

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE ENERGIA NUCLEAR**

**COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR
CENTRO REGIONAL DE CIÊNCIAS NUCLEARES DO NORDESTE**

Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares

**TÉCNICAS NUMÉRICAS PARA A APLICAÇÃO EM PROJETOS
TERMOFLUIDODINÂMICOS DE REATORES VHTGR**

JUSSIÊ SOARES DA ROCHA

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Brayner
de Oliveira Lira

Co-orientador: Prof. Dr. Edisson Sávio de
Góes Maciel

Recife, PE

Julho, 2016

JUSSIÊ SOARES DA ROCHA

**TÉCNICAS NUMÉRICAS PARA A APLICAÇÃO EM PROJETOS
TERMOFLUIDODINÂMICOS DE REATORES VHTGR**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares para obtenção do título de Doutor em Ciências. Área de concentração: Engenharia de Reatores

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira

Co-orientador: Prof. Dr. Edisson Sávio de Góes Maciel

Recife, PE

Julho, 2016

Catálogo na fonte
Bibliotecária Valdicea Alves, CRB-4 / 1260

R672t

Rocha, Jussê Soares da.

Técnicas numéricas para a aplicação em projetos Termofluidodinâmicos de reatores VHTGR / Jussê Soares da Rocha. - 2016.

105folhas, Il.; Tab. e Simb.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira.

Coorientador: Prof. Dr. Edisson Sávio de Góes Maciel.

Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG. Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares, 2016.

Inclui Referências, Anexos e Apêndices.

1. Energia Nuclear. 2. Equações de Navier-Stokes. 3. Diferenças finitas. 4. algoritmo de Jameson e Mavriplis. 5. Dissipação artificial. 6. Reator VHTGR. I. Lira, Carlos Alberto Brayner de Oliveira(Orientador). II. Maciel, Edisson Sávio de Góes(Coorientador).

UFPE

612.01448 CDD (22. ed.)

BCTG/2017-80

Técnicas Numéricas para a Aplicação em Projetos Termofluidodinâmicos de Reatores VHTGR

Jussié Soares da Rocha

APROVADA EM: 18.07.2016

ORIENTADOR: Prof. Dr. Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira

CO-ORIENTADOR: Prof. Dr. Edison Sávio de Góes Maciel

COMISSÃO EXAMINADORA:

Prof. Dr. Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira – DEN/UFPE

Prof. Dr. Jair de Lima Bezerra – DEN/UFPE

Prof. Dr. Fernando Roberto de Andrade Lima – CRCN-NE/CNEN

Prof. Dr. Mário Augusto Bezerra da Silva – DEN/UFPE

Prof. Dr. Carlos Costa Dantas – DEN/UFPE

Visto e permitida a impressão

Coordenador(a) do PROTEN/DEN/UFPE

E por muitas vezes precisei disso para continuar meu trabalho: *“Hey! Mr. Tambourine Man, play a song for me I’m not sleepy and there is no place I’m going to...”*

Trecho da Música “Mr. Tambourine Man”, de Bob Dylan, Prêmio Nobel de Literatura em 2016.

AGRADECIMENTOS

A Deus, por iluminar meus caminhos;

Aos meus familiares: Juçara (mãe), João (pai), Alexandry, André e Anderson (irmãos), pela paciência e convívio diário;

Aos meus 2 orientadores: Carlos Brayner e Edisson Sávio, fundamentais no sucesso do trabalho, sendo que, ao último, agradecimento também pela disponibilização de resultados de pesquisas próprias para validação das ferramentas obtidas no presente trabalho de tese;

Aos colegas e amigos do Instec em Havana – Cuba: Carlos Garcia, Ivón, Rony, Erich, Leo, Tony, Perdomo, Raul, Daniel, Jesus, Campi, Leorlen, Modesto, e em especial, à “mi madre” Conchita;

Aos meus sempre amigos: Samuel Pimentel, Igo, Lázaro, Lenival, Afonso, Fábio, Lavor, Márcio, pelo apoio à continuidade nos estudos;

Aos membros da banca examinadora: Mário, Fernando Andrade, Jair e Dantas por aceitarem o convite à participação e pela valorosa contribuição nas suas ponderações;

Aos funcionários do DEN-UFPE: Nilvânia, Magali, Josenildo, Edvaldo, Antônio, Zacarias e Juarez por sempre aturarem e ajudarem a este estudante;

Ao PROTEN, pela oportunidade de cursar o Doutorado;

Ao meu orientador de graduação e grande incentivador, Wilson Seraine;

Ao professor Marcos Ortega (ITA), por responder prontamente e pacientemente aos e-mails que enviei, sanando dúvidas a respeito de tópicos relacionados à escoamentos;

Aos meus amigos de convívio próximo: Paulo Daniel (in memoriam), Bruno Mendes, Martha Fernanda, Emanuel Richardson, Freitas, família Queiroz;

À CAPES, através do projeto BEX 10028/14-5/MES-CUBA, pelo suporte financeiro durante 3 meses de estudos em Havana - Cuba;

Por último, aos meus amores, combustível para as minhas conquistas: minha filha Juliê, meu filho Cauê, e à minha esposa, sempre presente, Conceição. Meu muito obrigado a todos!

RESUMO

O presente trabalho consistiu na resolução das equações de Euler e de Navier-Stokes, em suas formas conservativa e estruturada, no espaço bidimensional, através de uma formulação de diferenças finitas para a discretização espacial. Foi implementado o algoritmo de Jameson e Mavriplis para realizar os experimentos numéricos, bem como os modelos de dissipação artificial isotrópicos escalares linear e não-linear de Pulliam, a fim de prover estabilidade numérica ao esquema. O método de Euler explícito foi empregado para marcha no tempo para acelerar o processo de convergência. Foram estudados os problemas físicos de escoamentos livre e interno para configurações de rampa e de canal retangular com obstáculo, respectivamente. Foi feita a implementação de passo no tempo variável espacialmente no sentido de acelerar a convergência para a solução de estado estacionário. Objetivou-se, principalmente, a obtenção de ferramentas computacionais para futura aplicação na área nuclear de técnicas numéricas amplamente utilizadas em problemas aeronáuticos, tendo em vista o igual uso de equações governantes do meio fluido, para estudos preliminares de contornos de densidade, velocidade, pressão, número de Mach e energia para o escoamento de gás Hélio refrigerante, presente no núcleo do Reator Refrigerado a Gás de Muito Alta Temperatura, o VHTGR. Visou-se também descrever características relacionadas à qualidade global da solução numérica. Após as simulações, verificou-se o bom comportamento do algoritmo de Jameson e Mavriplis, bem como a satisfatória atuação dos operadores linear e não-linear de Pulliam na convergência do esquema, evidenciando-se o modelo não-linear como o que proporciona melhor tratamento numérico nas soluções obtidas.

Palavras-Chave: equações de Navier-Stokes. diferenças finitas. algoritmo de Jameson e Mavriplis. dissipação artificial. VHTGR.

ABSTRACT

The present work consisted in solving the Euler and Navier-Stokes equations, in conservative and structured forms, in the two-dimensional space, employing a finite difference formulation for spatial discretization. It was implemented the Jameson and Mavriplis algorithm to perform the numerical experiments, as well the isotropic scalar linear and nonlinear models of Pulliam, aiming to provide numerical stability to the algorithm. The Backward Euler method for explicit marching in time was also implemented to accelerate the convergence process. The physical problems of free and internal flows for the ramp and rectangular channel with obstacle configurations were studied, respectively. A spatially variable time step is employed aiming to accelerate the convergence to the steady state solution. The main objective was to implement computational tools to the future application in the nuclear sector of numerical techniques widely applied in aeronautical problems, due to the common employed governing equations of the fluid motion, for preliminary studies of density, velocity, pressure, Mach number and energy contours to the flow of gas helium coolant present in the core of the Very High Temperature Gas-cooled Reactor, the VHTGR. A study involving the algorithm's characteristics in relation to the overall quality of the solution is also accomplished. After the simulations, it was found good behavior of Jameson and Mavriplis algorithm, as well as satisfactory performance of the linear and nonlinear Pulliam operators in scheme convergence, showing the nonlinear model as providing better treatment to the numerical solutions obtained.

Keywords: Navier-Stokes equations. finite difference. Jameson and Mavriplis algorithm. artificial dissipation. VHTGR.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Very High Temperature Gas-cooled Reactor - VHTGR.	21
Figura 2 – Núcleo do HTTR.....	22
Figura 3 – Transformações de coordenadas curvilíneas generalizadas.....	28
Figura 4 – Interpretação geométrica de fórmulas de diferenças para as primeiras derivadas.....	32
Figura 5 – Contornos para rampa	54
Figura 6 – Contornos para o canal com obstáculo	55
Figura 7 – Razão de pressão obtida para a configuração de rampa.....	57
Figura 8 – Geometria da configuração de rampa	59
Figura 9 – Malha utilizada para a configuração de rampa utilizada nas simulações para o caso Euler.	59
Figura 10a – Contornos de densidade.....	61
Figura 10b – Contornos de velocidade.....	61
Figura 10c – Contornos de pressão.....	61
Figura 10d – Contornos de n° de Mach.	61
Figura 10e – Contornos de energia.....	62
Figura 11 – Campo vetorial de velocidades para $\varepsilon_E = 7,0$	62
Figura 12a – Contornos de densidade	63
Figura 12b – Contornos de velocidade	63
Figura 12c – Contornos de pressão.....	63
Figura 12d – Contornos de n° de Mach	63
Figura 12e – Contornos de energia.....	64
Figura 13 – Campo vetorial de velocidades para $\varepsilon_E = 10,0$	64
Figura 14a – Contornos de densidade.....	65
Figura 14b – Contornos de velocidade	65
Figura 14c – Contornos de pressão.....	65
Figura 14d – Contornos de n° de Mach	65
Figura 14e – Contornos de energia.....	66
Figura 15 – Campo vetorial de velocidades para $\varepsilon_E = 40,0$	66
Figura 16a – Contornos de densidade	67
Figura 16b – Contornos de velocidade	67

Figura 16c – Contornos de pressão.....	67
Figura 16d – Contornos de n° de Mach	67
Figura 16e – Contornos de energia.....	68
Figura 17 – Campo vetorial de velocidades	68
Figura 18 – Malha para a configuração de rampa utilizada na simulação para o caso Navier-Stokes	70
Figura 19a – Contornos de densidade	71
Figura 19b – Contornos de velocidade	71
Figura 19c – Contornos de pressão.....	71
Figura 19d – Contornos de n° de Mach	71
Figura 19e – Contornos de energia.....	71
Figura 20 – Campo vetorial de velocidades próximo à rampa	72
Figura 21 – Geometria da configuração de canal com obstáculo.....	73
Figura 22 – Malha para a configuração de canal com obstáculo utilizada nas simulações para os casos Euler e Navier-Stokes.....	74
Figura 23a – Contornos de densidade.....	76
Figura 23b – Contornos de velocidade	76
Figura 23c – Contornos de pressão.....	76
Figura 23d – Contornos de n° de Mach	76
Figura 23e – Contornos de energia.....	77
Figura 24 – Campo vetorial de velocidades para $\epsilon_E = 40,0$	77
Figura 25a – Contornos de densidade.....	78
Figura 25b – Contornos de velocidade	78
Figura 25c – Contornos de pressão.....	78
Figura 25d – Contornos de n° de Mach	78
Figura 25e – Contornos de energia.....	79
Figura 26 – Campo vetorial de velocidades para $\epsilon_E = 80,0$	79
Figura 27a – Contornos de densidade.....	80
Figura 27b – Contornos de velocidade	80
Figura 27c – Contornos de pressão.....	80
Figura 27d – Contornos de n° de Mach.	80
Figura 27e – Contornos de energia.....	81
Figura 28 – Campo vetorial de velocidades	81
Figura 29a – Contornos de densidade.....	82

Figura 29b – Contornos de velocidade.....	82
Figura 29c – Contornos de pressão.....	83
Figura 29d – Contornos de nº de Mach.	83
Figura 29e – Contornos de energia.....	83
Figura 30 – Campo de velocidades obtido para o caso Navier-Stokes.	84
Figura 31 – Esquema do ciclo termoquímico (I-S).	95
Figura 32 – Visão esquemática do HTGR.....	97
Figura 33 – Combustível TRISO.....	99
Figura 34 – Detalhes do combustível de um HTTR	100

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – ε_E <i>versus</i> total de iterações (configuração de rampa)	60
Tabela 2 – ε_E <i>versus</i> total de iterações (configuração de canal com obstáculo)	75

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Latinos

a - velocidade do som no fluido, m/s

$a_{entrada}$ - velocidade do gás hélio na entrada do canal, m/s

A_c - área da secção transversal da geometria cilíndrica equivalente ao canal retangular, m^2

C_p, C_v - calores específicos a pressão e volume constantes, respectivamente, $J/kg.K$

CFL - número de “Courant – Friedrichs – Levy”

D - diâmetro, m

D_ξ, D_η - operadores de dissipação artificial nas direcções ξ e η , respectivamente

e, e_i - energias total e interna por unidade de volume, respectivamente, J/m^3

E_e, \bar{E}_e - vetores de fluxo invíscido (ou vetores de fluxo de Euler) nos sistemas cartesiano e de coordenadas curvilíneas gerais, nas direcções x e ξ , respectivamente

E_v, \bar{E}_v - vetores de fluxo viscoso nos sistemas cartesiano e de coordenadas curvilíneas gerais, nas direcções x e ξ , respectivamente

F_e, \bar{F}_e - vetores de fluxo invíscido (ou vetores de fluxo de Euler) nos sistemas cartesiano e de coordenadas curvilíneas gerais, nas direcções y e η , respectivamente

F_v, \bar{F}_v - vetores de fluxo viscoso nos sistemas cartesiano e de coordenadas curvilíneas gerais, nas direcções y e η , respectivamente

J - jacobiano da transformação

l - comprimento característico, m

L - altura do canal, m

$M_{entrada}$ - número de Mach na entrada no canal

M_∞ - número de Mach de escoamento livre

N - número de canais

p - pressão estática do fluido, N/m^2

Pr - número de Prandtl

\bar{Q} - vetor de variáveis conservadas no sistema de coordenadas curvilíneas gerais

\dot{Q} - vazão mássica no núcleo, kg/s

\dot{Q}_c - vazão mássica por canal, $kg/s/canal$

r - raio do canal, m

Re - número de Reynolds

T - temperatura, K

u - componente cartesiana da velocidade na direção x , m/s

u_{REF} - velocidade característica do escoamento, m/s

U - velocidade contravariante na direção ζ

v - componente cartesiana da velocidade na direção y , m/s

V - velocidade contravariante na direção η

$V_{entrada}$ - velocidade do gás hélio na entrada do canal, m/s

Símbolos gregos

γ - relação entre calores específicos

δ^+ , δ^- e $\bar{\delta}$ - operadores de diferença avançada, recuada, e centrada, respectivamente

δ_ξ , δ_η - operadores de diferença centrada nas direções ζ e η , respectivamente

Δt - passo no tempo, s

Δ_ξ , Δ_η - operadores de diferença avançada nas direções ζ e η , respectivamente

ε_E - parâmetro presente no modelo linear de Pulliam (1986)

η - coordenada generalizada

η_x , η_y - termos de métrica do sistema curvilíneo nas direções x e y , respectivamente

θ - ângulo de incidência do escoamento à montante da configuração em análise (ou ângulo de ataque), *graus*

μ - viscosidade molecular, *Pa.s*

ζ - coordenada generalizada

ξ_x , ξ_y - termos de métrica do sistema curvilíneo nas direções x e y , respectivamente

ρ - densidade do fluido, kg/m^3

σ - soma dos raios espectrais das matrizes jacobianas invíscidas

τ - tempo ou tensões viscosas

∇_ξ , ∇_η - operadores de diferença recuada nas direções ζ e η , respectivamente

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	16
2	REVISÃO DE LITERATURA	21
2.1	O VHTGR (Very High Temperature Gas-Cooled Reactor).....	21
2.2	Métodos numéricos na área nuclear	23
2.3	Aspectos gerais em Aerodinâmica e Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD).....	26
2.4	O Método de Diferenças Finitas (MDF)	30
2.4.1	Os fundamentos do Método de Diferenças Finitas	30
2.4.2	Relações de diferenças finitas	31
2.5	Técnicas de aceleração de convergência.....	34
2.6	Operadores de dissipação artificial.....	41
3	MATERIAIS E MÉTODOS	44
3.1	Formulação teórica e numérica no espaço bidimensional	44
3.1.1	Escoamento viscoso versus não-viscoso (invíscido).....	44
3.1.2	Equações de Navier-Stokes	45
3.1.2.1	<i>Esquema numérico de Jameson e Mavriplis (1986) aplicado às equações de Navier-Stokes</i>	<i>49</i>
3.1.3	Equações de Euler	50
3.1.3.1	<i>Esquema numérico de Jameson e Mavriplis (1986) aplicado às equações de Euler</i>	<i>50</i>
3.2	Operadores de dissipação artificial no espaço bidimensional	51
3.2.1	Modelo escalar isotrópico linear de Pulliam (1986)	51
3.2.2	Modelo escalar isotrópico não-linear de Pulliam (1986).....	52
3.3	Definição dos problemas físicos, condições iniciais e de contorno para a formulação bidimensional.....	53
3.3.1	Definição dos problemas físicos	53
3.3.2	Condições iniciais e de contorno	54
3.4	Validação das ferramentas computacionais.....	56
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	59
4.1	Problema físico da rampa: caso Euler	59

4.2	Problema físico da rampa: caso Navier-Stokes	69
4.3	Problema físico do canal com obstáculo: caso Euler.....	73
4.4	Problema físico do canal com obstáculo: caso Navier-Stokes	82
5	CONCLUSÕES.....	85
	REFERÊNCIAS	87
	ANEXO A: ENERGIA NUCLEAR E A PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO	94
	ANEXO B: REATORES REFRIGERADOS A GÁS.....	97
	APÊNDICE A: ESTRUTURA DO PROGRAMA PRINCIPAL DO CÓDIGO DISSIPA2D_EULER.....	102
	APÊNDICE B: ESTRUTURA DO PROGRAMA PRINCIPAL DO CÓDIGO DISSIPA2D_NS	104

1 INTRODUÇÃO

Os problemas ambientais do mundo atual fazem do desenvolvimento sustentável uma questão de sobrevivência. A redução no consumo de combustíveis fósseis é fundamental para que se alcance a sustentabilidade. A limitação de recursos hídricos, de combustíveis fósseis, como o petróleo e o carvão mineral, próximos aos principais centros consumidores, dificuldades para o licenciamento ambiental para aproveitamento de recursos energéticos remanescentes e o constante crescimento da demanda de energia sugerem o desenvolvimento de fontes alternativas.

Nesse contexto a chamada “economia do hidrogênio” aparece como uma alternativa promissora para o consumo de energia sem emissão de gases responsáveis pelo efeito estufa para a atmosfera (PENNER, 2006). Entretanto, o hidrogênio não é uma fonte primária de energia: ele deve ser produzido por fontes massivas de energia. Detalhes para sua obtenção podem ser vistos no ANEXO A.

Por não emitir gases de estufa, a energia nuclear coloca-se como uma das fontes energéticas que podem ser utilizadas para produzir hidrogênio. Para isso, reatores que operem a temperaturas elevadas devem ser estudados e projetados. Nesse contexto, surge o Very High Temperature Gas-cooled Reactor (Reator Refrigerado a Gás de Muito Alta Temperatura), VHTGR, o qual apresenta-se como uma alternativa na produção de energia elétrica e hidrogênio. Paralelamente, por tratar-se de um reator avançado, os elementos negativos associados à exploração da energia nuclear devem ser minimizados. Proliferação de armas nucleares e o aumento dos inventários de rejeitos radioativos de longa vida são alguns desses efeitos (TALAMO; GUDOWSKI, 2007).

Sendo assim, considera-se importante a simulação computacional de possíveis eventos físicos em estado permanente no núcleo desse reator. Tendo em vista a necessidade de se fazer diversos testes nos componentes de um reator nuclear, as ferramentas computacionais tornam-se indispensáveis, gerando principalmente, ganho de tempo e de qualidade na experimentação. Um exemplo é o da análise fluidodinâmica no núcleo de um reator: as equações governantes podem ser modeladas e resolvidas através de técnicas numéricas computacionais que, se bem ajustadas à situação, podem demonstrar resultados satisfatórios.

A área nuclear, bem como outras áreas do conhecimento, tem consolidado o uso de um ferramental matemático modelado em linguagem computacional para ganho de velocidade e desempenho em cálculos que vão desde os mais simples até os de alta complexidade. Não se

enxergam, na atualidade, testes de segurança e confiabilidade de centrais nucleares sem o uso de computadores, pois estes facilitam bastante na tomada de decisões pertinentes à área (ROCHA, 2011).

O trabalho com métodos numéricos exige sensibilidade por parte do programador no tocante à adequação do método escolhido à situação física proposta. É necessário conhecimento prévio (no caso de simulações que envolvem Fluidodinâmica Computacional) de alguns itens-chave: tipo de escoamento e condições de contornos são alguns desses. No entanto, um esquema numérico pode possuir instabilidades numéricas inerentes ao método, como as que surgem da utilização de operadores centrados para discretização espacial de termos convectivos, por exemplo. Uma forma de se tratar tais instabilidades é a introdução de termos de dissipação artificial a fim de prover a estabilidade numérica necessária à convergência do esquema.

Operadores de dissipação artificial constituem uma importante ferramenta no trabalho com esquemas numéricos de discretização espacial simétrica. Tais operadores tem a função básica de dar melhor tratamento às instabilidades numéricas inerentes ao método numérico, presentes no processo de convergência. Desta forma, os operadores distinguem diferentes tipos de amortecimento numérico e medidas de quantidades apropriadas de amortecimento, viabilizando um melhor desempenho computacional do esquema numérico, acarretando soluções mais precisas.

Esquemas simétricos com um operador de dissipação artificial adequadamente formulado podem conduzir a resultados satisfatórios, em termos da qualidade e da quantidade da solução gerada (MAVRIPLIS, 1990; TURKEL; VATSA, 1994; MACIEL; AZEVEDO, 1998). O esquema de Jameson e Mavriplis (1986) é um exemplo de um esquema estruturado, simétrico e com boa resolução, que pode conduzir a resultados satisfatórios utilizando um operador de dissipação adequado. O esquema foi desenvolvido para problemas em malhas estruturadas com células triangulares, mas sua extensão para malhas com células retangulares é direta.

Mavriplis e Jameson (1987) elaboraram um algoritmo “multigrid” para resolver as equações de Euler bidimensionais em malhas não estruturadas formadas por células triangulares. O esquema numérico de solução das equações de movimento era simétrico e utilizava uma formulação de volumes finitos, com propriedades definidas nos nós da malha computacional (do inglês: “cell vertex”). Assim, cada volume computacional efetivo do esquema era formado por todas as células que concorriam para um dado nó. O método era de segunda ordem de precisão no espaço, exceto em regiões de elevados gradientes de pressão,

em que um operador de dissipação artificial de diferenças segundas reduzia a ordem de precisão à primeira. A integração no tempo usava um esquema tipo Runge-Kutta de cinco estágios (JAMESON; MAVRIPLIS, 1986), adequadamente projetado para amortecer erros de alta frequência, objetivo do algoritmo “multigrid”.

Beam e Warming (1976) desenvolveram um esquema de diferenças finitas implícito para obter soluções numéricas eficientes de sistemas hiperbólicos não lineares em forma de lei de conservação. O algoritmo era de segunda ordem de precisão no tempo, não iterativo, e na forma fatorada espacialmente. Operadores de discretização espacial simétrica de segunda e de quarta ordem de precisão e operadores de discretização espacial assimétrica de segunda ordem foram inseridos dentro da solução de um sistema de equações de blocos tridiagonais. Esquemas híbridos conservativos que alternavam da diferenciação espacial simétrica para a assimétrica, sempre que as velocidades características locais eram do mesmo sinal, foram construídos para melhorar a precisão de soluções fracas do sistema de equações algébricas resultante. Soluções para as equações de Euler bidimensionais foram apresentadas.

Maciel e Azevedo (1998) apresentaram um estudo entre quatro modelos de dissipação artificial, baseados no trabalho de Pulliam (1986) e de Turkel e Vatsa (1994), aplicados a um algoritmo de resolução das equações de Navier-Stokes. Os modelos avaliados apresentavam as características: escalar ou matricial, linear ou não-linear, e isotrópico ou anisotrópico. O algoritmo diagonal de Pulliam e Chaussee (1981), utilizando o método de Euler implícito para marcha no pseudo-tempo, segundo o formalismo de diferenças finitas, em um sistema de coordenadas curvilíneas generalizadas, foi utilizado para os experimentos numéricos. Os modelos foram estudados quanto à qualidade global da solução gerada e desempenho computacional. O problema físico simulado foi o escoamento transônico em um bocal convergente-divergente. Os resultados demonstraram que o modelo escalar, não-linear e isotrópico de Pulliam (1986) apresentava as melhores características gerais de qualidade global da solução e desempenho computacional, com o segundo menor custo computacional entre os modelos testados, para o problema físico do bocal. O modelo escalar, não-linear e anisotrópico de Turkel e Vatsa (1994) foi o segundo melhor e o modelo matricial, não-linear e anisotrópico de Turkel e Vatsa (1994) apresentava um custo computacional elevado em relação aos demais, prejudicando o seu desempenho geral.

Maciel (2006) apresentou estudo envolvendo a implementação dos modelos de dissipação artificial de Pulliam (1986) e Turkel e Vatsa (1994) no algoritmo diagonal de Chaussee e Pulliam (1981). As equações de Euler foram resolvidas no espaço bidimensional em um contexto de diferenças finitas utilizando um sistema de coordenadas generalizadas. Foi

trabalhado o problema físico de estado estacionário ao longo de uma configuração de rampa, onde foi demonstrado que o modelo escalar não-linear anisotrópico de Turkel e Vatsa (1994) apresentou os melhores resultados em relação à qualidade de solução e a relação custo-benefício.

O problema de análise termofluidodinâmica com refrigeração a gás através de geometrias complexas (tais como a do núcleo de reatores nucleares), sugere uma estreita analogia com a área de projetos aeronáuticos, nos quais as técnicas numéricas têm se revelado uma ferramenta indispensável para a resolução destes problemas. Partindo do princípio de que várias destas ferramentas já se encontram disponíveis, a ideia do presente projeto foi adaptar e aplicar algumas delas na análise do escoamento de gás hélio refrigerante, presente no núcleo do VHTGR. Com isso, objetivou-se obter códigos computacionais em linguagem de programação FORTRAN para estudos de escoamentos de gás em diversas geometrias, visando estudos preliminares do núcleo prismático do VHTGR, através de contornos de densidade, velocidade, pressão, número de Mach e energia, fazendo-se o uso de uma técnica numérica amplamente utilizada em problemas aeronáuticos: o método de diferenças finitas aplicado ao algoritmo de Jameson e Mavriplis (1986) e aos modelos de dissipação artificial isotrópicos escalares linear e não-linear de Pulliam (1986), bem como descrever características relacionadas à qualidade global da solução numérica.

Os estudos foram realizados através da resolução das equações de Euler e de Navier-Stokes, em suas formas conservativa e estruturada, no espaço bidimensional, com o uso de uma formulação de diferenças finitas para a discretização espacial. O método de Euler explícito foi empregado para marcha no tempo, visando à aceleração do processo de convergência para a solução de estado estacionário. Para a validação das ferramentas obtidas foi estudado o problema físico de escoamento invíscido de gás ao longo de uma configuração de rampa, e, após a validação, foram realizados os testes para a geometria de canal com obstáculo.

Deve ser ressaltado que a inserção do obstáculo se deu pelo fato que o escoamento deveria mudar de direção em relação ao escoamento não perturbado: significa que a solução passa a diferir daquela encontrada em casos de escoamentos livres. Evidentemente que não se trata de uma real situação do VHTGR, no entanto, objetivando-se a realização de testes preliminares para análise da qualidade das soluções do algoritmo de Jameson e Mavriplis (1986), bem como dos modelos de dissipação artificial isotrópicos escalares linear e não-linear de Pulliam (1986), levando-se em conta condições geométricas obtidas em Bess et al (2010) para um canal do VHTGR e físico-químicas para o gás hélio obtidas em KTA (1978),

foram realizadas simulações nas quais foi possível evidenciar características importantes a serem levadas em conta durante a simulação de eventos relacionados à termofluidodinâmica, que serão descritas com detalhes no decorrer do trabalho.

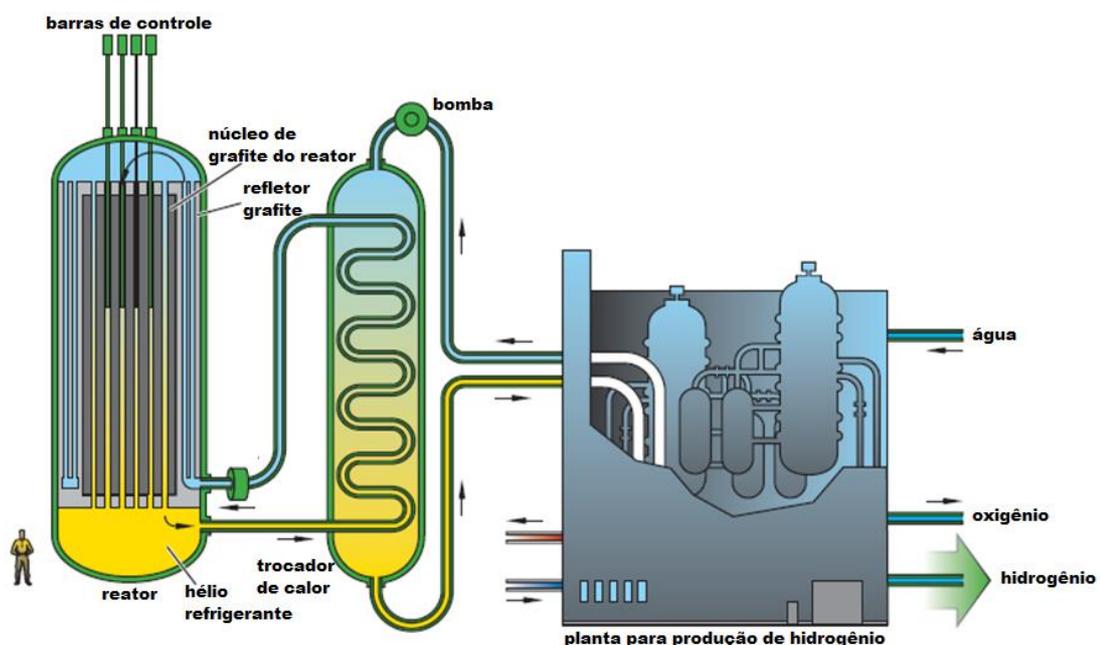
2 REVISÃO DE LITERATURA

2.1 O VHTGR (Very High Temperature Gas-cooled Reactor)

A próxima geração de usinas nucleares está em um sistema de reatores nucleares avançados que possuem sistemas de geração de eletricidade e de hidrogênio acoplados. Como resultado do Fórum Internacional Geração IV, 6 candidatos a reator avançado foram escolhidos: um destes é o VHTGR (Figura 1) (ANDERSON, 2006). A popularidade desse reator vem crescendo e isso tende a mudar a percepção sobre reatores nucleares se a crise energética e o esgotamento da camada de ozônio devido às emissões de CO₂ das usinas de energia fósseis ficarem mais acentuados (OH et al, 2006).

O VHTGR é um reator refrigerado a hélio abastecido a urânio, moderado a grafite, usando um ciclo de gás direto ou indireto para converter o calor gerado pela fissão nuclear em energia elétrica por meio de um turbogerador de hélio. O VHTGR produz uma maior temperatura de saída do que o HTGR (ANEXO B). Os VHTGRs foram construídos no Japão e China para pesquisa nuclear.

Figura 1: Very High Temperature Gas-cooled Reactor – VHTGR.

