Os dados experimentais e o modelo WENO-

SV/pipelines mostraram boa concordância em um intervalo de $3m$ a $10m$ ao longo do comprimento do gasodutos. Ambos os acoplamentos propostos nesta tese podem ser usados para investigar a análise de consequências na indústria de processo. Também podem ser usados como ponto de partida para desenvolver algoritmos para estudar explosões mais complexas contendo combustão, detonação e similares em espaços confinados ou parcialmente confinados.

Finalmente, acredita-se que este trabalho representa um grande avanço na capacidade de simular escoamentos não viscosos utilizando métodos de alta ordem de precisão. Acredita-se também que a teoria descrita neste texto é de grande valia para o grupo de CFD do laboratório L4R1S4 e deve ser usado em trabalhos futuros. As simulações discutidas neste trabalho também representam material de grande importância para a análise dos métodos WENO de alta ordem de precisão implementados em um contexto de malhas estruturadas.

7.2 Trabalhos futuros

- Ao longo deste trabalho, foram apresentadas simulações numéricas de problemas envolvendo grandes gradientes e descontinuidades. A partir da análise das simulações, foi possível verificar o comportamento menos dissipativo no esquema WENO-SV e perfis de escoamento ainda não observados por métodos WENO com a mesma ordem de precisão utilizada neste trabalho (quinta ordem de precisão). Uma vez que ainda há vários casos numéricos (eg. outros problemas de *Riemman*) no qual o padrão de escoamento ainda não foi analisado a partir do esquema WENO-SV, sugere-se como trabalho futuro fazê-los.
- Neste trabalho, implementaram-se condições de contorno em problemas de bocais utilizando como princípio a informação de entrada/saída subsônica ou sônica. Assim sendo, consideraram-se os valores de pressão, velocidade, massa específica e temperatura diretamente nas fronteiras dos bocais. Entretanto, uma outra possibilidade seria a implementação da condição de contorno do tipo *Inverse Lax-Wendroff* (ILW). Uma sugestão para trabalhos futuro seria comparar essas duas metodologias de implementação de condição de contorno e avaliar o impacto na ordem efetiva e na

precisão do esquema WENO-SV.

- Como pode-se observar ao logo deste trabalho, o esquema WENO-SV trouxe uma nova ideia para o cálculo dos pesos não-normalizados, ao modificar o parâmetro de ajuste do esquema WENO-Z+. Isto é, aumentou-se o peso dos sub-estênceis menos suave a partir da consideração do parâmetro de ajuste ser proporcional ao número de Mach do escoamento. Entretanto, Acker et al. (2016) já alertou que o aumento expressivo nos sub-estênceis menos suaves pode tornar o esquema instável. Tal como o esquema WENO-SV foi desenvolvido, problemas de escoamento envolvendo números de Mach extremamente elevados não foram objetos de investigação neste trabalho, e poderiam ser investigados e trazer estudos sobre sua estabilidade em escoamentos aplicados a foguetes, por exemplo.

Bibliografia

- Abbasi, T. and Abbasi, S. (2007). The boiling liquid expanding vapour explosion (BLEVE): mechanism, consequence assessment, management. *Journal of Hazardous Materials*, 141:489–519. 2.4.3
- Abbasi, T. A., Pasman, H. J., and Abssasi, S. (2010). A scheme for the classification of explosions in the chemical process industry. *Journal of Hazardous Materials*, 174:270–280. (document), 2.4.3, 2.4.3, 2.4.3, 2.15
- Acker, F., Borges, R. B. R., and Costa, B. (2016). An improved WENO-Z scheme. *J. Comp. Physics*, 313:726–753. (document), 1.1, 2.3.1, 3, 4.1, 7.2
- Anderson, J. D. (1995). Computational Fluid Dynamics, the basics with application. *McGraw Hill*, 1(1-1):1–563. (document), 2.1, 2.2, 2.9, 2.10, 2.11, 2.12, 3, 3
- Arandiga, A., Baeza, A., Belda, A. M., and Mulet, P. (2011). Analysis of weno schemes for full and global accuracy. *J. Numer. Anal.*, 49(2):893–915. 2.3.1
- Blazek, J. (2015). Chapter 8 - boundary conditions. In Blazek, J., editor, *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications (Third Edition)*, pages 253 – 281. Butterworth-Heinemann, Oxford, third edition edition. 2.3.2.3, 2.3.2.4
- Board, T., Griebel, M., Keyes, D., Nieminen, R., Roose, D., and Schlink, T. (2016). *Spectral and High Order Methods for Partial Differential Equations - ICOSAHOM*. Springer. 3
- Borges, R., Carmona, M., Costa, B., and Don, W. S. (2008). An improved weighted essentially non-oscillatory scheme for hyperbolic conservation laws. *J. Comp. Physics*, 227:3191–3211. (document), 1.1, 2.1, 2.3.1, 3

