

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**Simulação Numérica de Escoamentos Hipersônicos em
Não-Equilíbrio Termo-Químico através do
Método dos Elementos Finitos**

por

Martin Poulsen Kessler

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Dezembro de 2002

**Simulação Numérica de Escoamentos Hipersônicos em Não-Equilíbrio
Termo-Químico através do Método dos Elementos Finitos**

por

Martin Poulsen Kessler

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Armando Miguel Awruch

Aprovada por:

Algacyr Morgenstern Jr., PhD (CTA/SP)

Profa. Dra. Lígia D. F. Marczak (UFRGS/RS)

Prof. Dr. Horácio A. Vielmo (UFRGS/RS)

Prof. Dr. Sérgio Luiz Frey (UFRGS/RS)

Prof. Dr. Alberto Tamagna
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 18 de Dezembro de 2002

À memória de minha irmã,
Maria Eduarda

Os anos de busca na escuridão por uma verdade que se sente, mas não se pode exprimir, o intenso desejo e as alternâncias de confiança e desânimo até atingirmos a clareza e a compreensão só são conhecidos de quem os experimentou.

Albert Einstein

If I have seen further,
it is by standing on the shoulders of Giants.

Sir Isaac Newton

AGRADECIMENTOS

Gostaria de prestar os seguintes agradecimentos:

- À Divisão de Sistemas Espaciais do Instituto de Aeronáutica e Espaço (IAE) do Centro Técnico Aeroespacial (CTA), em particular aos doutores Paulo Moraes Jr. e Algacyr Morgenstern Jr., pela hospitalidade.
- À Agência Espacial Brasileira (AEB), pelo apoio financeiro concedido através do Projeto UNIESPAÇO, do qual fez parte o presente trabalho.
- Ao Centro Nacional de Supercomputação (CESUP) da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, em especial à Denise Ewald, à Magalí Longhi, ao Odilon Rolin, à Nilce Perin, ao Luis Fernando Fernandez e aos bolsistas, amigos e Mestres em Engenharia Dimitrius Pereira e André Rossa.
- À CAPES, pelo suporte financeiro.
- Ao Prof. Dr. Armando Miguel Awruch, pela orientação.
- Ao Prof. Dr. Sérgio Frey, pela orientação no estágio de docência.
- À Ivanise Sostisso e ao Paulo Kutter, pela amizade e suporte.
- À Walcy Oliveira, pelo grande carinho e pela amizade.
- Ao meu irmão, Edmundo, pelo apoio e companheirismo.
- A todos aqueles que, de alguma forma, contibuíram para a realização deste trabalho.

RESUMO

Simulação Numérica de Escoamentos Hipersônicos em Não-Equilíbrio Termo-Químico através do Método dos Elementos Finitos

O presente trabalho tem por objetivo desenvolver um código computacional destinado à simulação numérica tridimensional de escoamentos compressíveis hipersônicos, em especial para analisar o processo de reentrada de veículos espaciais na atmosfera terrestre. Devido às temperaturas elevadas encontradas neste tipo de escoamento, efeitos de altas temperaturas são incluídos, como excitação vibracional das moléculas e reações químicas. Utiliza-se o modelo de 2 temperaturas (translacional e vibracional), 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N , O) e 17 reações químicas de Park [1986] para o modelamento do fenômeno termo-químico. Introduce-se uma formulação baseada no método dos elementos finitos, através do esquema de Taylor-Galerkin, para a discretização do tempo e do espaço e para a solução do sistema de equações. Alguns exemplos e aplicações de problemas hipersônicos bi e tridimensionais, difusivos e não difusivos, são apresentados, incluindo comparações entre os resultados obtidos no presente trabalho e na literatura.

Autor: Martin Poulsen Kessler

Orientador: Prof. Dr. Armando Miguel Awruch

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, Dezembro de 2002.

ABSTRACT

Numerical Simulation of Thermochemical Nonequilibrium Hypersonic Flows using the Finite Element Method

The aim of the present work is to develop a computational code to simulate three-dimensional compressible hypersonic flows, specially to analyze the reentry of space vehicles into the Earth's atmosphere. Due to high temperatures found in this kind of flows, high temperature effects are included, such as vibrational excitation and chemical reaction. The 2 temperatures (translational and vibrational), 5 species (N_2 , O_2 , NO , N , O) and 17 reactions model presented by Park [1986] is used to represent the thermo-chemical phenomenon. A finite element method formulation, using the Taylor-Galerkin scheme, is introduced to perform time and space discretization and to obtain the solution of the system of equations. Some examples of two and three-dimensional, diffusive and non-diffusive, hypersonic problems are presented, including comparisons between results obtained in the present work and in the literature.

Author: Martin Poulsen Kessler

Supervisor: Prof. Dr. Armando Miguel Awruch

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

PhD Thesis

Porto Alegre, December 2002.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	A Era Espacial	1
1.2	Microgravidade	3
1.3	O Projeto SARA	4
1.4	Motivações, objetivos e conteúdo do texto	6
2	A Reentrada na Atmosfera	7
2.1	Introdução	7
2.2	Escoamentos hipersônicos	9
2.2.1	Efeitos de alta temperatura	10
2.3	Descrição microscópica dos gases	14
2.4	Equilíbrio e não equilíbrio químicos	16
2.5	Dinâmica de Fluidos Computacional em escoamentos hipersônicos	17
2.5.1	O Método dos Elementos Finitos na Dinâmica de Fluidos Computacional	20
3	Equações Governantes	22
3.1	Introdução	22
3.2	Conservação de massa	22
3.2.1	Quantas espécies químicas?	22
3.2.2	Conservação de massa da mistura	25
3.2.3	Conservação de massa das espécies químicas	25
3.3	Conservação da quantidade de movimento	27
3.4	Conservação de energia	28
3.4.1	Quantas temperaturas?	28
3.4.2	Conservação da energia vibracional	29

3.4.3	Conservação da energia total	31
3.4.4	Energia interna e entalpia	32
3.5	Modelo cinético-químico	33
3.6	Condições de contorno: superfícies catalíticas	35
3.7	Forma compacta das equações	37
4	Aplicação do Método de Taylor-Galerkin	38
4.1	Introdução	38
4.2	Discretização Temporal: Série de Taylor	38
4.3	Discretização Espacial: Galerkin	41
4.3.1	Modelo numérico para escoamentos não difusivos	42
4.3.2	Modelo numérico para escoamentos difusivos	45
4.4	Esquema de difusividade artificial	47
5	Integração Explícita das Matrizes de Elemento	49
5.1	Elementos isoparamétricos hexaédricos de oito nós	49
5.2	Transformação do domínio de integração	51
5.3	Integração analítica das matrizes de elemento	52
5.4	Tratamento das integrais de contorno	57
6	Aspectos Computacionais	60
6.1	Introdução	60
6.2	Condição de estabilidade	60
6.3	Estado estacionário	61
6.4	Convergência do processo iterativo	61
6.5	Condição de contorno de deslizamento	62
6.6	Cálculo da temperatura vibracional	63
7	Aplicações	66
7.1	Escoamento de nitrogênio sobre meio cilindro	66
7.2	Escoamento de ar sobre meio cilindro	73
7.3	Escoamento de ar sobre meia elipse	80
7.4	Escoamento de ar sobre o veículo SARA	87

7.5	Escoamento de ar sobre meia elipse com ângulo de ataque	93
7.6	Escoamento de ar sobre meia esfera	99
8	Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros	106
8.1	Conclusões	106
8.2	Sugestões para trabalhos futuros	108
	Anexos	110
A	Atmosfera Padrão	111
A.1	A Atmosfera Padrão dos EUA (<i>U.S. Standard Atmosphere</i>)	111
B	Termos Difusivos	113
B.1	Expansão dos termos difusivos	113
	Referências Bibliográficas	117

Lista de Figuras

2.1	Limites do número de Knudsen para os modelos matemáticos de escoamentos de gases [Moss & Bird, 1985].	8
2.2	Temperatura atrás de uma onda de choque como função da velocidade da corrente livre na altitude de 52 km [Anderson, 1989].	11
2.3	Faixas de temperatura para excitação vibracional, dissociação e ionização do ar a 1 atmosfera [Anderson, 1989].	12
2.4	Mapa velocidade-altitude sobreposto a regiões de excitação vibracional, dissociação e ionização [Anderson, 1989].	13
2.5	Trajetórias de vôo para reentradas atmosféricas em um mapa de velocidade-altitude [Anderson, 1989].	14
2.6	Modos de energia molecular [Anderson, 1989].	15
2.7	Escoamento supersônico sobre um corpo rombudo [Maliska, 1995].	19
3.1	Efeito da catalisação da superfície na recombinação de átomos [Bertin, 1994].	36
5.1	Espaços físico e computacional do elemento isoparamétrico de 8 nós.	49
6.1	Vetores utilizados para a aplicação de condição de contorno de deslizamento. .	62
7.1	Esquema de escoamento hipersônico de nitrogênio parcialmente dissociado sobre meio cilindro de 1 polegada (25.4 mm) de raio.	66
7.2	Malha de elementos finitos utilizada para a análise do escoamento hipersônico (3162 nós e 1500 elementos).	67
7.3	Distribuição de número de Mach.	67
7.4	Distribuição de temperatura translacional (valores em K).	68
7.5	Distribuição de temperatura vibracional (valores em K).	68
7.6	Distribuição de pressão (valores em kPa).	69

7.7	Distribuição de massa específica da mistura (valores em kg/m^3).	69
7.8	Distribuição de fração mássica de N_2 .	70
7.9	Distribuição de fração mássica de N .	70
7.10	Comparação entre os gráficos de temperatura para os casos de não equilíbrio e gás perfeito na linha de estagnação.	71
7.11	Comparação entre os gráficos de massa específica da mistura para os casos de não equilíbrio e gás perfeito na linha de estagnação.	71
7.12	Gráficos de frações mássicas na linha de estagnação.	72
7.13	Variação do resíduo em função do número de passos de tempo.	72
7.14	Esquema do escoamento hipersônico de ar sobre meio cilindro de 50 mm de raio.	73
7.15	Malha de elementos finitos utilizada para análise do escoamento hipersônico (3162 nós e 1500 elementos).	74
7.16	Distribuição de número de Mach.	74
7.17	Distribuição de temperatura translacional (valores em K).	75
7.18	Distribuição de temperatura vibracional (valores em K).	75
7.19	Distribuição de pressão (valores em kPa).	76
7.20	Distribuição de massa específica da mistura (valores em kg/m^3).	76
7.21	Distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O).	77
7.22	Gráficos de número de Mach e temperaturas (em K) na linha de estagnação.	78
7.23	Gráficos de frações mássicas para as 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O) na linha de estagnação.	78
7.24	Comparação do número de Mach na linha de estagnação para 3 densidades de malha diferentes.	79
7.25	Variação do resíduo em função do número de passos de tempo.	79
7.26	Esquema do escoamento hipersônico ao redor de uma elipse.	80
7.27	Malha de elementos finitos formada por 7442 nós e 3600 elementos (apenas um elemento na direção z: 60x60x1).	81
7.28	Distribuição do número de Mach.	82
7.29	Distribuição de temperatura (em K).	82