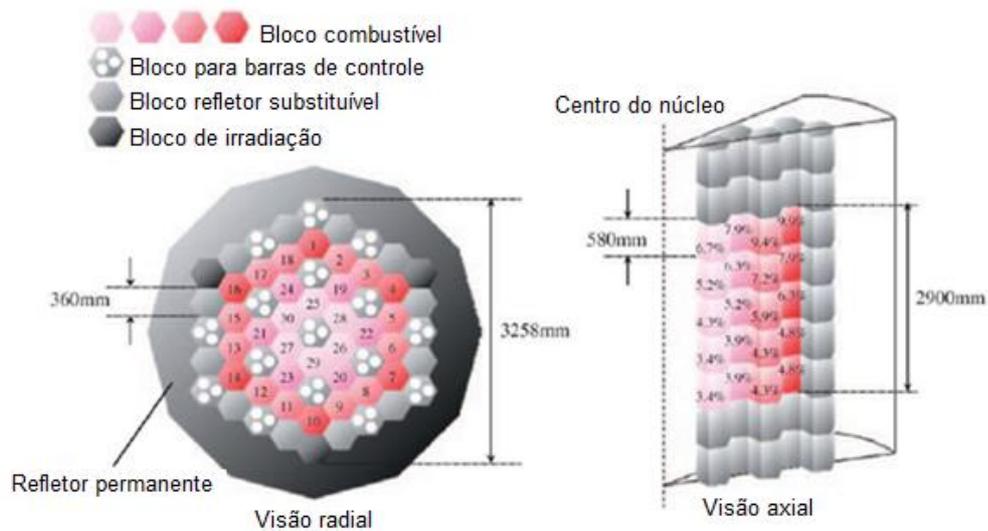


Adaptado de Anderson, 2006

O princípio de funcionamento consiste na passagem de um gás de arrefecimento através do núcleo e, em seguida, o gás aquecido é canalizado diretamente a uma turbina a gás ou a um gerador de vapor. O hélio refrigerante escoava internamente no pleno superior, onde é misturado e então muda o sentido do escoamento, fluindo para baixo através de canais no núcleo ativo do reator. Após isso, flui para dentro do pleno inferior. Parte do hélio refrigerante do pleno superior escoava através de orifícios presentes entre as barras de controle visando arrefece-las.

Os VHTGRs aparecem como opção natural para atender aos requisitos de alta temperatura de saída do refrigerante ($\sim 1000^{\circ}\text{C}$), ao passo que apresentam eficiência térmica bem mais elevada do que os reatores refrigerados a água. Esses reatores possuem núcleo (Figura 2) similar ao do HTTR30 japonês.

Figura 2: núcleo do HTTR



Adaptado de Bess et al, 2010

A segurança do VHTGR baseia-se na sua baixa densidade de potência, capacidade de produção de calor elevado e capacidade passiva para remover o calor a partir do vaso do reator sem a necessidade de sistemas de segurança ativa. O sistema passivo de arrefecimento do vaso, que está localizado no edifício do reator, deve remover todo o calor de decaimento liberado pelo núcleo, no caso de um acidente.

No entanto, o VHTGR enfrenta alguns desafios técnicos e econômicos, particularmente, critérios de segurança e custos. Uma das preocupações que cercam esse

reator é o evento de ingresso de ar na sequência de um Acidente por Perda de Refrigerante (Loss of Coolant Accident), LOCA. É um dos acidentes para estudo do projeto-base do VHTGR. Na sequência da despressurização de hélio no núcleo, se o acidente não é atenuado, existe o potencial para a entrada de ar no núcleo através da ruptura e daí ocorrerá a oxidação da estrutura de grafite no núcleo do VHTGR (OH et al, 2006).

O comportamento do sistema VHTGR deve ser previsto em condições normais e anormais. O cenário do acidente da planta e o comportamento da segurança passiva devem ser previstos com alto grau de precisão. Pequenas incertezas em tal comportamento poderiam ter grandes efeitos sobre as características do sistema. Devido a estes problemas de desempenho, há uma necessidade urgente de testes de desenvolvimento e validação de ferramentas de concepção para demonstrar a viabilidade dos conceitos e guiar a melhoria dos componentes da planta, e é nesse sentido que o presente trabalho traz a aplicação de técnicas numéricas computacionais através de testes com geometrias de menor complexidade: visando resultados preliminares que funcionarão como base para estudos posteriores de escoamentos externos e internos a reatores do tipo VHTGR.

2.2 Métodos numéricos na área nuclear

Não constitui uma novidade o uso dos métodos numéricos na área nuclear. Com a necessidade de se criar um projeto conceitual de reator, são necessários diversos testes de segurança e confiabilidade, o que torna o desenvolvimento de códigos computacionais uma tarefa comum. Com a modelagem matemática adequada, criam-se sistemas de equações que, na maioria das vezes, são acopladas, obrigando o programador a utilizar métodos diretos ou iterativos para a sua resolução. O método de discretização por diferenças finitas é bastante comum entre os métodos de discretização de equações diferenciais parciais, devido a reduzir o problema contínuo a um problema discreto que se resume, em última instância, na solução de um conjunto de equações lineares. É nesse momento que surgem os métodos numéricos computacionais: estes métodos auxiliam na resolução de tais sistemas de equações.

Na área nuclear, são diversos os trabalhos que fizeram uso de determinados métodos numéricos para resolução de equações acopladas. De fato, o desenvolvimento de reatores refrigerados a gás leva à implementação de diversos códigos computacionais a fim de se modelar o comportamento termohidráulico desses reatores. Um trabalho recente do Laboratório Nacional de Idaho (INL) utiliza um código simples, denominado POKE, em

conjunção com um código 3-D implementado em volumes finitos: RELAP5-3-D/ATHENA, visando a análise termoidráulica de regiões específicas do núcleo (Idaho National Laboratory, 2012).

Oh et al (2006) desenvolveram o código computacional GAMMA para estudos no VHTGR. O código foi concebido através da discretização das equações governantes das reações químicas no núcleo do VHTGR, de forma semi-implícita, no esquema de malha deslocada, no qual as variáveis independentes foram linearizadas pelo método de Newton (LIM; NO, 2004).

Moura e Dominguez (2010) criaram uma ferramenta de modelagem computacional que utiliza o Método de Diferenças Finitas para a resolução de problemas de difusão em geometria cartesiana bidimensional e aproximação de uma velocidade. A ferramenta resolve problemas de fonte fixa, com aplicação nos cálculos de blindagem de radiação, e problemas de autovalor, que aparecem nos cálculos de reatores nucleares. Primeiramente, desenvolveu-se um código com base no método iterativo de Gauss-Seidel para resolver o problema de fonte fixa. Em seguida, o código foi ampliado para resolver problemas de autovalor utilizando o método da potência. Os resultados numéricos obtidos pela ferramenta computacional foram satisfatórios tanto em domínios homogêneos como heterogêneos.

Rocha et al (2011) realizaram simulações termoidráulicas de transitórios de variação de pressão e fluxo de massa no núcleo do reator IRIS (International Reactor Innovative and Secure) através do acoplamento de 2 códigos computacionais: MODIRIS e MODPRESS. O primeiro se utiliza de uma estrutura de diagramas em bloco representando as equações diferenciais ordinárias utilizadas para modelagem neutrônica e termoidráulica do IRIS (MAGALHÃES, 2010). O segundo, representa o modelo do pressurizador, e foi formulado através do método de Euler para resolver as equações do modelo do pressurizador propostas por Barroso e Baptista (2004).

Lee et al (2007) realizaram um estudo numérico de regiões de contato entre esferas de um PBR (Pebble Bed Reactor ou “Reator de Leito de Bolas”) utilizando técnicas de dinâmica dos fluidos computacional. Para as simulações do escoamento e da transferência de calor por convecção foi utilizado o CFX-5.7. Para a resolução do fenômeno considerado tridimensional e independente do tempo, foram resolvidas as equações com média de Reynolds para escoamentos incompressíveis, com uso do modelo de turbulência $k - \omega$. A discretização foi realizada através da utilização do esquema de Euler implícito, de segunda ordem para o termo transitório, por ser considerado um esquema robusto, implícito e conservativo no tempo.

Southworth et al (2004) realizaram estudos termoidrúlicos para um reator do tipo prismático e um do tipo leito de bolas utilizando o código computacional POKE. Foram realizados cálculos para a distribuição de fluxo em 1/3 do núcleo. O principal objetivo destes estudos foi o de investigar opções de configuração para esse reator que poderiam permitir a) uma temperatura de saída de 1000°C; b) a menor temperatura de entrada possível; c) a mais alta potência global possível enquanto se mantinham os picos de temperatura em um nível aceitável de 1250°C, durante uma operação normal. Neste mesmo trabalho, foram realizados estudos, através dos códigos computacionais RELAP5-3D/ATHENA, de picos de temperatura do combustível e do vaso do reator durante acidentes de perdas de carga (altas e baixas) do refrigerante e assim identificar a potência permitida para o núcleo.

Hirano e Hada (1990) utilizaram o código THYDE-HTGR para analisar transitórios termoidrúlicos característicos dos sistemas primário e secundário do HTGR. Nesse código, os percursos do refrigerante (incluindo o núcleo do reator) são simulados por um modelo em rede de nós em volumes finitos que estão em contato com junções. Os transitórios termoidrúlicos foram calculados através da solução das equações de conservação de massa, momento e energia para os fluxos de hélio e água. As distribuições de temperatura em estruturas tais como barras de combustível, moderador grafite, dentre outras, foram obtidas através da solução da equação de condução de calor unidimensional.

Kunitomi et al (1991) realizaram estudos de transitórios de temperatura em condição de aquecimento com o código termoidrúlico TAC-NC desenvolvido para licenciamento do HTTR. Tal código foi baseado em outra ferramenta computacional, o código TAC-2D (CLERK; PERTERSON, 1969) e pode calcular a transferência de calor por circulação natural assim como por condução e radiação durante acidentes. A circulação natural é trabalhada por um modelo de fluxo em rede unidimensional. As equações resolvidas por esse código no espaço unidimensional são as de momento, continuidade, estado e energia, em regime estacionário.

Boer et al (2008) desenvolveram um sistema de códigos para a simulação dos comportamentos transitório e estado estacionário de reatores tipo “Pebble Bed”. Para este fim, um código de difusão dependente do tempo (3D) “DALTON” foi acoplado a um código termoidrúlico existente: “THERMIX”. A fim de validar o sistema de código, simulações no PBMR e no AVR foram realizadas para condições de estado estacionário e transitórios. Foi dada atenção especial para a metodologia de cálculo acoplado para os vários tipos de transientes. Ambas as simulações PBMR e a comparação dos resultados do cálculo com dados experimentais da AVR foram satisfatórios. O sistema de códigos fornece um elemento chave

no desenvolvimento e otimização do projeto de reatores de muito alta temperatura. Nesse trabalho, o DALTON utiliza uma discretização espacial utilizando o método de volumes finitos de segunda ordem.

2.3 Aspectos gerais em Aerodinâmica e Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD)

A mecânica dos fluidos estuda fluidos em equilíbrio e em movimento, aplicando-se a estes casos, respectivamente, os termos “Estática” e “Dinâmica dos Fluidos”. No aspecto dinâmico, sendo o fluido incompressível, o termo “hidrodinâmica” é utilizado. escoamentos compressíveis geralmente são estudados pela Aerodinâmica (QUADROS, 2003). De fato, a fim de atender aos requerimentos destas aplicações nas diversas áreas (aeroespacial, nuclear, etc.), recorre-se às técnicas de Dinâmica dos Fluidos Computacional, “CFD” (*Computational Fluid Dynamics*), para previsão de grandezas físicas do escoamento atuante sobre geometrias diversas.

A Aerodinâmica está inserida na Aeronáutica, assim como a Aerotermodinâmica e a Aeroelasticidade. Um analista destas áreas dispõe basicamente de três ferramentas: experimentação laboratorial, métodos analíticos e métodos numéricos, cada qual com vantagens e desvantagens, que são amplamente discutidas na literatura.

Com o advento de novas tecnologias, a revolução da Dinâmica dos Fluidos Computacional para estudos que envolviam a Aerodinâmica trouxe novas perspectivas. Duas grandes descobertas na área de CFD foram feitas por matemáticos. Esses trabalhos foram de Courant et al (1928), que estabeleceram um critério fundamental para garantir a estabilidade de métodos numéricos (condição de “CFL”); e de Lax (1954), que formulou um esquema numérico simplificado para automaticamente capturar ondas de choque em um escoamento sem o prévio conhecimento de suas posições.

Talvez o primeiro maior exemplo de Dinâmica dos Fluidos Computacional tenha sido o trabalho de Kopal (1947), que calculou tabelas com numerosos dados de escoamentos supersônicos sobre geometrias cônicas pela solução numérica das equações diferenciais de Taylor e Maccol (1933). Estas soluções foram obtidas em um computador digital do “MIT” (*Massachusetts Institute of Technology* – Instituto de Tecnologia de Massachusetts) (MACIEL, 2002).

Contudo, a primeira geração de soluções de Dinâmica dos Fluidos Computacional apareceu durante os anos de 50 e 60, impulsionadas pelos eventos simultâneos de computadores eficientes e de grande capacidade, e da necessidade de resolver problemas de reentrada de corpos a temperatura e velocidade elevadas. Temperaturas altas necessitavam a inclusão de modelos de energias vibracionais e de reações químicas em problemas de escoamento algumas vezes em equilíbrio e outras em não equilíbrio. Tais fenômenos físicos ainda hoje não podem ser resolvidos analiticamente, mesmo para as geometrias mais simples. Por isso, soluções numéricas das equações de movimento eram de absoluta necessidade.

Nestas décadas existiram avanços grandes na área de CFD, entre eles: Lax e Wendroff (1964), que estudaram aproximações de diferenças finitas de precisão elevada para malhas grosseiras, atendendo às limitações da época, a fim de resolver problemas de valor inicial para sistemas hiperbólicos de primeira ordem no espaço bidimensional e os critérios necessários de serem atendidos para garantir a estabilidade de tais esquemas; MacCormack (1969), que desenvolveu um método numérico de segunda ordem de precisão, em ambos espaço e tempo, para solução das equações de Navier-Stokes. Neste trabalho, o método foi aplicado para calcular o campo de escoamento, com simetria axial, produzido por impacto de cilindros de alumínio em alta velocidade sobre alvos também de alumínio, além de análise sobre as condições de estabilidade. Este esquema ficou popularizado como o melhor método de diferenças finitas disponível, devido a sua simplicidade e eficiência computacional, durante a década de 70 (ANDERSON, 1976).

Dentre as diversas aplicações emergentes na comunidade CFD, três merecem atenção especial: A primeira foi conduzida utilizando o “ENIAC”, primeiro computador eletrônico, simulando numericamente o tempo meteorológico utilizando uma malha grosseira (primeira previsão meteorológica com uso de computador no século) (MACIEL, 2002).

A segunda grande aplicação foi no setor aeroespacial, propriamente dito, por volta de 1960. Um programa de pesquisa nos Estados Unidos sobre física de reentrada atmosférica deu surgimento à realidade dos “ICBMs” (do inglês: “Intercontinental Ballistic Missiles” – Mísseis Balísticos Intercontinentais). Este estudo conduziu a uma pesquisa significativa no “problema do corpo rombudo”, no qual métodos numéricos de diferenças finitas para escoamento não viscoso estacionário foram utilizados para calcular a estrutura da onda de choque destacada à frente de um míssil de nariz rombudo.

A terceira grande aplicação envolveu uma demonstração em 1963 por cientistas da antiga Comissão de Energia Atômica dos Estados Unidos. Eles demonstraram que o

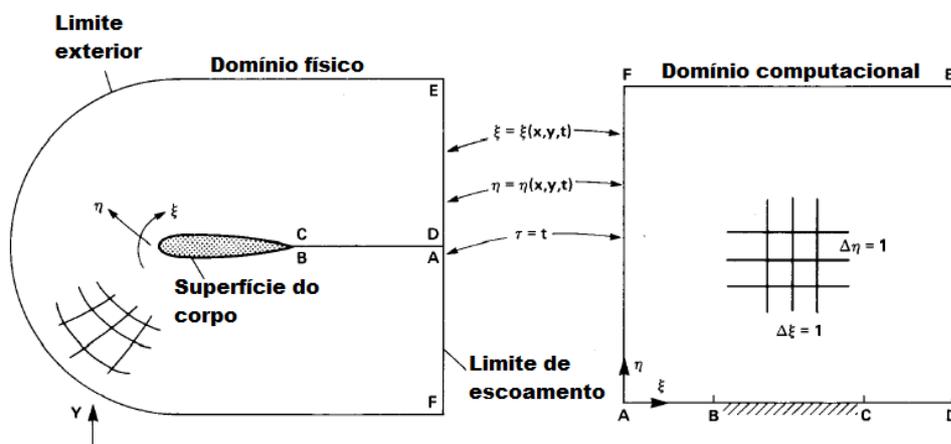
desenvolvimento de uma esteira de vórtices periódica atrás de um objeto cônico, em baixa velocidade, poderia ser automaticamente calculado usando as equações de Navier-Stokes.

A segunda geração de soluções de Dinâmica dos Fluidos Computacional, aquelas as quais hoje são apresentadas em disciplinas de cursos universitários, envolve a aplicação das equações de conservação para problemas de CFD tão complexos que a necessidade de um computador é evidente. Exemplos de tais problemas com dificuldade inerente são escoamentos subsônico/supersônico combinados, tal como o problema do corpo rombudo em escoamento supersônico, e escoamentos viscosos que não são representados pela aproximação de camada limite, como escoamentos descolados e com recirculação. Para a última classe de problemas, as equações de Navier-Stokes completas são requeridas para uma solução exata. Nestes casos, a técnica de marcha no tempo, introduzida de forma prática na metade dos anos 60, criou uma nova perspectiva nos cálculos de campos de escoamentos (MACIEL, 2002).

São diversos os trabalhos na literatura que tratam da simulação das equações em Dinâmica dos Fluidos, como as equações de Euler e de Navier-Stokes. Nestes, os escoamentos analisados são externos e internos, tanto bidimensionais quanto tridimensionais. Na realização dessas simulações são empregadas diversas estratégias numéricas, às quais deve-se atenção especial.

Algumas dessas consistem em técnicas que transformam as equações governantes, que são do tipo parciais não-lineares, em equações algébricas. Como estas equações algébricas estão escritas no sistema cartesiano, é feita uma transformação para o sistema curvilíneo (Figura 3) ajustado à geometria a ser estudada (aerofólios, asas, etc.).

Figura 3: Transformações de coordenadas curvilíneas generalizadas.



Adaptado de Pulliam, 1986

No caso, $\tau = t$, $\xi = \xi(x,y,t)$ e $\eta = \eta(x,y,t)$. Os métodos normalmente usados para aproximar estas equações são os de diferenças finitas, volumes finitos, elementos finitos, elementos de contorno e espectrais (QUADROS, 2003). Cada um destes possui vantagens e desvantagens, no entanto, tendem a um objetivo comum: a solução eficiente de problemas de interesse técnico.

O estudo numérico do escoamento em torno de um corpo qualquer não é trivial, mas é geralmente necessário para minimizar o tempo e o custo de um projeto. O projeto de um corpo aerodinâmico envolve o cálculo das forças em torno do mesmo, passando por vários regimes de escoamento. Princípios físicos e matemáticos são as ferramentas utilizadas nesse processo.

O domínio pode ser discretizado através de malhas estruturadas (JUSTO, 2001), não-estruturadas, adaptativas ou não (DOMPIERRE et al, 2002). A primeira é tal que cada volume interno possui sempre o mesmo número de vizinhos e a numeração dos mesmos tem uma sequência natural; a segunda é tal que os elementos possuam um número variável de vizinhos e estejam dispostos sem alguma ordem aparente, e as adaptativas são construídas de modo que haja um acoplamento iterativo entre malha e solução do fluxo, havendo refinamentos de acordo com a necessidade do escoamento.

Quando um corpo aerodinâmico é projetado, suas formas são definidas de acordo com a velocidade para evitar perdas de energia provocadas por deslocamento da camada-limite, ou pela presença de choques (descontinuidades). Verifica-se que o choque tem mais intensidade para geometrias bojudas (arredondadas, com perímetro maior em uma determinada zona). Portanto, o choque sobre geometrias aerodinâmicas é, geralmente, evitado ou minimizado pela utilização de geometrias adequadas. Em situações em que o choque não pode ser evitado, deverá ser minimizado.

A onda de choque representa um processo não isoentrópico (transformação em que a entropia não se conserva) que representa uma descontinuidade das propriedades do fluido, e pode ser normal ou oblíquo. O choque normal corresponde a uma variação abrupta nas propriedades pressão, temperatura e massa específica. Os gradientes de temperatura e velocidade provocam trocas de calor e dissipação viscosa, o que torna o choque um processo irreversível. O choque oblíquo também representa uma mudança abrupta, quase descontínua das propriedades do fluido e age como um choque normal para componente normal à onda.

No núcleo de reatores nucleares, onde um determinado fluido encontrará diversos obstáculos como placas, tubos, canais (com ou sem bloqueio), orifícios, etc., deve-se buscar a diminuição de efeitos indesejáveis, principalmente sob o ponto de vista operacional. Aqui,

pode-se buscar a diminuição destes efeitos através da modelagem matemática e do método numérico adequados à situação, visando uma melhor previsão do que pode ocorrer durante o percurso do fluido refrigerante. No decorrer do presente trabalho serão descritas as técnicas utilizadas, tanto para a discretização das equações quanto para a aceleração da convergência das simulações computacionais.

2.4 O Método de Diferenças Finitas (MDF)

Das diversas técnicas numéricas disponíveis na literatura, o Método de Diferenças Finitas (MDF) é uma das mais utilizadas: baseia-se nas propriedades das expansões em séries de Taylor e na aplicação da definição de derivadas. É talvez, um método simples de se aplicar, particularmente, ao caso de malhas uniformes, porém, requer um alto grau de regularidade da malha. Em particular, a malha deve ser concebida de forma estruturada, onde os pontos da malha, em um espaço n-dimensional, estejam localizados nas interseções de n-famílias de linhas curvilíneas ou retilíneas. Estas curvas aparecem em formas de linhas de coordenadas numéricas e cada ponto deve estar em uma, e somente uma, linha de cada família (HIRSCH, 1994). No presente trabalho, o MDF foi utilizado para a obtenção do esquema de Jameson e Mavriplis (1986) aplicado às equações de Euler e Navier-Stokes no formalismo de diferenças finitas visando a obtenção dos códigos utilizados para as simulações computacionais.

2.4.1 Os fundamentos do Método de Diferenças Finitas

A aproximação em diferenças finitas é o mais antigo dos métodos aplicados para se obter soluções numérica de equações diferenciais. Considera-se como primeira aplicação a que foi desenvolvida por Euler em 1768. A ideia dos métodos de diferenças finitas é relativamente simples, desde que corresponda a uma estimativa da derivada através da relação entre duas diferenças de acordo com sua definição.

Para uma função $u(x)$ a derivada no ponto x é definida por:

$$u_x \equiv \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} \quad (1)$$

Se Δx é pequeno, mas finito, a expressão do lado direito é uma aproximação do valor exato de u_x . A aproximação melhora através da redução de Δx , mas para qualquer valor de Δx existe um erro associado (erro de truncamento) que tende a zero quando Δx tende a zero. A potência de Δx com a qual o erro tende a zero é denominada “ordem da aproximação de diferenças”, e pode ser obtida do desenvolvimento em séries de Taylor de $u(x + \Delta x)$ ao redor do ponto x . Atualmente, o conceito de aproximações de diferenças finitas é baseado nas propriedades das expansões em séries de Taylor. Desenvolvendo $u(x + \Delta x)$ obtém-se:

$$u(x + \Delta x) = u(x) + \Delta x u_x(x) + \frac{\Delta x^2}{2} u_{xx}(x) + \dots \quad (2)$$

e, portanto, para uma alta ordem em Δx ,

$$\frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} = u_x(x) + \frac{\Delta x}{2} u_{xx}(x) + \dots \quad (3)$$

Supondo que a aproximação para $u_x(x)$ seja de primeira ordem em Δx , e escrevendo

$$\frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} = u_x(x) + O(\Delta x) \quad (4)$$

indica que o erro de truncamento $O(\Delta x)$ tende a zero assim como a primeira potência em x . Um grande número de aproximações de diferenças pode ser obtido através de derivadas de funções. Com base no formalismo dos operadores de diferenças finitas e em sua manipulação, pode-se definir algumas relações e operadores envolvidos na obtenção das fórmulas de diferenças. Tal definição é importante para a compreensão do desenvolvimento da modelagem matemática trabalhada nas simulações computacionais.

2.4.2 Relações de diferenças finitas

Considerando o espaço unidimensional, eixo x , onde uma discretização espacial é apresentada tal que o espaço contínuo é substituído por N pontos de malha x_i , $i = 1, \dots, N$ (Figura 8), indicando por u_i os valores da função $u(x)$ nos pontos x_i (isto é, $u_i = u(x_i)$),

considerando que o espaço entre os pontos de diferenças é constante e igual a Δx , e que o ponto $x_i = i\Delta x$, será tido como “ponto x_i ” ou “ponto i ”, pode-se definir as seguintes relações de diferenças para a primeira derivada $(u_x)_i \equiv (\partial u / \partial x)_{x=x_i}$:

$$(u_x)_i \equiv \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=x_i} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (5)$$

$$(u_x)_i \equiv \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=x_i} = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (6)$$

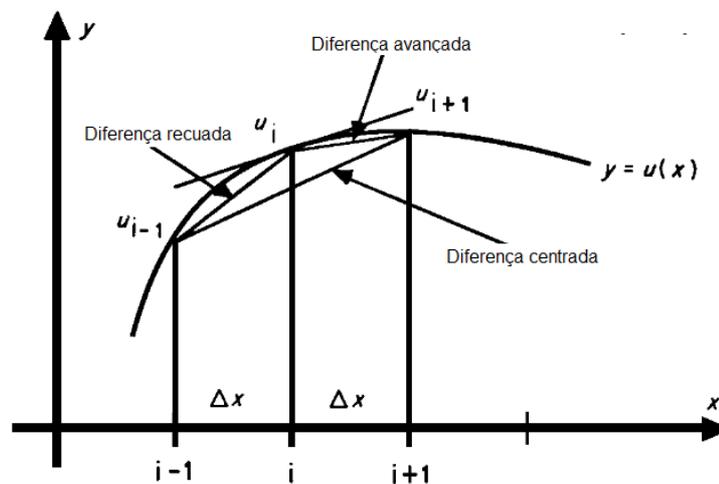
Em relação ao ponto $x = x_i$ a primeira fórmula (Eq. 5) é chamada “diferença avançada” (*forward difference*), enquanto que a segunda (Eq. 6) é denominada “diferença recuada” (*backward difference*). Ambas são consideradas diferenças “one-sided”.

Uma segunda aproximação é obtida da “diferença centrada”:

$$(u_x)_{i-1/2} = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (7)$$

que é facilmente verificada através da expansão em série de Taylor de u_{i+1} ao redor do ponto x_i . Estas três aproximações são representadas geometricamente na Figura 4.

Figura 4: Interpretação geométrica de fórmulas de diferenças para as primeiras derivadas



Adaptado de Hirsch, 1994

A fórmula de diferença avançada para $(u_x)_i$ pode ser considerada uma diferença centrada em relação ao ponto

$$x_{i+1/2} = \frac{x_i - x_{i-1}}{2} \quad (8)$$

levando a uma segunda aproximação para a derivada $(u_x)_{i+1/2}$ nesse ponto. Esta é uma importante propriedade frequentemente utilizada em computação decorrente de seu caráter compacto. A mesma fórmula (Eq. 5) é tanto uma diferença avançada de primeira ordem para $(u_x)_i$ quanto uma aproximação central de segunda ordem para $(u_x)_{i+1/2}$, porém, envolvendo somente os mesmos dois pontos da malha i e $(i+1)$. Portanto, têm-se:

$$(u_x)_{i+1/2} \equiv \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i+1/2} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (9)$$

De forma similar em $(i-1/2)$:

$$(u_x)_{i-1/2} = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (10)$$

Comparando as Eqs. (5) e (6) para $(u_x)_i$, têm-se o ganho de uma ordem de precisão considerando as mesmas expressões como aproximações para os pontos medianos $(i+1/2)$ e $(i-1/2)$, respectivamente. Fórmulas de diferenças para a primeira derivada $(u_x)_i$ podem ser construídas envolvendo um número qualquer de pontos adjacentes, nas quais a ordem de aproximação aumenta com o número de pontos. Em qualquer esquema numérico faz-se um balanço entre a ordem de precisão e o número de pontos, simultaneamente envolvidos no cálculo. No presente trabalho, a fim de se gerar fórmulas de diferenças finitas para qualquer ordem de precisão, foram utilizados os seguintes operadores (HIRSCH, 1994):

a) Operador de diferença avançada δ^+ (ou Δ):

$$\delta^+ u_i = u_{i+1} - u_i \quad (11)$$

b) Operador de diferença recuada δ^- (ou ∇):

$$\delta^- u_i = u_i - u_{i-1} \quad (12)$$

c) Operador de diferença centrada $\bar{\delta}$:

$$\bar{\delta} u_i = \frac{1}{2} (u_{i+1} - u_{i-1}) \quad (13)$$

Cabe salientar que a escolha da precisão das equações de diferenças finitas deve ser adequada à situação física, a fim de se minimizar possíveis erros inerentes ao modelo numérico proposto.

2.5 Técnicas de aceleração de convergência

Tão importante quanto a escolha da técnica numérica a ser utilizada na discretização das equações que modelam o problema físico é a escolha da técnica de aceleração de convergência a ser trabalhada. O desenvolvimento de técnicas de aceleração de convergência para obtenção de soluções de problemas de estado estacionário constitui outro foco de extensa pesquisa em CFD. Tais problemas proviam e provêm grande quantidade de dados aerodinâmicos requeridos ao projeto de veículos aeronáuticos e aeroespaciais: Kutler (1985); Stiles e Hoffman (1985); Long e Radespiel (1991); Nicola et al, (1994); entre outros. Técnicas para aceleração de convergência, a fim de propiciar uma rápida obtenção de tais informações, sempre foram grandes alvos de CFD acompanhando o desenvolvimento de códigos de soluções das equações de movimento do fluido. Muitas técnicas foram elaboradas e vários trabalhos procuraram descrever ferramentas computacionais para aceleração de convergência que produzissem códigos mais eficientes e ao mesmo tempo menos custosos.

Entre tais estudos, é possível destacar Pulliam e Chaussee (1981), enfatizando que a maior parte do trabalho computacional em um algoritmo de diferenças finitas implícito estava contido na solução de um sistema de equações acopladas. Estas equações eram bastante complexas e custosas de serem resolvidas. Desta forma, um método para desacoplar o processo de solução através da diagonalização de estrutura de matriz de blocos foi apresentado. O método foi implementado no algoritmo implícito de fatoração aproximada de

Beam e Warming (1978), aplicado à solução das equações de Euler bidimensionais e tridimensionais, escritas em coordenadas curvilíneas generalizadas. O processo de diagonalização utilizou transformações similares sugeridas no trabalho de Warming et al, (1975). Foi mostrado que o algoritmo diagonal reduzia a necessidade de memória do processo de solução implícito e, por isso, tinha um efeito importante na aplicação de esquemas de diferenças finitas implícitos a processadores vetorizados. Resultados foram apresentados para campos de escoamentos transônicos bidimensionais em torno de aerofólios NACA 0012 e NACA 64A410, apresentando custos computacionais reduzidos entre 24-34%.

MacCormack (1982) desenvolveu um método para resolver as equações compressíveis de Navier-Stokes, a altos números de Reynolds, incondicionalmente estável, computacionalmente mais eficiente do que outros existentes, simples e direto de programar. O método continha dois estágios: o primeiro usava o esquema de diferenças finitas explícito do tipo preditor/corretor apresentado em MacCormack (1969) Este esquema era fácil de programar, porém limitado pelas condições de estabilidade de um método explícito; o segundo estágio removia esta limitação, transformando numericamente as equações do primeiro estágio para a forma implícita. Neste procedimento, equações matriciais de bloco bidiagonais inferior e superior necessitavam e eram mais fáceis de serem resolvidas do que as equações de matrizes de bloco tridiagonais existentes nos métodos implícitos usuais. O método, então, alternava entre a solução obtida por um esquema explícito ou implícito, mediante uma condição de CFL pré-determinada. Desta forma, o método era mais eficiente do que os outros existentes devido aos seguintes aspectos: 1) para regiões do escoamento satisfazendo um critério de estabilidade explícito, o método utilizava um procedimento de solução explícito e apresentava o respectivo custo computacional; 2) para outras regiões, apenas equações de bloco bidiagonais necessitavam ser resolvidas em oposição às equações de bloco tridiagonais mais caras de métodos concorrentes. Testes numéricos com problemas de interação onda de choque/camada limite foram realizados com convergência para solução de estado estacionário obtida em aproximadamente 256 iterações. Números de CFL da ordem de 1000 foram utilizados, resultando em taxas de convergência mais de duas vezes maiores do que as produzidas por métodos implícitos de blocos tridiagonais em uso. Parte deste desempenho excelente foi devido ao fato que, para os espaçamentos de malha utilizados, mais da metade do número total de pontos requereu somente o uso do método explícito de 1969, otimizando o processo de obtenção da solução.