- Borges, R. B. R. (2017). Recent Results on the Improved WENO-Z+ Scheme. *ICOSAH*, 1:547–559. 3, 3
- Boyer, D. W. (1960). An experimental study of the explosion generated by a pressurized sphere. *Journal of Fluid Mechanics*, 3:401–429. (document), 6.2.2, 6.1, 6.2.3, 6.2.3, 6.9, 6.10
- Brode, H. L. (1957). Theoretical solutions of spherical shock tube blasts. *The RAND Corporation*, 3. (document), 6.2.2, 6.2.3, 6.9
- CCPS (1999). Centre for Chemical Process Safety, Guidelines for Consequence Analysis of Chemical Releases. *The American Institute of Chemical Engineering*, 1:131–140. (document), 2.4.3, 2.13, 2.14
- Courant, R., Friedrichs, K., and Lewy, H. (1967). On the partial difference equations of mathematical physics. *IBM Journal*, 11(1):215–234. 2.3.4
- Crowl, D. and Louvar, J. (2002). Chemical process safety. fundamentals with applications. *Prentice Hall PTR*, 1:1. 6.2.1
- Ekaterinaris, J. A. (2005). High-order accurate, low numerical diffusion methods for aerodynamics. *Progress in Aerospace Sciences*, 41(3-4):192–300. 3
- Feng, H., Hu, F., and Wang, R. (2012). A new mapped weighted essentially non-oscillatory scheme. *Journal of Scientific Computing*, 51(2):449–473. 3
- Feng, H., Huang, C., and Wang, R. (2014). An improved mapped weighted essentially non-oscillatory scheme. *Applied Mathematics and Computation*, 232:453–468. 3
- Friedman, M. P. (1961). A simplified analysis of spherical and cylindrical blast waves. *Journal of Fluid Mechanics*, 1:1–15. (document), 2.4.3, 2.17, 6.2.3
- Harten, A., Engquist, B., Osher, S., and Chakravarthy, S. R. (1987). Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes III. *Journal of Computational Physics*, 131:231–303. 2.3.1, 3, 3

- Henrick, A. K., Aslam, T. D., and Powers, J. M. (2005). Mapped weighted essentially non-oscillatory schemes: Achieving optimal order near critical points. *Journal of Computational Physics*, 207(2):542–567. 1.1, 3
- Jiang, G. S. and Shu, C. W. (1996). Efficient implementation of weighted ENO schemes. *Journal of Computational Physics*, 126(126):202–228. 1.1, 2.3.1, 3
- Khan, F. I. (1999). Major accidents in process industries and an analysis of causes and consequences. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 12:361–378. 2.4.3
- Lees, F. (1996). Hazard Identification, Assessment, and Control. *Loss Prevention in the Process Industries*, 1-3:131–140. 2.4.3, 2.4.3
- Leveque, R. J. (1992). Numerical methods for conservation law. *Birkhauser*, (2):1–208. 2.2, 2.2, 3, 3
- Lewis, D. J. (1980). Unconfined vapor clouds explosions—historical perspective and predictive method based on incident record. *Progress in Energy and Combustion Science*, 6:1–151. 2.4.3
- Li, X., Zhou, R., Zhou, W., and Yao, X. (2017). Flow Characteristic of Highly Underexpanded Jets from Various Nozzle Geometries. *Applied Thermal Engineering*, 125(1):240–253. 3
- Liu, X.-D., Osher, S., and Chan, T. (1994). Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes. *Journal of Computational Physics*, 115:200–212. 3
- Mannan, S. (2005). Hazard Identification, Assessment, and Control. *Loss Prevention in the Process Industries*, 1-3:131–140. 2.4.3
- Neumann, J. V. and Richtmyer, R. D. (1950). A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. *J. Appl. Phys.*, 21:232–237. 3
- Raman, S. K. and Kim, H. D. (2018). Solutions of Supercritical CO₂ Flow Through a Convergent-Divergent Nozzle with Real Gas Effects. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 116(1):127–135. 3