7.30	Distribuição de pressão (em Pa).	83
7.31	Distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O).	84
7.32	Comparação do perfil de temperatura na linha de estagnação obtida pelo presente trabalho e por Argyris <i>et al.</i> [1991].	85
7.33	Comparação do perfil de massa específica na linha de estagnação obtida pelo presente trabalho e por Argyris <i>et al.</i> [1991].	85
7.34	Comparação do perfil de pressão na linha de estagnação obtida pelo presente trabalho e por Argyris <i>et al.</i> [1991].	85
7.35	Comparação entre as frações mássicas das espécies químicas na linha de estagnação obtidas pelo presente trabalho (a) e por Argyris <i>et al.</i> [1989] (b).	86
7.36	Variação do resíduo em função do número de passos de tempo.	86
7.37	Esquema do escoamento hipersônico e dimensões do SARA [Moraes Jr. & Pilchowski, 1997].	87
7.38	Malha de elementos finitos utilizada para análise do escoamento hipersônico ao redor do SARA.	88
7.39	Distribuição de número de Mach.	89
7.40	Distribuição de pressão (em kPa).	89
7.41	Distribuição de massa específica da mistura (em kg/m^3).	90
7.42	Distribuição de temperatura translacional (em K).	90
7.43	Distribuição de temperatura vibracional (em K).	90
7.44	Distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O).	91
7.45	Gráfico de número de Mach e temperaturas (em K) na linha de estagnação.	92
7.46	Gráfico de frações mássicas das espécies químicas na linha de estagnação.	92
7.47	Esquema do escoamento hipersônico de ar ao redor de meia elipse com ângulo de ataque de 30° e temperatura prescrita na parede.	93
7.48	Malha de elementos finitos formada por 14762 nós e 7200 elementos (120x60x1 elementos).	94
7.49	Distribuição de número de Mach	95
7.50	Distribuição de pressão (em Pa).	96

7.51	Distribuição de temperatura translacional (em K).	97
7.52	Distribuição de temperatura vibracional (em K).	97
7.53	Distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O).	98
7.54	Esquema de escoamento hipersônico de ar parcialmente dissociado sobre meia esfera de 2 cm de raio com temperatura prescrita na parede ($T_w = 300K$).	99
7.55	Malha de elementos finitos formada por 36771 nós e 33750 elementos.	100
7.56	Distribuição de número de Mach em um plano longitudinal.	101
7.57	Distribuição de pressão (em kPa) em um plano longitudinal.	101
7.58	Distribuição de temperatura translacional (em K) em um plano longitudinal.	102
7.59	Distribuição de temperatura vibracional (em K) em um plano longitudinal.	102
7.60	Distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O) em um plano longitudinal.	103
7.61	Gráficos de número de Mach e temperaturas translacional e vibracional na linha de estagnação.	104
7.62	Gráficos das frações mássicas das espécies químicas na linha de estagnação.	104
7.63	Variação do resíduo em função do número de passos de tempo.	105
A.1	Variação da pressão e da massa específica em função da altitude para a atmosfera padrão (<i>U.S. Standard Atmosphere</i>).	112
A.2	Variação da temperatura e da velocidade do som em função da altitude para a atmosfera padrão (<i>U.S. Standard Atmosphere</i>).	112

Lista de Tabelas

1.1	Meios de geração do ambiente de micro-gravidade e os respectivos tempos de duração.	4
2.1	Diferenças de temperatura para gás perfeito e para um gás com reações em equilíbrio na região de estagnação, avaliadas em problemas conhecidos.	11
3.1	Modelos químicos para o ar.	23
3.2	Dados para o modelo de 5 espécies.	24
3.3	Parâmetros para o cálculo dos coeficientes de taxa de reação para o ar [Park, 1986].	34
3.4	Constantes para cálculo do coeficiente de equilíbrio, $K_{eq,r}$, onde $M = N_2, O_2, NO, N$ e O [Park, 1986].	35

Lista de Símbolos

Letras Romanas

- a_∞ Velocidade do som na corrente livre, $[m/s]$, eq. (2.2), p. 9
- $a_{s,r}$ Parâmetro para cálculo da condutividade térmica, eq. (3.33), p. 31
- $B_{i,r}$ Coeficientes para o cálculo de $K_{eq,r}$, eq. (3.48), p. 35
- $b_{s,r}$ Coeficiente estequiométrico para os reagentes da reação r , eq. (3.42), p. 33
- c_s fração mássica da espécie s , eq. (3.36), p. 32
- D_s Coeficiente de difusão de massa da espécie s , $[m^2/s]$, eq. (3.5), p. 25
- D_{sr} Coeficiente de difusão binária, $[m^2/s]$, eq. (3.9), p. 26
- e Energia total específica, $[J/m^3]$, eq. (3.29), p. 31
- e_v Energia vibracional específica, $[J/m^3]$, eq. (3.20), p. 29
- $e_{e,s}$ Energia interna eletrônica da espécie s , $[J/kg]$, eq. (3.36), p. 32
- $e_{o,s}$ Energia interna de formação da espécie s , $[J/kg]$, eq. (3.36), p. 32
- $e_{t,s}$ Energia interna translacional da espécie s , $[J/kg]$, eq. (3.36), p. 32
- $e_{v,s}$ Energia interna vibracional da espécie s , $[J/kg]$, eq. (3.36), p. 32
- \mathbf{F}_j Vetor de termos advectivos, eq. (3.53), p. 37
- $f_{s,r}$ Coeficiente estequiométrico para os produtos da reação r , eq. (3.42), p. 33
- \mathbf{G}_j Vetor de termos difusivos, eq. (3.53), p. 37
- G_s Parâmetro para cálculo de $e_{e,s}$, eq. (3.39), p. 32
- \mathbf{H} Vetor de termos fonte, eq. (3.53), p. 37
- h_s Entalpia total da espécie s , $[J/kg]$, eq. (3.41), p. 33
- $h_{v,s}$ Entalpia vibracional da espécie s , $[J/kg]$, eq. (3.41), p. 33
- \mathbf{J} Matriz jacobiana, eq. (5.15), p. 52

$J_{s,j}$	Vetor de fluxo de massa, $[kg/m^2s]$, eq. (3.5), p. 25
$K_{eq,r}$	Constante de equilíbrio da reação r , eq. (3.48), p. 35
$k_{b,r}$	Coefficiente de taxa de reação para trás da reação r , eq. (3.47), p. 34
$k_{f,r}$	Coefficiente de taxa de reação para frente da reação r , eq. (3.47), p. 34
k	Constante de Boltzmann, $k = 1.380622 \times 10^{-23} J/K$, eq. (3.22), p. 30
Kn	Número de Knudsen, eq. (2.1), p. 8
ℓ	Comprimento característico, $[m]$, eq. (2.1), p. 8
M_∞	Número de Mach da corrente livre, eq. (2.2), p. 9
M_s	Peso molecular da espécie s , $[kg/kg-mol]$, eq. (3.7), p. 25
N_s	Número de espécies químicas, eq. (3.1), p. 23
N_r	Número de reações químicas, eq. (3.42), p. 33
p	Pressão, $[Pa]$, eq. (3.10), p. 26
p_s	Pressão parcial da espécie s , $[Pa]$, eq. (3.10), p. 26
q_j	Vetor de fluxo de calor total, $[J/m^2s]$, eq. (3.30), p. 31
$q_{v,j}$	Vetor de fluxo de calor vibracional, $[J/m^2s]$, eq. (3.21), p. 29
\bar{R}	Constante universal dos gases, $\bar{R} = 8314.3 J/kg-molK$, eq. (3.11), p. 26
$R_{b,r}$	Taxa de reação para trás para a reação r , $[kg-mol/m^3s]$, eq. (3.44), p. 33
$R_{f,r}$	Taxa de reação para frente para a reação r , $[kg-mol/m^3s]$, eq. (3.44), p. 33
R_s	Constante do gás para a espécie s , $[J/kgK]$, eq. (3.11), p. 26
T	Temperatura translacional, $[K]$, eq. (3.9), p. 26
$T_{\epsilon,s}$	Temperatura característica, $[K]$, eq. (3.13), p. 27
T_a	Temperatura de controle de taxa de reação, $[K]$, eq. (3.45), p. 34
T_d	Temperatura de ativação, $[K]$, eq. (3.47), p. 34
T_x	Temperatura de controle de taxa de reação, $[K]$, eq. (3.47), p. 34
t	Tempo, $[s]$, eq. (3.3), p. 25
\mathbf{U}	Vetor de incógnitas, eq. (3.53), p. 37
U_∞	Velocidade da corrente livre, $[m/s]$, eq. (2.2), p. 9

u_j	Componente da velocidade na direção x_j , $[m/s]$, eq. (3.3), p. 25
x_j	Coordenada na direção j , $[m]$, eq. (3.3), p. 25
y_s	Fração molar da espécie s , eq. (3.5), p. 25
Z	Parâmetro para cálculo de $K_{eq,r}$, eq. (3.49), p. 35