MacCormack (1985) desenvolveu um novo procedimento numérico para resolver as equações compressíveis de Navier-Stokes com alta taxa de convergência. O método foi

apresentado para as equações de movimento no espaço bidimensional e em coordenadas cartesianas, embora a extensão para um sistema de coordenadas arbitrárias ou para volumes finitos em duas dimensões fosse direta, não sendo direta, entretanto, para três dimensões. O artigo destacava que métodos implícitos em uso para resolver as equações de Navier-Stokes em duas dimensões requeriam a inversão de uma matriz de blocos pentadiagonal, enquanto em três dimensões uma matriz de blocos heptadiagonal tinha de ser resolvida. Tais matrizes não possuíam inversão direta eficiente e, ao contrário, eram fatoradas aproximadamente em matrizes de blocos tridiagonais mais simples, que possuíam procedimentos de inversão direta eficientes.

Contudo, devido à fatoração ser aproximada, erros eram introduzidos que limitavam, assim como a condição de CFL, o tamanho do passo no tempo. O artigo propunha um novo procedimento para resolver tais sistemas que não envolvia a utilização da fatoração aproximada. A solução era obtida iterativamente através dos métodos SLGS ou Newton, sem resultar nos erros inerentes do processo de fatoração aproximada. O algoritmo básico utilizado foi novamente o esquema explícito proposto em MacCormack (1969). A obtenção de um sistema diagonalmente dominante, a fim de acelerar o processo de convergência, foi conseguida com a utilização do esquema de separação de vetores de fluxo de Steger e Warming (1981). O método foi apresentado para resolver as equações de Navier-Stokes de camada fina, nas quais os efeitos viscosos estão confinados a regiões muito estreitas próximas à geometria e são representados principalmente por derivadas normais à superfície. Testes com o método SLGS foram realizados para problemas viscosos como: escoamento supersônico em torno de geometria esfera/cone, utilizando um CFL igual a 1500 na direção normal à superfície e convergência em aproximadamente 50 iterações; e escoamento transônico ao longo de um bocal convergente/divergente, utilizando um CFL igual a 17000 na direção normal à parede e convergência em 192 iterações. Para o problema do bocal, o método de Newton apresentou convergência em aproximadamente 16 iterações. A limitação do método foi a ordem de precisão espacial resultante, recaindo em primeira ordem. Em contrapartida, o esquema era mais eficiente do que o proposto em MacCormack (1982) devido à facilidade na implementação implícita de condições de contorno de todos os tipos, o que acelerava ainda mais o processo de convergência.

Ainda sob o contexto de ganho de convergência, uma técnica eficiente que emergiu para cálculos numéricos foi o procedimento “multigrid”. Esta técnica foi apresentada inicialmente para obtenção de soluções de estado estacionário de problemas envolvendo equações diferenciais parciais elípticas (Brandt, 1981), sendo posteriormente estendida para

equações diferenciais parciais hiperbólicas. O procedimento consistia em evoluir a solução de um dado sistema de equações diferenciais parciais para a condição de estado estacionário, utilizando passos no tempo elevados em malhas mais grossas. Desta forma, erros do processo de discretização eram mais rapidamente expelidos através do contorno externo.

Um dos trabalhos com esta técnica, envolvendo tanto o contexto estruturado como o contexto não estruturado de discretização espacial, foi Jameson e Yoon (1986), que desenvolveram um método “multigrid” para esquemas implícitos de fatoração aproximada tipo ADI, com o intuito de resolver as equações de Euler. O esquema implícito utilizava uma formulação de volumes finitos, em um contexto de discretização espacial estruturada, e empregava células computacionais tipo quadrilátero, com propriedades definidas no centro dos volumes. O esquema implícito era de segunda ordem de precisão no espaço em malhas suficientemente suaves. O procedimento “multigrid” foi implementado considerando que malhas mais grossas eram obtidas dobrando o espaçamento de malha. Valores das variáveis conservadas eram transferidos entre malhas por uma média ponderada pelos volumes das células computacionais, levando em consideração a pura definição de conservação inerente ao formalismo de volumes finitos. Os passos para solução via “multigrid” consistiam em:

- a) Calcular a correção da solução na malha mais fina e atualizá-la;
- b) Transferir os valores das variáveis conservadas para a malha mais grossa;
- c) Definir o resíduo na malha mais grossa a partir dos resíduos da malha mais fina e determinar um termo forçante a fim de direcionar a convergência na malha grossa;
- d) Calcular a correção da solução na malha grossa e atualizá-la;
- e) Repetir os passos “b” até “d” para a malha grossa seguinte até a última do ciclo;
- f) Após a correção da solução na malha mais grossa da sequência, esta era transferida para a malha imediatamente mais fina usando interpolação bilinear, sendo este processo executado sucessivamente através das malhas mais finas do ciclo até alcançar a malha inicial.

Um mesmo número de CFL era usado em todas as malhas, permitindo que passos no tempo locais progressivamente crescentes fossem usados em cada nível (malha) do ciclo. Apenas um passo no tempo era executado em cada nível. O custo computacional deste procedimento todo era superior ao calculado em uma malha simples, porém era satisfatoriamente compensado pelas razões de convergência excelentes obtidas. Testes numéricos foram realizados para escoamentos subsônicos e transônicos em torno de aerofólios NACA 0012, sem e com ângulo de ataque, e KORN, sem ângulo de ataque. Foram usados quatro níveis de malhas e fatores de redução de números de ciclos para convergência

da ordem de 15 foram alcançados. O uso de um algoritmo diagonal (Pulliam e Chaussee, 1981, por exemplo) foi sugerido como opção para acelerar ainda mais o processo de convergência, reduzindo o custo computacional envolvido na inversão dos sistemas de matrizes de bloco. Outro fator importante relatado para o ganho de convergência foi a estratégia de resolver um sistema pentadiagonal na malha mais fina, com o uso de dissipação artificial de diferenças segundas e quartas no LHS, e sistemas tridiagonais nas malhas grossas, com o uso de dissipação artificial de diferenças segundas, evidenciando a importância do amortecimento de erros de alta frequência no método “multigrid” através da melhor consistência dos termos dissipativos no RHS e LHS.

Mavriplis e Jameson (1987) elaboraram um algoritmo “multigrid” para resolver as equações de Euler bidimensionais em malhas não estruturadas formadas por células triangulares. O esquema numérico de solução das equações de movimento era simétrico e utilizava uma formulação de volumes finitos, com propriedades definidas nos nós da malha computacional (em inglês: “cell vertex”). Assim, cada volume computacional efetivo do esquema era formado por todas as células que concorriam para um dado nó. O método era de segunda ordem de precisão no espaço, exceto em regiões de elevados gradientes de pressão, em que um operador de dissipação artificial de diferenças segundas (JAMESON et al, 1981) reduzia a ordem de precisão à primeira. A integração no tempo usava um esquema tipo Runge-Kutta de cinco estágios (JAMESON; MAVRIPLIS, 1986), adequadamente projetado para amortecer erros de alta frequência, objetivo do algoritmo “multigrid”.

A decisão de adotar uma estratégia “multigrid” envolvendo uma sequência de malhas não relacionadas foi motivada pelo desejo de otimizar tanto a precisão como a eficiência do método de solução. Foi observado que, para um algoritmo “multigrid”, a precisão da solução era determinada unicamente pela malha mais fina, enquanto que a taxa de convergência era determinada pela malha mais grossa da sequência. Além disso, era importante combinar as vantagens de uma geração de malhas não estruturadas com àquelas de uma estratégia “multigrid” de forma desacoplada. Desta forma, foi desenvolvido um método que trabalhava com uma sequência de malhas não relacionadas, em que a principal chave para este procedimento era uma transferência eficiente de variáveis do escoamento e de resíduo entre as malhas. Esta transferência empregava um algoritmo de busca em árvore, em uma fase de pré-processamento, que rapidamente identificava regiões de intersecção entre células de malhas finas e grossas. Coeficientes e endereços de transferência (nós que compartilham uma área de intersecção) eram calculados e armazenados e, subsequentemente, utilizados no algoritmo de solução em cada nível do ciclo. Foi utilizado um ciclo de quatro malhas em que o

procedimento “multigrid” era iniciado na malha mais fina da sequência. As variáveis do escoamento e resíduos eram transferidos para a malha grossa subsequente e assim sucessivamente, através de interpolação linear e de funções de forma lineares, respectivamente. As equações nas malhas grossas eram modificadas para assegurar que elas representavam a solução da malha fina através da introdução de um termo forçante na definição do resíduo. O procedimento era repetido em malhas sucessivas mais grossas, em que era efetuado um passo no tempo em cada nível. Quando a malha mais grossa era alcançada, as correções eram transferidas para as malhas mais finas, sem qualquer interação intermediária, usando interpolação bilinear simples. Nessa estratégia, malhas mais finas eram obtidas ou por uma nova geração de malhas refinadas globalmente ou por refinamento adaptativo de malhas mais grosseiras. Resultados foram apresentados para uma configuração de dois aerofólios (um principal e um tipo “flape”), em extensivo estudo para vãos transônicos de aviões de ataque, para número de Mach 0,7 e ângulo de ataque 2,8 graus. Reduções de cinco ordens de magnitude no resíduo foram obtidas em 100 ciclos “multigrid”, em comparação com 600 ciclos transcorridos em uma única malha. Em qualquer das técnicas utilizadas para geração das malhas da sequência “multigrid”, foram observadas taxas de convergência comparáveis com as obtidas em algoritmos “multigrid”, para métodos de solução das equações de Euler, segundo um contexto de malhas estruturadas.

Técnicas mais simples para acelerar convergência de esquemas explícitos e implícitos, quando aplicados à resolução das equações de movimento fluido, foram também investigadas: passo no tempo variável espacialmente, amortecimento de entalpia e suavização de resíduo. O passo no tempo variável espacialmente visava utilizar o máximo passo no tempo permitido por um limite de estabilidade local em toda parte do domínio computacional. Isto tinha o efeito de assegurar que perturbações fossem propagadas através de todo o domínio até o limite exterior em um número de passos no tempo proporcional ao número de intervalos de malha ou células entre as fronteiras internas e externas. Esta técnica foi inicialmente utilizada em Jameson et al (1981). Outros trabalhos que a utilizaram foram: Jameson e Mavriplis (1986); Arnone et al (1991); Long et al (1991); Long e Radespiel (1991); Parthasarathy e Kallinderis (1995).

A estratégia de amortecimento de entalpia (em inglês: “enthalpy damping”) era baseada no fato de que as equações de Euler são não dissipativas, não apresentam viscosidade, e, devido a isso, a entalpia total permanece constante no domínio de cálculo, na condição de estado estacionário, em acordo com as equações de conservação de massa e de energia. Partindo desta compreensão física envolvendo as equações de Euler, termos forçantes

proporcionais à diferença entre a entalpia total local durante o processo de convergência e a entalpia total de escoamento não perturbado são adicionados às equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, e de conservação de energia, a fim de acelerar o processo de convergência para a condição de estado estacionário. Este procedimento foi inicialmente sugerido por Jameson et al (1981) e, levando em consideração que esquemas simétricos utilizam operadores de dissipação artificial, a fim de garantir estabilidade numérica, e que tais termos podem vir a representar uma pseudoviscosidade durante o processo de marcha no tempo, a equação de energia é resolvida em tais métodos avaliando a dissipação artificial em relação à entalpia total e não em relação à energia total local, garantindo, assim, o princípio conservativo inerente às equações de Euler (JAMESON et al 1981). Entre trabalhos que utilizaram esta técnica estavam: Jameson e Yoon (1986); Jameson e Mavriplis (1986); Long et al (1991); Baruzzi et al (1991).

O máximo passo no tempo que pode ser considerado é limitado pela condição de CFL (Courant et al 1928), que define que o domínio de dependência das equações discretizadas necessita no mínimo conter o domínio da equação diferencial original. Para aliviar esta restrição, uma suavização implícita de resíduos foi desenvolvida para aumentar a estabilidade do esquema. Esta estratégia nada mais consistia do que em determinar um valor médio de resíduo, ponderado pelo valor de resíduo de vizinhos. Inicialmente, a suavização explícita foi proposta, mas esta, embora resultasse em aumentos no valor do passo no tempo, não resultava em ganhos consideráveis de razão de convergência. Assim, a suavização implícita foi sugerida e observado que em malhas de quadriláteros, tal procedimento implicava em ausência de restrição por parte da condição de CFL e que o passo no tempo poderia ser utilizado sem limites. Este método recaía em um sistema de equações contendo quatro elementos diferentes de zero por linha em uma matriz de coeficientes (malhas triangulares e tetraedros) e não podia ser exatamente invertido por um algoritmo sem elevar muito o custo computacional para uma operação tão simples. Contudo, para problemas de interesse, o sistema era extremamente diagonal dominante. Desta forma, soluções aproximadas para os resíduos suavizados eram obtidas executando apenas duas iterações de Jacobi no sistema. Estes resíduos permitiam a aceleração de convergência para o método de marcha no tempo. Esta técnica foi introduzida no trabalho de Jameson e Mavriplis (1986). Outros trabalhos que utilizaram esta técnica foram: Arnone et al (1991); Long e Radespiel (1991); Long et al (1991); Swanson e Radespiel (1991).

A técnica de aceleração de convergência utilizada no presente trabalho de tese foi o método de Euler explícito, que constitui uma técnica para marcha no tempo, de passo

variável, visando acelerar a convergência para a solução de estado estacionário em todos os problemas simulados.

2.6 Operadores de dissipação artificial

A fim de beneficiar esquemas numéricos com discretização espacial simétrica (tais como o esquema centrado de Jameson e Mavriplis (1986)), foram desenvolvidos e implementados os chamados “Operadores de Dissipação Artificial”, cuja função básica é a de dar melhor tratamento numérico aos esquemas numéricos. Diferentemente de esquemas denominados “*upwind*” (os quais possuem implicitamente dissipação artificial), esquemas centrados necessitam da adição explícita de dissipação. São diversos os exemplos encontrados na literatura que tratam do estudo da influência de Operadores de Dissipação Artificial na qualidade da solução numérica.

Pulliam (1986) realizou uma análise entre dois modelos de dissipação artificial utilizados em algoritmos com discretização espacial simétrica: ambos escalares e isotrópicos, sendo um linear e outro não linear. Um esquema numérico implícito de fatoração aproximada foi utilizado para realizar experimentos numéricos, nos quais modelos de dissipação artificial foram implementados no LHS (*Left Hand Side*), a fim de acrescentar robustez e ganho de convergência ao esquema. Foram examinados os tratamentos dos modelos de dissipação nos contornos do domínio computacional, bem como análises referentes à estabilidade do esquema e à precisão provida pelos modelos. Testes foram realizados para determinação do coeficiente de pressão de escoamentos não viscosos com choque sobre o aerofólio NACA 0012. O artigo destacava que algoritmos simétricos, acoplados com modelos de dissipação artificial não lineares apropriados, podiam prover resultados precisos e perfis de ondas de choque bem definidos, livres de oscilação.

Maciel (2005) realizou um estudo através da comparação de um esquema numérico de discretização espacial simétrica e um operador de dissipação artificial com um esquema numérico assimétrico de alta resolução. Foram estudados o algoritmo explícito de Jameson e Mavriplis (1986), no contexto de uma discretização espacial simétrica e segunda ordem de precisão espacial, e o algoritmo também explícito de Harten (1983), no contexto de uma discretização espacial assimétrica, utilizando o conceito de separação de diferenças de fluxos, com igual ordem de precisão espacial. Foram resolvidas as equações de Euler em forma conservativa, empregando uma formulação de volumes finitos e discretização espacial

estruturada, em duas dimensões. Foi realizado o estudo dos problemas físicos de estado estacionário do escoamento transônico em torno de um aerofólio NACA 0012 e do escoamento supersônico em torno da geometria de corpo rombudo, ambos sem ângulo de ataque. A marcha no tempo empregada no esquema de Jameson e Mavriplis (1986) foi o método de Runge-Kutta com segunda ordem de precisão, enquanto que o algoritmo de alta resolução utilizou uma integração no tempo baseada no método de separação temporal. Os resultados obtidos apresentaram boa comparação entre os algoritmos estudados.

Maciel (2005) descreve a implementação dos algoritmos de Jameson e Mavriplis (1986) e de Liou e Steffen (1993) para resolução numérica das equações de Euler ou de Navier-Stokes no espaço tridimensional, segundo um contexto de malhas não estruturadas. Os algoritmos eram explícitos e com segunda ordem de precisão no tempo. O esquema de Jameson e Mavriplis (1986) era de segunda ordem de precisão espacial e centrado, necessitando, assim, de adição de dissipação artificial para a estabilidade numérica na presença de instabilidades decorrentes de desacoplamento de soluções ou de não linearidades físicas. O esquema de Liou e Steffen (1993) era de primeira ordem de precisão espacial, do tipo separação de vetores de fluxo, logo não necessitou de operador de dissipação artificial. A marcha no tempo foi realizada por um método tipo Runge-Kutta de cinco estágios para os dois esquemas.

Maciel (2006) realizou um trabalho no qual comparou 2 modelos de turbulência, analisando-os no tocante à qualidade e à precisão da solução. Os esquemas de MacCormack (1969) e de Jameson e Mavriplis (1986) foram implementados, segundo uma formulação de volumes finitos e discretização espacial estruturada, a fim de realizarem as experimentações numéricas. Foram resolvidas as equações de Navier-Stokes com média de Reynolds. Foi resolvido também o problema do escoamento supersônico ao longo de uma rampa. Um passo no tempo variável espacialmente foi implementado a fim de acelerar o processo de convergência. Os resultados foram de boa qualidade, destacando o modelo de Cebeci e Smith (1970) como apresentando melhores características de qualidade da solução e soluções mais críticas, quando o algoritmo de MacCormack (1969) é empregado. Quando o esquema de Jameson e Mavriplis (1986) foi utilizado, diferenças significativas não são percebidas entre os modelos. Nesse trabalho, houve a introdução de um operador de dissipação artificial para garantir a estabilidade numérica do esquema.

Turkel e Vatsa (1994) apresentaram dois modelos de dissipação artificial a fim de reduzir a viscosidade numérica tipicamente utilizada nos esquemas correntes. Os autores propunham a substituição dos modelos escalares por modelos matriciais, obtidos a partir de

conceitos de esquemas assimétricos. Foram apresentados modelos não lineares e anisotrópicos, sendo um escalar e o outro matricial. O modelo matricial era capaz de prover um determinado grau de precisão com um menor número de pontos de malha. Bons resultados foram obtidos para o escoamento transônico sobre uma asa ONERA M6, quando comparados com os resultados do modelo escalar, principalmente nas proximidades de ondas de choque e camadas limite, mantendo boa razão de convergência. Os parâmetros de análise foram: distribuição de pressão, coeficiente de sustentação, coeficiente de arrasto e propriedades de convergência.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 Formulação teórica e numérica no espaço bidimensional

A elaboração dos códigos para a realização das simulações foi antecedida de estudos detalhados de técnicas numéricas amplamente utilizadas em problemas aeronáuticos. Para isso, foi necessário o ganho de sensibilidade com a linguagem de programação FORTRAN, bem como com as técnicas de diferenças finitas e de aceleração de convergência, além do trabalho com o algoritmo de Jameson e Mavriplis (1986), e com os modelos de dissipação artificial linear e não-linear de Pulliam (1986) utilizados na implementação das ferramentas computacionais.

A pesquisa realizada teve como foco a obtenção de ferramentas para análises preliminares de escoamentos de gás, no caso, gás Hélio, internos a geometrias do tipo dutos e/ou canais, através do estudo dos contornos de densidade, velocidade, pressão, número de Mach e energia resultantes das simulações.

Inicialmente, foi necessário um primeiro contato com simulações de escoamentos livres invíscidos, devido à menor complexidade na modelagem matemática. Para isso bastou-se desprezar os termos viscosos das equações de Navier-Stokes, o que levou à modelagem das equações de Euler, que descrevem o movimento de fluidos, e expressam a conservação de massa, de quantidade de movimento e de energia para um meio não-viscoso, não condutor de calor e compressível, na ausência de forças externas. Após realizadas as primeiras simulações, resolveu-se então fazer a implementação das equações de Navier-Stokes, visando resultados com maior precisão. Detalhes dos tipos de escoamentos bem como das modelagens matemática e computacional trabalhadas serão apresentados a seguir.

3.1.1 Escoamento viscoso versus não-viscoso (invíscido)

Quando um fluido se move, ele está sujeito aos fenômenos de difusão de massa, viscosidade e condução térmica. Escoamentos sujeitos a estes fenômenos são usualmente conhecidos como viscosos. Em comparação, um escoamento que não envolve nenhum dos fenômenos supracitados é conhecido como um escoamento não-viscoso ou invíscido.

Existem casos práticos de escoamentos na Aerodinâmica onde a influência dos efeitos de viscosidade é pequena e, portanto, podem ser modelados como escoamentos invíscidos.

Teoricamente, o escoamento invíscido ocorre quando o número de Reynolds tende a infinito (ANDERSON, 1990), mas para casos práticos esta hipótese é adotada quando o número de Reynolds é muito alto e também finito.

O escoamento, tanto viscoso como não viscoso, pode ser representado por equações diferenciais que utilizam os princípios de conservação de massa, energia e quantidade de movimento, como as equações de Navier-Stokes para casos viscosos e as equações de Euler para casos não viscosos.

3.1.2 Equações de Navier Stokes

A fim de se iniciar as simulações de escoamentos para os casos viscosos, visando posterior aplicação para o escoamento de gás Hélio interno a um canal do VHTGR, foram utilizadas as equações de Navier-Stokes: trata-se de um sistema de equações acopladas que governam os escoamentos de fluidos viscosos. Em um sistema de coordenadas generalizadas são escritas como segue:

$$\partial_{\tau} \bar{Q} + \partial_{\xi} (\bar{E}_e - \bar{E}_v) + \partial_{\eta} (\bar{F}_e - \bar{F}_v) = 0 \quad (14)$$

Sendo \bar{Q} o vetor de variáveis conservadas, \bar{E}_e e \bar{F}_e os vetores de fluxo invíscido (ou de Euler) e \bar{E}_v e \bar{F}_v os vetores de fluxo viscoso nas direções ξ e η respectivamente. Os vetores \bar{Q} , \bar{E}_e , \bar{F}_e , \bar{E}_v e \bar{F}_v são descritos abaixo:

$$\bar{Q} = J^{-1} \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ e \end{Bmatrix}; \quad (15)$$

$$\bar{E}_e = J^{-1} \begin{Bmatrix} \rho U \\ \rho u U + p \xi_x \\ \rho v U + p \xi_y \\ (e + p) U - p \xi_t \end{Bmatrix}; \quad (16)$$

$$\bar{F}_e = J^{-1} \begin{Bmatrix} \rho V \\ \rho u V + p \eta_x \\ \rho v V + p \eta_y \\ (e + p)V - p \eta_t \end{Bmatrix}; \quad (17)$$

$$\bar{E}_v = J^{-1} \frac{1}{Re} \begin{Bmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \xi_x + \tau_{xy} \xi_y \\ \tau_{xy} \xi_x + \tau_{yy} \xi_y \\ \beta_x \xi_x + \beta_y \xi_y \end{Bmatrix}; \quad (18)$$

$$\bar{F}_v = J^{-1} \frac{1}{Re} \begin{Bmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \eta_x + \tau_{xy} \eta_y \\ \tau_{xy} \eta_x + \tau_{yy} \eta_y \\ \beta_x \eta_x + \beta_y \eta_y \end{Bmatrix}, \quad (19)$$

Em que:

$$\tau_{xx} = 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right); \quad (20)$$

$$\tau_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right); \quad (21)$$

$$\tau_{yy} = 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right); \quad (22)$$

$$\beta_x = \tau_{xx} u + \tau_{xy} v + \left(\frac{\gamma \mu}{Pr} \right) \frac{\partial e_i}{\partial x}; \quad (23)$$

$$\beta_y = \tau_{xy} u + \tau_{yy} v + \left(\frac{\gamma \mu}{Pr} \right) \frac{\partial e_i}{\partial y}; \quad (24)$$

$$u_x = u_\xi \xi_x + u_\eta \eta_x; \quad (25)$$

$$u_y = u_\xi \xi_y + u_\eta \eta_y; \quad (26)$$

$$v_x = v_\xi \xi_x + v_\eta \eta_x; \quad (27)$$

$$v_y = v_\xi \xi_y + v_\eta \eta_y; \quad (28)$$

$$e_i = \left[\frac{e}{\rho} - \frac{u^2 + v^2}{2} \right]; \quad (29)$$

$$\frac{\partial e_i}{\partial x} = \frac{\partial e_i}{\partial \xi} \xi_x + \frac{\partial e_i}{\partial \eta} \eta_x; \quad (30)$$

$$\frac{\partial e_i}{\partial y} = \frac{\partial e_i}{\partial \xi} \xi_y + \frac{\partial e_i}{\partial \eta} \eta_y. \quad (31)$$

Sendo ρ a densidade do fluido; u e v as componentes cartesianas do vetor velocidade nas direções x e y , respectivamente; e a energia total por unidade de volume do meio fluido; e_i a energia interna por unidade de volume; p a pressão estática; U e V as velocidades contravariantes; os τ 's representam os termos do tensor de tensões viscosas; ξ_x e ξ_y são as derivadas de ξ em relação a x e y , respectivamente; η_x e η_y as derivadas de η em relação a x e y , respectivamente; Pr é o número de Prandtl; Re é o número de Reynolds; μ é a viscosidade molecular do fluido; γ a razão entre calores específicos a pressão e volume constantes C_p e C_v , respectivamente. Para as primeiras simulações (escoamentos supersônicos de ar para uma malha do tipo rampa) $\gamma = 1,4$. A fim de se obter o valor de γ para o Hélio (γ_{He}), foram utilizados os valores $C_p = 5195$ J/kg.K e $C_v = 3117$ J/kg.K (KTA, 1978), sendo possível concluir que $\gamma_{He} = 1,67$. O Jacobiano da transformação de coordenadas e os termos de métrica são definidos como segue:

$$J = \frac{1}{x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi}, \quad \xi_x = Jy_\eta, \quad \xi_y = -Jx_\eta, \quad \eta_x = -Jy_\xi \text{ e } \eta_y = Jx_\xi \quad (32)$$

Para a realização das simulações, levou-se em conta o caso de malha estacionária. Assim, os termos ξ_t e η_t são iguais a zero. As velocidades contravariantes U e V são, então, representadas por:

$$U = \xi_x u + \xi_y v \text{ e } V = \eta_x u + \eta_y v \quad (33)$$

O número de Reynolds que caracteriza o regime de escoamento é estimado, em alguns casos por:

$$Re = u_{REF} l / \mu \quad (34)$$

Onde u_{REF} é uma velocidade característica do escoamento e l é um comprimento característico. Para os casos simulados envolvendo efeitos de viscosidade, a viscosidade molecular (μ) foi estimada por (KTA, 1978):

$$\mu = 3,674 \cdot 10^{-7} \cdot T^{0,7} \quad (35)$$

ou, com a hipótese do gás ideal,

$$\mu = 3,674 \cdot 10^{-7} \cdot (e_i / c_v)^{0,7} \quad (36)$$

Onde μ e T estão medidos em Pa.s e em K, respectivamente.

Para que fosse possível resolver o sistema matricial das equações de Navier-Stokes (Eq. 14), foi feita a utilização da equação de estado para os gases perfeitos:

$$p = (\gamma - 1) \left[e - \rho \frac{u^2 + v^2}{2} \right] \quad (37)$$

Para a resolução das equações de Navier-Stokes, foi feita a divisão do domínio de cálculo em um grande número de células retangulares, assim, a Eq. (14) foi aplicada a cada célula.

3.1.2.1 Esquema Numérico de Jameson e Mavriplis (1986) aplicado às equações de Navier-Stokes

As derivadas espaciais $\partial_\xi \bar{E}_e$, $\partial_\xi \bar{E}_v$, $\partial_\xi \bar{F}_e$ e $\partial_\xi \bar{F}_v$ podem ser aproximadas por diferenças centrais de segunda-ordem. Assim, a Eq. (14) pode ser reescrita como:

$$\Delta \bar{Q} = -\Delta t ((\delta_\xi (\bar{E}_e - \bar{E}_v) + \delta_\eta (\bar{F}_e - \bar{F}_v))), \quad (38)$$

em que:

$$\begin{aligned} \delta_\xi \bar{E}_{e_{i,j}} &= \frac{\bar{E}_{e_{i+1,j}} - \bar{E}_{e_{i-1,j}}}{2}, & \delta_\xi \bar{E}_{v_{i,j}} &= \frac{\bar{E}_{v_{i+1,j}} - \bar{E}_{v_{i-1,j}}}{2}, \\ \delta_\eta \bar{F}_{e_{i,j}} &= \frac{\bar{F}_{e_{i,j+1}} - \bar{F}_{e_{i,j-1}}}{2}, & \delta_\eta \bar{F}_{v_{i,j}} &= \frac{\bar{F}_{v_{i,j+1}} - \bar{F}_{v_{i,j-1}}}{2} \end{aligned} \quad (39)$$

Desta forma, a Eq. (38) passa a ser escrita da seguinte forma:

$$\bar{Q}^{n+1} = \bar{Q}^n - \Delta t \left(\frac{\bar{E}_{e_{i+1,j}} - \bar{E}_{e_{i-1,j}}}{2} - \frac{\bar{E}_{v_{i+1,j}} - \bar{E}_{v_{i-1,j}}}{2} + \frac{\bar{F}_{e_{i,j+1}} - \bar{F}_{e_{i,j-1}}}{2} - \frac{\bar{F}_{v_{i,j+1}} - \bar{F}_{v_{i,j-1}}}{2} \right) \quad (40)$$

A introdução de um operador de dissipação “ D ” é necessária a fim de garantir a estabilidade numérica, por exemplo, em casos de desacoplamento par-ímpar de soluções e de instabilidades não-lineares, como ondas de choque. Então a Eq. (40) é reescrita como:

$$\begin{aligned} \bar{Q}^{n+1} &= \bar{Q}^n - \Delta t \left(\frac{\bar{E}_{e_{i+1,j}} - \bar{E}_{e_{i-1,j}}}{2} - \frac{\bar{E}_{v_{i+1,j}} - \bar{E}_{v_{i-1,j}}}{2} + \frac{\bar{F}_{e_{i,j+1}} - \bar{F}_{e_{i,j-1}}}{2} - \frac{\bar{F}_{v_{i,j+1}} - \bar{F}_{v_{i,j-1}}}{2} \right) \\ &+ D_\xi + D_\eta \end{aligned} \quad (41)$$

em que D_ξ e D_η são os operadores nas direções ξ e η , respectivamente.