- Sankesh, D., Petersen, P., and Lappas, P. (2018). Flow Characteristics of Natural Gas from an Outward-opening Nozzle for Direct Injection Engines. *Fuel*, 218(1):188–202. 3
- Shi, J., Zhang, Y. T., and Shu, C. W. (2003). Resolution of high order weno schemes for complicated flow structures. *Journal of Computational Physics*, 186(2):690 – 696. (document), 4.2.4, 4.14
- Shu, C. (1998). Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws, in: Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations. *Lecture Notes in Mathematics*, 1697:325–432. 3, 3
- Shu, C.-W. and Osher, S. (1988). Efficient implementation of Essentially Non-oscillatory Shock-Capturing schemes. *J. Comp. Physics.*, 77:439–471. 3
- Shu, C.-W. and Osher, S. (1989). Efficient implementation of Essentially Non-oscillatory shock-capturing schemes II. *J. Comp. Physics.*, 83:32–78. 3
- Skacel, R., Janovsky, B., Dostal, L., and Svihovsky, J. (2013). Small-scale physical explosions in shock tubes in comparison with condensed high explosive detonations. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 26:1590–1596. (document), 6.3.2, 6.11, 6.3.3
- Strikwerda, J. C. (2004). Finite difference scheme and partial differential equation. *Society for Industrial and Applied Mathematics*, 1:1–448. (document), 3, 3, 3.7, 3.8
- Su, X., Sasaki, D., and Nakahash, K. (2011). Efficient implementation of WENO Scheme on structured meshes. *Computational Fluid Dynamics Symposium*, 1(1):1–9. 3
- Sun, B., Li, S., Su, W., Li, J., and Wang, N. (2016). Effects of Gas Temperature on Nozzle Damping Experiments on Cold flow Rocket Motors. *Applied Thermal Engineering*, 126(1):18–26. 3
- Toro, E. (1999). Riemman solvers and numerical methods for fluid dynamics. *Springer*, 2:1–605. 2.2, 2.2, 3
- Versteeg, H. K. e Malalasekera, W. (2007). An Introductionto ComputationalFluid Dynamics, the finite volume method. *Prentice Hall*, 1:1–517. (document), 1.1, 1.1, 2.1

- Wang, Z. (2014). High-order computational fluid dynamics tools for aircraft design . *Philos Trans A Math Phys Eng Sci*, 372:1–18. (document), 1.1, 1.2
- Wang, Z. J., Fidkowski, K., Bassi, F., Caraeni, D., Cary, A., Deconinck, H., Hartmann, R., Hillewaert, K., Huynh, H. T., Kroll, N., May, G., Persson, P., Leer, B. V., and Visbal, M. (2012). High-Order CFD Methods: Current Status and Perspective. *International Journal in Numerical Methods in Fluids*, pages 1–42. 1.1, 3
- Wesseling (2009). Principles of computational fluid dynamics. *Springer Science e Business*,, 1. 3
- Xing, Y. and Shu, C.-W. (2006). High-order Well-balanced finite difference WENO schemes for a class of hyperbolic systems with source terms. *Journal of Scientific Computing*, 27(1-3):477–494. 3
- Zhang, G., Kim, H. D., and Jin, Y. Z. (2017). Solutions of Supercritical CO₂ Flow Through a Convergent-Divergent Nozzle with Real Gas Effects. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, 1(1):1–8. 3