Letras Gregas

Γ_e	Contorno do elemento, eq. (4.29), p. 43
γ_s	Concentração molar da espécie s , $[kg\text{-mol}/m^3]$, eq. (3.8), p. 26
γ_{tot}	Concentração molar total, $[kg\text{-mol}/m^3]$, eq. (3.8), p. 26
$\Delta_{sr}^{(1)}$	Primeira integral de colisão modificada, $[ms]$, eq. (3.23), p. 30
$\Delta_{sr}^{(2)}$	Segunda integral de colisão modificada, $[ms]$, eq. (3.34), p. 32
δ_{ij}	Delta de Kronecker, eq. (3.15), p. 27
η	Condutividade térmica total, $[J/ms]$, eq. (3.31), p. 31
η_i	Coordenadas da face de contorno do elemento, eq. (5.48), p. 57
η_r	Condutividade térmica rotacional, $[J/ms]$, eq. (3.22), p. 30
η_t	Condutividade térmica translacional, $[J/ms]$, eq. (3.31), p. 31
η_v	Condutividade térmica vibracional, $[J/ms]$, eq. (3.22), p. 30
$\theta_{e,s}$	Temperatura eletrônica característica, $[K]$, eq. (3.39), p. 32
$\theta_{v,s}$	Temperatura vibracional característica, $[K]$, eq. (3.39), p. 32
λ	Viscosidade volumétrica, $[kg/ms]$, eq. (3.15), p. 27
λ_m	Livre caminho médio, $[m]$, eq. (2.1), p. 8
μ	Viscosidade da mistura, $[kg/ms]$, eq. (3.16), p. 27
μ_s	Viscosidade da espécie s , $[kg/ms]$, eq. (3.17), p. 28
ξ_i	Coordenadas no espaço computacional, eq. (5.1), p. 49
ρ	Massa específica da mistura, $[kg/m^3]$, eq. (3.1), p. 23
ρ_s	Massa específica da espécie s , $[kg/m^3]$, eq. (3.1), p. 23
τ_{ij}	Tensor de tensões, $[Pa]$, eq. (3.15), p. 27

τ_{sr}	Tempo de relaxação da espécie s , [s], eq. (3.26), p. 30
Φ_i	Função de interpolação, eq. (4.24), p. 41
Ω_e	Domínio do elemento, eq. (4.26), p. 42
Ω_s	Integral de colisão, [m^2], eq. (3.19), p. 28
Ω_{sr}	Integral de colisão de difusão, [m^2], eq. (3.12), p. 27
ω_s	Taxa de produção da espécie química s , [kg/m^3s], eq. (3.42), p. 33
ω_v	Termo fonte da eq. de conservação de en. vibracional, [J/m^3s], eq. (3.24), p. 30

Capítulo 1

Introdução

1.1 A Era Espacial

Quatro de Outubro de 1957. Esta data representa um marco para a história: com o lançamento e a colocação em órbita da Terra do primeiro satélite artificial pela antiga União Soviética, a raça humana entra oficialmente na chamada Era Espacial, ampliando permanentemente seus horizontes. *Sputnik 1* — do tamanho de uma bola de basquete, com 83 kg, e orbitando o planeta em uma trajetória elíptica a cada 96 minutos a uma altitude de até 900 km —, permaneceu em órbita por 3 meses, desintegrando-se na atmosfera terrestre em 4 Janeiro de 1958. Menos de 4 anos depois, em 12 de Abril de 1961, o cosmonauta *Yuri Alexeyevich Gagarin* torna-se o primeiro homem a ir ao espaço, orbitando a Terra por 108 minutos a uma altitude de 300 km a bordo da espaçonave *Vostok 1*. A chegada do homem à Lua, através da missão *Apollo 11* — tripulada pelos astronautas *Neil Armstrong*, *Edward "Buzz" Aldrin* e *Michael Collins* —, em 20 de Julho de 1969, representa a conquista definitiva do espaço e mostra que o esforço, a ousadia e a engenhosidade humanas são capazes de enfrentar qualquer desafio.

Desde então, a exploração espacial cresceu de forma extraordinária e tornou-se parte do dia-a-dia de grande parcela da população mundial. As idas de pessoas ao espaço e sua permanência por longos períodos em estações orbitais já se tornaram comuns. Telecomunicações, meteorologia, uso militar, sistema de posicionamento global (GPS - *Global Positioning System*) e aplicações científicas são apenas alguns exemplos de como a indústria espacial desenvolveu-se e hoje está fortemente consolidada. Em 1999, estimava-se que ao longo dos 10 anos seguintes a indústria espacial *strictu sensu* (satélites e veículos lançadores) deve-

ria realizar vendas no montante de 50 bilhões de dólares; as aplicações comerciais — como telecomunicações, observação da Terra e navegação — deveriam movimentar 450 bilhões de dólares e que o total dos orçamentos dos programas governamentais civis em todo o mundo representaria 200 bilhões de dólares [Meira Filho *et al.*, 1999].

Neste contexto, o Brasil é presença constante no cenário aeroespacial, firmando-se como um dos poucos países com domínio de tecnologia voltada ao espaço. Lançamento de sondas meteorológicas, construção de satélites, operação de veículos lançadores e de bases de lançamento e atuação na Estação Espacial Internacional, ISS (do inglês, *International Space Station*), comprovam de maneira inequívoca o compromisso do país em competir de igual para igual no seleto grupo de nações que dominam e operam atividades espaciais. Prova disso é a criação da Agência Espacial Brasileira, AEB, pelo governo brasileiro, em 10 de fevereiro de 1994, sob a forma de uma autarquia federal de natureza civil, vinculada à Presidência da República, com a finalidade de promover o desenvolvimento das atividades espaciais de interesse nacional [Meira Filho *et al.*, 1999].

Devido ao seu alto teor tecnológico, a indústria aeroespacial gera uma série de benefícios diretos — como a formação de recursos humanos — e indiretos — destacando-se os chamados *spin-offs**. Além disso, a contribuição dos programas espaciais para o desenvolvimento econômico e social de uma nação pode ser significativa, como a aplicação de tecnologias espaciais nas comunicações, meteorologia, educação, agricultura, crescimento industrial, controle de recursos naturais e da poluição ambiental, entre outros [Teracine, 1999].

De todas as áreas, a que, talvez, mais foi beneficiada com a corrida espacial é a ciência. Com a conquista do espaço, foi possível ao ser humano avançar nas pesquisas dos mais diversos setores do conhecimento: agricultura, biologia, biomedicina, estrutura e evolução do universo, exploração do Sistema Solar, qualidade da atmosfera, meteorologia, vegetação e uso do solo, recursos minerais e alimentares, qualidade de água doce e dos oceanos, combustão, processamento de materiais, apenas para citar alguns [Souza & Kataoka Filho, 1999]. Telescópios espaciais orbitam a Terra em busca de informações dos mais longínquos pontos do Universo. Sondas foram lançadas para os limites do Sistema Solar, transmitindo informações sobre os diversos astros que o compõe. Um veículo de seis

* *Spin-offs*: tecnologias desenvolvidas no contexto dos programas espaciais que são utilizadas em atividades fora deste setor [Teracine, 1999].

rodas (*Sojourner*), movido a energia solar, foi enviado a Marte e transmitiu imagens e dados sobre a sua superfície. Nada disso teria sido possível sem a vontade humana de romper com os limites físicos de seu planeta.

1.2 Microgravidade

As atividades científicas, como foi dito anteriormente, representam papel importante dentro das atividades espaciais, impulsionadas principalmente pelo desejo do ser humano de encontrar respostas e satisfazer sua curiosidade. Neste contexto, as pesquisas em ambiente de microgravidade[†] representam uma das principais atividades científico-espaciais, uma vez que permitem aos pesquisadores:

- a) estudar processos que normalmente seriam afetados ou anulados pela gravidade da Terra;
- b) testar teorias existentes;
- c) formular novas teorias.

As disciplinas específicas de pesquisas em ambiente de microgravidade incluem biotecnologia, combustão, física dos fluidos, física fundamental e ciência dos materiais [Souza & Kataoka Filho, 1999]. Tal ambiente é gerado artificialmente, anulando-se os efeitos da atração gravitacional da Terra, através de diversos métodos com tempos de duração diferentes, como pode ser observado na Tabela 1.1. Em geral, a microgravidade é obtida através de efeitos de queda-livre, que permitem anular a ação gravitacional terrestre. Mesmo as estações orbitais comportam-se como se estivessem constantemente "caindo", mas nunca chegam a retornar à Terra.

Cada um dos meios apresentados na Tabela 1.1 encontra sua aplicação, em função dos custos (que podem variar de 10 a 10000 dólares para cada quilograma e cada hora de experimento) e do tempo necessário para a realização de experimentos [Moraes Jr. & Pilchowski, 1997].

[†]Microgravidade significa gravidade (ou aceleração) muito pequena, da ordem de milionésimos da gravidade sentida na Terra.

Tabela 1.1 – Meios de geração do ambiente de microgravidade e os respectivos tempos de duração.

Meio	Tempo (aproximado)
Torre de queda livre	10 segundos
Avião em vôo parabólico	30 segundos ^a
Plataforma sub-orbital	5-15 minutos
Veículo espacial não tripulado	10 dias
Veículo espacial tripulado ^b	10 dias
Estação espacial	anos

^a Vôos sucessivos podem gerar vários minutos de microgravidade.

^b Veículos do tipo *Space Shuttle*.

1.3 O Projeto SARA

Experimentos científicos em ambiente de microgravidade de interesse de laboratórios de universidades ou institutos de pesquisa não têm sido, em geral, bem atendidos, devido principalmente à falta de recursos por parte de tais laboratórios. Além disso, o grande tempo de espera entre a realização de um experimento e o seu retorno à Terra é um empecilho à utilização de estações espaciais, uma vez que deve-se aguardar o retorno de uma espaçonave que traga os resultados desse experimento. Em função disso e da crescente demanda por utilização de sistemas que operem em ambientes de microgravidade, propôs-se, em 1997, uma alternativa, de concepção do tipo *return-on-request*, para usuários de experimentos científicos e tecnológicos de pequeno porte, definida da seguinte forma [Moraes Jr. & Pilchowski, 1997]:

Um satélite de pequenas dimensões (micro-satélite), operando em órbita baixa, com capacidade de transportar experimentos científicos ou tecnológicos de pequeno porte, com permanência orbital de até 10 dias, sendo posteriormente conduzido à Terra, recuperado em solo, e reutilizado sem necessidade de retrabalho em sua estrutura básica.

Este sistema, denominado inicialmente SARA (Satélite de Reentrada Atmosférica), deverá ser projetado e operado pelo Instituto de Aeronáutica e Espaço do Centro Técnico

Aeroespacial, IAE/CTA e pelo Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, INPE, e apresenta, preliminarmente, os seguintes dados:

- massa total do satélite: 250 kg;
- carga útil: 25 kg;
- órbita: 300 km;
- subsistemas embarcados:
 - telemetria,
 - escudo térmico,
 - controle de atitude,
 - módulo de carga útil,
 - sistema de recuperação,
 - motor de indução de reentrada,
 - provimento de energia (bateria).