3.1.3 Equações de Euler

As equações de Euler são obtidas desprezando os vetores de fluxo viscoso presentes nas equações de Navier-Stokes. Em coordenadas curvilíneas generalizadas, as equações de Euler tomam a seguinte forma:

$$\partial_{\tau}\bar{Q} + \partial_{\xi}\bar{E} + \partial_{\eta}\bar{F} = 0 \quad (42)$$

Sendo \bar{Q} o vetor de variáveis conservadas, \bar{E} e \bar{F} vetores de fluxo de Euler nas direções ξ e η respectivamente. Os vetores \bar{Q} , \bar{E} e \bar{F} são descritos abaixo:

$$\bar{Q} = J^{-1} \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ e \end{Bmatrix},$$

$$\bar{E} = J^{-1} \begin{Bmatrix} \rho U \\ \rho u U + \xi_x p \\ \rho v U + \xi_y p \\ U(e + p) - \xi_t p \end{Bmatrix}, \quad (43)$$

$$\bar{F} = J^{-1} \begin{Bmatrix} \rho V \\ \rho u V + \eta_x p \\ \rho v V + \eta_y p \\ V(e + p) - \eta_t p \end{Bmatrix}$$

3.1.3.1 Esquema Numérico de Jameson e Mavriplis (1986) aplicado às equações de Euler

Para a implementação do algoritmo de Jameson e Mavriplis (1986), as derivadas espaciais $\partial_{\xi}\bar{E}$ e $\partial_{\eta}\bar{F}$ tiveram de ser aproximadas por diferenças centrais de segunda-ordem. Assim, a Equação (42) passou a ser escrita como

$$\Delta\bar{Q} = -\Delta t(\delta_{\xi}\bar{E} + \delta_{\eta}\bar{F}) \quad (44)$$

Em que

$$\delta_{\xi} \bar{E}_{i,j} = \frac{\bar{E}_{i+1,j} - \bar{E}_{i-1,j}}{2} \quad \text{e} \quad \delta_{\eta} \bar{F}_{i,j} = \frac{\bar{F}_{i,j+1} - \bar{F}_{i,j-1}}{2} \quad (45)$$

Desta forma, a Equação (44) passa a ser escrita da seguinte forma:

$$\bar{Q}^{n+1} = \bar{Q}^n - \Delta t \left(\frac{\bar{E}_{i+1,j} - \bar{E}_{i-1,j}}{2} + \frac{\bar{F}_{i,j+1} - \bar{F}_{i,j-1}}{2} \right) \quad (46)$$

A Eq. (46) é reescrita devido à introdução dos operadores de dissipação artificial:

$$\bar{Q}^{n+1} = \bar{Q}^n - \Delta t \left(\frac{\bar{E}_{i+1,j} - \bar{E}_{i-1,j}}{2} + \frac{\bar{F}_{i,j+1} - \bar{F}_{i,j-1}}{2} \right) + D_{\xi} + D_{\eta}, \quad (47)$$

Em que D_{ξ} e D_{η} são os operadores nas direções ξ e η , respectivamente.

3.2 Operadores de dissipação artificial no espaço bidimensional

Os modelos de dissipação artificial estudados neste trabalho são baseados em Pulliam (1986), ambos isotrópicos e escalares, sendo um linear e outro não-linear, implementados a fim de prover estabilidade numérica ao esquema de Jameson e Mavriplis (1986), já que trata-se de um esquema centrado, requerendo portanto, adição explícita de dissipação.

3.2.1 Modelo escalar isotrópico linear de Pulliam (1986)

O modelo de dissipação artificial isotrópico escalar linear de Pulliam (1986) consiste em fornecer dissipação uniforme no domínio de cálculo e nas quatro equações de conservação, atuando independentemente em cada direção coordenada. Em outras palavras, a dissipação fornecida na direção ξ leva em conta uma ponderação proveniente da informação originada das instabilidades na direção η com o mesmo peso relativo da direção ξ , caracterizando, então, um isotropismo no modelo. Tal operador pode ser definido por:

$$D_\xi = D_\xi^{(4)} = -\Delta t_{i,j} \varepsilon_E J^{-1} \left(\nabla_\xi \Delta_\xi \right)^2 J \bar{Q}^n \quad \text{e} \quad D_\eta = D_\eta^{(4)} = -\Delta t_{i,j} \varepsilon_E J^{-1} \left(\nabla_\eta \Delta_\eta \right)^2 J \bar{Q}^n \quad (48)$$

O parâmetro ε_E tem seu valor ajustado através de experimentação numérica. Devido ao fato de não existir distinção entre as instabilidades resultantes de soluções desacopladas e da instabilidade resultante da presença de ondas de choque, por exemplo, Pulliam (1986) sugere o uso do modelo escalar não-linear.

3.2.2 Modelo escalar isotrópico não-linear de Pulliam (1986)

O modelo escalar isotrópico não-linear de Pulliam (1986) consiste em fornecer dissipação não-uniforme no domínio de cálculo para tratar diferentemente as possíveis instabilidades características. Este modelo utiliza um sensor de pressão para a distinção entre dois tipos clássicos de instabilidades numéricas em aplicações aeroespaciais: aquelas resultantes de soluções pares e ímpares desacopladas, erros de discretização, etc., chamadas instabilidades de campo; e as instabilidades resultantes de ondas de choque. O sensor de pressão permite que uma permuta entre um termo de dissipação de diferenças segundas, apropriado para amortecer instabilidades resultantes de ondas de choque, e um termo de dissipação de diferenças quartas, utilizado para prover estabilidade numérica, seja realizada. Então, os termos D_ξ e D_η são definidos como:

$$D_{\xi_{i,j}} = \nabla_\xi \left(\sigma_{i+1,j} J_{i+1,j}^{-1} + \sigma_{i,j} J_{i,j}^{-1} \right) \left(\varepsilon_{\xi_{i,j}}^{(2)} \Delta_\xi J_{i,j} \bar{Q}_{i,j}^n - \varepsilon_{\xi_{i,j}}^{(4)} \Delta_\xi \nabla_\xi \Delta_\xi J_{i,j} \bar{Q}_{i,j}^n \right); \quad (49)$$

$$D_{\eta_{i,j}} = \nabla_\eta \left(\sigma_{i+1,j} J_{i+1,j}^{-1} + \sigma_{i,j} J_{i,j}^{-1} \right) \left(\varepsilon_{\eta_{i,j}}^{(2)} \Delta_\eta J_{i,j} \bar{Q}_{i,j}^n - \varepsilon_{\eta_{i,j}}^{(4)} \Delta_\eta \nabla_\eta \Delta_\eta J_{i,j} \bar{Q}_{i,j}^n \right). \quad (50)$$

Os termos $\varepsilon_{\xi_{i,j}}^{(2)}$ e $\varepsilon_{\xi_{i,j}}^{(4)}$ são definidos em Pulliam (1986), em Maciel (2002, 2006). O sensor de pressão é definido como:

$$v_{\xi_{i,j}} = \left| p_{i+1,j} - 2p_{i,j} + p_{i-1,j} \right| / \left(p_{i+1,j} + 2p_{i,j} + p_{i-1,j} \right). \quad (51)$$

A mesma analogia é válida para a direção η . O termo $\sigma_{i,j}$ é a soma dos raios espectrais das matrizes jacobianas invíscidas, e é definido, no caso bidimensional, como:

$$\sigma_{i,j} = (|U| + a\sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2} + |V| + a\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2})_{i,j} \quad (52)$$

onde a é a velocidade do som.

3.3 Definição dos problemas físicos, condições iniciais e de contorno para a formulação bidimensional

3.3.1 Definição dos problemas físicos

Os problemas estudados no presente trabalho podem ser alocados em 2 grupos:

1) Os que dizem respeito às análises preliminares do algoritmo de Jameson e Mavriplis (1986) e dos modelos de dissipação artificial linear e não-linear de Pulliam (1986) envolvendo escoamentos livres supersônicos para a configuração de rampa para os casos Euler e Navier-Stokes. Para os problemas estudados nesse grupo, as equações de Euler e Navier-Stokes foram adimensionalizadas em relação à densidade de escoamento livre, ρ_∞ , e à velocidade do som de escoamento livre, a_∞ . Então, a densidade foi adimensionalizada em relação à ρ_∞ , as velocidades u e v foram adimensionalizadas em relação à a_∞ , a pressão e a energia total foram adimensionalizadas em relação ao produto $\rho_\infty(a_\infty)^2$. O sistema matricial de equações de Euler e Navier-Stokes é então fechado com a equação (37), admitindo a hipótese de gás ideal. É importante destacar que os valores reais das variáveis são facilmente obtidos pela multiplicação dos valores dimensionais pelos termos de adimensionalização. Assim, se for necessário calcular a pressão no seu valor real, basta multiplicar os valores obtidos da simulação por $\rho_\infty(a_\infty)^2$.

2) Os que dizem respeito às simulações de escoamentos subsônicos, para os casos Euler e Navier-Stokes (este último do tipo laminar-viscoso), ambos internos a um canal com obstáculo, também envolvendo o algoritmo de Jameson e Mavriplis (1986) e os modelos de dissipação artificial linear e não-linear de Pulliam (1986). Nesse caso, a adimensionalização adotada foi a seguinte: densidade na entrada do canal adimensionalizada por ela mesma, ρ_{entrada} , neste caso, $\rho_{\text{entrada}} = 1,0$; velocidades u e v adimensionalizadas pela velocidade do som da entrada, a_{entrada} , neste caso $(a_{\text{entrada}})^2 = \gamma_{\text{He}} \cdot R_{\text{He}} \cdot T_{\text{entrada}}$, onde $R_{\text{He}} =$ constante do gás hélio (no presente trabalho, $R_{\text{He}} = 2078,625 \text{ J/kg.K}$) e $T_{\text{entrada}} =$ temperatura do gás hélio na entrada do canal obtida de Bess et al (2010), no caso, $T_{\text{entrada}} = 668,15 \text{ K}$; pressão p adimensionalizada

por $\rho_{\text{entrada}} \cdot (a_{\text{entrada}})^2$. Novamente, se for necessário calcular a pressão no seu valor real, basta multiplicar os valores obtidos da simulação por $\rho_{\text{entrada}} \cdot (a_{\text{entrada}})^2$.

Para esta adimensionalização, foi necessário considerar que a densidade na entrada e a temperatura na entrada fossem constantes, o que é consistente, pois o canal deve ser alimentado por uma vazão à temperatura constante na entrada.

3.3.2 Condições iniciais e de contorno

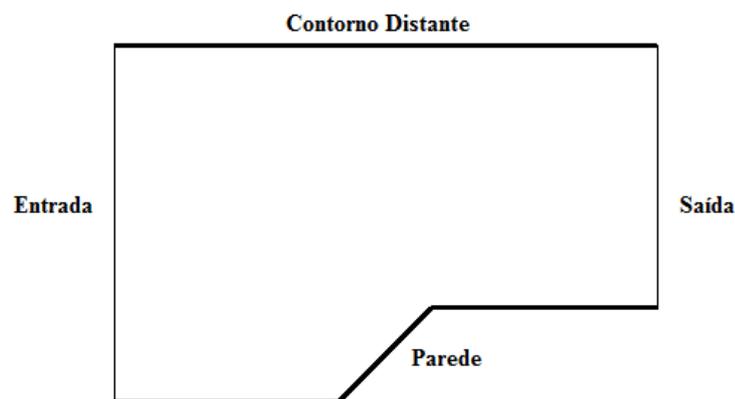
A condição inicial adotada nos problemas propostos para o grupo 1 é a de escoamento não perturbado para todo o domínio de cálculo. O vetor de variáveis conservadas é definido como segue:

$$Q_{\infty} = \left\{ 1 \quad M_{\infty} \cos \theta \quad M_{\infty} \sin \theta \quad \left[\frac{1}{\gamma(\gamma-1)} + \frac{M_{\infty}^2}{2} \right] \right\}^t, \quad (53)$$

em que M_{∞} representa o número de Mach de escoamento não-perturbado e θ é o ângulo de incidência do escoamento à montante da configuração em análise.

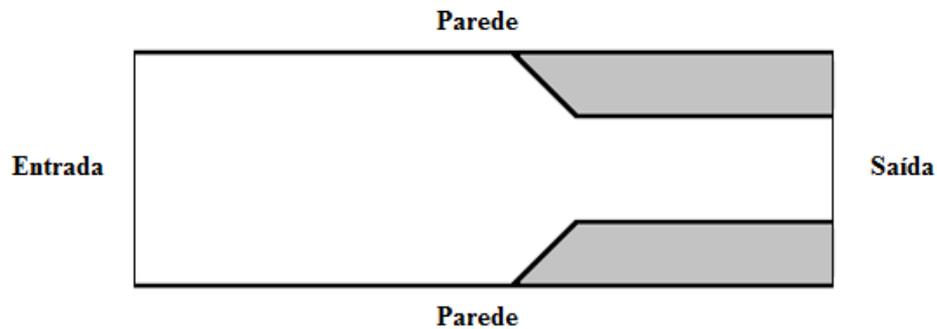
Em relação aos problemas do grupo 2, são trabalhadas condições iniciais que levam em conta valores estimados na entrada do canal. Os contornos para a configuração de rampa e para a configuração de canal com obstáculo utilizadas para as simulações podem ser vistos nas Figuras 5 e 6, respectivamente.

Figura 5: Contornos para rampa



Fonte: autoria própria

Figura 6: Contornos para o canal com obstáculo



Fonte: autoria própria

As condições de contorno utilizadas nas simulações foram:

- a) Parede - As simulações para o caso Euler requerem a condição de tangência de fluxo. Segundo o formalismo de diferenças finitas, as componentes cartesianas u e v são determinadas definindo que $v_{i,1} = 0$ ($j=1$ define computacionalmente a parede) e extrapolando a componente $u_{i,1}$ de seu ponto adjacente. Os casos viscosos (Navier-Stokes) impõem a condição de não-deslizamento (“no-slip”) e de impermeabilidade, ou seja, o vetor velocidade é igual ao vetor nulo na parede: no caso $u_{i,1} = v_{i,1} = 0$ (configuração de rampa) e $u_{i,1} = v_{i,1} = u_{i,j_{\max}} = v_{i,j_{\max}} = 0$ (configuração de canal com obstáculo) para o formalismo de diferenças finitas;
- b) Contorno Distante (do inglês: “far field”) - Na implementação das condições de contorno na região externa limitante da malha para os problemas físicos de escoamentos externos e internos, pode-se trabalhar quatro situações físicas possíveis: entrada com escoamento subsônico, entrada com escoamento supersônico, saída com escoamento subsônico e saída com escoamento supersônico. No presente trabalho, foram trabalhadas as condições de entrada e saída descritas a seguir:
 - b.1) Entrada com escoamento supersônico - Todas as variáveis são especificadas no contorno de entrada do domínio de cálculo em termos dos valores de escoamento à jusante.
 - b.2) Saída com escoamento supersônico - As quatro características que regem as equações de Euler vêm da região interna do domínio de cálculo, não sendo possível assim especificar valores de variáveis na saída. A extrapolação de ordem zero é aplicada a todas as componentes do vetor de variáveis conservadas.
 - b.3) Entrada com escoamento subsônico – Considerando o conceito de relações características unidimensionais na direção normal de penetração do escoamento, a entrada com escoamento

subsônico apresenta três velocidades características de propagação de informações que têm direção e sentido para dentro do domínio de cálculo, não podendo ser extrapoladas. Para estas três informações, são necessárias as especificações de três condições. Jameson e Mavriplis (1986) indicam como grandezas adequadas para especificação a densidade de escoamento não perturbado e as componentes cartesianas u e v do vetor velocidade do escoamento não à jusante. No presente trabalho, uma extrapolação de ordem zero é efetuada para a pressão, sendo a energia total definida pela equação de estado dos gases perfeitos.

b.4) Saída com escoamento subsônico - Três características que regem as equações de Euler vêm da região interna do domínio de cálculo. Uma condição deve ser especificada para o contorno. Neste caso, a pressão é fixada na saída do domínio de cálculo, permanecendo com o seu respectivo valor de escoamento estagnado. As demais três propriedades são extrapoladas do domínio interno.

Para todas as simulações, a fim de acelerar a convergência para o caso de estado estacionário, foi utilizada a técnica de passo no tempo variável espacialmente. A ideia básica deste procedimento consiste em manter constante o número de CFL em todo o domínio de cálculo, permitindo, assim, o uso de passos no tempo apropriados para cada região específica da malha durante o processo de convergência. Desta forma, e de acordo com a definição do número de CFL, é possível escrever:

$$\Delta t_{i,j} = CFL(\Delta s)_{i,j} / c_{i,j}, \quad (54)$$

em que CFL é o número de “Courant-Friedrichs-Lewy” para prover estabilidade numérica ao esquema; $c_{i,j}$ é a velocidade característica máxima de transporte de informações no domínio de cálculo; e $(\Delta s)_{i,j}$ é um comprimento característico de transporte de informações. Segundo o formalismo de diferenças finitas, em um sistema de coordenadas curvilíneas generalizadas, pode-se definir $(\Delta s)_{i,j} = \Delta \xi = \Delta \eta = 1$ e $c_{i,j} = \max(|U| + a\sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}, |V| + a\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2})_{i,j}$, que representa a soma dos autovalores máximos das matrizes Jacobianas em cada direção.

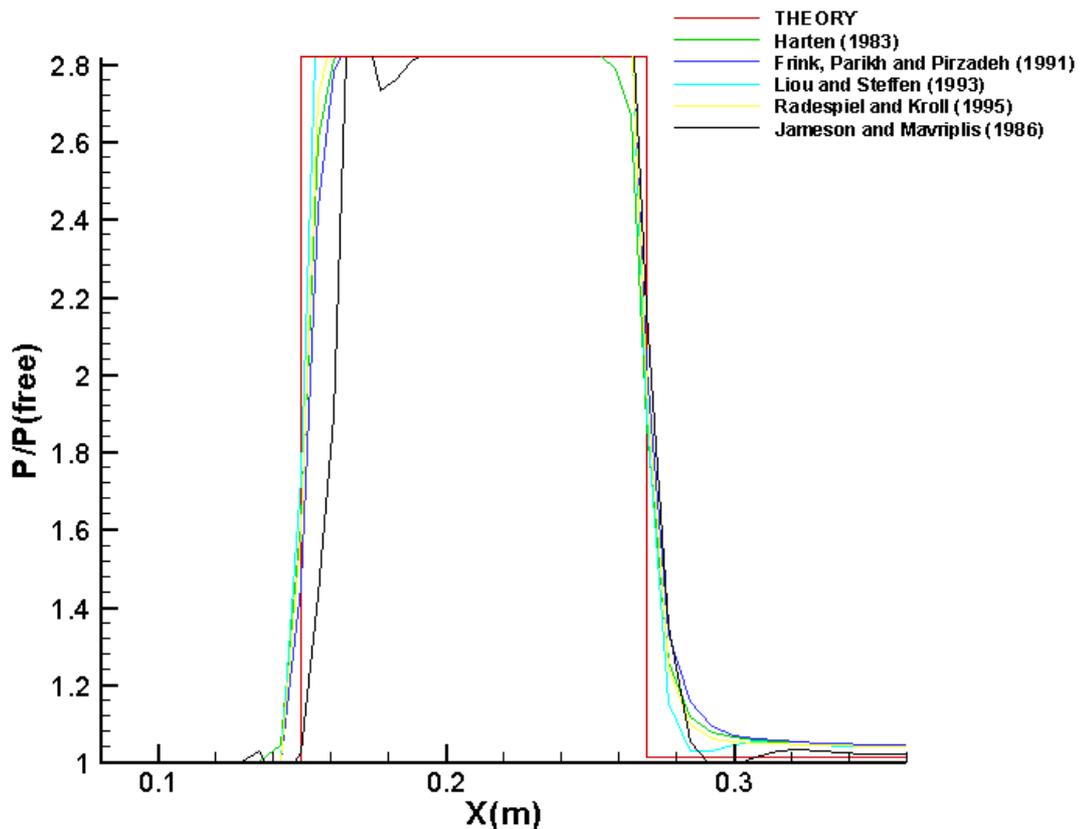
3.4 Validação das ferramentas computacionais

A validação das ferramentas seguiu um padrão de análise levando em conta casos aeronáuticos. Dados obtidos de Maciel (2007) resultantes das simulações realizadas com os esquemas de Harten (1983), Frink, Parikh e Pirzadeh (1991), Liou e Steffen (1993), Radespiel

e Kroll (1995), foram utilizados para a comparação com as soluções obtidas no presente trabalho através do esquema de Jameson e Mavriplis (1986), para a razão de pressão na parede da rampa no caso Euler, através do código DISSIP2D_EULER.

No trabalho realizado por Maciel (2007), os esquemas *upwind* utilizados foram aplicados na solução de problemas aeronáuticos e aeroespaciais. Todos os esquemas são de primeira ordem de precisão no espaço. As equações de Euler em sua forma conservativa, implementadas através do emprego de uma formulação de volumes finitos e discretização espacial estruturada, no espaço bidimensional, foram resolvidas. Os resultados obtidos estão na Figura 7. No caso específico do escoamento supersônico para a configuração de rampa, os esquemas apresentaram bom comportamento, com destaque para o esquema de Harten (1983).

Figura 7: Razão de pressão obtida para a configuração de rampa



O comportamento do esquema de Jameson e Mavriplis (1986) pode ser evidenciado na Figura 7. Como pode ser observado, a pressão tem leve oscilação no patamar em relação ao valor teórico. Apesar disso, percebe-se que a solução gerada não diverge do valor teórico de

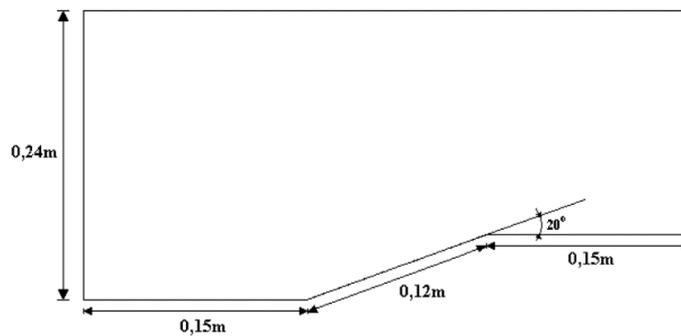
forma a comprometer a qualidade do método utilizado, já que a discretização das equações governantes com fórmulas centrais não é dissipativa: tais fórmulas podem conduzir a oscilações espúrias em problemas nos quais a convecção é dominante. Além disso, por ser um esquema de segunda ordem de precisão no espaço, ele não trata de forma adequada as oscilações de pressão em regiões de gradientes de pressão elevados. Logo, com base nas comparações e levando em conta as particularidades de cada esquema, o código `DISSIPA2D_EULER` apresentou bom comportamento. Após essa verificação, foi possível seguir com as simulações para os demais casos.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Problema físico da rampa: caso Euler

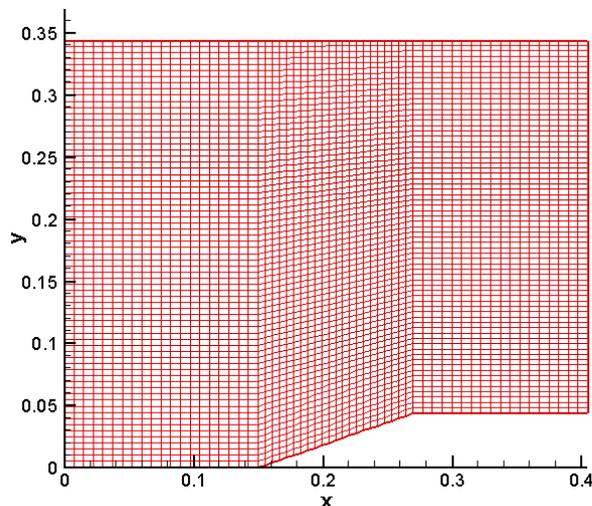
A implementação das equações de Euler, bem como do algoritmo de Jameson e Mavriplis (1986) e dos modelos de dissipação artificial de Pulliam (1986) em um contexto de diferenças finitas resultaram no código denominado DISSIP2D_EULER (estrutura do programa principal presente no apêndice A). Em princípio, uma malha estruturada e uniforme para a configuração da rampa com 61 pontos na direção ξ e 71 na direção η , obtida de forma algébrica, foi utilizada para as simulações de escoamento livre supersônico de ar. A geometria da rampa e a malha utilizadas podem ser visualizadas nas Figuras 8 e 9, respectivamente.

Figura 8: Geometria da configuração de rampa



Fonte: Maciel (2002)

Figura 9: Malha para a configuração de rampa utilizada nas simulações para o caso Euler



Para as simulações, testes foram realizados em um microcomputador PENTIUM Dual-Core – 2,3GHz e 4 Gbytes de memória RAM. O valor do número de Mach adotado foi 2,0 (caracterizando escoamento supersônico), o valor usado para γ foi 1,4 e o número de CFL igual a 0,1. Para o ângulo de ataque, o valor adotado foi 0,0°.

As simulações para o caso Euler foram iniciadas com o uso do modelo 1 (Linear). Nesse modelo de dissipação, a variação do parâmetro ε_E atua diretamente no número final de iterações (Tabela 1). À medida que ε_E foi incrementado, o número de iterações diminuiu, o que era esperado, pois o aumento de ε_E implica em mais dissipação linear adicionada ao sistema. Apesar de não existir um valor padrão para ε_E , deve-se ter cuidado em seu incremento, pois determinados valores de ε_E podem afetar diretamente a solução do problema, ou seja, existe um compromisso entre a solução e o valor de ε_E .

Tabela 1: ε_E versus total de iterações (configuração de rampa)

ε_E	Total de iterações	Resíduo
5,0	-	0,0000001
6,0	-	0,0000001
7,0	2551	0,0000001
10,0	2489	0,0000001
40,0	2204	0,0000001

A fim de se mostrar o comportamento dos contornos de densidade, velocidade, pressão, nº de Mach e energia, foram realizadas simulações com diferentes valores de ε_E . De acordo com a Tabela 1, para os valores de ε_E iguais a 5,0 e 6,0 ocorreram instabilidades no esquema, conduzindo-o à divergência. Isso significava dissipação insuficiente. Para valores a partir de 7,0 o número de iterações diminuiu, conduzindo à convergência. O aumento de ε_E no modelo linear tende a homogeneizar a solução tal como no modelo não-linear, a ser confirmada mais adiante.

As Figuras 10a, 10b, 10c, 10d e 10e representam, respectivamente, os contornos de densidade, velocidade na direção x, pressão, nº de Mach e energia obtidos pelo esquema de Jameson e Mavriplis (1986), cuja dissipação adotada corresponde ao modelo 1 para um valor de ε_E igual a 7,0. Valores convergidos ocorreram para um resíduo da ordem de 10^{-7} , após 2551 iterações.

Nas Figuras 10a e 10b, é possível notar perda de homogeneidade na entrada da rampa. Isso significava pouca dissipação, regulada pelo parâmetro ε_E . Cabe salientar que tal

comportamento é típico de algoritmos de segunda ordem e, logo, não representa um erro de implementação e da solução do algoritmo. O pico de densidade foi 2,10165 e de velocidade foi 2,26.

As Figuras 10c, 10d e 10e trazem os contornos de pressão, nº de Mach e de energia. Acompanhando os contornos já visualizados, também nota-se perda de homogeneidade, o que não prejudica a visualização da captura do choque. O pico de pressão foi 2,05061, do nº de Mach foi 2,78857 e o pico de energia foi 7,56498.

Nas figuras, também é possível notar que as ondas de choque formadas como solução possuem certo grau de difusão na região de rarefação após o choque. A depender do regime de escoamento bem como do esquema numérico trabalhado essa difusão pode ser mais ou menos extensa.

Figura 10a: Contornos de densidade

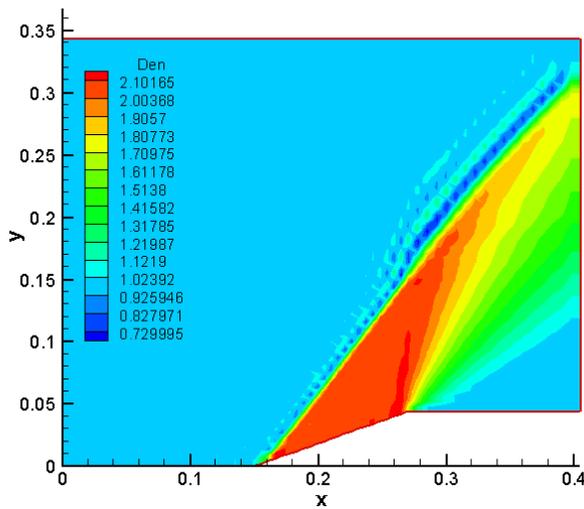


Figura 10b: Contornos de velocidade

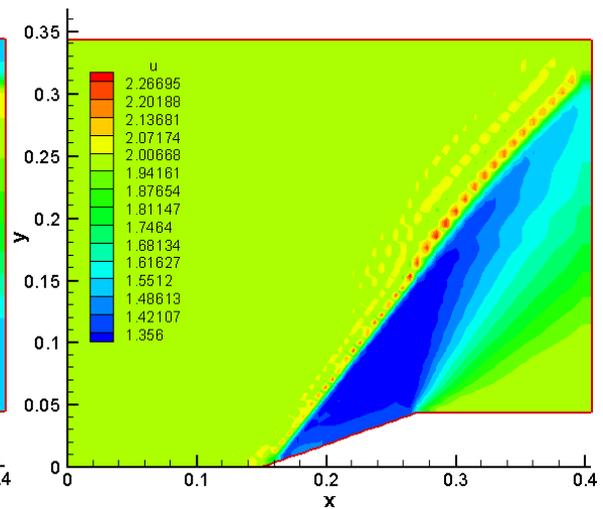


Figura 10c: Contornos de pressão

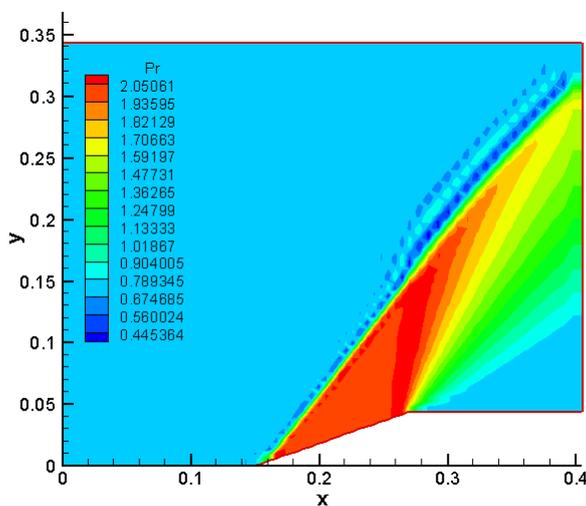


Figura 10d: Contornos de nº de Mach

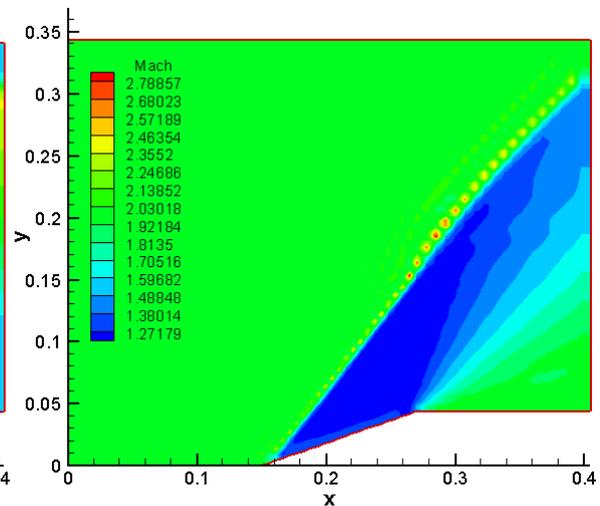
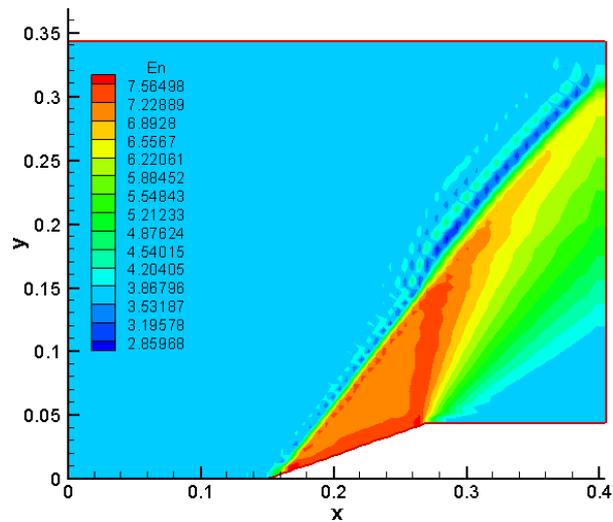
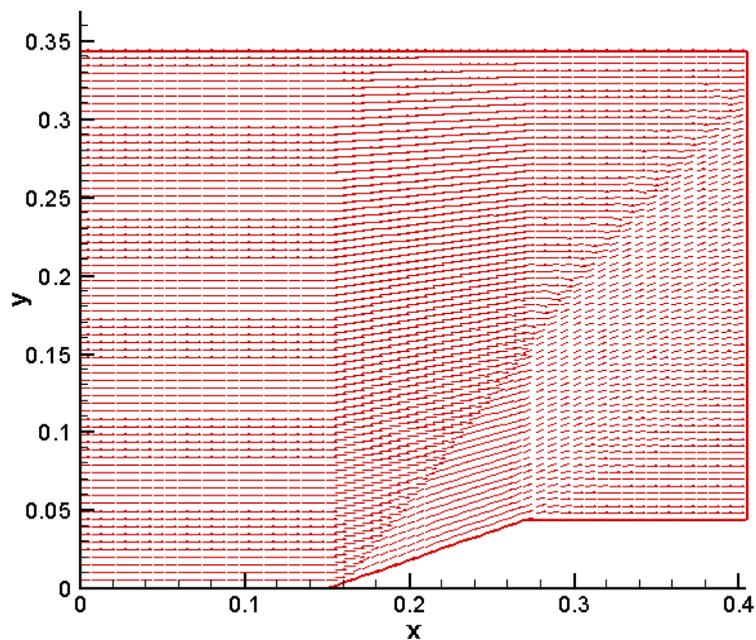


Figura 10e: Contornos de energia



A Figura 11 exibe o campo vetorial de velocidades obtido. É possível perceber bom comportamento do campo, em acordo com os contornos obtidos para a velocidade, sendo possível notar a mudança de direção do escoamento em relação ao escoamento não-perturbado.