Apêndice A - Configuração de experimentos numéricos

Os experimentos numéricos baseados em problemas de Riemann foram utilizados nesta tese. Um problema de *Riemann* é um problema de valor inicial para as equações de movimento (eg. equações de conservação de *Euler*) em que os dados iniciais são descontínuos. *Riemann* estudou o problema de um tubo com dois gases, desprezando o efeito das paredes do tubo, devido à baixa viscosidade dos gases. Este tipo de problema de valor inicial ficou então conhecido como Problema de *Riemann*. Explicitamente, chama-se Problema de *Riemann* associado à Lei de Conservação ao seguinte problema de valor inicial:

$$U(x, t = 0) = \begin{cases} U_L & \text{se } x < 0 \\ U_R & \text{se } x > 0 \end{cases}$$

isto é, o estado inicial é constante para todo x negativo e constante para todo x positivo, mas difere entre esquerda e direita. Para problemas hidrodinâmicos, por exemplo, pode-se considerar que este é um problema hidrodinâmico unidimensional em que o gás com uma temperatura e densidade está localizado à esquerda de uma parede móvel e o gás com outra temperatura e densidade à direita dessa parede. No tempo $t = 0$, a parede é instantaneamente removida e o escoamento ocorre.

A.1 Casos unidimensionais

A.1.1 Problema de *Riemman de Lax*

A condição inicial do problema de *Riemman de Lax* está descrita abaixo:

$$(\rho_0, U_0, P_0) = \begin{cases} 0.445, & 0.698, & 0.3528 & -5 \leq x < 0 \\ 0.500, & 0.000, & 0.5710 & 0 \leq x < 5 \end{cases} \quad (7.1)$$

O comprimento do tubo foi definido em uma faixa de $-5 \leq x \leq 5$. A solução de referência é numericamente simulada com o número de nós na malha de $N = 8000$ utilizando o esquema WENO-JS. O teste numérico foi feito com o número de nós na malha de $N = 300$ e $CFL = 0.5$. A condição de contorno fixa foi aplicada para este problema. O tempo final de simulação para este problema foi $t = 1.3s$.

A.1.2 Problema do choque de entropia de *Titarev-Toro*

A condição inicial do problema de choque de entropia de *Titarev-Toro* é escrita como:

$$(\rho_0, u_0, p_0) = \begin{cases} (1.515695, & 0.523346, & 1.805000) & x < -4.5, \\ (1 + \sin(10\pi x)/10, & 0, & 1) & x \geq 4.5 \end{cases} \quad (7.2)$$

A solução de referência foi numericamente simulada com o número de nós na malha de $N = 8000$ utilizando o esquema WENO-JS. O tempo final simulação para este problema foi de $t = 5s$. A condição de contorno periódica foi utilizada.

A.1.3 Problema do choque de entropia de *Shu-Osher*

A condição inicial do problema de choque de entropia de *Shu-Osher* é:

$$(\rho, u_0, p_0) = \begin{cases} (27/7, & 4\sqrt{35}/9, & 31./3) & -5 \leq x < -4, \\ (1 + 0.2 \sin(kx), & 0, & 1) & -4 \leq x < 5 \end{cases} \quad (7.3)$$

onde o número de onda é dado por $k = 5$. A solução de referência é numericamente simulada com o número de nós na malha de $N = 8000$ utilizando o esquema WENO-JS. O tempo final de simulação foi de 1.8s. A condição de contorno periódica foi utilizada.