Para tornar o custo acessível e minimizar o tempo de desenvolvimento, esse sistema deve utilizar a tecnologia e meios já existentes no país. Dessa forma, tanto o VLS (Veículo Lançador de Satélites) como o VLM (Veículo Lançador de Micro-satélites) podem ser utilizados para o lançamento da plataforma SARA [Moraes Jr. & Pilchowski, 1997].

Um projeto semelhante ao SARA foi desenvolvido nos Estados Unidos pela EER Systems Corp. e supervisionado pela NASA[‡]. Neste projeto, um veículo não tripulado, chamado COMET (*Comercial Experiment Transporter*), deveria colocar pequenas cargas em ambiente de microgravidade por um período de 30 dias e ser retornado à Terra. Posteriormente, o veículo operacional deveria chamar-se METEOR (*Multiple Experiment Transporter to Earth Orbit and Return*). O veículo acabou sendo destruído por uma explosão durante seu lançamento em 23 de outubro de 1995 [Wood *et al.*, 1996].

[‡]NASA: *National Aeronautics and Space Administration* (Administração Nacional de Aeronáutica e Espaço dos Estados Unidos).

1.4 Motivações, objetivos e conteúdo do texto

O Brasil está fortemente empenhado em firmar-se no importante mercado aeroespacial, procurando atuar nos principais projetos internacionais e oferecendo serviços nas mais diversas áreas deste mercado. Nesse sentido, o planejamento, a construção e a operação de um veículo espacial do tipo SARA são as motivações do presente trabalho.

A simulação numérica de escoamentos hipersônicos com não equilíbrio termo-químico para a análise de processos de reentrada de veículos espaciais na atmosfera terrestre e a definição de parâmetros de projeto são os objetivos deste trabalho.

No texto que se segue, o capítulo 2 apresenta informações a respeito da reentrada na atmosfera. No capítulo 3 são introduzidas as equações que governam escoamentos compressíveis em regimes hipersônicos. O capítulo 4 refere-se à implementação do esquema de Taylor-Galerkin. No capítulo 5 é apresentada a integração explícita das matrizes de elemento. O capítulo 6 trata de aspectos computacionais relativos ao código utilizado no presente trabalho. No capítulo 7 são apresentados exemplos e aplicações. Finalmente, no capítulo 8 são apresentadas as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

A Reentrada na Atmosfera

2.1 Introdução

A operação de um veículo espacial do tipo do SARA é composta, em geral, por três fases distintas: lançamento, operação em órbita e recuperação. Destes, a última é extremamente complexa, pois envolve a reentrada do veículo na atmosfera da Terra. Orbitando o planeta com velocidades da ordem de 8 km/s e altitudes ao redor de 300 km, este tipo de plataforma possui grandes quantidades de energias cinética e potencial. Sua desaceleração ocorre através do chamado "freio aerodinâmico", ou seja, o atrito do veículo com o ar provoca a redução de velocidade, para que possa chegar em segurança à superfície terrestre (solo ou água) e recuperado. Consequência direta deste atrito é a transformação das altas energias cinética e potencial em calor, aumentando consideravelmente a temperatura do ar ao redor do veículo, exigindo uma proteção térmica adequada na sua superfície para não comprometer a qualidade dos experimentos de seu interior.

A aplicação de um impulso de desaceleração (*deboost impulse*), através de um motor de indução de reentrada, é responsável pela retirada do veículo de órbita. Desde o início da descida até a recuperação na superfície, o veículo passa por diferentes regimes de escoamento, começando pelo *regime molecular livre* — onde as partículas estão muito dispersas entre si, a hipótese de meio contínuo não se aplica e o impacto individual das moléculas na superfície é importante —, passando pelo *regime de transição* — onde os efeitos de deslizamento na parede (*velocity slip*) e de salto de temperatura (*temperature jump*) são importantes — e chegando ao *regime contínuo*. O parâmetro que pode ser usado para identificar os regimes de escoamento é o número de Knudsen, definido da seguinte forma:

$$Kn = \frac{\lambda_m}{\ell} \quad (2.1)$$

onde λ_m é o *livre caminho médio** das moléculas e ℓ é um *comprimento característico* — como, por exemplo, uma dimensão do corpo ou a espessura da camada-limite [Hayes & Probstein, 1959]. Os valores de Kn para os diferentes regimes podem ser observados na Figura 2.1. A região onde as equações de Navier-Stokes (meio contínuo) valem é a de $Kn < 0.2$. Entretanto, efeitos de velocidade não-nula nas paredes (*velocity slip*) e de salto de temperatura (*temperature jump*) devem ser incluídos nessa formulação para $Kn > 0.03$. Os efeitos de escoamento molecular livre começam por volta de $Kn = 1$ e estendem-se até $Kn = \infty$. O regime de transição fica, portanto, definido para $0.03 < Kn < 1.0$ [Anderson, 1989].

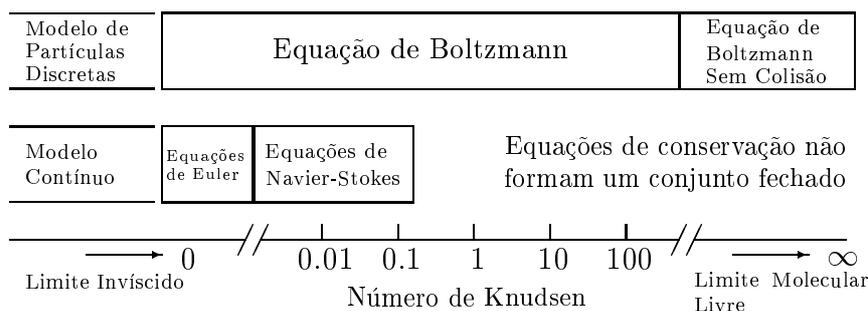


Figura 2.1 – Limites do número de Knudsen para os modelos matemáticos de escoamentos de gases [Moss & Bird, 1985].

A literatura procura definir limites de altitude para o uso da mecânica do contínuo na solução de problemas de reentrada: alguns autores estabelecem 80 km [Ivanov & Gimelshein, 1998; Häuser *et al.*, 1991], enquanto outros definem 90 km de altitude como limite [Anderson, 1989; Bertin, 1994]. Estes valores servem apenas como referência, uma vez que cada caso deve ser avaliado em função de suas características particulares (como o comprimento característico, por exemplo). Acima deste limite, apenas a *dinâmica de gases rarefeitos* pode ser usada para estudar a aerodinâmica de veículos espaciais que viajam desde sua órbita

*O *livre caminho médio* é definido como a distância média percorrida por uma molécula entre colisões sucessivas [Vincenti & Kruger, 1965]. Em geral, considera-se o valor do livre caminho médio da corrente livre, $\lambda_{m\infty}$. Entretanto, os valores atrás de uma onda de choque e na região de estagnação podem ser muito menores que o da corrente livre [Hayes & Probstein, 1959].

até altitudes onde o escoamento transiciona para o regime contínuo [Ivanov & Gimelshein, 1998]. A variação de algumas propriedades do ar em função da altitude para a atmosfera padrão é apresentada no anexo A.

Computacionalmente, a única equação fechada para números de Knudsen iguais e maiores que 1 é a equação de Boltzmann. Para o limite molecular livre, onde o número de Knudsen tende ao infinito, as soluções para a equação de Boltzmann são diretamente obtidas, mas várias dificuldades analíticas são encontradas para números de Knudsen característicos de escoamentos de transição. Em busca de enfoques alternativos, os chamados procedimentos de Monte Carlo (qualquer método que empregue números aleatórios) têm sido desenvolvidos. Destes, a Simulação Direta de Monte Carlo (DSMC - *Direct Simulation Monte Carlo*) é o método que mais diretamente se aplica a problemas complexos de escoamentos de gases, onde as colisões intermoleculares são tratadas de forma probabilística ao invés de determinística [Moss & Bird, 1985].

2.2 Escoamentos hipersônicos

Normalmente, a reentrada de veículos espaciais na atmosfera envolve velocidades muito altas, chegando a várias vezes a velocidade do som. Em outras palavras: o número de Mach é muito maior que um, ou seja,

$$M_\infty \equiv \frac{U_\infty}{a_\infty} \gg 1 \quad (2.2)$$

onde M_∞ é o número de Mach da corrente livre, U_∞ é a velocidade da corrente livre e a_∞ é a velocidade do som na corrente livre. Em geral, os escoamentos que cumprem a equação acima estão no chamado *regime hipersônico*. Não há um número de Mach bem definido que estabeleça a transição de supersônico para hipersônico, embora a condição de $M_\infty = 5$ seja usada por alguns autores como referência [Grundmann, 1991]. O que realmente caracteriza regimes hipersônicos é a presença de fenômenos físicos que tornam-se progressivamente mais importantes à medida que o número de Mach aumenta, como efeitos de alta temperatura, interação viscosa, camadas de choque finas (*thin shock layers*) e camada de entropia (*entropy layer*) [Anderson, 1989]. Por um lado, pode-se ter a presença de um ou mais destes fenômenos

em velocidades inferiores a Mach igual a 5 e, por outro lado, é possível que um escoamento com velocidades superiores a este valor não apresente tais fenômenos.

2.2.1 Efeitos de alta temperatura

A energia cinética de um escoamento hipersônico é dissipado pela fricção do ar junto à camada-limite. Essa dissipação viscosa, por sua vez, pode criar temperaturas extremamente altas — suficientemente altas para excitar vibracionalmente as moléculas, causar dissociação ou até mesmo ionização do gás. Além disso, a camada-limite não é a única região de escoamento de alta temperatura sobre um corpo a velocidades hipersônicas, pois num escoamento deste tipo ao redor de um corpo rombudo (*blunt body*), a onda de choque é normal, ou praticamente normal, na região do nariz e a temperatura do gás atrás desta onda de choque pode ser muito grande para altas velocidades. Observe-se, como exemplo, o gráfico da temperatura atrás de um choque normal, em função da velocidade da corrente livre, de um veículo voando a uma altitude de 52 km, apresentado na Figura 2.2. Duas curvas são mostradas: (1) a curva da esquerda assume um gás caloricamente perfeito, sem reações químicas, com razão de calores específicos $\gamma = c_p/c_v = 1.4$ e com valores muito altos que não representam a realidade e (2) a curva da direita assume um gás com reações e equilíbrio químicos que se aproxima da situação real. A partir desta figura pode-se tirar as seguintes conclusões:

1. A temperatura na região do nariz de um veículo hipersônico pode ser extremamente alta, chegando a aproximadamente 11000 K para o caso de número de Mach igual a 36 (como a reentrada da *Apollo*);
2. A inclusão adequada dos efeitos de reações químicas é vital para o cálculo preciso da temperatura da camada de choque. A hipótese de que γ é constante não é mais válida.