Figura 11: Campo vetorial de velocidades para $\varepsilon_E = 7,0$



As Figuras 12a, 12b, 12c, 12d e 12e representam, respectivamente, os contornos de densidade, velocidade na direção x, pressão, nº de Mach e energia obtidos pelo esquema de Jameson e Mavriplis (1986), cuja dissipação adotada corresponde ao modelo 1 para um valor

de ε_E igual a 10,0. Valores convergidos ocorreram para um resíduo da ordem de 10^{-7} , após 2489 iterações.

Apesar de se ter variado o parâmetro ε_E para um valor ligeiramente maior, pode-se notar um leve ganho de homogeneidade nos contornos da entrada, da parede e da saída da rampa, com boa captura do choque. Para esse caso, os picos de densidade, velocidade, pressão, n° de Mach e energia foram, respectivamente iguais a 2,08002, 2,24897, 2,02683, 2,72007 e 7,4509.

Figura 12a: Contornos de densidade

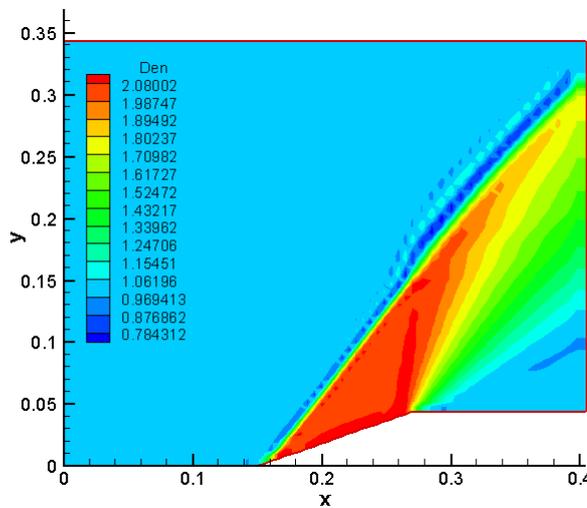


Figura 12b: Contornos de velocidade

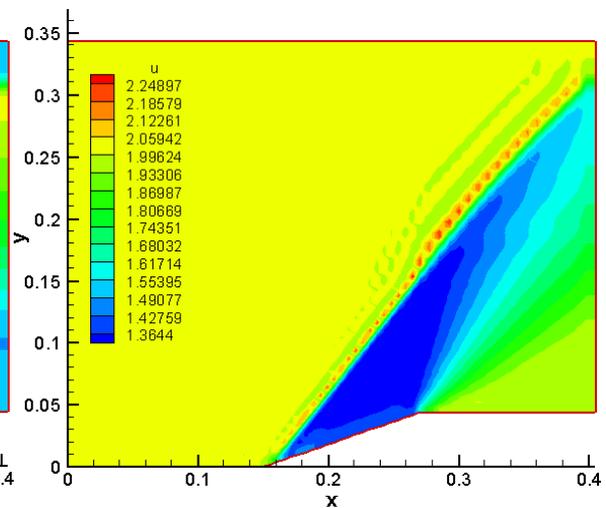


Figura 12c: Contornos de pressão

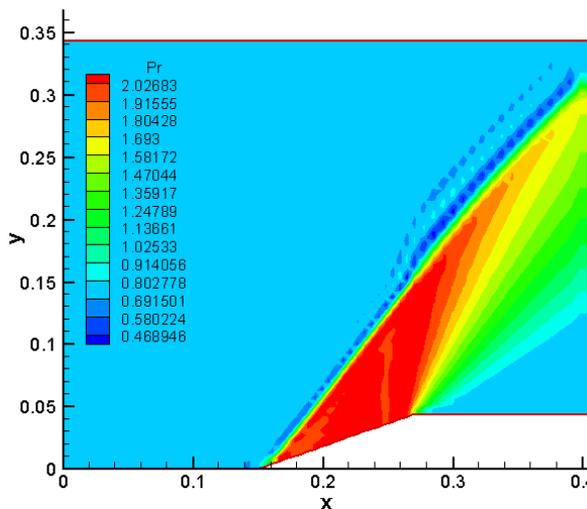


Figura 12d: Contornos de n° de Mach

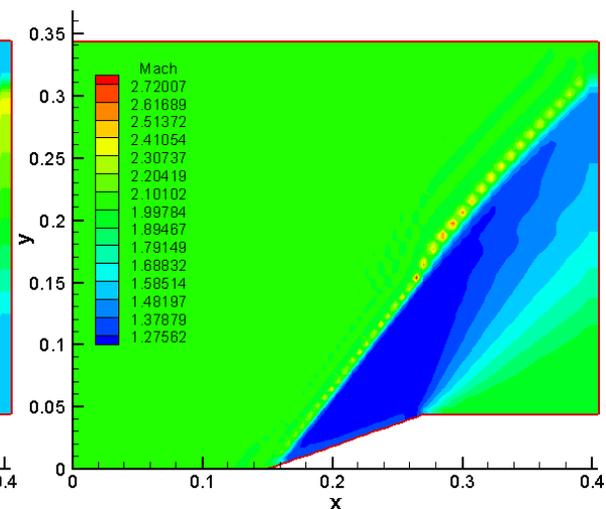
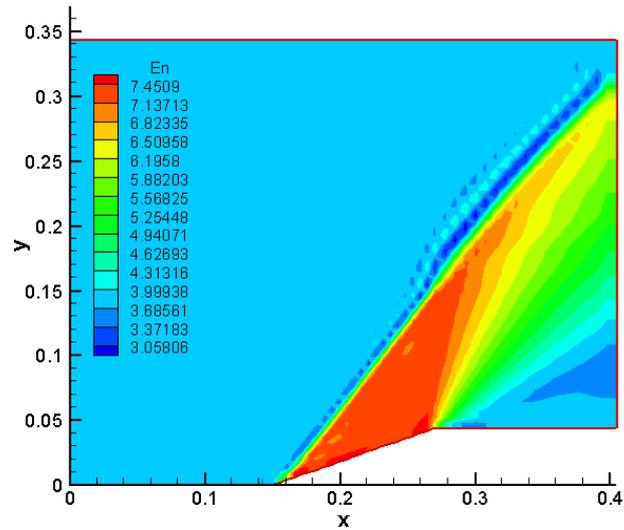
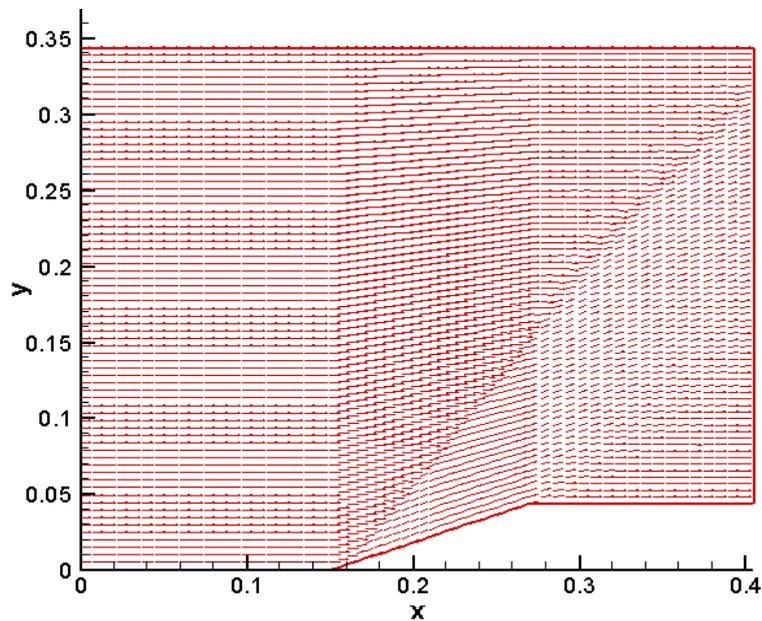


Figura 12e: Contornos de energia



A Figura 13 mostra o campo vetorial de velocidades obtido, cujo comportamento acompanha a dos contornos visualizados, sendo possível evidenciar a manutenção do padrão do escoamento convergido.

Figura 13: Campo vetorial de velocidades para $\varepsilon_E = 10,0$



As Figuras 14a, 14b, 14c, 14d e 14e representam, respectivamente, os contornos de densidade, velocidade na direção x , pressão, nº de Mach e energia obtidos pelo esquema de Jameson e Mavriplis (1986), cuja dissipação adotada corresponde ao modelo 1 para um valor de ε_E igual a 40,0. Valores convergidos ocorreram para um resíduo da ordem de 10^{-7} , após 2204 iterações.

A variação do parâmetro ε_E para o valor 40,0 (30 unidades acima do valor adotado para a simulação anterior) trouxe um notável ganho de homogeneidade na solução, fato comprovado pela melhor visualização dos contornos da rampa, com menos descontinuidades e com boa captura do choque. Nesse caso, pode-se afirmar que dentre os valores adotados, o valor $\varepsilon_E = 40,0$ apresentou melhor definição dos contornos. Isso não exclui testes com outros valores, porém, deve-se manter o compromisso entre o valor de ε_E e a qualidade da solução gerada.

Figura 14a: Contornos de densidade

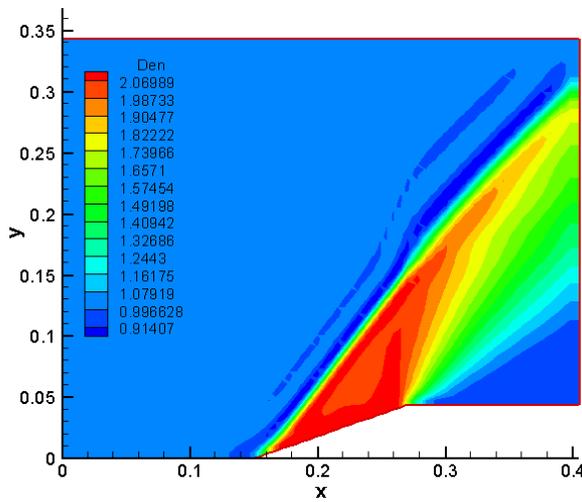


Figura 14b: Contornos de velocidade

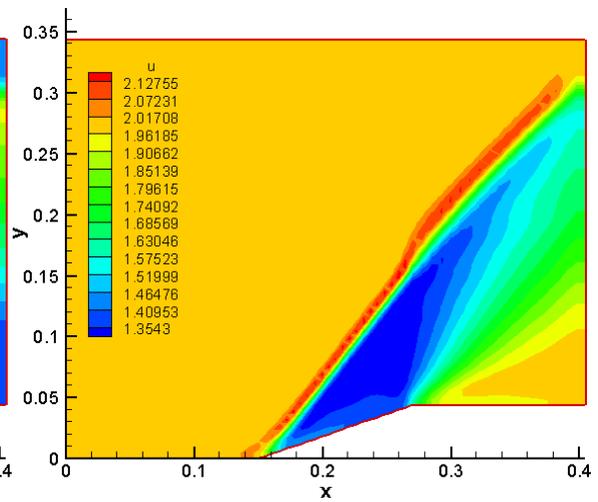


Figura 14c: Contornos de pressão

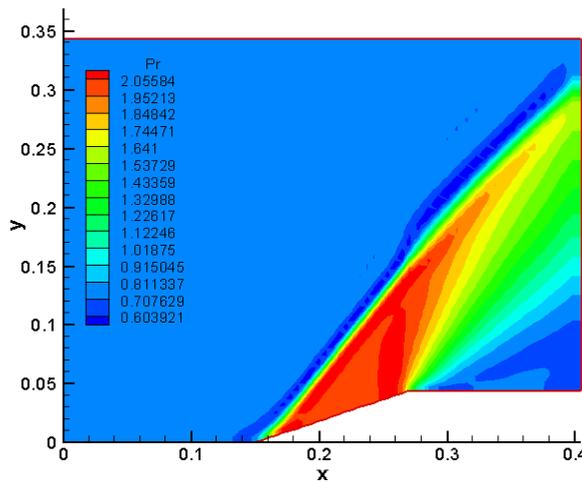


Figura 14d: Contornos de nº de Mach

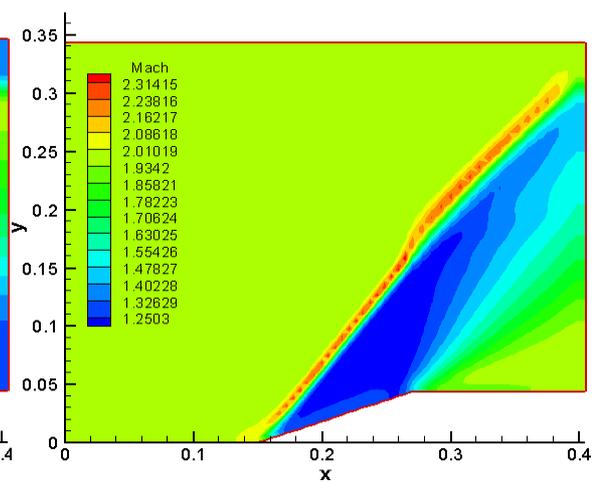
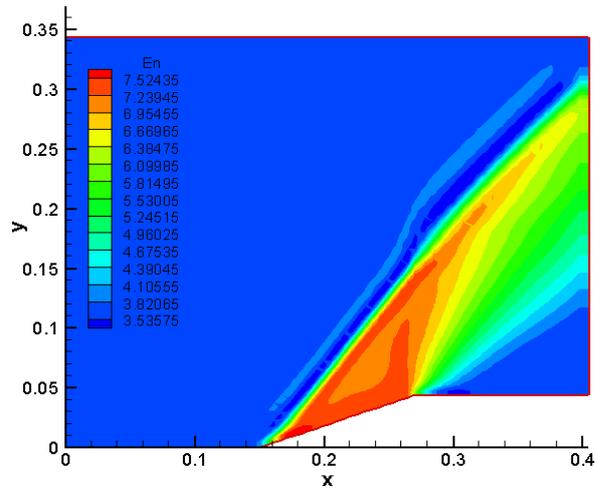
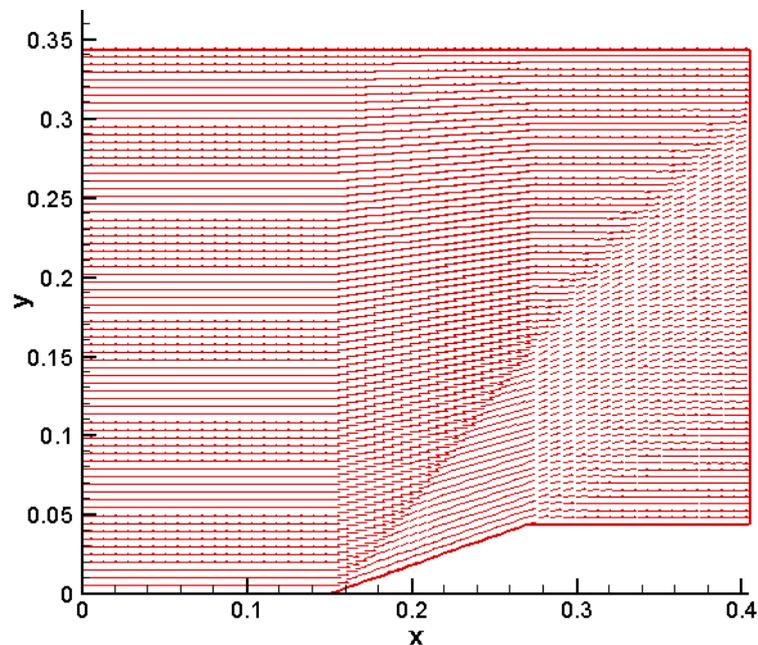


Figura 14e: Contornos de energia



Para esta última simulação com o modelo 1, os picos de densidade, velocidade, pressão, nº de Mach e energia foram respectivamente iguais a 2,06989, 2,12755, 2,05584, 2,31415 e 7,52435. A Figura 15 traz o campo vetorial de velocidades obtido, e demonstra estar de acordo com os contornos gerados para o caso da rampa.

Figura 15: Campo vetorial de velocidades para $\varepsilon_E = 40,0$



As Figuras 16a, 16b, 16c, 16d e 16e representam, respectivamente, os contornos de densidade, velocidade na direção x, pressão, nº de Mach e energia obtidos pelo esquema de Jameson e Mavriplis (1986), cuja dissipação adotada corresponde ao modelo 2 (não-linear).

Valores convergidos ocorreram para um resíduo da ordem de 10^{-7} , após 2014 iterações. Em todas as figuras, nota-se ganho na qualidade da solução, com regiões bem definidas, demonstrando, em relação ao modelo 1, melhor captura do choque, fato evidenciado pelo ganho de homogeneidade nos contornos da rampa, o que, conseqüentemente, traz soluções com melhor comportamento.

Figura 16a: Contornos de densidade

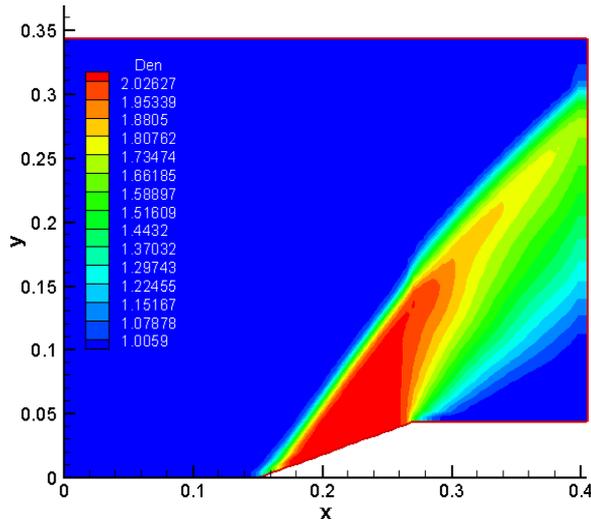


Figura 16b: Contornos de velocidade

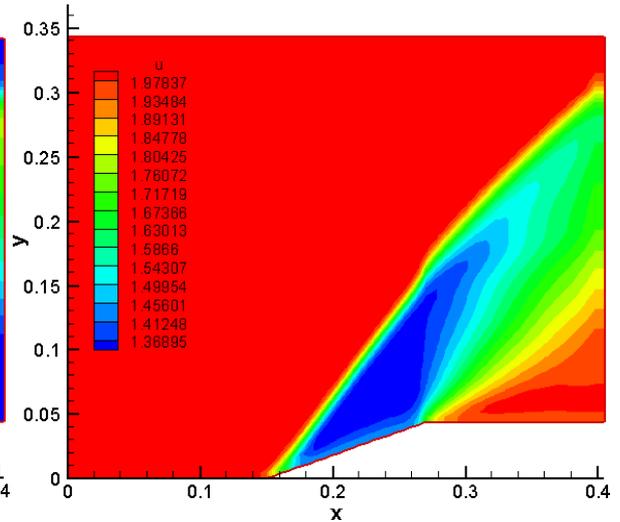


Figura 16c: Contornos de pressão

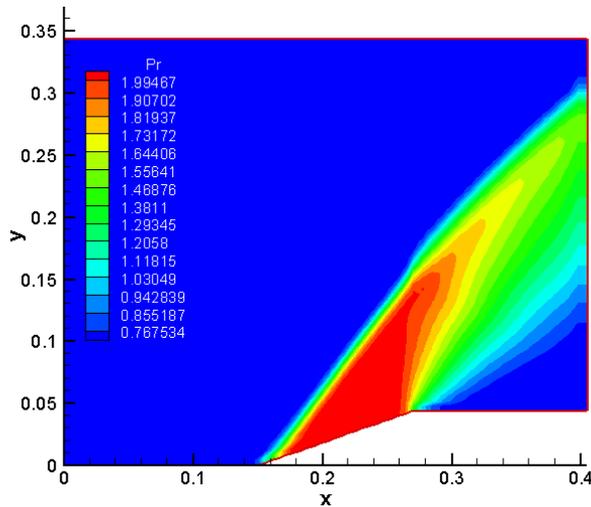


Figura 16d: Contornos de nº de Mach

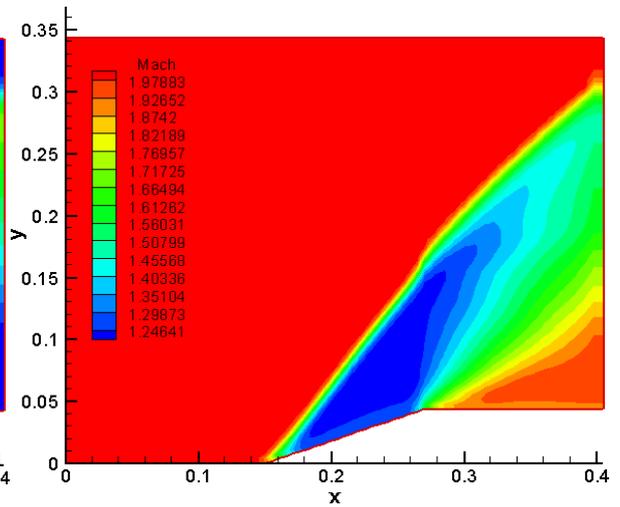
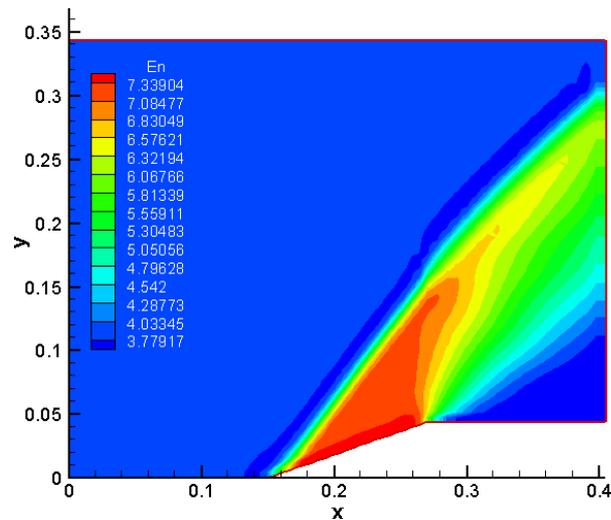
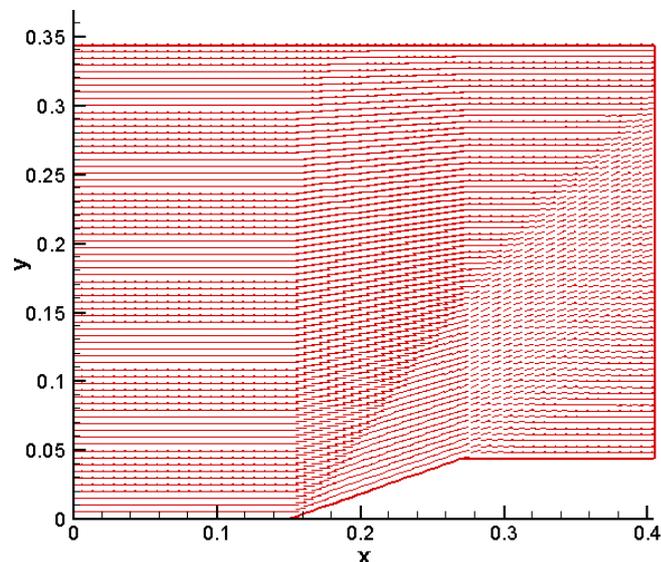


Figura 16e: Contornos de energia

Em relação ao modelo 1, também é possível notar que as ondas de choque formadas como solução apresentaram menor grau de difusão na região da entrada da rampa, bem como na região de rarefação após o choque. Isso se dá pelo maior grau de homogeneidade que o modelo não-linear de Pulliam (1986) apresenta. Regime de escoamento e esquema numérico trabalhados, conforme relatado nos resultados referentes ao modelo 1, podem tornar essa difusão mais ou menos extensa.

A Figura 17 traz o campo vetorial de velocidades obtido com o modelo 2 (não-linear) de Pulliam (1986), no qual se pode notar a manutenção do padrão do escoamento visualizado nos contornos obtidos. A distribuição dos vetores velocidade possui melhor ordenamento, seguindo o comportamento esperado para o modelo em questão.

Figura 17: Campo vetorial de velocidades

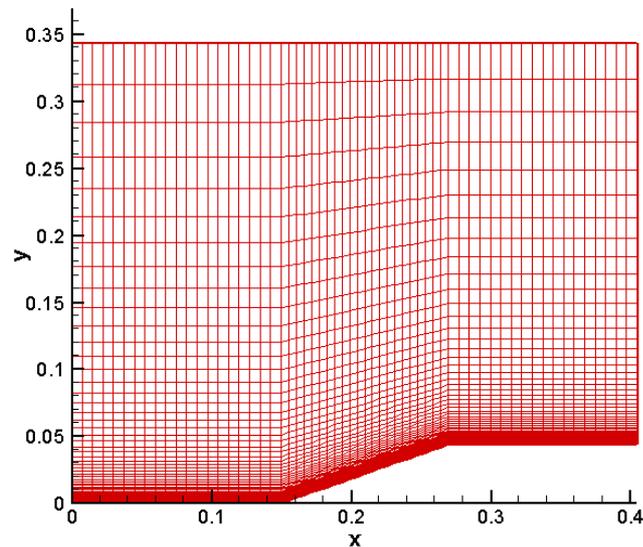
Após a realização das primeiras simulações, verificou-se a notória diferença entre os operadores não-linear e linear de Pulliam (1986): deve-se recordar que, o modelo linear possui dissipação uniforme no domínio de cálculo, e não prevê instabilidades do tipo desacoplamento par-ímpar bem como instabilidades resultantes de oscilações pré-choque, o que ficou caracterizado pela perda de homogeneidade dos contornos. Para tal, Pulliam (1986) recomenda o modelo não-linear, que diferencia tais instabilidades. Outra comprovação dessa diferença está no número de iterações: com a atuação do modelo não-linear, o número de iterações foi reduzido significativamente. Apesar dessa diferença, evidencia-se que ambos os modelos atuam eficientemente na convergência do esquema. Esses resultados preliminares foram determinantes para que o trabalho, a partir desse ponto, fosse melhor direcionado.

4.2 Problema físico da rampa: caso Navier-Stokes

Após a realização das simulações de escoamentos supersônicos para o caso Euler, foram realizadas simulações levando em conta efeitos de viscosidade, ou seja, foi feita a simulação envolvendo as equações de Navier-Stokes, resultando no código denominado DISSIP2D_NS (estrutura do programa principal presente no apêndice B). Em princípio, parâmetros trabalhados nas simulações para o caso Euler foram mantidos: o valor do número de Mach adotado foi 2,0 (caracterizando escoamento supersônico) e o valor usado para γ foi 1,4. Para o ângulo de ataque, o valor adotado foi $0,0^\circ$ e para o número de CFL utilizou-se 0,2. Então foram realizados novos testes com os modelos 1 (linear) e 2 (não-linear), visando uma situação mais realística, pois efeitos de viscosidade devem ser levados em conta em tal situação.

A malha utilizada para a rampa, com 61 pontos na direção ξ e 70 na direção η , também gerada de forma algébrica, pode ser visualizada na Figura 18. A fim de se poder captar efeitos de camada-limite foi necessário realizar um estiramento exponencial na malha na região próxima à parede da rampa.

Figura 18: Malha para a configuração de rampa utilizada na simulação para o caso Navier-Stokes.



Após a realização das simulações, somente o modelo 2 conduziu a resultados convergidos. A convergência ocorreu para um resíduo da ordem de 10^{-8} (menor do que aquele trabalhado para o caso Euler), após 2950 iterações. Resultados similares foram obtidos por Rocha et al (2015) para um escoamento supersônico de gás hélio em uma configuração de rampa, diferindo nos valores trabalhados para γ , número de Mach, e para o resíduo.

Os resultados podem ser visualizados nas Figuras 19a, 19b, 19c, 19d e 19e. Trata-se respectivamente dos contornos de densidade, velocidade, pressão, n° de Mach e energia gerados pelo esquema de Jameson e Mavriplis (1986) cuja dissipação adotada corresponde ao modelo 2.

Nos contornos de pressão (Figura 19c) é possível notar uma região mais clara antes da rampa, que sugere a ocorrência de um primeiro choque mais fraco e, conseqüentemente, um segundo choque mais forte, este último, o esperado. O choque mais fraco é causado pelo descolamento da camada limite antes da rampa, o que simula o efeito de aumento da espessura da geometria, e assim o choque é gerado. Os picos de densidade, velocidade, pressão, n° de Mach e energia atingidos após as simulações foram, respectivamente, 1,97988, 1,94689, 1,97722, 189643 e 7,58749.