A.2 Casos bidimensionais

A.2.1 Problema do choque de entropia de *Shu-Osher*

Neste problema, o choque forma um ângulo $\theta \in (0, \pi/6)$ sobre o domínio de teste de $[-5, 5] \times [-1, 1]$. A condição inicial é dada:

$$(\rho_0, u_0, v_0, p_0) = \begin{cases} (27/7, 4\sqrt{35}/9, 0, 31/3) & x < -4, \\ (1 + \sin(2\pi x \cos \theta + 2\pi y \sin \theta)/5, 0, 0, 1) & x \geq 4 \end{cases} \quad (7.4)$$

Condição de contorno fixa foi implementada nas fronteiras da direção x , enquanto que a condição de contorno periódica foi considerada na direção y .

A.2.2 Problema de *Riemman* tipo 1

A condição inicial é dada pela condição abaixo:

$$(\rho_0, u_0, v_0, p_0) = \begin{cases} (1.5000, 0.000, 0.000, 1.500) & x > 0.7, y > 0.7 \\ (0.5323, 1.206, 0.000, 0.300) & x < 0.7, y > 0.7 \\ (0.1380, 1.206, 1.206, 0.029) & x < 0.7, y < 0.7 \\ (0.1380, 1.206, 1.206, 0.029) & x > 0.7, y < 0.7 \end{cases} \quad (7.5)$$

O domínio computacional foi de $[0, 1] \times [0, 1]$ e a condição de contorno fixa foi utilizada em todas as fronteiras da direção x e y . O tempo $t = 0.6s$ e a malha uniforme de $\Delta x = \Delta y = 1/1500$ foram consideradas.

A.2.3 Problema de Riemman tipo 2

A condição inicial é dada pela condição abaixo:

$$(\rho_0, u_0, v_0, p_0) = \begin{cases} (1.00, 0.75, -0.50, 1.00) & x > 0.5, y > 0.50, \\ (2.00, 0.75, 0.50, 1.00) & x < 0.5, y > 0.5 \\ (1.00, -0.75, 0.50, 1.00) & x < 0.5, y < 0.5 \\ (3.00, -0.75, -0.50, 1.00) & x > 0.5, y < 0.5 \end{cases} \quad (7.6)$$

O domínio computacional foi de $[0, 1] \times [0, 1]$ e a condição de contorno fixa foi utilizada em todas as fronteiras da direção x e y . O tempo de $t = 0.6s$ e a malha uniforme de $\Delta x = \Delta y = 1/1500$ foram consideradas.

A.2.4 Instabilidade de Rayleigh-Taylor

Um problema envolvendo um fluido mais leve que é acelerado em direção ao fluido mais pesado é conhecido como instabilidade de *Rayleigh-Taylor*. A instabilidade de *Rayleigh-Taylor* é uma instabilidade impulsionada pela flutuabilidade e ocorre em vários tipos de escoamento de fluidos que contêm diferentes massas moleculares na presença de aceleração, como a gravidade. A condição inicial para um problema de instabilidade de *Rayleigh-Taylor* é dada por:

$$(\rho_0, u_0, v_0, p_0) = \begin{cases} (2, 0, -0.025c \cos(8\pi x), 2y + 1) & x \leq 0.5, \\ (1, 0, -0.025c \cos(8\pi x), y + 3/2) & x > 0.5, \end{cases} \quad (7.7)$$

onde $c = \sqrt{\frac{\gamma P}{\rho}}$ é a velocidade do som e $\gamma = 1.4$. O domínio computacional utilizado foi $[0, 0.25] \times [0, 1]$. A condição de contorno reflexiva foi implementada nos contornos da direção y . Nos contornos da direção x , localizado no topo do domínio, utilizou-se $(\rho_0, u_0, v_0, p_0) = (1, 0, 0, 2.5)$, enquanto que na base definiu-se $(\rho_0, u_0, v_0, p_0) = (2, 0, 0, 1)$. Um termo fonte para este problema foi escrito como sendo $s(Q) = (0, 0, \rho, \rho v_0)$.

A.2.5 Jato sônico

Um problema envolvendo vazamento sônico de um gás ideal foi implementado em um domínio computacional de $[0, 0.6] \times [-0.3, 0.3]$. A velocidade do vazamento no orifício de $0.05m$ foi de $340m/s$.