Em um escoamento hipersônico, portanto, a camada de choque pode estar dominada por reações químicas.

É possível observar, a partir da Tabela 2.1, as diferenças de temperatura para um gás perfeito e para um gás com reações químicas na região de estagnação para alguns problemas conhecidos. Nota-se que as temperaturas obtidas com o modelo de reações químicas só

começam a sofrer grandes desvios do modelo de gás perfeito acima de Mach 5, que é o valor geralmente aceito como transição de supersônico para hipersônico.

Ao contrário do que aplica-se nos estudos tradicionais de termodinâmica e de escoamentos compressíveis — onde considera-se que o gás possui calores específicos constantes (γ

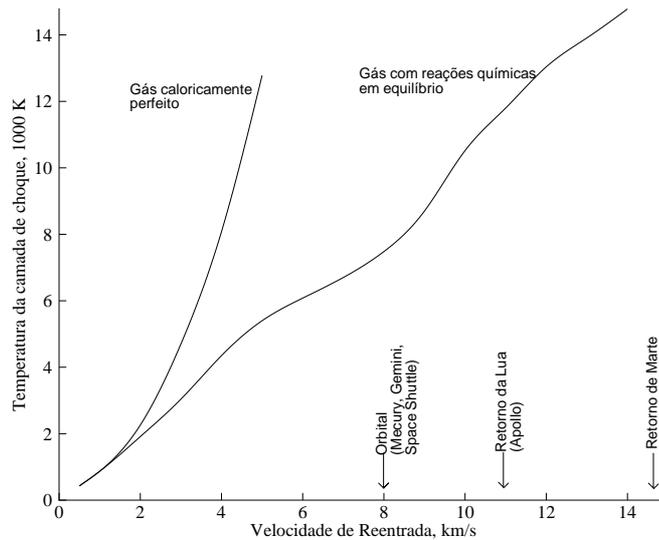


Figura 2.2 – Temperatura atrás de uma onda de choque como função da velocidade da corrente livre na altitude de 52 km [Anderson, 1989].

Tabela 2.1 – Diferenças de temperatura para gás perfeito e para um gás com reações em equilíbrio na região de estagnação, avaliadas em problemas conhecidos.

Veículo	M_∞	$h[km]$	$T_0^{gp}[K]$	$T_0^{eq}[K]$	Erro (%)
Flyer	0.046	0	288	288	0.0
Boeing 747	0.8	10	252	252	0.0
Concorde	2	20	391	390	0.3
SR-71	3	30	636	628	1.3
X-15	6.7	108	2265	1818	24.6
X-30	15	75	9430	4210	124.0
Space Shuttle	25	75	25830	5812	344.0
AOTV	30	75	37105	6850	441.7
Apollo	36	~100	52821	~11000	380.2

M_∞ é o número de Mach, h é a altitude, T_0^{gp} e T_0^{eq} são as temperaturas na região de estagnação para gás perfeito e para reações em equilíbrio, respectivamente.

Veículos: *Flyer*: Irmãos Wright, 1903; *Boeing 747*: Aeronave *Wide Body*, 1970; *Concorde*: Transporte supersônico, 1969; *Lockheed SR-71 "Blackbird"*: Aeronave de espionagem, 1964; *X-15*: Aeronave mais veloz, 1963; *X-30*: Veículo conceito para transporte hipersônico; *Space Shuttle*: Veículo espacial reutilizável, 1981; *AOTV*: Veículo para Transferência Orbital Aeroassistida; *Apollo*: Veículo de retorno da Lua, 1969.

constante, portanto) e comporta-se de forma "ideal" —, quando a temperatura é aumentada para valores altos, o gás comporta-se de forma "não ideal". Especificamente:

1. A energia vibracional das moléculas fica excitada, tornando os calores específicos função da temperatura. Da mesma forma, a razão dos calores específicos, $\gamma = c_p/c_v$, também torna-se função da temperatura. Para o ar, este efeito começa a ficar importante acima de 800 K.
2. À medida que a temperatura é aumentada ainda mais, podem ocorrer reações químicas. Para um gás com reações químicas, c_p e c_v são funções tanto da temperatura como da pressão, e, portanto, $\gamma = f(T, p)$. Para o ar a 1 atmosfera, a dissociação de oxigênio molecular ($O_2 \rightarrow 2O$) começa ao redor dos 2500 K e está quase totalmente dissociado em 4000 K. Nesta temperatura começa a dissociação do nitrogênio molecular ($N_2 \rightarrow 2N$) e está quase totalmente dissociado em 9000 K. Acima desta temperatura começa a formação de íons ($N \rightarrow N^+ + e^-$ e $O \rightarrow O^+ + e^-$) e o gás torna-se um plasma parcialmente ionizado.

Todos estes fenômenos são chamados de *efeitos de alta temperatura* e são apresentados na Figura 2.3 para o ar a 1 atmosfera.

Um veículo espacial em processo de reentrada na atmosfera terrestre passa por vários desses efeitos, como pode ser observado na Figura 2.4, onde é apresentado um mapa

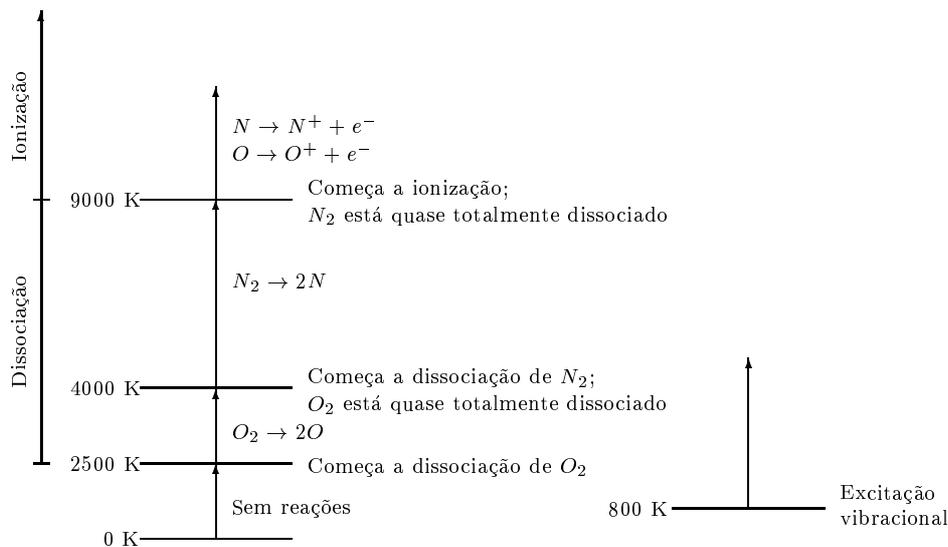


Figura 2.3 – Faixas de temperatura para excitação vibracional, dissociação e ionização do ar a 1 atmosfera [Anderson, 1989].

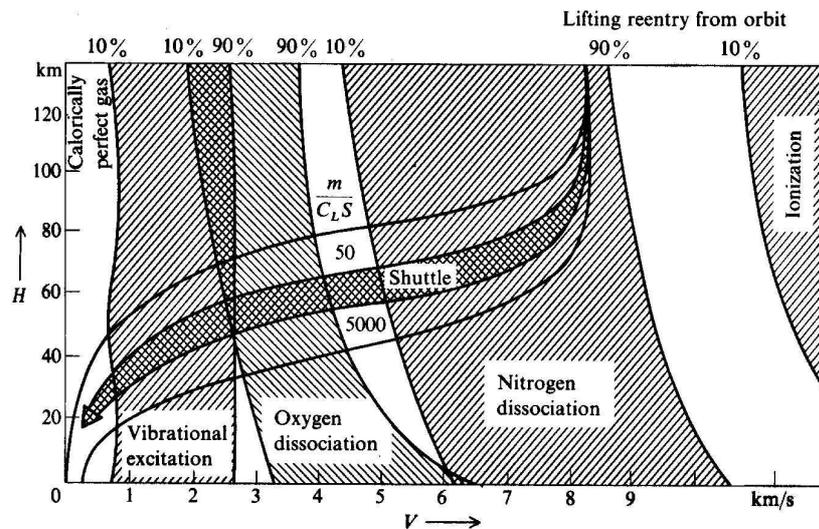


Figura 2.4 – Mapa velocidade-altitude sobreposto a regiões de excitação vibracional, dissociação e ionização [Anderson, 1989].

velocidade-altitude de reentradas de veículos com sustentação (*lifting reentry vehicles*) sobreposto a regiões associadas aos vários efeitos de alta temperatura para o ar. Nesta figura, estão delimitadas as faixas compreendidas entre 10 e 90% de cada efeito. Um veículo do tipo SARA, que descreve uma trajetória balística (sem sustentação), apresenta um gráfico de velocidade-altitude um pouco diferente do gráfico de um veículo com sustentação, como pode ser observado na Figura 2.5. Note-se que veículos que iniciam a reentrada com velocidades orbitais — como o *Space Shuttle* e o SARA — atravessam regiões de pouca ionização (menos de 10%), ao contrário de veículos que iniciam a reentrada com velocidades de escape[†], como o *Apollo*.

Outro efeito de alta temperatura que pode estar presente em escoamentos hipersônicos é a *radiação*, ou seja, um elemento de fluido pode perder energia devido à emissão de radiação ou, ainda, pode ganhar energia devido à absorção de radiação emitida por outros elementos de fluidos. Segundo Anderson [1989], a emissão, por radiação, de quantidades significativas de energia começa ao redor de 10000 K para o ar. No presente trabalho, adota-se a hipótese simplificativa de ausência de radiação.

[†]Velocidade de escape é a velocidade necessária para fugir à atração gravitacional da Terra, que é de 11.2 km/s.