Figura 19a: Contornos de densidade

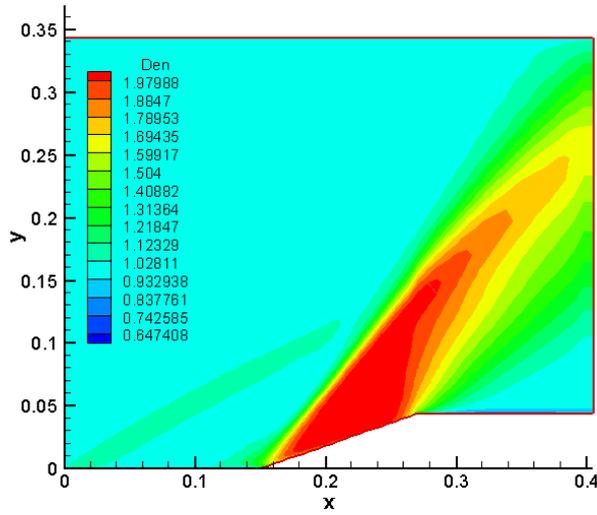


Figura 19b: Contornos de velocidade

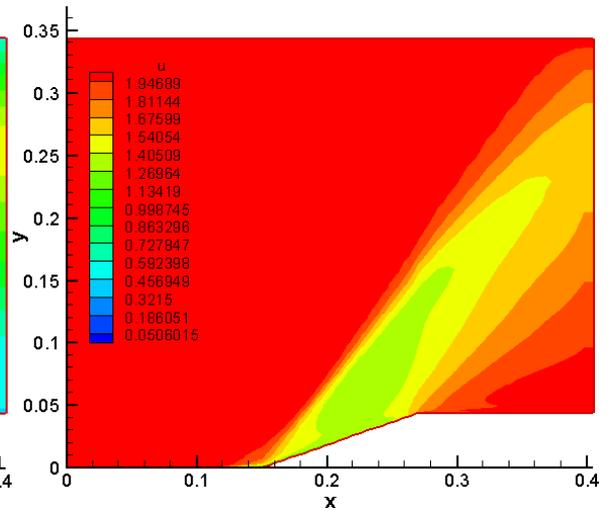


Figura 19c: Contornos de pressão

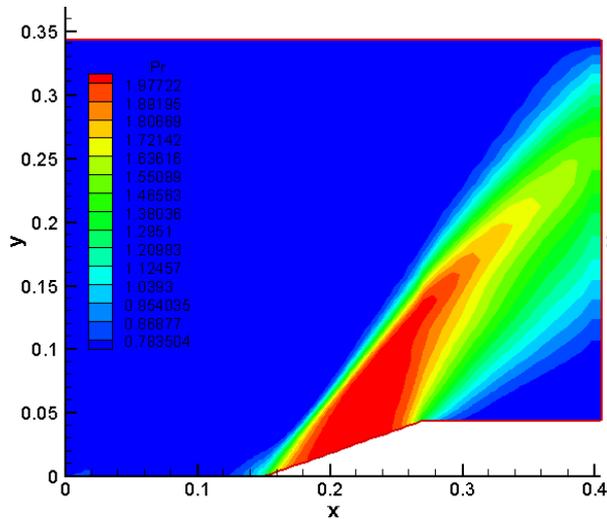


Figura 19d: Contornos de nº de Mach

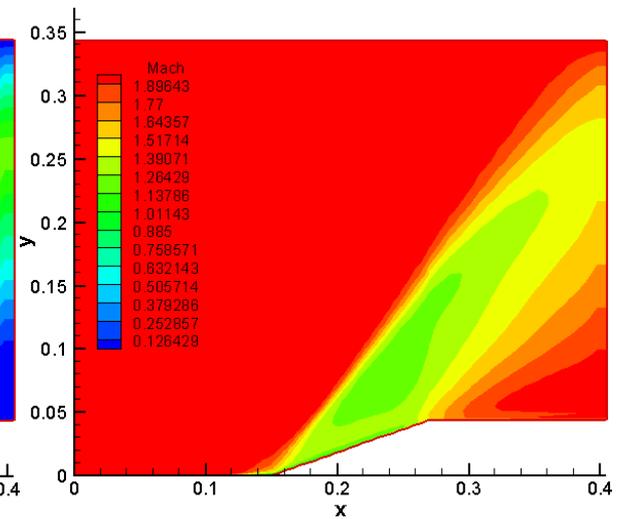
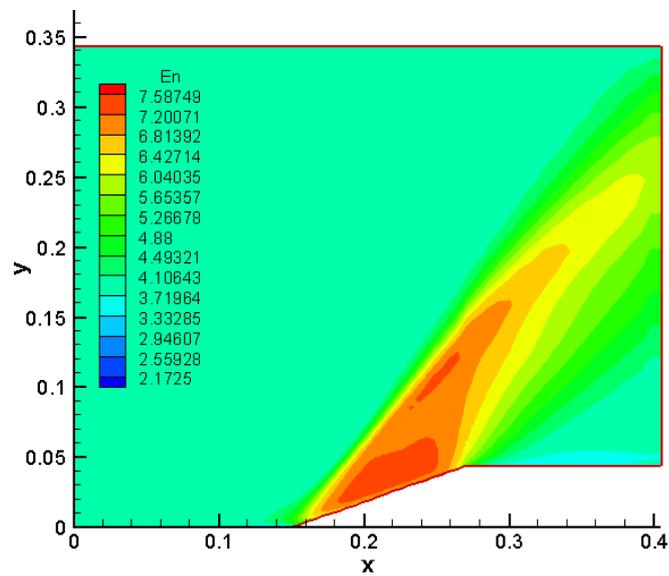


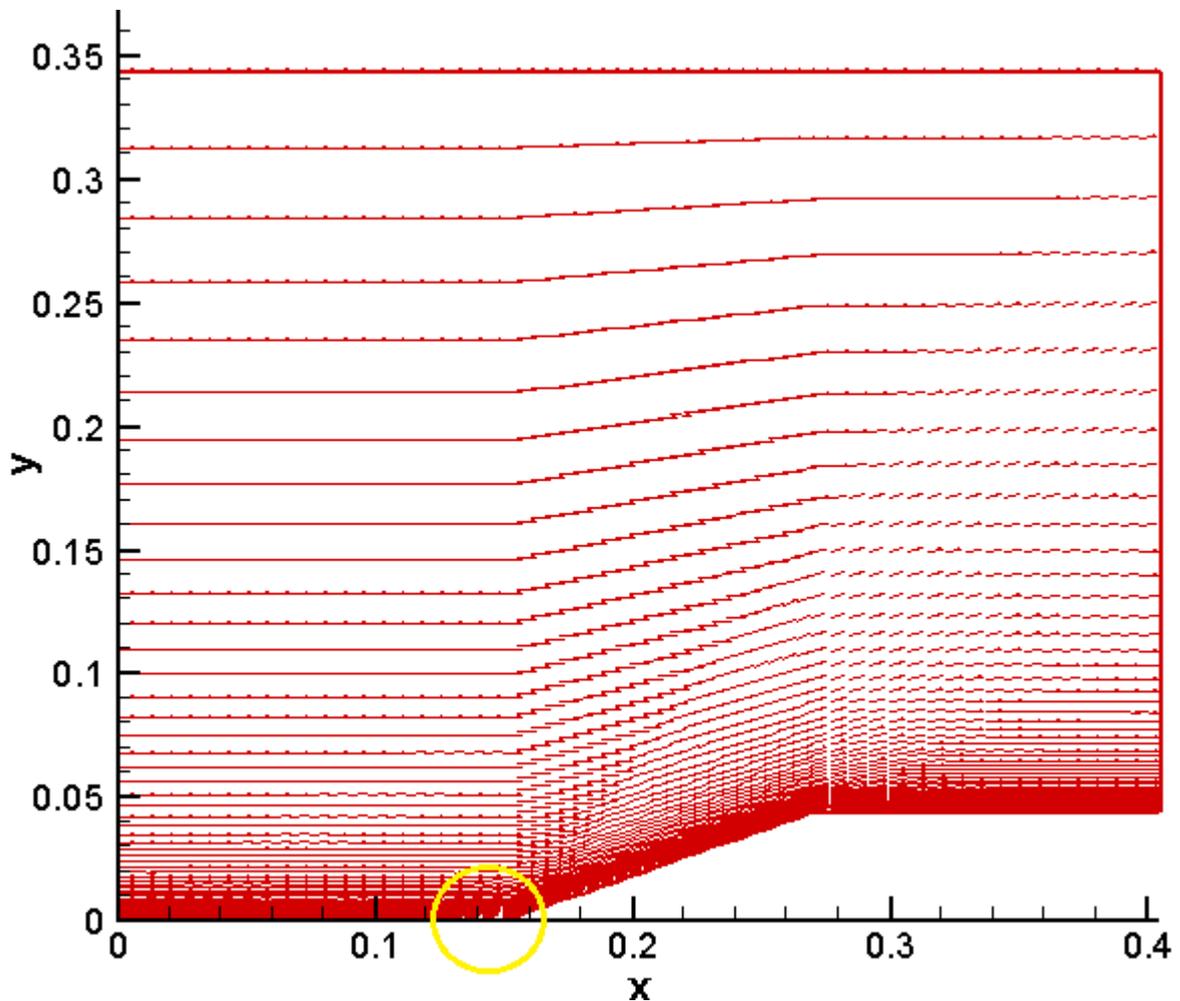
Figura 19e: Contornos de energia



Nos contornos obtidos, assim como para o caso Euler, é possível notar que as ondas de choque formadas como solução apresentaram certo grau de difusão na região da entrada da rampa, bem como na região de rarefação após o choque, sendo menor a expansão, nesse caso. A visualização dos contornos também permite notar uma boa captura dos choques, demonstrados pelas regiões bem definidas, resultando em uma boa homogeneidade nos contornos da rampa.

A Figura 20 exibe o correspondente campo vetorial de velocidades. Nota-se o leve destacamento da camada limite antes da rampa (em destaque), conforme sugerido pelo choque mais fraco, visualizado nos contornos obtidos.

Figura 20: Campo vetorial de velocidades próximo à rampa



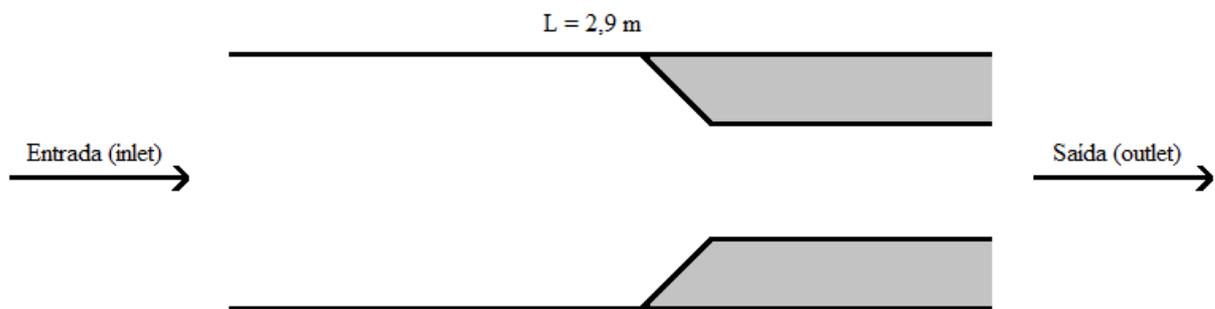
As simulações para os casos Euler e Navier-Stokes permitiram visualizar efeitos importantes, com destaque para a captura dos choques e da camada-limite da região laminar do escoamento (este último obtido após a implementação da parte viscosa das equações de

Navier-Stokes). Atingida a convergência das versões dos códigos obtidas, foi possível iniciar as simulações para o caso de escoamentos internos (típico de situações envolvendo canais fechados).

4.3 Problema físico do canal com obstáculo: caso Euler

Após as simulações com a malha do tipo rampa (escolhida por sua maior simplicidade, facilitando sua obtenção por meios algébricos), foram realizadas simulações para situações envolvendo uma configuração de canal com obstáculo. A geometria trabalhada está representada na Figura 21.

Figura 21: Geometria da configuração de canal com obstáculo.



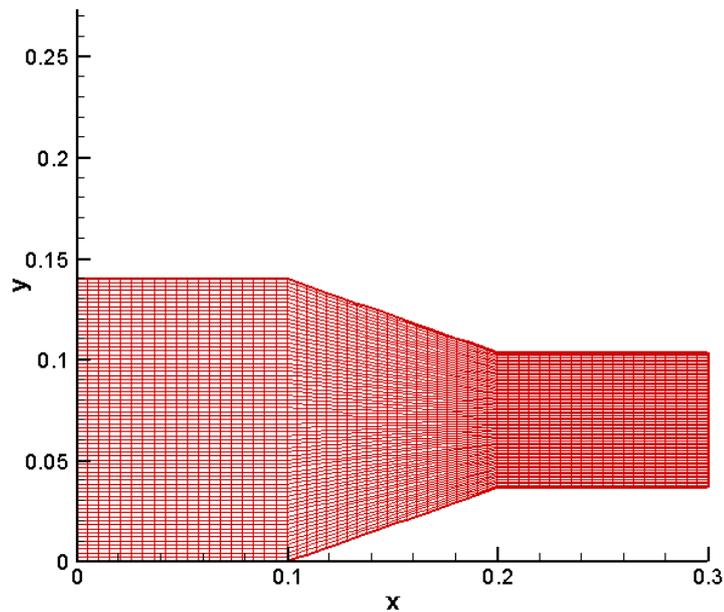
Fonte: autoria própria

A malha obtida para esse caso possui 61 pontos na direção ξ e 71 na direção η e pode ser visualizada na Figura 22. É importante indicar que, assim como no caso das demais, as coordenadas da malha foram adimensionalizadas, o que resulta em um fator de aspecto de 9,67 para se obter o comprimento físico do canal do reator. Deve-se ressaltar que a inserção do obstáculo se dá pela necessidade de se obter contornos para a visualização do escoamento interno convergido, cuja solução deve diferir daquelas encontradas para escoamentos livres. Inicialmente optou-se por uma configuração de rampa pela simplicidade de sua obtenção por meios algébricos, para posteriormente, ser trabalhada a opção envolvendo uma configuração de canal.

A partir de então, pensou-se na possibilidade de simulações de escoamentos subsônicos (por serem estes presentes no núcleo de reatores refrigerados a gás, no caso, do VHTGR). Para a realização das simulações envolvendo o escoamento subsônico de gás hélio

refrigerante foi necessário que se fizesse o levantamento de parâmetros envolvidos para uma nova adimensionalização com base em dados obtidos para o VHTGR. Os dados obtidos serão detalhados a seguir.

Figura 22: Malha para a configuração de canal com obstáculo utilizada nas simulações para os casos Euler e Navier-Stokes.



Para as simulações, valores de parâmetros tais como total de canais (N), fluxo mássico no núcleo (\dot{Q}), diâmetro (D) e altura do canal (L), foram obtidos em Bess et al (2010). Assim, foi possível estimar o valor do n° de Mach na entrada do canal (M_{entrada}) a ser trabalhado para o escoamento subsônico de gás hélio. Para o cálculo da vazão mássica por canal, \dot{Q}_c , foi utilizada a seguinte relação:

$$\dot{Q}_c = \frac{\dot{Q}}{N} \quad (55)$$

Em que \dot{Q} = vazão mássica no núcleo (kg/s) e N = número de canais. Assim, para $\dot{Q} = 12,4$ Kg/s e $N = 954$, obtém-se $\dot{Q}_c = 0,013$ kg/s/canal. Com isso, foi possível estimar a velocidade do gás hélio na entrada do canal (V_{entrada}), através da seguinte relação:

$$\dot{Q}_c = \rho_{\text{entrada}} V_{\text{entrada}} A_c \quad (56)$$

Sendo $A_c = \pi r^2$ a área de secção transversal da geometria cilíndrica equivalente ao canal retangular. Com $r = 5,0 \cdot 10^{-3}$ m, encontra-se $A_c = 0,0000785$ m².

Com os valores calculados e através do uso da Eq. (56) foi possível estimar a velocidade do gás hélio na entrada do canal em $V_{\text{entrada}} = 165,6$ m/s. Também foi possível estimar a velocidade do som na entrada: $a_{\text{entrada}} = 1522,94$ m/s.

Logo, com base nos valores encontrados para velocidade de escoamento do gás hélio e para a velocidade do som, ambas na entrada do canal, foi possível estimar o n° de Mach através da seguinte relação:

$$M_{\text{entrada}} = \frac{V_{\text{entrada}}}{a_{\text{entrada}}} \quad (57)$$

Sendo possível encontrar o valor $M_{\text{entrada}} = 0,108$, caracterizando o escoamento subsônico. Nas simulações, foi utilizado o valor $M_{\text{entrada}} = 0,1$. O número de CFL adotado foi 0,1.

Tal como nas simulações para o caso Euler para a malha do tipo rampa, foram realizados testes com o DISSIP2D_EULER para a malha do tipo canal com obstáculo, fazendo-se o uso do modelo 1 (linear). Vale recordar que a qualidade da solução referente ao modelo linear de Pulliam (1986) está relacionada ao parâmetro ε_E . A tabela 2 a seguir traz os valores de ε_E testados.

Tabela 2: ε_E versus total de iterações (configuração de canal com obstáculo)

ε_E	Total de iterações	Resíduo
5,0	-	0,00000001
6,0	-	0,00000001
7,0	-	0,00000001
10,0	-	0,00000001
40,0	889	0,00000001
80,0	288	0,00000001

Para os valores de ε_E iguais a 5, 6, 7, 8 e 10, não houve convergência. Decidiu-se então realizar testes com valores maiores, no caso, a partir de $\varepsilon_E = 40,0$ (valor que apresentou melhores contornos para o modelo linear no caso Euler para a malha do tipo rampa). Os contornos de densidade, velocidade, pressão, n° de Mach e energia gerados pelo esquema de

Jameson e Mavriplis (1986) cuja dissipação adotada corresponde ao modelo 1 podem ser visualizados nas Figuras 23a, 23b, 23c, 23d e 23e, respectivamente.

Resultados convergidos ocorreram após 889 iterações, para um resíduo da ordem de 10^{-8} (ou seja, um resíduo menor do que o utilizado para as simulações nos casos Euler e para a malha do tipo rampa). Notam-se contornos menos definidos, porém, com a possibilidade da adição de dissipação para que a solução fique mais próxima da solução apresentada pelo modelo não-linear.

Figura 23a: Contornos de densidade

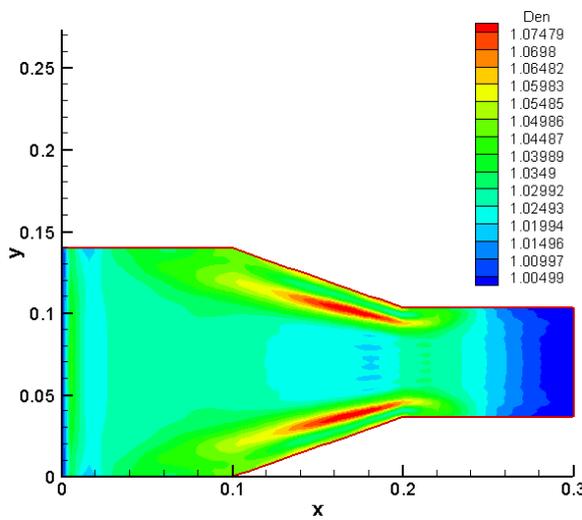


Figura 23b: Contornos de velocidade

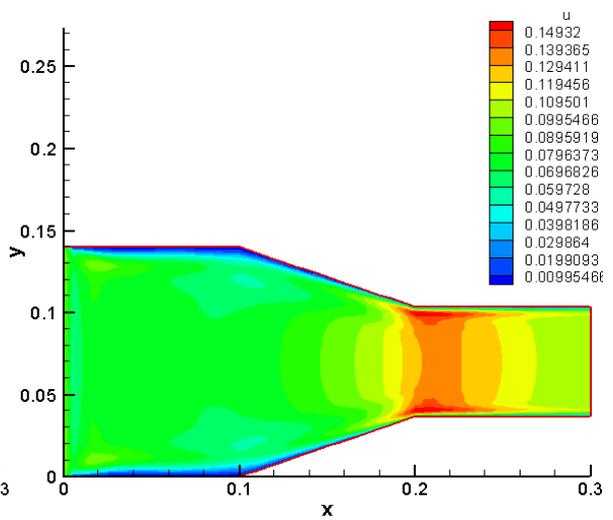


Figura 23c: Contornos de pressão

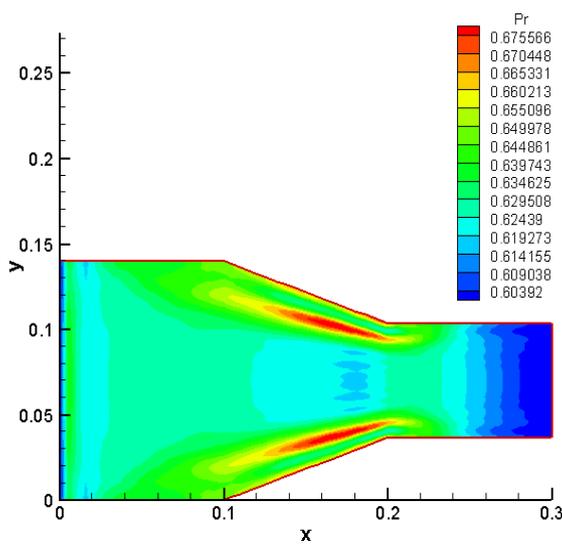


Figura 23d: Contornos de nº de Mach

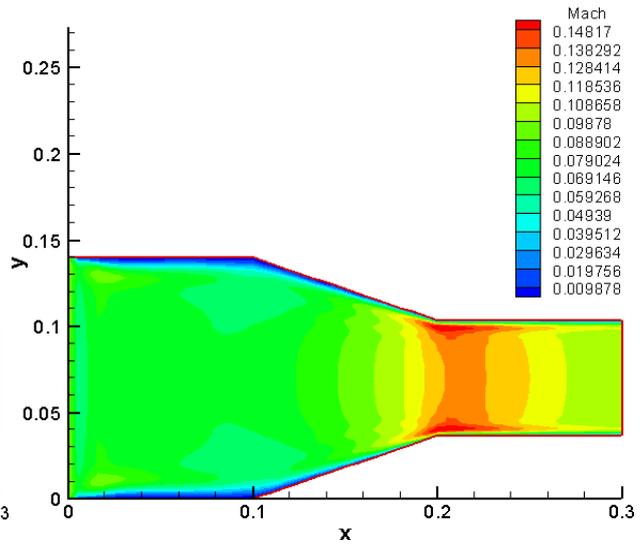
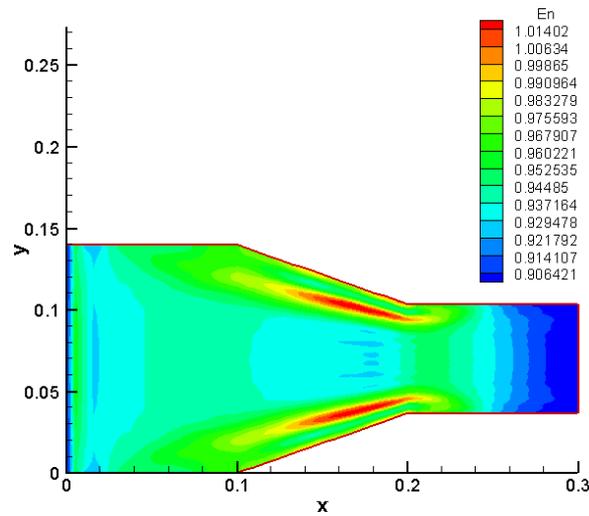
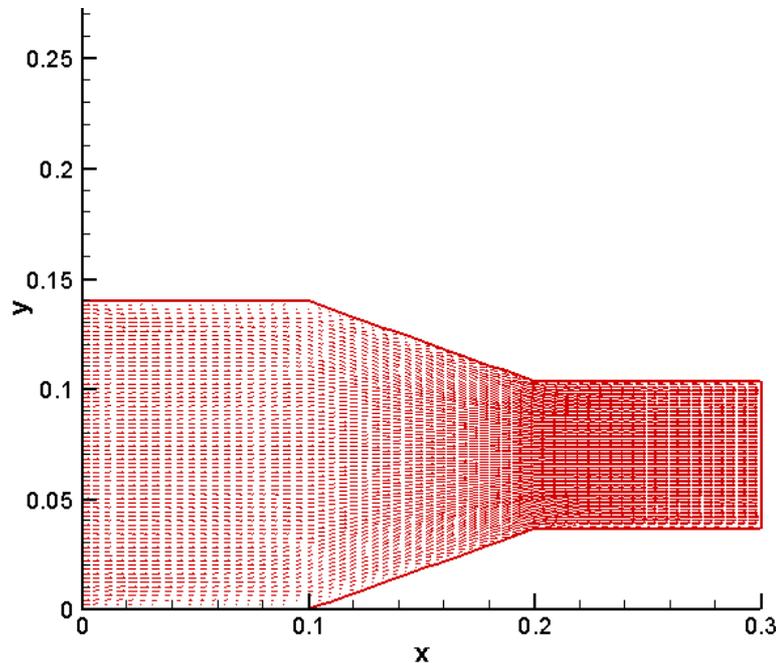


Figura 23e: Contornos de energia



A figura 24 traz o campo vetorial de velocidades para esse caso. É possível evidenciar os padrões de simetria propostos pelos contornos obtidos, através da visualização da disposição dos vetores.

Figura 24: Campo vetorial de velocidades para $\varepsilon_E = 40,0$



As Figuras 25a, 25b, 25c, 25d e 25e exibem, respectivamente, os contornos de densidade, velocidade, pressão, nº de Mach e energia obtidos para $\varepsilon_E = 80,0$. Resultados convergidos ocorreram após 288 iterações, para um resíduo da ordem de 10^{-8} . O número de iterações foi bastante reduzido, sendo notável a diferença em relação aos perfis obtidos com

$\varepsilon_E = 40,0$. A região central (região do estrangulamento) apresenta uma região de compressão mais definida, porém, percebe-se que as propriedades de campo podem ser melhoradas. Nesse sentido, testes com outros valores de ε_E podem ser realizados a fim de se buscar melhor equilíbrio entre ε_E e a qualidade da solução gerada.

Figura 25a: Contornos de densidade

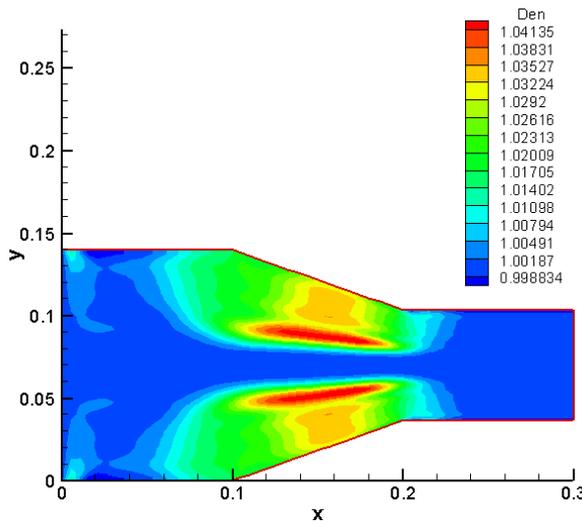


Figura 25b: Contornos de velocidade

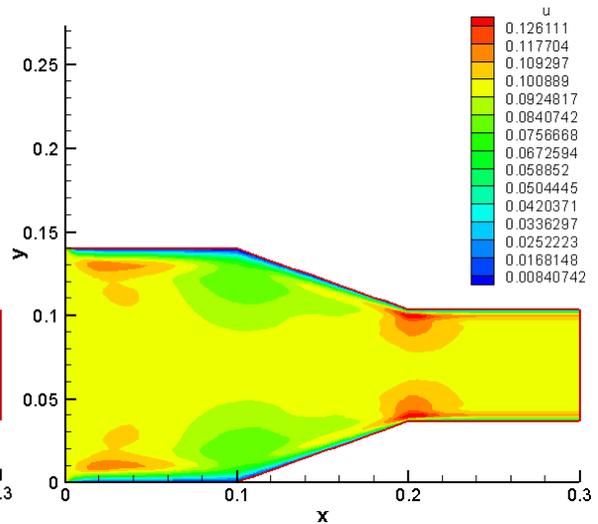


Figura 25c: Contornos de pressão

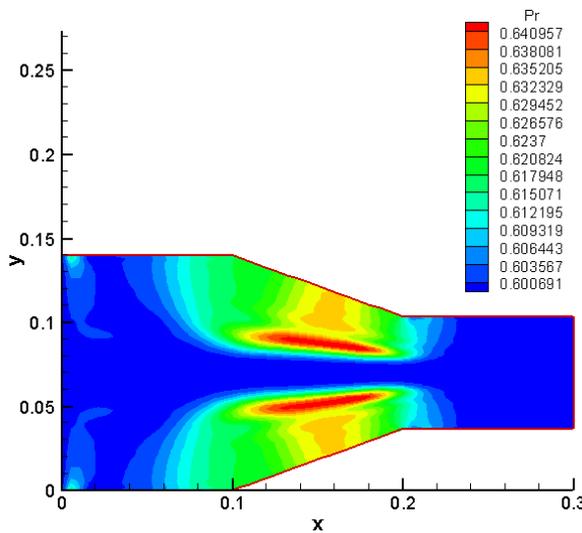


Figura 25d: Contornos de nº de Mach

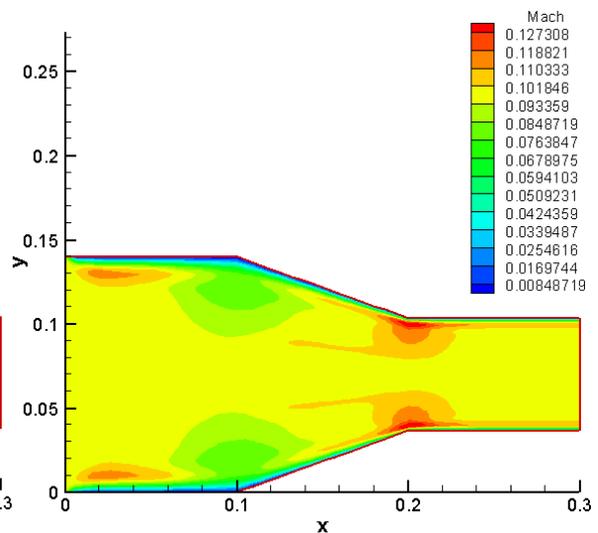
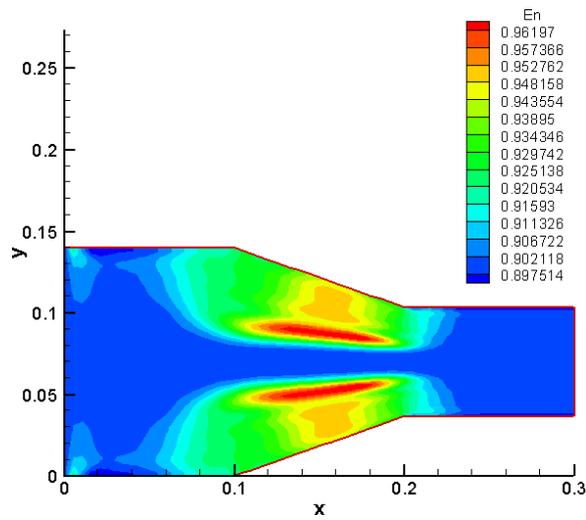
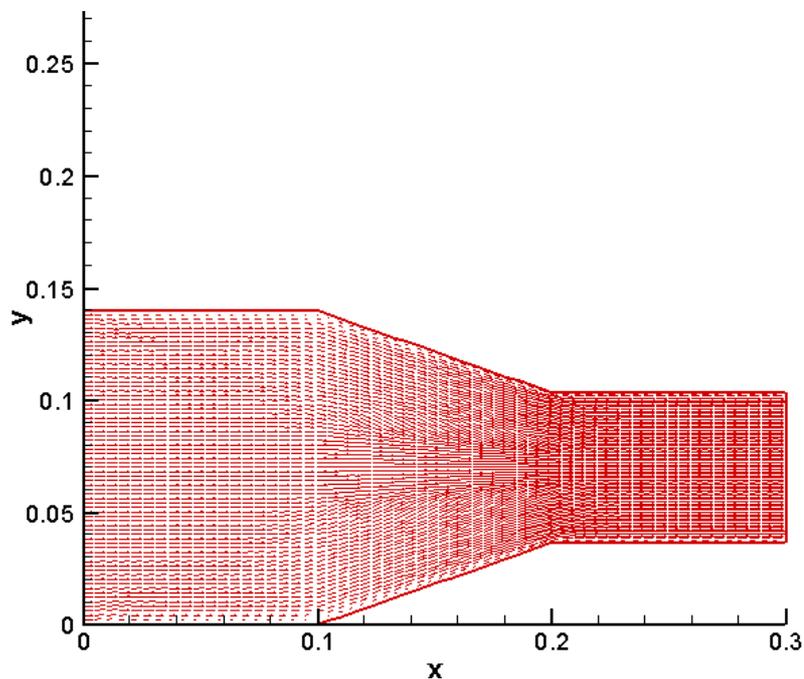


Figura 25e: Contornos de energia

A Figura 26 mostra o campo vetorial de velocidades para este caso, sendo possível observar a mudança no perfil obtido em relação à simulação para $\varepsilon_E = 40,0$.

Figura 26: Campo vetorial de velocidades para $\varepsilon_E = 80,0$ 

Os resultados a seguir dizem respeito à simulação realizada com o uso do modelo 2 (não-linear). Em conformidade com os resultados obtidos para o mesmo modelo no caso da malha do tipo rampa, nota-se relevante ganho de qualidade na solução gerada, com melhores propriedades de simetria no campo e sem choques.

Resultados convergidos ocorreram após 508 iterações. Nas Figuras 27a, 27b, 27c, 27d e 27e que exibem, respectivamente, os contornos de densidade, velocidade, pressão, n° de Mach e energia, é possível notar com maior nitidez uma zona de compressão central, fato que não foi possível observar com maior definição no modelo linear. Isso ocorre exatamente na região de estrangulamento imposta pelo obstáculo, demonstrada através dos valores de picos de pressão e densidade (no caso, 0,67498 e 1,0742, respectivamente). Não foram registradas ocorrências de choques. Os demais valores, no caso, velocidade, n° de Mach e energia, tiveram picos respectivamente iguais a 0,163329, 0,16545 e 1,01342.