Apêndice B. Propriedades adimensionais

As explosões físicas foram realizadas numericamente utilizando valores adimensionais envolvidas no problema, tais como as propriedades de conservação, tempo e espaço. Essas propriedades tornam-se adimensionais utilizando as seguintes relações:

$$\rho' = \rho/\rho_0, \quad p' = P/\rho_0 c_0^2, \quad u' = u/c_0. \quad (7.8)$$

onde c_0 diz respeito à velocidade do som, que pode ser calculada a partir de $c_0^2 = \gamma(P_0/\rho_0)$. As variáveis independentes, como tempo, t , e distância radial, r_0 , tornam-se adimensionais utilizando as relações abaixo:

$$t' = t/(4r_0/c_0) \quad (7.9)$$

$$r'_0 = r/4r_0 \quad (7.10)$$

Apêndice C. Linhas de Código

Neste apêndice, apresentam-se algumas linhas de codificação simplificada em fortran 90 para solução da equação de Euler unidimensional pelo método das variáveis características, utilizando o esquema WENO de diferenças finitas. Uma CPU com processadores da *intel* core i7 com 8 núcleos foi utilizada para realizar as simulações.

No caso a seguir, a condição inicial do problema de *Riemman de Lax* é implementada. Após computar uma malha estruturada, $x(1 : nx)$, os valores das variáveis primitivas (massa específica, velocidade e pressão) são definidos e, logo em seguida, calculam-se as variáveis conservadas (ou fluxos de massa, momento e energia).

```
subroutine init_cond

DO i=1, nx + 1
  IF (x(i) > 0.000) THEN
    r0 = 0.500
    u0 = 0.000
    p0 = 0.571
  ELSE
    r0 = 0.445
    u0 = 0.698
    p0 = 3.528
  END IF

  ro(i) = r0
```

```

rovx(i) = r0*u0
roe(i) = p0/(gamma-1) + (r0*u0**2)/2
END DO

```

Os exemplos de implementação das condições de contorno fixa e periódica são apresentados a seguir. Os novos valores das variáveis conservadas (ou fluxos de massa, momento e energia) são definidos nas fronteiras do domínio da malha original. O *loop* em $i=4, nx+4$ representa os valores das variáveis conservadas nos pontos da malha original, $x(1 : nx)$; nos *loops* restantes, calculam-se os pontos fictícios das condições de contorno fixa e periódica, respectivamente. Considerando os pontos fictícios na malha, tem-se $x(1 : nx + 7)$.

```

subroutine fixed boundary condition

```

```

do i=1,3
gro(i) = ro(1)
grovx(i) = rovx(1)
groe(i) = roe(1)
end do

```

```

do i = 4,nx+4
gro(i) = ro(i-3)
grovx(i) = rovx(i-3)
groe(i) = roe(i-3)
end do

```

```

do i = nx+5,nx+7
gro(i) = ro(nx+1)
grovx(i) = rovx(nx+1)
groe(i) = roe(nx+1)
end do

```

```
subroutine periodic boundary condition
```

```
gro(1) = ro(ny-2)
```

```
gro(2) = ro(ny-1)
```

```
gro(3) = ro(ny)
```

```
grovx(1) = rovx(ny-2)
```

```
grovx(2) = rovx(ny-1)
```

```
grovx(3) = rovx(ny)
```

```
groe(i,1) = roe(ny-2)
```

```
groe(i,2) = roe(ny-1)
```

```
groe(i,3) = roe(ny)
```

```
do i=4,nx + 4
```

```
gro(i) = ro(i-3)
```

```
grovx(i) = rovx(i-3)
```

```
groe(i) = roe(i-3)
```

```
end do
```

```
gro(nx+5) = ro(1)
```

```
gro(nx+6) = ro(2)
```

```
gro(nx+7) = ro(3)
```

```
grovx(nx+5) = rovx(1)
```

```
grovx(nx+6) = rovx(2)
```

```
grovx(nx+7) = rovx(3)
```

```
groe(nx+5) = roe(1)
```

```
groe(nx+6) = roe(2)
groe(nx+7) = roe(3)
```

```
end do
```