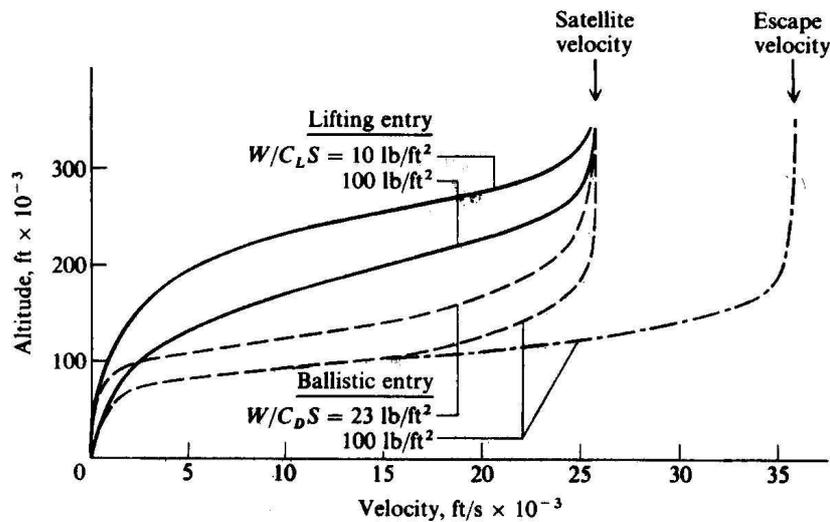


Figura 2.5 – Trajetórias de vôo para reentradas atmosféricas em um mapa de velocidade-altitude [Anderson, 1989].

2.3 Descrição microscópica dos gases

Para a análise de qualquer escoamento de alta temperatura, necessita-se do conhecimento das propriedades termodinâmicas do gás. Entretanto, algumas dessas propriedades não podem ser obtidas a partir da termodinâmica clássica (a não ser através de dados experimentais). A termodinâmica estatística (baseada na teoria cinética dos gases), por outro lado, permite calcular as propriedades termodinâmicas a partir de princípios básicos, contanto que esteja-se considerando sistemas em equilíbrio [Anderson, 1989].

No desenvolvimento da termodinâmica estatística, concentra-se na descrição microscópica de um gás, ou seja, assume-se que o gás consiste de um grande número de moléculas individuais e examina-se a natureza destas moléculas. Uma molécula, por exemplo, é um conjunto de átomos unidos através de forças intramoleculares. Um conceito simples de molécula diatômica é o modelo de "halteres" (*dumbbell*), apresentado na Figura 2.6. Esta molécula possui vários modos (formas) de energia, da seguinte forma:

1. A molécula move-se no espaço e, portanto, possui *energia translacional*, como pode ser observado na Figura 2.6a. A fonte desta energia é a energia cinética translacional do centro de massa da molécula.
2. A molécula gira em relação aos três eixos ortogonais no espaço e, portanto, possui *energia rotacional*, como pode ser observado na Figura 2.6b. A fonte desta energia é a

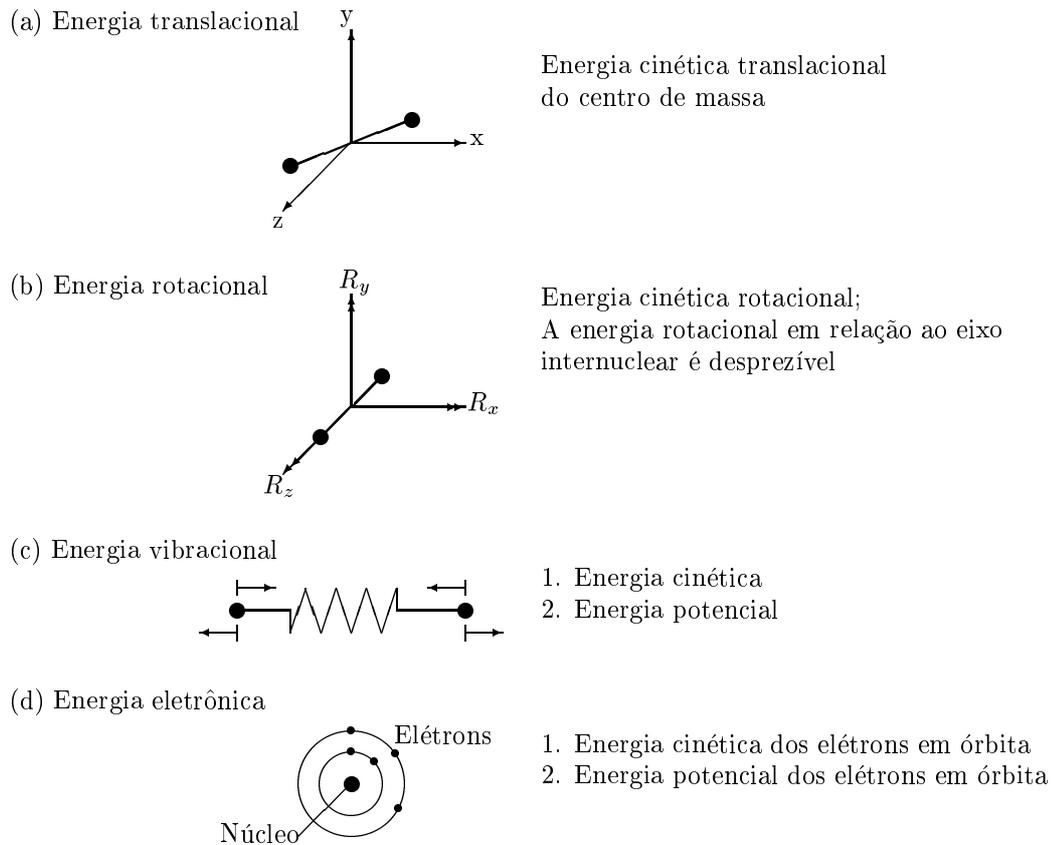


Figura 2.6 – Modos de energia molecular [Anderson, 1989].

energia cinética rotacional associada à velocidade rotacional e ao momento de inércia da molécula. Entretanto, para a molécula diatômica da Figura 2.6b, o momento de inércia em relação ao eixo internuclear (eixo z) é muito pequeno, de modo que a energia cinética rotacional em relação ao eixo z é desprezível em relação às dos eixos x e y .

3. Os átomos da molécula vibram em relação a uma localização de equilíbrio. Para uma molécula diatômica, esta vibração é modelada como dois átomos unidos por uma mola, como pode ser visto na Figura 2.6c. Portanto, a molécula possui *energia vibracional*. Há duas fontes desta energia vibracional: a energia cinética dos átomos durante a vibração; e a energia potencial associada à força intramolecular (simbolizada por uma mola).
4. Os elétrons estão em movimento em relação ao núcleo de cada átomo que constitui a molécula, como pode ser observado na Figura 2.6d. Portanto, a molécula possui *energia eletrônica*. Há duas fontes de energia eletrônica associadas a cada elétron: a energia cinética devido ao movimento translacional através de sua órbita ao redor do

núcleo e a energia potencial devido à sua localização no campo eletromagnético ao redor do núcleo.

A energia total de uma molécula, portanto, é a soma das energias translacional, rotacional, vibracional e eletrônica. Para um átomo, há apenas as energias translacional e eletrônica. A energia total das partículas é idêntica à energia interna usada na termodinâmica clássica.

Essas formas de energia podem ser trocadas entre as partículas de um sistema. Tal troca ocorre através da interação entre essas partículas — colisões ou outro processo [Vincenti & Kruger, 1965].

2.4 Equilíbrio e não equilíbrio químicos

Todos os processos vibracionais e químicos ocorrem através de colisões e/ou interações radiativas. Entretanto, o número de colisões necessárias para excitar vibracionalmente ou dissociar uma molécula é, em geral, muito grande. A molécula de oxigênio (O_2), por exemplo, necessita de algo em torno de 20000 colisões antes de tornar-se vibracionalmente excitada e ao redor de 200000 colisões para dissociar-se. O número real de colisões depende do tipo de molécula e da energia cinética relativa entre as duas partículas que estão colidindo: quanto maior a energia cinética, menor o número de colisões para a troca de energia vibracional. As colisões, portanto, são responsáveis pelas alterações vibracionais e químicas. Tais colisões levam tempo para ocorrer e, dessa forma, alterações vibracionais e químicas em um gás também levam tempo para ocorrerem [Anderson, 1989].

Num sistema em equilíbrio, assume-se que o gás teve um tempo suficientemente grande para que as colisões ocorressem e as propriedades do sistema para pressão e temperatura fixas se tornassem constantes, independentemente do tempo. Na verdade, colisões intermoleculares são os mecanismos chaves para levar um gás ao seu estado de equilíbrio final [Vincenti & Kruger, 1965]. Considere-se, por exemplo, um sistema composto de três espécies químicas arbitrárias A , B e AB . A equação que governa a reação entre estas espécies é:



Assume-se que a mistura está confinada em um volume fixo com pressão e temperatura constantes e que o sistema existiu um tempo suficientemente longo para que a composição

química se tornasse fixa, ou seja, a reação acima ocorre um número igual de vezes para a direita e para a esquerda (as reações para frente e para trás estão balanceadas) [Anderson, 1989].

Há, por outro lado, inúmeros casos na dinâmica de gases em alta velocidade onde o gás não tem o tempo necessário para atingir o equilíbrio. Um exemplo deste fenômeno é o escoamento através de uma onda de choque, onde a pressão e a temperatura aumentam rapidamente no seu interior, alterando as propriedades de equilíbrio vibracional e químico. As novas condições de equilíbrio somente são atingidas após colisões intermoleculares e, portanto, levam algum tempo. Até que isso ocorra, um elemento de fluido já percorreu uma certa distância a jusante do choque. Por esse motivo, há uma região imediatamente atrás do choque onde as condições de equilíbrio não são satisfeitas, ou seja, há uma região de não equilíbrio.

Em outras palavras, se as reações químicas ocorrem muito rapidamente em comparação com o tempo que um elemento de fluido leva para mover-se de um ponto a outro do escoamento, tem-se um escoamento em equilíbrio químico. Se os tempos são parecidos, então tem-se escoamento em não equilíbrio químico. Caso o tempo de reações químicas seja muito maior que o tempo que um elemento de fluido leva para mover-se de um ponto a outro do escoamento, diz-se que se está em uma condição de estado "congelado" (*frozen*).

2.5 Dinâmica de Fluidos Computacional em escoamentos hipersônicos

Desde os primeiros contatos com fluxos de altas velocidades, há um enorme interesse dos cientistas pelo modelamento de problemas deste tipo de escoamento. Para o caso hipersônico isto é particularmente verdadeiro, dada a dificuldade (ou impossibilidade, em alguns casos) e os altos custos de reprodução destes escoamentos em laboratório. Nesse sentido, várias teorias foram desenvolvidas e aplicadas com sucesso a vários problemas práticos, podendo-se citar a primeira aplicação do método das características[‡] a um

[‡]O *método das características* é usado para obter-se a solução numérica de equações hiperbólicas. Uma das propriedades deste tipo de equação é que ela possui direções ou linhas *características* [Liepmann & Roshko, 1957]. Para um escoamento supersônico bidimensional, as curvas características físicas são as linhas de Mach [Shapiro, 1953].

problema hipersônico por Ludwig Prandtl e Adolf Busemann em 1929, na Alemanha. Igualmente importantes são as teorias desenvolvidas nas décadas de 1950 e 1960, como a teoria da interação viscosa (forte e fraca) [Anderson, 1989].