Figura 27a: Contornos de densidade

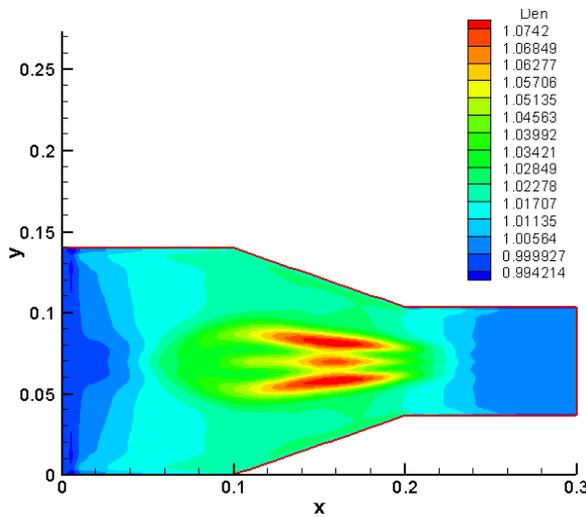


Figura 27b: Contornos de velocidade

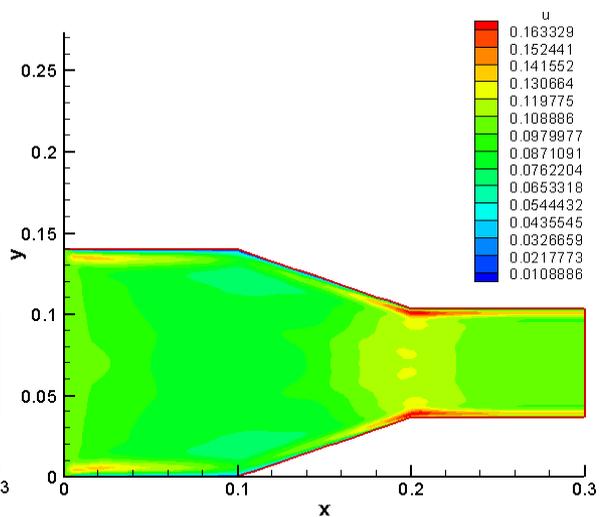


Figura 27c: Contornos de pressão

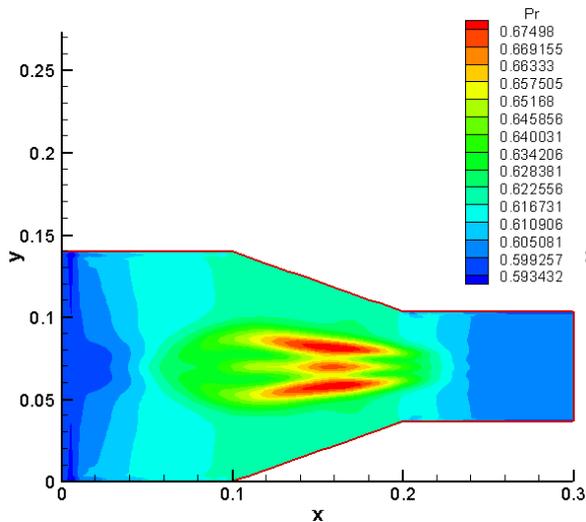


Figura 27d: Contornos de n° de Mach

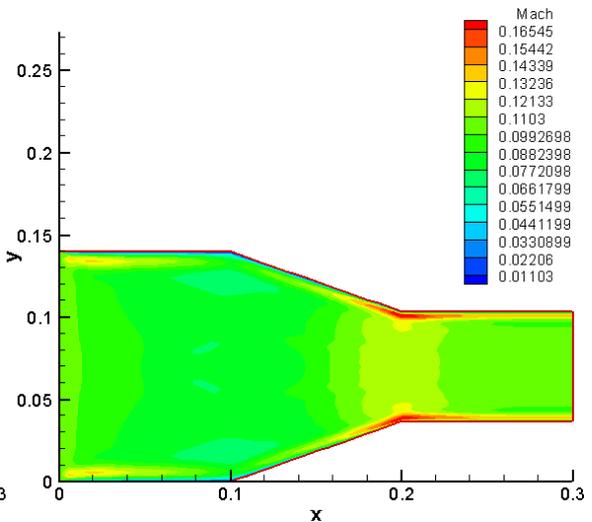
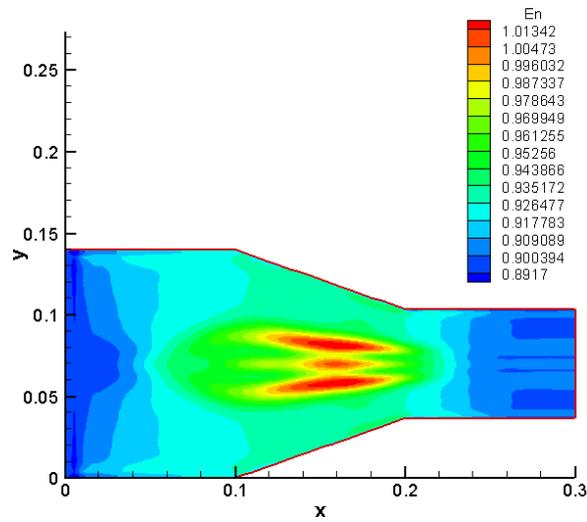
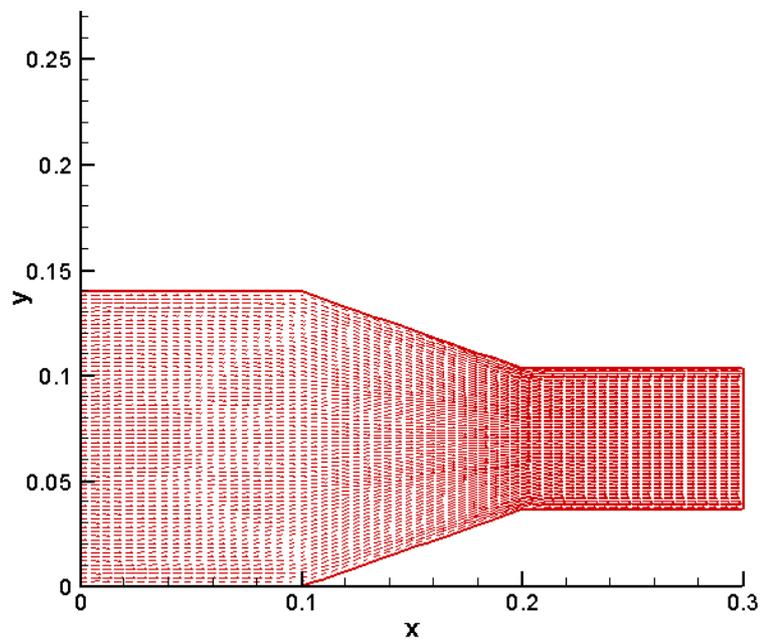


Figura 27e: Contornos de energia



A Figura 28 exibe o campo vetorial de velocidades obtido com o modelo 2, exibindo as regiões onde o gás hélio refrigerante atingiu valores de maior e menor velocidade, em concordância com os contornos apresentados para esse caso, preservando as boas propriedades de simetria de campo.

Figura 28: Campo vetorial de velocidades



4.4 Problema físico do canal com obstáculo: caso Navier-Stokes

Após a observação do comportamento das soluções apresentadas para as simulações, no caso Euler, do escoamento subsônico de gás hélio interno a um canal com obstáculo, foram realizadas simulações com os modelos 1 (linear) e 2 (não-linear) para o mesmo escoamento levando em conta efeitos de viscosidade, através da utilização do código DISSIPA2D_NS. A ideia principal foi mantida, ou seja, a visualização dos contornos obtidos através das propriedades de simetria e de campo.

Tal como os resultados demonstrados no caso da configuração de rampa, somente o modelo 2 levou a resultados convergidos, após 508 iterações. As Figuras 29a, 29b, 29c, 29d e 29e exibem, respectivamente, os contornos de densidade, velocidade, pressão, n° de Mach e energia obtidos. O número de CFL adotado foi o mesmo para a simulação do caso Euler: 0,1.

A visualização dos contornos permite observar a manutenção das propriedades de campo e de simetria obtidos com o modelo 2 de Pulliam (1986) trabalhado para o caso Euler. A diferença entre os valores obtidos para os parâmetros destacados é pequena. Pode-se notar também leves alterações nos perfis, fato constatado pela diferença na coloração de algumas regiões, em relação às observadas nos resultados obtidos para o modelo 2 no caso Euler. Após as simulações para esse caso, novamente, observou-se a não ocorrência de ondas de choque.

Figura 29a: Contornos de densidade

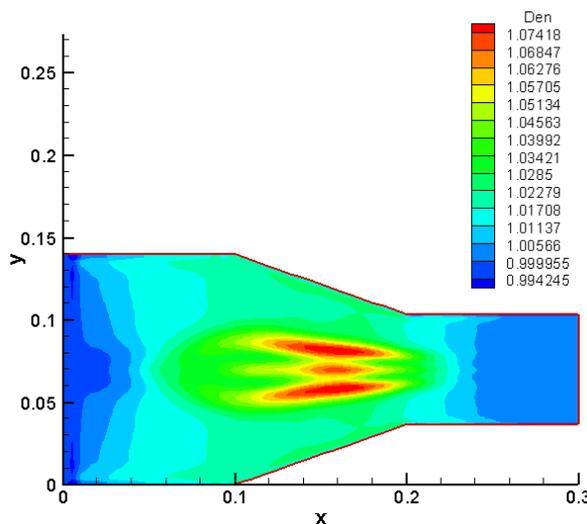


Figura 29b: Contornos de velocidade

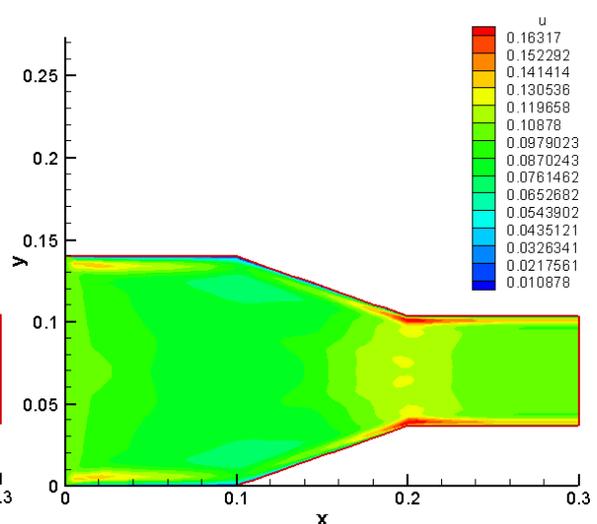


Figura 29c: Contornos de pressão

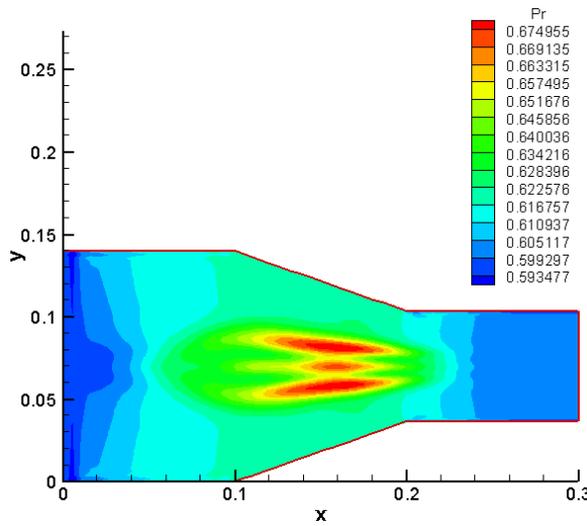


Figura 29d: Contornos de n° de Mach

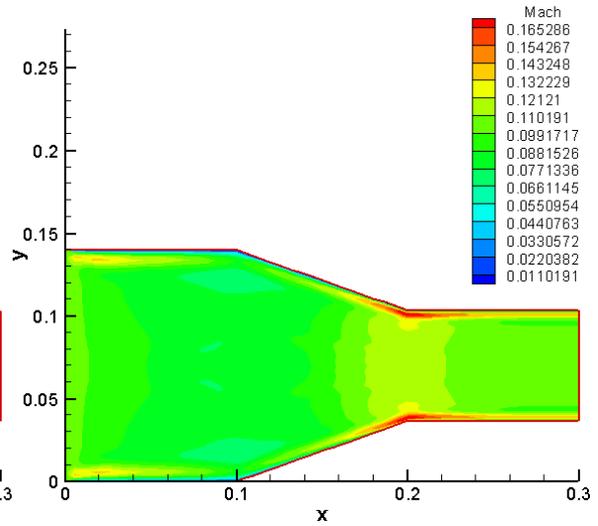
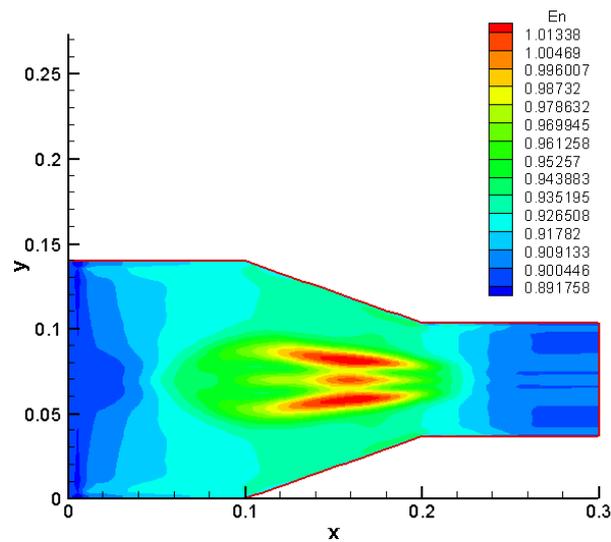
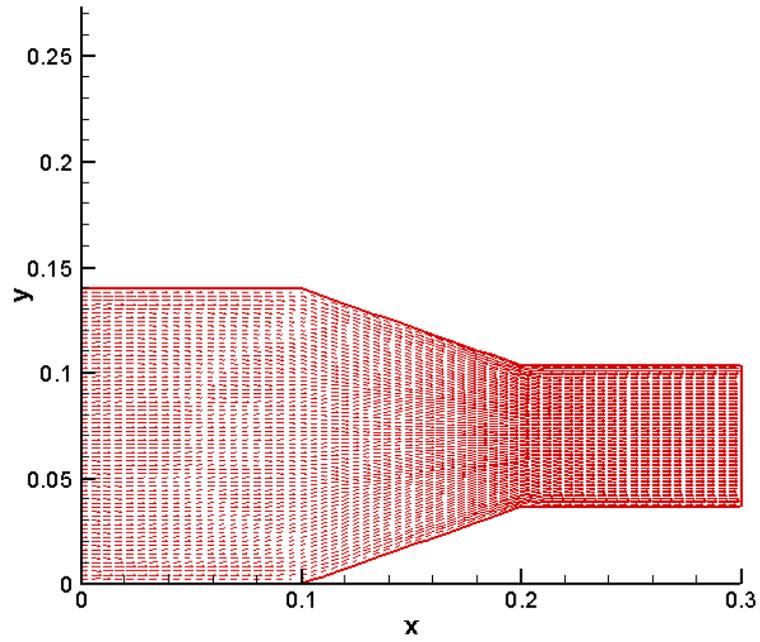


Figura 29e: Contornos de energia



A Figura 30 exibe o campo vetorial de velocidades obtido com o modelo 2 para o caso Navier-Stokes. Tal como na simulação para o caso Euler, demonstra as regiões onde o gás hélio refrigerante atingiu valores de maior e menor velocidade, em concordância com os contornos apresentados para esse caso, preservando as boas propriedades de simetria de campo.

Figura 30: Campo de velocidades obtido para o caso Navier-Stokes



5 CONCLUSÕES

O presente trabalho apresenta a implementação numérica do algoritmo de Jameson e Mavriplis (1986) e dos modelos de dissipação linear e não-linear de Pulliam (1986) segundo o formalismo de diferenças finitas. Para isso, as equações de Euler e Navier-Stokes em suas formas conservativa e estruturada, são resolvidas no espaço bidimensional, através de uma formulação de diferenças finitas para a discretização espacial com a utilização do método de Euler explícito para marcha no tempo. Foi feita a implementação de passo no tempo variável espacialmente no sentido de acelerar a convergência para a solução de estado estacionário.

Os modelos de dissipação artificial foram analisados em relação a diversos aspectos: forma criteriosa de tratar instabilidades numéricas de diferentes origens, qualidade global da solução (boa descrição de fenômenos físicos), desempenho computacional (através do número de iterações) e quantidade de dissipação artificial provida (para o caso do modelo linear).

Para as simulações, foram utilizadas malhas obtidas por meios algébricos, a fim de se visualizar o campo de escoamento convergido para os problemas físicos de escoamento supersônico ao longo de uma configuração de rampa e de escoamento subsônico de gás hélio ao longo de uma configuração de canal com obstáculo.

Entre as grandezas de interesse para a análise termofluidodinâmica do escoamento de gás hélio foram analisados os contornos de densidade, velocidade, pressão, nº de Mach e de energia obtidos através da simulação numérica de problemas físicos relacionados a escoamentos, a fim de se desenvolver ferramentas computacionais para estudos e testes preliminares de casos envolvendo escoamentos de fluidos, especificamente de gás hélio refrigerante, presente no núcleo de reatores VHTGR, dentro de condições de operação, levando em conta suas características físico-químicas a fim de se avaliar o comportamento dos métodos numéricos trabalhados.

Após as simulações, verificou-se a notória diferença entre os operadores linear e não-linear de Pulliam (1986): o modelo linear possui dissipação uniforme no domínio de cálculo, e não prevê instabilidades do tipo desacoplamento par-ímpar. Assim, recomenda-se o modelo não-linear, que diferencia tais instabilidades. Outra comprovação dessa diferença está no número de iterações: com a atuação do modelo não-linear, o número de iterações foi reduzido significativamente. Apesar dessa diferença, evidencia-se que ambos os modelos atuam eficientemente na convergência do esquema.

No tocante ao esquema de Jameson e Mavriplis (1986) baseado no formalismo proposto, pode-se concluir que o esquema apresentou bom comportamento, pois permitiu dentro das condições simuladas, boa captura dos choques (no caso das situações envolvendo escoamentos supersônicos), mostrando a capacidade dos códigos em prever efeitos abruptos, fato evidenciado através da visualização dos contornos, bem como proporcionou um bom comportamento do campo.

Outro fator importante a ser destacado diz respeito à introdução, na área nuclear, de técnicas numéricas computacionais (no caso, os operadores de dissipação linear e não-linear de Pulliam (1986), além da utilização do esquema numérico de Jameson e Mavriplis (1986) amplamente utilizados no estudo de problemas aeronáuticos e aeroespaciais. Devido à carência na literatura de trabalhos específicos, a avaliação da qualidade das soluções obtidas seguiu um padrão existente nos estudos de problemas aeronáuticos, porém, com a devida formulação matemática e computacional necessárias para a obtenção de resultados preliminares que possam ajudar na elaboração de códigos com maior robustez que atuem no desenvolvimento do VHTGR.

Assim, como sugestão para trabalhos futuros, pode-se listar as seguintes ideias:

- 1) Implementação de versões de códigos visando a simulações para casos tridimensionais, com base nos esquemas numéricos do presente trabalho;
- 2) Implementação de um modelo de turbulência, podendo-se, assim, realizar simulações mais realísticas para escoamentos internos a canais ou em outras situações que o pesquisador julgar pertinentes, tendo em vista a capacidade dos códigos DISSIP2D_EULER e DISSIP2D_NS em trabalhar com geometrias diversas;
- 3) Implementação de outros esquemas numéricos e de outros métodos numéricos para a comparação com os resultados obtidos no corrente trabalho.
- 4) Melhor estudo do modelo linear (modelo 1) de Pulliam (1986), analisando outras faixas para o parâmetro ε_E , claro, levando em conta o compromisso entre o valor de ε_E e a qualidade da solução;

Finalmente, a reinterpretação do algoritmo de Jameson e Mavriplis (1986) através de uma situação envolvendo algumas condições existentes no escoamento de gás hélio refrigerante, bem como a aplicação dos operadores de dissipação artificial para esta situação, constituem um dos ganhos da presente tese de doutorado.

REFERÊNCIAS

- ANDERSON, J.D. **Modern Compressible Flow**. McGraw Hill, 2ª Edição, 1990.
- ANDERSON Jr., J. D. “Computational Fluid Dynamics – An Engineering Tool”, **Numerical/Laboratory Computer Methods in Fluid Dynamics**, ASME, New York, Estados Unidos, pp. 1-12, 1976.
- ANDERSON, N. A. **Coupling RELAP5-3D® and FLUENT to Analyze A Very High Temperature Reactor (VHTR) Outlet Plenum**. Master Thesis, Texas A&M University, 2006.
- ARNONE, A.; LIOU, M. S.; POVINELLI, L. A. “Multigrid Calculation of Three-Dimensional Viscous Cascade Flows”, **AIAA Journal** Paper 91-3238-CP, 1991.
- BARROSO, A. C. O.; BAPTISTA FILHO, B. D. **Refining the design and analysis of the IRIS pressurizer. In: 5th International Conference on Nuclear Option in Countries With Small and Medium Electricity Grids**. Dubrovnik, Croatia, 2004.
- BARUZZI, G. S., HABASHI, W. G., e HAFEZ, M. M. “Finite Element Solutions of the Euler Equations for Transonic External Flows”, **AIAA Journal**, Vol. 29, No. 11, 1991, pp. 1886-1893.
- BEAM, R. M.; WARMING, R. F. “An Implicit Finite-Difference Algorithm for Hyperbolic Systems in Conservation-Law Form”, **Journal of Computational Physics**, Vol. 22, 1976, pp. 87-110.
- BEAM, R. M.; WARMING, R. F. “An Implicit Factored Scheme for the Compressible Navier-Stokes Equations”, **AIAA Journal**, Vol. 16, 1978, pp. 393-401.
- BESS, J. D.; FUJIMOTO, N.; DOLPHIN, B. H.; SNOJ, L.; ZUKERAN, A. Evaluation of the Start-Up Core Physics Tests at Japan’s High Temperature Engineering Test Reactor (Fully-Loaded Core), HTTR-GCR-RESR-001, revision 1, **International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments**, NEA/NSC/DOC(2006)1, OECD-NEA, 2010.
- BOER, B.; LATHOUWERS, D.; DING, M.; KLOOSTERMAN, J. L.; **Coupled neutronics / thermal hydraulics calculations for High Temperature Reactors with the DALTON - THERMIX code system**, International Conference on the Physics of Reactors, “Nuclear Power: A Sustainable Resource” Casino-Kursaal Conference Center, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.

BRANDT, A. "Guide to Multigrid Development", **Lecture Notes in Mathematics**, Vol. 960, Springer-Verlag, Berlin, 1981, pp. 220-312.

CEBECI, T.; SMITH, A. M. O. "A Finite-Difference Method for Calculating Compressible Laminar and Turbulent Boundary Layers", **Journal of Basic Engineering, Trans. ASME, Series B**, Vol. 92, No. 3, September, 1970, pp. 523-535.

CHAUSSEE, D. S.; PULLIAM, T. H. Two-Dimensional Inlet Simulation Using a Diagonal Implicit Algorithm, **AIAA Journal**, 19(2), p. 153-159, 1981.

CLERK, S. S.; PERTERSON, J. F. TAC-2D A **General Purpose Two-dimensional Heat Transfer Code**, GA-9292, 1969.

COURANT, R.; FRIEDRICHS, K. O.; LEWY, H. "Ueber Die Differenzgleichungen Der Mathematischen Physik", **Mathematical Annual**, Vol. 100, p. 32, 1928.

DOMPIERRE, J.; VALLET, M.; BOURGALT, Y.; FORTIN, M.; HABASHI, G. Anisotropic mesh adaptation: Towards user-independent, mesh-independent and solver-independent CFD. **Int. J. for Num. Meth. In fluids** 39, 8, 2002.

FAJARDO, L. G. **Diseño conceptual de um sistema controlado por un acelerador para transmutación de residuos nucleares y aplicaciones energéticas** Tese de Doutorado, Instituto de Ingeniería Energética, Universidade Politécnica de Valencia, Valencia, 2012.

FRINK, N. T.; PARIKH, P.; PIRZADEH, S. "Aerodynamic Analysis of Complex Configurations Using Unstructured Grids", **AIAA 91-3292-CP**, 1991.

HARTEN, A. High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws, **Journal of Computational Physics**, v. 49, p. 357-393, 1983.

HIRANO, M.; HADA, K. **Development Of Thyde-HTGR: Computer Code For Transient Thermal-Hydraulics of High-Temperature Gas-Cooled Reactor**, JAERIM90- 07, 1990.

HIRSCH, C. **Numerical Computation of Internal and External Flows**. John Wiley & Sons, 1994.

Idaho National Laboratory. **RELAP5-3D Manuals**. Disponível em <<http://www.inel.gov/relap5/r5manuals.htm>>. Acesso em novembro de 2012.

JAMESON, A.; MAVRIPLIS, D. Finite Volume Solution of the Two-Dimensional Euler Equations on a Regular Triangular Mesh, **AIAA Journal**, v. 24, n. 4, p. 611-618, 1986.

JAMESON, A.; SCHMIDT, W.; TURKEL, E. "Numerical Solution of the Euler Equations by Finite Volume Methods Using Runge-Kutta Time Stepping Schemes", **AIAA Journal Paper** 81-1259, 1981.

JAMESON, A.; YOON, S. "Multigrid Solution of the Euler Equations Using Implicit Schemes", **AIAA Journal**, Vol. 24, No. 11, 1986, pp. 1737-1743.

JUSTO, D. A. R. Geração de malhas, condições de contorno e discretização de operadores para fluidodinâmica computacional. Dissertação de Mestrado, UFRGS-PPGMap, 2001.

KOPAL, Z. "Tables of Supersonic Flow Around Cones", Dept. of Electrical Engineering, Center of Analysis, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, Estados Unidos, 1947.

KTA. **Safety Standards of the Nuclear Safety Standard Commission. KTA3102.1, Reactor Core Design for High-Temperature Gas-Cooled Reactor, Part 1: Calculation of the Material Properties of Helium.** Geschäftsstelle des Kerntechnischen Ausschusses beim Bundesamt für Strahlenschutz, June, 1978.

KUNITOMI, K.; NISHIGUCHI, I.; WADA, H.; TAKEDA, T.; HISHIDA, M.; SUDO, Y.; TANAKA, T.; SAITO, S. "Depressurization accident analysis for the HTTR by the TAC-NC, **Energy**" 16, 1/2, P471-480, 1991.

KUTLER, P. "A Perspective of Theoretical and Applied Computational Fluid Dynamics", **AIAA Journal**, Vol. 23, No. 3, 1985, pp. 328-341.

LAX, P. D. "Weak Solutions of Nonlinear Hyperbolic Equations and Their Numerical Computation", **Communications on Pure and Applied Mathematics**, Vol. VII, pp. 159-193. 1954.

LAX, P. D.; WENDROFF, B. "Difference Schemes for Hyperbolic Equations with High Order of Accuracy", **Communications on Pure and Applied Mathematics**, Vol. XVII, pp. 381-398. 1964.

LEE, J.J.; PARK, G. C.; KIM, K. Y.; LEE, W.J. Numerical treatment of pebble contact in the flow and heat transfer analysis of a pebble bed reactor core. **Nuclear Engineering and Design** 237, 2183–2196, 2007.

LIM, H.S.; NO, H.C. "Development of 3-D Multicomponent Mixture Analysis (GAMMA) Code for Pebble bed Safety Analysis in a HTGR," Proc. of KNS Spring Meeting, Gyeongju, Korea, May, 2004.

LINARES, J.; MORATILLA, B. **El hidrógeno y la energía. Análisis de situación y prospectiva de nuevas tecnologías energéticas.** Colección: Avances de Ingeniería. Asociación Nacional de Ingenieros del ICAI, 2007.

LIU, M.; STEFFEN, C. J., Jr. "A New Flux Splitting Scheme", **Journal of Computational Physics**, Vol. 107, 1993, pp. 23-39.

LONG, L. N.; KHAN, M. M. S.; SHARP, H. T. "Massively Parallel Three-Dimensional Euler / Navier-Stokes Method", **AIAA Journal**, Vol. 29, No. 5, 1991, pp. 657-666.

LONG, J. M. A.; RADESPIEL, R. "Vortical Flow Simulation around the Space Shuttle Orbiter", **AIAA Journal Paper** 91-3201-CP, 1991.

MACCORMACK, R. W. "The Effect of Viscosity in Hypervelocity Impact Cratering", **AIAA Journal Paper** 69-354, 1969.

MACCORMACK, R. W. "A Numerical Method for Solving the Equations of Compressible Viscous Flow", **AIAA Journal**, Vol. 20, No. 9, 1982, pp. 1275-1281.

MACCORMACK, R. W. "Current Status of Numerical Solutions of the Navier-Stokes Equations", **AIAA Paper** 85-0032, 1985.

MACIEL, E. S. G.; AZEVEDO, J. L. F. **Comparação entre Vários Modelos de Dissipação Artificial na Solução das Equações de Navier-Stokes**, *Anais do V Congresso de Engenharia Mecânica Norte-Nordeste (V CEM – NNE)*, v. 3, Fortaleza, CE, p. 604- 611, 1998.

MACIEL, E. S. G. **Simulação Numérica de Escoamentos Supersônicos e Hipersônicos Utilizando Técnicas de Dinâmica dos Fluidos Computacional**, Tese de Doutorado, ITA, CTA, São José dos Campos, SP, Brasil, 2002, 258 p.

MACIEL, E. S. G. **Relatório ao Conselho Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento Tecnológico (CNPq) sobre as Atividades de Pesquisa Desenvolvidas no Segundo Ano de Vigência da Bolsa de Estudos para Nível DCRIF Referente ao Processo No. 304318/2003-5**, Report to the National Council of Scientific and Technological Development (CNPq), Recife, PE, Brazil, 54p, 2005. Disponível em < www.edissonsavio.eng.br>.

MACIEL, E. S. G. **Comparação entre Diferentes Modelos de Dissipação Artificial Aplicados a um Sistema de Coordenadas Generalizadas – Parte I**, 7th Symposium of Computational Mechanics (VII SIMMEC), Araxá, MG, Brazil, 2006. 1 CD-ROM.

MACIEL, E. S. G. **Estudo de Esquemas Numéricos Simétrico e Assimétrico de Alta Resolução na Solução de escoamentos Transônico e supersônico – Parte I**, *Mecânica Computacional* v. XXIV, Buenos Aires, Argentina, novembro, 2005.

MACIEL, E. S. G. **Comparison among structured first order algorithms in the solution of the euler equations in two-dimensions**. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 29(4), 421-431.

MAGALHÃES, M. A. S. **Efeitos de transitórios de boro no comportamento do reator IRIS através de modelagem dinâmica com SIMULINK**, Dissertação de mestrado, DENUFPE, Recife-PE, 2010.

MAVRIPLIS, D. J.; JAMESON, A. **“Multigrid Solution of the Euler Equations on Unstructured and Adaptive Meshes”**, ICASE Report 87-53, 1987.

MAVRIPLIS, D. J. **Accurate Multigrid Solution of the Euler Equations on Unstructured and Adaptive Meshes**, *AIAA Journal*, v. 28, n. 2, p. 213-221, 1990.

MOURA, D. P. M.; DOMINGUES, D. S. **Ferramenta Computacional Usando o Método de Diferenças Finitas para Problemas de Difusão Neutrônica em Geometria Cartesiana Bidimensional**. Disponível em <<http://cesmac.com.br/erbase2010/papers/wticg/65532.pdf>>. Acesso em 07 de agosto de 2012.

NICOLA, C.; TOGNACCINI, R.; VISINGARDI, P.; PAPANONE, L. **“Progress in the Aerodynamic Analysis of Inviscid Supersonic Flow Fields around Complex Aircraft Configurations”**, *AIAA Journal* Paper 94-1821-CP, 1994.

OH, C. H.; DAVIS, C.; SIEFKEN, L.; MOORE, R.; NO, H. C.; KIM, J.; PARK, G. C.; LEE, J. C.; MARTIN, W. R. **Development of Safety Analysis Codes and Experimental Validation for a Very High Temperature Gas-Cooled Reactor**, Final Report, Idaho National Laboratory, INL/EXT-06-01362, 2006.

PARTHASARATHY, V.; KALLINDERIS, Y. **“Directional Viscous Multigrid Using Adaptive Prismatic Meshes”**, *AIAA Journal*, Vol. 33, No. 1, 1995, pp. 69-78.