O pseudo-código abaixo diz respeito ao cálculo dos autovalores da matriz jacobiana da equação de Euler unidimensional. Os autovalores auxiliam no cálculo do passo de tempo (Δt), na aplicação do método das variáveis características e na repartição dos fluxos de *Lax-Friedrichs*. Na repartição dos fluxos, por exemplo, usa-se o valor de *alpha* (α) – veja a equação 2.41. Os autovalores são computados após a avaliação dos pontos fictícios.

```
subroutine eigenvalue

DO i=1,nx+7
lambda(1,i) = vx(i) - c(i)
lambda(2,i) = vx(i)
lambda(3,i) = vx(i) + c(i)
END DO

alpha = maxval(abs(lambda))
```

A sub-rotina *weno* apresentada calcula o polinômio reconstruído (*fhat*) que será usado para aproximar as derivadas do fluxos do escoamento. As linhas do código apresenta o polinômio local reconstruído, o indicador de suavidade local e global, os pesos não normalizados dos esquemas WENO-JS, WENO-Z, WENOZ+ e WENO-SV, bem como os pesos normalizados. Os valores no vetor *f* (fluxo de massa, momento e energia) são inicialmente computados pela condição inicial do problema de escoamento, calculados com pontos fictícios, repartidos em fluxos positivo e negativo de acordo com a repartição de fluxo de *Lax-Friedrich* e finalmente utilizados na *sub-rotina weno* abaixo.

O sub-índice *i* diz respeito às variáveis conservadas (ou fluxos de massa, momento e energia). Repare que cinco pontos são utilizados para o cálculo polinômio reconstruído em $f_{i+1/2}$, ou seja, esta é uma sub-rotina para um esquema WENO de quinta ordem.

```
subroutine weno
```

```
DO i=1,3
```

```
DO j = 3,3
```

```
!Reconstrução polinomial local nos sub-estênceis usando
os valores do centro da célula fi
```

```
fhat0(i,1) = (2*f(i,j-2) - 7*f(i,j-1) + 11*f(i,j)) / 6
```

```
fhat1(i,1) = (-1* f(i,j-1) + 5*f(i,j) + 2*f(i,j+1)) / 6
```

```
fhat2(i,1) = (2*f(i,j) + 5*f(i,j+1) - f(i,j+2)) / 6
```

```
!Indicador de suavidade local em cada sub-estêncil
```

```
beta0(i) = (1./4)*(1*f(i,j-2)-4*f(i,j-1)+3*f(i,j))**2
+(13./12)*(f(i,j-2)-2*f(i,j-1)+f(i,j))**2
```

```
beta1(i) = (1./4)*(-1*f(i,j-1)+0*f(i,j)+1*f(i,j+1))**2
+(13./12)*(f(i,j-1)-2*f(i,j)+f(i,j+1))**2
```

```
beta2(i) = (1./4)*(-3*f(i,j)+4*f(i,j+1)-1*f(i,j+2))**2
+(13./12)*(f(i,j)-2*f(i,j+1) + f(i,j+2))**2
```

```
!Indicador de suavidade global no estêncil
```

```
tau = abs(beta2(i)-beta0(i))
```

```
!peso não-normalizado: WENO-JS
```

```
!alpha0(i) = (1./10)/(((beta0(i) + epsi)**pp))
```

```
!alpha1(i) = (6./10)/(((beta1(i) + epsi)**pp))
```

```
!alpha2(i) = (3./10)/(((beta2(i) + epsi)**pp))
```

!peso não normalizado: WENO-Z

!alpha0(i) = (1./10)*(1 + (tau/(beta0(i) + epsi)**pp))

!alpha1(i) = (6./10)*(1 + (tau/(beta1(i) + epsi)**pp))

!alpha2(i) = (3./10)*(1 + (tau/(beta2(i) + epsi)**pp))