Foi somente com o advento dos computadores digitais de alta velocidade que a solução de problemas hipersônicos deu um salto importante. Aproveitando-se da era digital, surgiu uma nova área de pesquisa para a análise de escoamentos de fluidos: a dinâmica de fluidos computacional, CFD (do inglês, *computational fluid dynamics*). As aplicações de CFD estão presentes em todo o espectro de vôo: desde o subsônico até o hipersônico. Por isso, e pela dificuldade dos túneis de vento em reproduzir todos os regimes de vôo, CFD firmou-se como uma ferramenta poderosa na pesquisa, desenvolvimento e projeto de problemas hipersônicos.

Tradicionalmente, em CFD, três enfoques para a solução de escoamentos viscosos em problemas hipersônicos tem sido usados:

1. Solução de camada de choque viscosa (*viscous shock-layer*), introduzida por Davis [1970], onde as equações completas de Navier-Stokes são escritas em coordenadas de camada-limite e uma análise de ordem de grandeza é realizada sobre os termos das equações;
2. Solução de Navier-Stokes parabolizada (*parabolized Navier-Stokes*), onde são desprezados os termos viscosos das equações de Navier-Stokes que envolvem derivadas na direção do escoamento;
3. Solução completa de Navier-Stokes, onde não há qualquer tipo de simplificação dos termos das equações.

Esta última pôde finalmente ser empregada para problemas complexos devido ao desenvolvimento de técnicas de CFD e ao surgimento de supercomputadores cada vez mais velozes nas últimas décadas.

Vários projetos em diversos países impulsionaram o interesse por simulações de fluxos hipersônicos externos em meio contínuo. No período 1980-90, os Estados Unidos empreenderam estudos em aplicações como o AOTV (*Aeroassisted Orbital Transfer Vehicle*), o STS (*Space Transportation System*), o Pegasus e o NASP (*National AeroSpace Plane*).

No mesmo período, projetos importantes desenvolvidos pela Europa incluem o Hermes, o S anger e o HOTOL. Na antiga Uni o Sovi tica, o Buran ( onibus espacial) pode ser citado como importante projeto deste per odo. A partir de 1991, novas aplica es surgiram: X-33, X-34, ACRV (*Assured Crew Return Vehicle*), Hyper X, COMET (*Comercial Experiment Transporter*) — mais tarde rebatizado de METEOR (*Multiple Experiment Transporter to Earth Orbit and Return*) —, Programa de Explora o de Marte, Stardust, Skipper e Pegasus XL [Gnoffo *et al.*, 1999].

Os escoamentos supers nicos (e hipers nicos, por consequ ncia), em geral, s o complexos e exigem cuidados especiais para a sua solu o atrav s de simula o num rica. Observe-se, por exemplo, o caso de um escoamento de alta velocidade ao redor de um corpo rombudo, como pode ser visto na Figura 2.7. Na regi o I a velocidade   constante e igual a U_∞ (escoamento n o perturbado). A regi o II   subs nica (problema el ptico). A regi o III   supers nica (problema hiperb lico) [Maliska, 1995]. Este problema, de car ter misto, exige tratamento especial. Moretti & Abbett [1966] foram os primeiros a resolver numericamente este problema, utilizando uma t cnica de diferen as finitas com marcha no tempo desenvolvida por Lax & Wendroff [1960, 1962, 1964] aplicada  s equa es de Euler transientes. Estas equa es s o *hiperb licas com respeito ao tempo*, mesmo se o escoamento   localmente subs nico ou supers nico. Um procedimento de marcha no tempo, partindo de condi es iniciais, permite, portanto, a solu o simult nea de todas as regi es do escoamento com a mesma t cnica num rica [Anderson, 1989]. MacCormack, em 1969, apresentou uma variante da t cnica Lax-Wendroff, por m mais simples — esquema expl cito, preditor-corretor, baseado no m todo das diferen as finitas — que foi largamente usado nos 15 anos seguintes

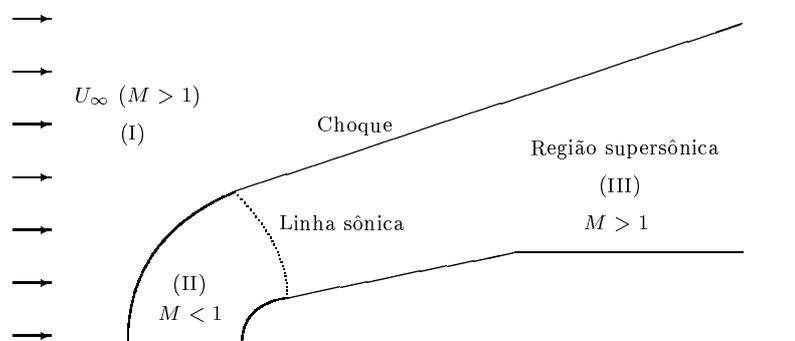


Figura 2.7 – Escoamento supers nico sobre um corpo rombudo [Maliska, 1995].

[Anderson, 1995].

Os primeiros códigos computacionais que incorporaram fenômenos físicos presentes em fluxos hipersônicos surgiram no início da década de 1970. Segundo Désidéri [1991], C. P. Li, em 1974, apresentou um artigo onde as equações de Navier-Stokes eram resolvidas para baixos números de Reynolds ao redor de uma esfera usando o método de MacCormack. Usou-se um modelo de não equilíbrio com 6 espécies químicas, incluindo NO^+ e elétrons. Em 1975, Rakich, Bailey e Park aplicaram o método das características para resolver a parte supersônica de escoamentos bidimensionais (2D) e tridimensionais (3D) invíscidos em não equilíbrio usando um modelo de 5 espécies e 18 reações químicas. Rizzi & Bailey [1976] empregaram o método dos volumes finitos com marcha no tempo para resolver um escoamento supersônico com reações químicas ao redor de um corpo rombudo 3D.

Lee [1985] apresentou uma formulação básica para a solução de problemas em regimes de baixa densidade e alta entalpia que incluía as seguintes equações de conservação: de massa para cada espécie química, de massa da mistura, de quantidade de movimento da mistura e 3 de energia (total, vibracional e eletrônica). Esta formulação foi desenvolvida para análise de vôo de veículos de transferência orbital aeroassistida (AOTV - *Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles*). Park [1985] introduziu um modelo mais simples, com apenas duas equações de energia (total e vibracional), onde as temperaturas vibracional e eletrônica são consideradas iguais entre si, mas diferentes da temperatura translacional-rotacional.

2.5.1 O Método dos Elementos Finitos na Dinâmica de Fluidos Computacional

Dentro dos inúmeros métodos para solução de problemas de escoamentos de fluidos através de CFD, destaca-se o Método dos Elementos Finitos, FEM (do inglês, *Finite Element Method*). Criado na década de 1950 para o cálculo de problemas estruturais, o FEM passou a ser aplicado a problemas de fluidos no início da década de 1970.

Normalmente, o método dos elementos finitos é obtido após a aplicação da aproximação de Galerkin à forma fraca[§] das equações governantes. A aplicação de Galerkin tradicional (ou *Bubnov-Galerkin*) gera aproximações centrais para os operadores diferenciais (equiva-

[§]*Forma fraca*, ou forma variacional, é a equação utilizada para aplicar o método dos elementos finitos. Essa formulação é normalmente chamada de *princípios dos trabalhos virtuais* e sua solução equivale à da forma forte [Hughes, 1987a].

lente a diferenças centrais em diferenças finitas). Para problemas advectivo-dominantes — que é o caso de escoamentos hipersônicos —, esquemas do tipo diferenças centrais são afetados por oscilações espúrias, devido ao fato de serem esquemas não dissipativos [Maliska, 1995]. Vários procedimentos têm sido empregados nos últimos anos para evitar tais oscilações, sendo os mais populares os esquemas do tipo *upwind* (a montante) aplicados aos termos advectivos, onde a informação que está a montante é tratada de forma preferencial em relação à informação que está a jusante do ponto considerado. O conceito de *upwind* também foi introduzido no FEM, onde funções de peso modificadas são aplicadas ao método (basicamente, um elemento a montante de outro elemento é ponderado mais fortemente do que um elemento a jusante desse elemento) [Brooks & Hughes, 1982]. Qualquer método que use um método de resíduos ponderados diferente do Galerkin tradicional, é chamado de Petrov-Galerkin [Hughes, 1987b]. O mais conhecido esquema de *upwind* para o método dos elementos finitos é o método SUPG (*streamline-upwind/Petrov-Galerkin*), criado por Brooks & Hughes [1982], onde um termo de difusão artificial que atua apenas na direção da linha de corrente é adicionado para aumentar o controle sobre o termo advectivo-difusivo das equações de Euler e Navier-Stokes [Hughes *et al.*, 1986].

Uma alternativa aos esquemas *upwind* foi introduzida por Donea [1984]: o método de Taylor-Galerkin, considerado o equivalente ao método Lax-Wendroff para o FEM [Codina, 1998; Safjan & Oden, 1995]. Neste método, uma expansão em série de Taylor é usada para a discretização temporal e, posteriormente, é aplicada a aproximação de Galerkin tradicional sobre o domínio espacial [Youn & Park, 1995]. Argyris *et al.* [1989, 1990, 1991, 1994] aplicaram o método de Taylor-Galerkin para a análise da reentrada do veículo espacial europeu *Hermes* na atmosfera terrestre, onde foi empregado um modelo de escoamento hipersônico com reações químicas e apenas uma equação de energia (energia total específica).

O presente trabalho introduz uma formulação para a solução de problemas hipersônicos com reações químicas e modelo de Park de duas equações de energia (total e vibracional) usando o método de Taylor-Galerkin.

Capítulo 3

Equações Governantes

3.1 Introdução

Neste capítulo, descreve-se as equações que governam escoamentos hipersônicos, viscosos, laminares, transientes, com reações químicas e não equilíbrio termo-químico, usando o modelo de duas temperaturas de Park [1985]. Estas equações são apresentadas em forma *conservativa*, pois são obtidas a partir de um volume infinitesimal *fixo* no espaço [Anderson, 1995]. Todas as equações de conservação estão em coordenadas cartesianas tridimensionais e são aplicadas a todo domínio considerado. Assume-se uma mistura reagente composta de gases perfeitos.