PENNER, S.S. **Steps toward the hydrogen economy**. *Energy* v. 31, p. 33-43, 2006.

PULLIAM, T. H. Artificial Dissipation Models for the Euler Equations, **AIAA Journal**, v. 24, n. 12, p. 1931-1940, 1986.

PULLIAM, T. H.; CHAUSSEE, D. S. “A Diagonal Form of an Implicit Approximate-Factorization Algorithm”, **Journal of Computational Physics**, Vol. 39, 1981, pp. 347- 363.

QUADROS, R. S. **Utilização de Geometrias Aerodinâmicas Utilizando Métodos Inversos**, Dissertação de Mestrado, PPGMAp-UFRGS, Porto Alegre – RS, 2003.

RADESPIEL, R.; KROLL, N. “Accurate flux vector splitting for shocks and shear layers”, **Journal of Computational Physics**, Vol. 121, pp. 66-78, 1995.

ROCHA, J. S. **Desenvolvimento de um Código Computacional para Análise Dinâmica do Circuito Primário de um Reator Avançado**, Dissertação de Mestrado, DEN-UFPE, Recife – PE, 2011.

ROCHA, J. S.; LIRA, C. A. B. O.; MAGALHÃES, M. A. S. **Development of a Computer Code for Dynamic Analysis of the Primary Circuit of Advanced Reactors**. International Nuclear Atlantic Conference - INAC 2011 Belo Horizonte, MG, Brazil, Associação Brasileira de Energia Nuclear – ABEN, October 24-28, 2011.

ROCHA, J. S.; LIRA, C. A. B. O.; MACIEL, E. S. G. **Artificial Dissipation Models Applied to Navier-Stokes Equations for Analysis of Supersonic Flow of Helium Gas Around a Geometric Configuration Ramp Type** – INAC 2015 São Paulo, SP, Brazil, Associação Brasileira de Energia Nuclear – ABEN, October, 2015.

SOUTHWORTH, F. H.; MACDONALD, P. E.; BAXTERB, A. M.; BAYLESSA, P. D.; BOLINB, J. M.; GOUGARA, H. D.; LABARB, M.; MOOREA, R. L.; OUGOUAGA, A. M.; RICHARDSB, M. B.; SANTA, R. L.; STERBENTZA, J. W.; TERRYA, W. **Next Generation Nuclear Plant (NGNP) Project – Preliminary Assessment of Two Possible Designs** 14th Pacific Basin Nuclear Conference Honolulu, Hawaii, March 21-25, Paper 91915, 2004.

STEGER, J. L.; WARMING, R. F. “Flux Vector Splitting of the Inviscid Gasdynamic Equations with Application to Finite Difference Methods”, **Journal of Computational Physics**, Vol. 40, 1981, pp. 263-293.

STILES, R. J.; HOFFMAN, J. D. “Analysis of Steady, Two-Dimensional, Chemically Reacting, Nonequilibrium, Inviscid Flow in Nozzles”, **AIAA Journal**, Vol. 23, No. 3, 1985, pp. 342-348.

SWANSON, R. C.; RADESPIEL, R. "Cell Centered and Cell Vertex Multigrid Schemes for the Navier-Stokes Equations", **AIAA Journal**, Vol. 29, No. 5, 1991, pp. 697-703.

TACHIBANA, Y.; NAKAGAWA S.; TAKEDA T.; SAIKUSA A.; FURUSAWA T.; TAKAMATSU K.; SAWA K.; IYOKU T. Plan for first phase of safety demonstration tests of the High Temperature Engineering Test Reactor. **Nuclear Engineering and Design**. 224: 179-197, 2003.

TALAMO A.; GUDOWSKI, W.; Incineration of light water reactor waste in high temperature gas reactors: axial fuel management and efficiency of americium and curium transmutation. **Nuclear Science and Engineering** 156/2, p. 244-266, 2007.

TALAMO A.; GUDOWSKI, W. Adapting the deep burn in - core fuel management strategy for the gas turbine - modular helium reactor to a uranium-thorium fuel. **Ann Nuclear Energy**. 32, 1750-1781, 2005.

TAYLOR, G. I.; MACCOL, J. W. "The Air Pressure on a Cone Moving at High Speed", *Proceedings of the Royal Society (A)*, Vol. 139, p. 278, 1933.

TURKEL, E.; VATSA, V. N. Effect of Artificial Viscosity on Three-Dimensional Flow Solutions, **AIAA Journal**, v. 32, n. 1, p. 39-45, 1994.

U.S. DOE, Department of Energy. **Progress Report for Hydrogen, Fuel Cells, and Infrastructure Technologies Program. Energy Efficiency and Renewable Energy**. Office of Hydrogen, Fuel Cells, and Infrastructure Technologies. FY 2002; November, 2002.

U.S. NUREG, Nuclear Regulatory Commission. **TRISO-Coated Particle Fuel Phenomenon Identification and Ranking Tables (PIRTs) for Fission Product Transport Due to Manufacturing, Operations, and Accidents**. Office of Nuclear Regulatory Research; NUREG/CR-6844, Vol. 1, 2004.

WARMING, R. F., BEAM, R. M., e HYETT, B. J., "Diagonalization and Simultaneous Symmetrization of the Gas-Dynamic Matrices", **Mathematics of Computation**, Vol. 29, No. 132, 1975, pp. 1037-1045.

ANEXO A: ENERGIA NUCLEAR E A PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO

O hidrogênio apresenta uma grande capacidade de armazenamento de energia e, por este motivo seu uso para geração de energia elétrica e como fonte de calor vem sendo amplamente pesquisado. Além disso, a queima de hidrogênio para a produção de energia não produz poluentes atmosféricos, ao contrário dos combustíveis fósseis. O hidrogênio normalmente existe combinado com outros elementos, como o oxigênio na água, o carbono no metano e demais compostos orgânicos.

Embora seja o terceiro elemento mais abundante na Terra, o hidrogênio não constitui um recurso energético: trata-se de um portador de energia (em outras palavras, um vetor energético), pois não se encontra isolado na natureza. Para ser obtido, deve-se produzi-lo através de outras matérias primas (água, biomassa, recursos fósseis, etc.), e isso ocorre através transformações nas quais se consome algum tipo de energia primária (nuclear, renovável ou fóssil) (LINHARES; MORATILLA, 2007).

Do ponto de vista de suas aplicações, a mais comum é a conversão direta da energia química do hidrogênio em eletricidade através da célula de combustível, que apresenta um elevado rendimento por tratar-se de um processo eletroquímico (U.S. DOE, 2002). Diversas empresas do ramo automobilístico já dispõem de protótipos que se utilizam de células combustíveis, sendo os ônibus urbanos e alguns veículos industriais os modelos nos quais se concentram boa parte das aplicações.

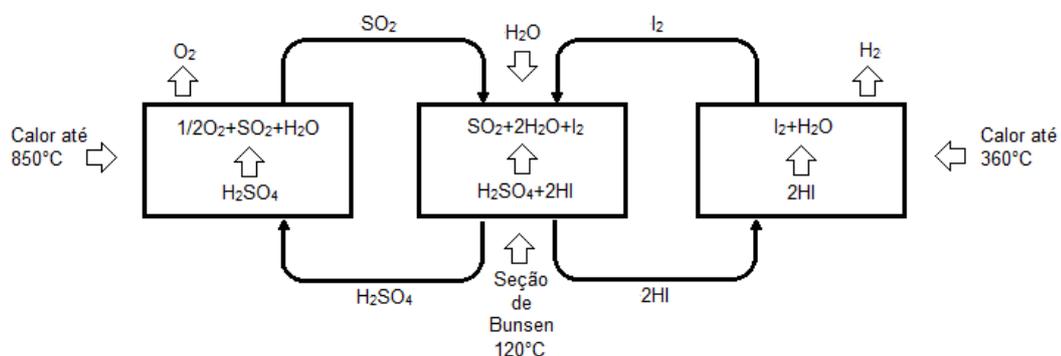
A combustão direta em motores alternativos ou turbinas a gás constitui outra possibilidade a ser considerada como campo de aplicação do hidrogênio. Esse uso direto perde a característica atrativa da alta eficiência energética das células de combustível, apresentando uma série de problemas técnicos importantes, oriundos em sua grande maioria da elevada temperatura de combustão do hidrogênio. Levando-se em conta esse último campo de aplicação, o hidrogênio pode ter um importante papel quando utilizado em conjunto com outros combustíveis (LINHARES; MORATILLA, 2007).

Outra importante consideração que deve ser levada em conta no tocante ao desenvolvimento de tecnologias que utilizem hidrogênio como vetor energético diz respeito à redução da poluição do meio ambiente: combinando o hidrogênio com a produção de eletricidade, por exemplo, poderia-se reduzir as emissões de gases de estufa, o que consequentemente diminuiria a dependência dos combustíveis fósseis na produção de eletricidade e transporte (FAJARDO, 2012).

Existem diversas possibilidades para a produção de hidrogênio: procedimentos químicos, dissociação da água por calor (termólise), dissociação da água por eletricidade (eletrolise), fermentação e dissociação da água por luz (fotólise). Atualmente 96% do hidrogênio que se produz é obtido por combustíveis fósseis mediante processos químicos, principalmente a partir da reforma de vapor de gás natural, com conseqüente emissão de CO_2 (são obtidos aproximadamente 7 kg de CO_2 para cada kg de hidrogênio) conforme requerido para que o processo se torne ambientalmente aceitável. O uso do carbono como energia primária na produção de hidrogênio é uma opção interessante, pois apresenta a vantagem de poder realizar co-geração produzindo tanto eletricidade quanto hidrogênio. Além disso, o carbono apresenta reservas para sua exploração durante aproximadamente 200 anos, e requer um custo reduzido de produção. No entanto, demanda grandes investimentos, similares a uma central nuclear de segunda geração (FAJARDO, 2012).

Levar adiante a obtenção de hidrogênio mediante energias renováveis poderia eliminar o problema das emissões de CO_2 e do uso de combustíveis fósseis para esse fim. Contudo, essas fontes renováveis atualmente representam uma pequena fração da energia requerida para uma plena “economia do hidrogênio”. Seria interessante encontrar uma alternativa para a produção de hidrogênio em larga escala a partir de água, sem recorrer a combustíveis fósseis, utilizando uma fonte de energia sem emissões de CO_2 e com a qual o custo de produção fosse relativamente baixo. O ciclo termoquímico mostrado na Figura 31 desenvolvido pela GA nos anos 70, baseia-se na produção de hidrogênio a partir de água mediante o processo termoquímico iodo-enxofre (I-S).

Figura 31. Esquema do ciclo termoquímico (I-S).



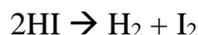
Fonte: autoria própria

O processo consiste na quebra da molécula de água mediante três reações químicas:

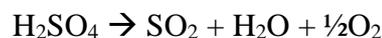
1 – Reação Bunsen, que ocorre a 120°C e é o núcleo do processo:



2 – Reação de decomposição do HI, que ocorre a aproximadamente 360°C:



3 – Reação de decomposição do H₂SO₄, a 870°C:



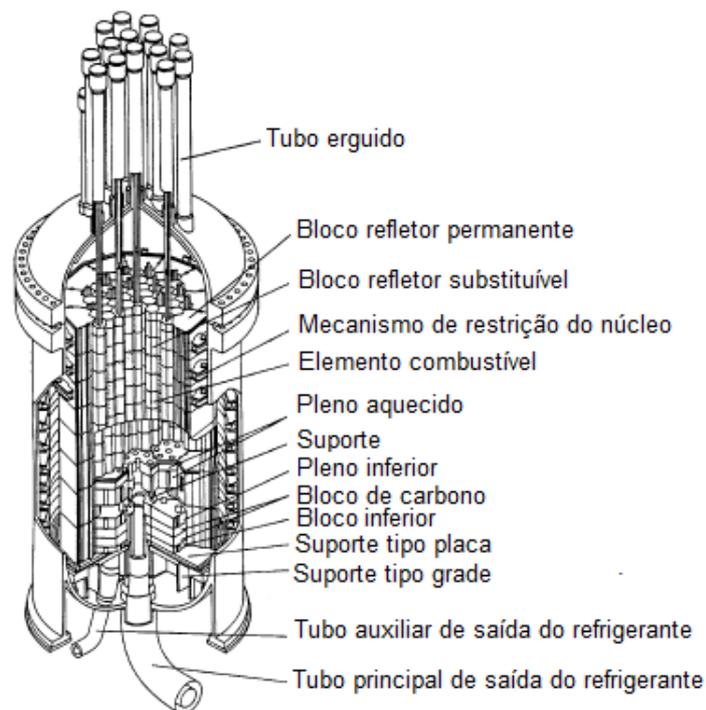
O resultado final seria: $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2$. Com exceção dos elementos hidrogênio e oxigênio, os produtos das duas últimas reações são reciclados como reagentes na primeira reação. As dificuldades são altas temperaturas que são requeridas para executar o processo, devido à terceira reação.

A eletrólise seria a outra opção para produzir hidrogênio a partir de água: consiste na quebra da molécula de água por ação de uma corrente elétrica. Quando ocorre em condição ambiente (a uma temperatura de 25°C e pressão de 1 atm) torna-se um processo pouco interessante, pois se produz, em termos de energia, o equivalente a 1,02 kJ de hidrogênio por cada kJ elétrico consumido. No entanto, se a reação transcorre com vapor de água a 1000°C, se produzem 1,36 kJ de hidrogênio por cada kJ elétrico consumido. A eletrólise a altas temperaturas cumpriria com os requisitos pleiteados, mas para ser eficiente demandaria altas temperaturas tais como as do ciclo descrito anteriormente (FAJARDO, 2012). O desenvolvimento de uma forma de se atingir altas temperaturas de forma rentável seria o caminho adequado para a obtenção de hidrogênio em larga escala, o que implicaria na redução de emissões de CO₂ e do uso de combustíveis fósseis, reforçando a ideia da utilização de reatores de muito alta temperatura, dentre eles, o VHTGR.

ANEXO B: REATORES REFRIGERADOS A GÁS

A evolução tecnológica de reatores refrigerados a gás ao longo dos anos pode ser atribuída ao desenvolvimento do High Temperature Gas-cooled Reactor (Reator de Alta Temperatura Refrigerado a Gás), HTGR, Figura 32, precursor dos reatores de muito alta temperatura. Esse conceito de reator inclui os primeiros reatores refrigerados por ar e por CO₂. O uso de hélio no lugar de CO₂ como refrigerante, combinado com grafite como moderador, oferece melhores eficiências neutrônica e térmica, e possibilita a produção de calor a altas temperaturas.

Figura 32: Visão esquemática do HTGR.



Adaptado de Tachibana et al, 2003

O desenvolvimento de HTGRs evoluiu paralelamente em dois ramos: reatores de potência e de pesquisa. O primeiro HTGR de potência, o “Peach Bottom I” (na Pensilvânia) teve construção concluída em 1966 pela Philadelphia Electric. Tinha potência de 115 MW térmicos e uma temperatura de saída de 1000°C. Uma década depois, a General Atomics (GA) colocou em operação o reator “Fort St. Vrain” (no Colorado), que tinha potência alta: 842 MW térmicos. Na mesma época, dois HTGRs de pesquisa foram construídos na Europa:

o “British Dragon”, em 1966, e o alemão Arbeitsgemeinschaft Versuchsreaktor (Reator Experimental Arbeitsgemeinschaft), AVR, em 1967, com uma potência térmica de 20 e 46 MW, respectivamente. Em 1986, a Hochtemperatur Kernkraftwerk GmbH (HKG) lançou o Thorium Reactor High Temperature (Reator a Tório de Alta Temperatura), THTR, na Alemanha, que utilizou pela primeira vez leitos de grafite (TALAMO; GUDOWSKI, 2005).

No início do novo milênio, a pesquisa sobre os HTGRs começou na Ásia através do HTTR-2000 japonês e do HTR-10 chinês, que entraram em operação no ano de 2000 e 2003, respectivamente, com uma potência de 30 e 10 MW térmicos. No ano de 2002, a GA apresentou à Comissão Reguladora Nuclear dos EUA seu mais recente projeto de HTGR: o Gas Turbine – Modular Helium Reactor (Reator Modular de Hélio – Turbina a Gás), GT-MHR, que tem uma potência de 2.400 MW e está estruturado em quatro módulos HTGRs de 600 MW térmicos (TALAMO; GUDOWSKI, 2005).

Entre as semelhanças dos HTGRs se deve destacar o uso de combustível em forma de partículas revestidas do tipo BISO ou TRISO, que consiste em um núcleo esférico de material físsil e/ou fértil, segundo sua aplicação, encapsulado em múltiplas camadas de revestimentos refratários. As múltiplas camadas formam um vaso de pressão em miniatura, altamente resistente à corrosão, e uma barreira impermeável à liberação de gases e produtos de fissão metálicos. As partículas BISO já não estão em uso nos atuais HTGRs devido a seu menor rendimento e sua menor retenção dos produtos de fissão, em comparação com as TRISO.

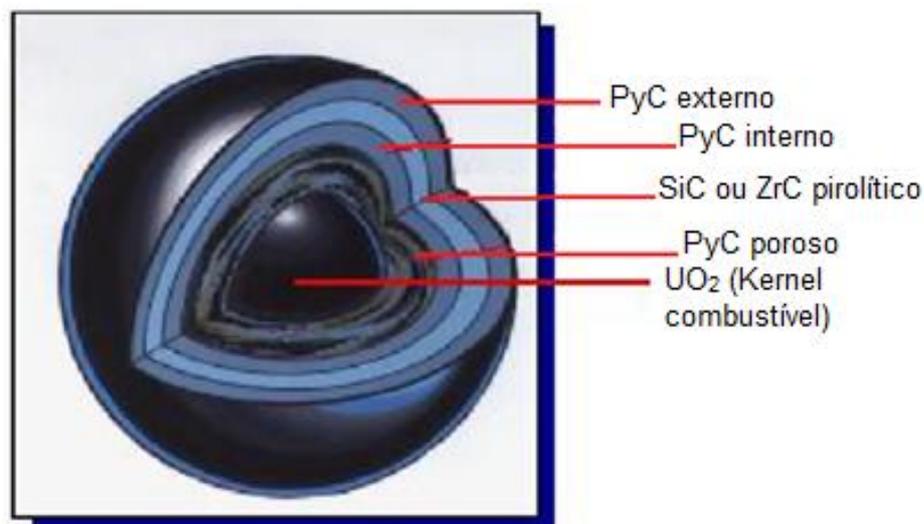
O objetivo das partículas de combustível revestidos e da forma do elemento combustível é o de permitir o funcionamento dos HTGRs mantendo uma alta integridade das partículas e uma baixa liberação de produtos de fissão durante a operação normal e durante a situação de acidente. Outro objetivo é conseguir alta queima de combustível: acima de 10% das fissões por átomo inicial de metal (FIMA) para leito de bolas e de 20% de FIMA para bloco prismático, a fim de permitir um funcionamento econômico do sistema e um bom uso de material físsil (FAJARDO, 2012).

Para atingir estes objetivos requer-se o uso de diferentes materiais habitualmente utilizados nos Light Water Reactors (Reatores Refrigerados à água Leve), LWRs. Minimiza-se o uso de materiais metálicos e o fluido refrigerante é um gás inerte, monofásico. A segurança é confiada a materiais cerâmicos com base no carbono, tais como grafite, pirocarbono e carboneto de silício. As propriedades destes materiais também tem alterado o design do combustível (de matrizes de varas de combustível a blocos de grafite e esferas de combustível). Além disso, moderador e refrigerante são separados.

A concepção das partículas de combustível revestidos utilizados nos HTGRs é diferente das pastilhas e do revestimento do combustível, que é utilizado nos LWRs. O núcleo de um HTGR contém milhões destas partículas, cada uma atuando com sua própria contenção. O núcleo combustível de cada partícula é revestido com camadas de grafite e de carboneto de silício. A partícula resultante deve suportar a pressão dos gases de fissão que são gerados e formar uma barreira para a liberação de produtos de fissão. Enquanto o revestimento do combustível dos LWRs faz esta função em larga escala em condições normais de funcionamento, as partículas de combustível revestidos requerem elevado nível de integridade durante condições de acidentes. Portanto, é necessário que as partículas de combustível permaneçam intactas e com um elevado grau de confiabilidade durante o funcionamento normal e de acidente (U.S. NUREG, 2004).

Partículas TRISO comuns (Figura 33) são compostas de uma esfera central de actinídeo óxido (Kernel) coberto por: uma camada de carbono poroso, uma camada interna de Pirocarbono, uma camada de ZrC e uma camada de Pirocarbono externa. A camada interna de Pirocarbono geralmente é a primeira camada de uma partícula TRISO que falha, uma vez que é submetida a tensões mecânicas contrárias: inchaço, devido à pressão de produtos de fissão gasosos, e o encolhimento, devido à irradiação de nêutrons. Esse fenômeno pode ser atenuado por um novo tipo de partículas TRISO que introduz mais duas camadas: uma camada porosa de Pirocarbono, após a camada porosa de grafite e uma camada de ZrC-Pirocarbono, antes da camada de ZrC.

Figura 33: Combustível TRISO

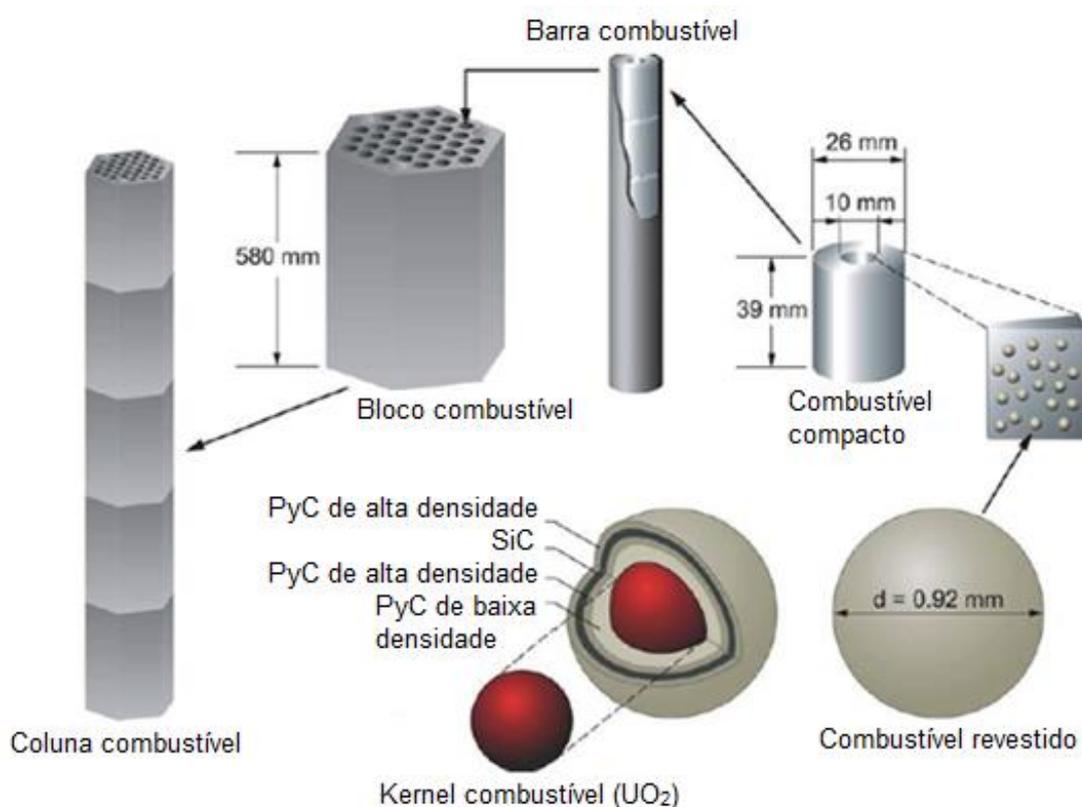


Adaptado de Fajardo, 2012

No novo tipo de partículas TRISO, a mudança de densidade entre as diferentes camadas é mais gradual do que a atenuação de tensões mecânicas. Além disso, a fim de repartir mais volume para os produtos gasosos de fissão, a densidade da camada de carbono porosa é inferior. Esse novo conceito de partícula permite redução na liberação de produtos gasosos de fissão em comparação com as partículas TRISO comuns na paridade de condições de irradiação, que são importantes para a medição da liberação de produtos de fissão.

A distinção fundamental no desenho dos HTGRs é a forma dos elementos combustíveis (esféricos versus hexagonais/cilíndricos) (Figura 34). Ambos conceitos de desenho usam as partículas TRISO como combustível, por estas partículas estarem contidas em elementos combustíveis com diferentes configurações: blocos prismáticos ou leito de bolas.

Figura 34: Detalhes do combustível de um HTTR



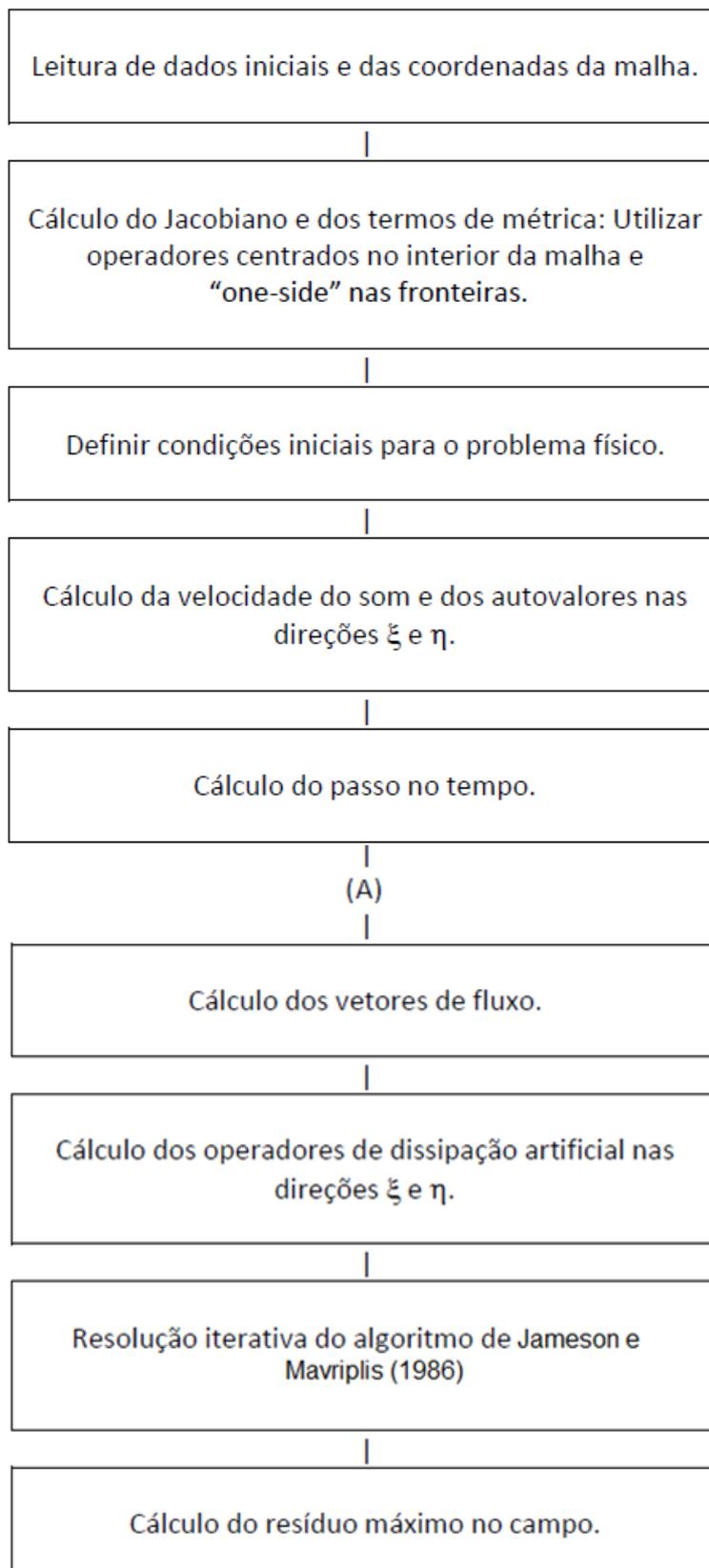
Adaptado de Bess et al, 2010

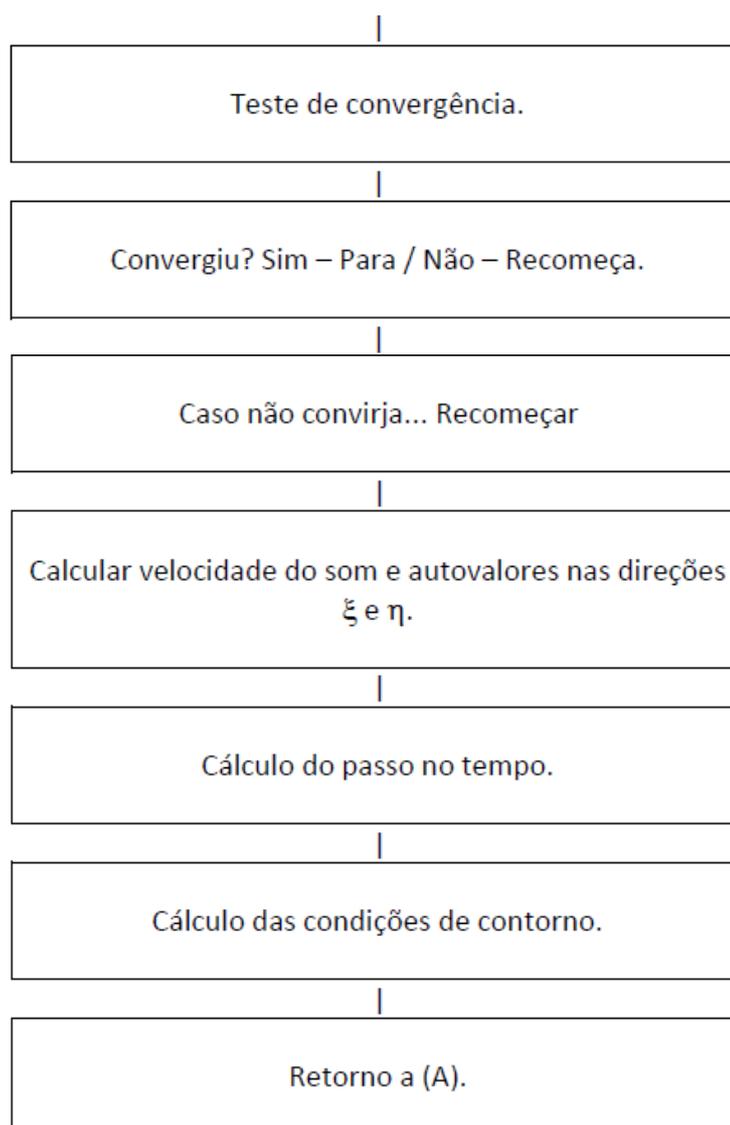
Em um reator com bloco prismático, as partículas são misturadas com a matriz de carbono fechado em formas cilíndricas e 12,5 mm de diâmetro externo e 50 mm de comprimento. Os elementos combustíveis são colocados dentro de blocos cilíndricos ocos

hexagonais de grafite com cerca de 80 cm de altura e 36 cm entre as faces. O combustível é arrefecido por hélio que flui para baixo através de canais de arrefecimento que se encontram em blocos de grafite. Durante o período de recarga, os blocos de combustível usados são removidos e substituídos por novos blocos de combustível. Exemplos de HTGRs prismáticos são o Fort St. Vrain e o HTTR.

Em um reator de leito de bolas (tal como o AVR), as partículas de combustível estão contidas em elementos combustíveis esféricos do tamanho de bolas de bilhar (6 cm de diâmetro). O combustível é arrefecido por hélio, que flui para baixo através dos elementos combustíveis. Estes grânulos são removidos continuamente a partir do núcleo do reator, o seu conteúdo é medido pela atividade dos produtos de fissão e são devolvidas ao núcleo ou substituídas por elementos combustíveis novos, de acordo com seu nível de esgotamento (FAJARDO, 2012).

APÊNDICE A: ESTRUTURA DO PROGRAMA PRINCIPAL DO CÓDIGO DISSIPA2D_EULER





APÊNDICE B: ESTRUTURA DO PROGRAMA PRINCIPAL DO CÓDIGO DISSIPA2D_NS