!peso não normalizado: WENO-Z+

!alpha0(i) = 1./10*(1 + (tau/(beta0(i) + epsi)**pp) &
!+ dx**(2./3)*(beta0(i)+epsi)/(tau+epsi))

!alpha1(i) = 6./10*(1 + (tau/(beta1(i) + epsi)**pp) &
!+ dx**(2./3)*(beta1(i)+epsi)/(tau+epsi))

!alpha2(i) = 3./10*(1 + (tau/(beta2(i) + epsi)**pp) &
!+ dx**(2./3)*(beta2(i)+epsi)/(tau+epsi))

!peso não normalizado: WENO-SV

alpha0(i) = 1./10*(1 + (tau/(beta0(i) + epsi)**pp) &
+ (abs(Ma(j)))**(1./2)*(beta0(i)+epsi)/(tau+epsi))

alpha1(i) = 6./10*(1 + (tau/(beta1(i) + epsi)**pp) &
+ (abs(Ma(j)))**(1./2)*(beta1(i)+epsi)/(tau+epsi))

alpha2(i) = 3./10*(1 + (tau/(beta2(i) + epsi)**pp) &
+ (abs(Ma(j)))**(1./2)*(beta2(i)+epsi)/(tau+epsi))

!peso normalizado

soma(i) = alpha0(i) + alpha1(i) + alpha2(i)

omega0(1,i) = alpha0(i)/soma(i)

omega1(1,i) = alpha1(i)/soma(i)

omega2(1,i) = alpha2(i)/soma(i)

```

!polinômio reconstruído fi+1/2
fhat(i,j+1) = omega0(1,i)*fhat0(i,1) + omega1(1,i)*fhat1(i,1)
+ omega2(1,i)*fhat2(i,1)

END DO
END DO

```

A codificação para avançar a solução no tempo é computada utilizando o método SSP-RK3 de terceira ordem (Strong stability preserving Runge-Kutta). O passo de tempo, dt , é calculado utilizando a condição CFL (*Courant-Friedrichs-Lewy*), enquanto que o novo valor das variáveis conservadas é obtido após três níveis de cálculo. No primeiro nível, obtém-se $ro1$, $rovx1$, $roe1$; no segundo, obtém-se $ro2$, $rvx2$ e $roe2$; e, finalmente, no terceiro nível, calculam-se os novos valores das variáveis conservadas, no tempo $t = t + dt$. Após o cálculo de cada nível, devem-se recalculer os pontos fictícios, os autovalores e todas as etapas dependentes (método das variáveis características), para finalmente calcular os polinômios, as derivadas dos fluxos e o passo de tempo.

```

subroutine ssp-kr3

dt = CFL*dx/maxval(abs(lambda))

do i=1,nx+1
ro1(i) = ro(i) + dt*(dflux(1,i))
end do

do i=1,nx+1
rovx1(i) = rovx(i) + dt*(dflux(2,i))
end do

```

```
do i=1,nx+1
roel(i) = roe(i) + dt*(dflux(3,i))
end do

call newcompute

do i=1,nx+1
ro2(i) = (1./4)*(3*ro(i) + ro1(i) + dt*(dflux(1,i)))
end do

do i=1,nx+1
rovx2(i) = (1./4)*(3*rovx(i) + rovx1(i) + dt*(dflux(2,i)))
end do

do i=1,nx+1
roe2(i) = (1./4)*(3*roe(i) + roe1(i) + dt*(dflux(3,i)))
end do

call newcompute

do i=1,nx+1
ro(i) = (1./3)*(ro(i) + 2*ro2(i)+ 2*dt*(dflux(1,i)))
end do

do i=1,nx+1
rovx(i) = (1./3)*(rovx(i) + 2*rovx2(i)+ 2*dt*(dflux(2,i)))
end do

do i=1,nx+1
roe(i) = (1./3)*(roe(i) + 2*roe2(i)+ 2*dt*(dflux(3,i)))
```

end do