As equações são apresentadas em notação indicial de Einstein, ou seja, ocorre somatório nos termos com índices repetidos (exceto quando indicado o contrário).

3.2 Conservação de massa

3.2.1 Quantas espécies químicas?

A quantidade de espécies químicas presentes em fluxos hipersônicos é determinada pelas condições do escoamento. Como foi dito no capítulo anterior, fenômenos de excitação vibracional, dissociação e ionização podem ocorrer. Para o ar, vários modelos químicos podem ser usados, como pode ser visto na Tabela 3.1. O modelo de 2 espécies assume o ar formado pelo nitrogênio e o oxigênio moleculares e não admite dissociação e ionização. O modelo de 5 espécies permite que o ar sofra dissociação de suas moléculas, mas não admite ionização. O modelo de 7 espécies admite dissociação e um leve grau de ionização,

Tabela 3.1 – Modelos químicos para o ar.

Número de Espécies	Espécies presentes
2	N_2, O_2
5	N_2, O_2, NO, N, O
7	$N_2, O_2, NO, N, O, NO^+, e^-$
11	$N_2, O_2, NO, N, O, N_2^+, O_2^+, NO^+, N^+, O^+, e^-$

formando apenas dois íons: NO^+ e e^- — o NO possui a energia de ionização mais baixa e, portanto, é o primeiro a produzir elétrons à medida que a temperatura aumenta [Vincenti & Kruger, 1965]. Já o modelo de 11 espécies admite tanto a dissociação das moléculas do ar, como a ionização de todas as espécies presentes. Caso a superfície de um veículo viajando em velocidades hipersônicas sofra um processo de ablação, várias outras espécies químicas podem estar presentes no escoamento, podendo-se chegar a centenas delas.

Segundo Vincenti & Kruger [1965], para casos de temperaturas do ar de até 8000K, as únicas espécies presentes em quantidades mensuráveis são N_2 , O_2 , NO , N e O (modelo de 5 espécies). Este é o modelo adotado no presente trabalho, cujos dados são apresentados na Tabela 3.2.

Park [1990] sugere dois métodos para a solução numérica das equações de conservação de espécies químicas: 1) calcular a equação de conservação de ρ_s para todas as espécies químicas e 2) calcular a equação de conservação da mistura e retirar uma equação de conservação de espécie química. No método 2, a espécie química ausente pode ser obtida subtraindo-se todas as outras espécies químicas da massa específica global, uma vez que

$$\rho = \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s \quad (3.1)$$

onde N_s é o número de espécies presentes na mistura, ρ é a massa específica da mistura e ρ_s é a massa específica da espécie s [Chapman & Cowling, 1990].

Se o método 1 é usado, deve-se garantir que os termos viscosos do lado direito das equações de conservação de espécies químicas são consistentes para que sua soma seja zero. Caso contrário, massa pode ser criada ou destruída no domínio computacional. Se o método 2 é usado, os erros numéricos que ocorrerem em cada espécie química serão acumulados na espécie ausente. Para que os resultados sejam confiáveis, os erros acumulados devem ser

Tabela 3.2 – Dados para o modelo de 5 espécies.

	N_2	O_2	NO	N	O
M_s [kg/kg-mol]	28.02	32.00	30.01	14.01	16.00
R_s [J/kg K]	296.7	259.8	277.04	593.6	519.6
$e_{o,s}$ [J/kg]	0	0	$2.99 \cdot 10^6$	$33.59 \cdot 10^6$	$15.42 \cdot 10^6$
$\theta_{v,s}$ [K]	3393	2270	2740	-	-
$\theta_{e,s}$ [K]	-	11390	174	-	228
G_s	0	0.6667	1	0	0.6
σ_s [Å]	3.798	3.467	3.492	3.298	3.050
$T_{e,s}$ [K]	71.4	106.7	116.7	71.4	106.7

M_s é o peso molecular, R_s é a constante do gás, $e_{o,s}$ é a energia de ativação, $\theta_{v,s}$ e $\theta_{e,s}$ são as temperaturas características vibracional e eletrônica, respectivamente, G_s é um parâmetro de cálculo, σ_s é o diâmetro de colisão e $T_{e,s}$ é uma temperatura característica.

muito menores que a magnitude da própria variável, ou seja, a espécie retirada do conjunto de equações de conservação deve ser dominante. Para o ar, N_2 é dominante para velocidades de vôo de até 8 km/s. Para velocidades maiores, N_2 não é mais dominante e, portanto, cuidado deve ser tomado ao utilizar-se este método. O método 2 é empregado neste trabalho.

Para escoamentos não difusivos (ou do tipo Euler), há, ainda, uma simplificação que permite eliminar uma ou mais espécies químicas do conjunto de equações de conservação. Sem difusão, as reações químicas não conseguem alterar a relação total de elementos químicos presentes na mistura. O ar, por exemplo, consiste de 79% de nitrogênio e 21% de oxigênio. Esta relação não muda mesmo quando ocorre dissociação e ionização [Park, 1990]. No caso do modelo de 5 espécies para o ar (onde a dissociação do ar produz apenas NO, N e O), a conservação de elementos é regida pela seguinte relação [Ait-Ali-Yahia & Habashi, 1997]:

$$\frac{(O) + 2(O_2) + (NO)}{(N) + 2(N_2) + (NO)} = \frac{21}{79} \quad (3.2)$$

onde os parênteses representam as concentrações molares de cada espécie.

Mesmo para escoamentos difusivos a relação acima é aproximadamente válida se as velocidades de difusão dos dois elementos são quase os mesmos. Para o ar, os átomos de nitrogênio e de oxigênio têm aproximadamente a mesma massa, de modo que suas velocidades de difusão devem ser parecidas [Park, 1990].

3.2.2 Conservação de massa da mistura

A equação que descreve a conservação de massa para a mistura é a seguinte:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (3.3)$$

onde u_j é a componente do vetor velocidade na direção x_j (j varia de 1 a 3) e t é o tempo.

3.2.3 Conservação de massa das espécies químicas

A equação que descreve a conservação de massa para cada espécie química é a seguinte:

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_s u_j) = \frac{\partial J_{s,j}}{\partial x_j} + \omega_s \quad (3.4)$$

onde ω_s é a taxa de produção de massa da espécie s , definida na seção 3.5. $J_{s,j}$ é o vetor de fluxo de massa, dado por

$$J_{s,j} = \rho D_s \frac{\partial y_s}{\partial x_j}, \quad (\text{sem soma em } s) \quad (3.5)$$

onde y_s e D_s são a fração molar e o coeficiente de difusão efetiva para a espécie s , respectivamente, definidas pelas seguintes expressões:

$$y_s = \frac{\rho_s / M_s}{\sum_{r=1}^{N_s} (\rho_r / M_r)}, \quad (\text{sem soma em } s) \quad (3.6)$$

$$D_s = \frac{\gamma_{tot}^2 M_s (1 - M_s \gamma_s)}{\sum_{\substack{r=1 \\ r \neq s}}^{N_s} (\gamma_r / D_{sr})}, \quad (\text{sem soma em } s) \quad (3.7)$$

onde M_s é o peso molecular da espécie s (os valores para cada espécie estão disponíveis na Tabela 3.2). γ_{tot} e γ_s são as concentrações molares total e da espécie s , respectivamente, calculadas da seguinte forma:

$$\gamma_{tot} = \sum_{s=1}^{N_s} \gamma_s = \frac{\rho_s}{M_s} \quad (3.8)$$

Segundo Bird *et al.* [1960], o coeficiente de difusão mássica para misturas binárias de gases não polares*, D_{sr} , pode ser determinado com desvio máximo de 5% através da teoria cinética dos gases, a partir da expressão

$$D_{sr} = 1.8583 \times 10^{-7} \frac{\sqrt{T^3 \left(\frac{M_s + M_r}{M_s M_r} \right)}}{p \sigma_{sr}^2 \Omega_{sr}}, \quad (\text{sem soma em } s \text{ e } r) \quad (3.9)$$

onde σ_{sr} é o parâmetro de Lennard-Jones: $\sigma_{sr} = 0.5(\sigma_s + \sigma_r)$ (os valores dos diâmetros de colisão para cada espécie, σ_s , são dados na Tabela 3.2), T é a temperatura translacional e p é a pressão da mistura, calculada a partir da *Lei de Dalton das Pressões Parciais*, como segue [Van Wylen *et al.*, 1994; Zemansky, 1957]:

$$p = \sum_{s=1}^{N_s} p_s = \rho_s R_s T \quad (3.10)$$

onde p_s é a pressão parcial da espécie s , calculada a partir da lei de gases perfeitos, e R_s é a constante dos gases para a espécie s (cujos valores estão disponíveis na Tabela 3.2), definida por:

$$R_s = \frac{\bar{R}}{M_s} \quad (3.11)$$

onde \bar{R} é a constante universal dos gases ($\bar{R} = 8314.3$ J/kg-mol K). Na equação (3.9), a pressão deve ser introduzida em atmosferas e a temperatura em K para obter-se o coeficiente de difusão, D_{sr} , em m^2/s .

A integral de colisão de difusão, Ω_{sr} , pode ser aproximada pela seguinte expressão [White, 1991]:

*Moléculas não polares são aquelas onde o centro de carga positiva coincide com o centro de carga negativa [Metz, 1979; Slabaugh & Parsons, 1974].

$$\Omega_{sr} \cong \left(\frac{T}{T_{sr}^*} \right)^{-0.145} + \left(\frac{T}{T_{sr}^*} + 0.5 \right)^{-2.0} \quad (3.12)$$

onde

$$T_{sr}^* = (T_{\epsilon,s} T_{\epsilon,r})^{1/2} \quad (3.13)$$

onde $T_{\epsilon,s}$ é uma temperatura característica, listada na Tabela 3.2 para cada espécie. A integral de colisão de difusão, Ω_{sr} , é 10% menor que a integral de colisão, Ω_s [White, 1991], apresentada na próxima seção.

3.3 Conservação da quantidade de movimento

A equação que descreve a conservação da quantidade de movimento é a seguinte:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} \quad (3.14)$$

onde i varia de 1 a 3 (uma equação para cada componente de velocidade) e τ_{ij} é o tensor de tensões, definido como

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (3.15)$$

onde δ_{ij} é o delta de Kronecker ($\delta_{ij} = 1$, para $i = j$ e $\delta_{ij} = 0$, para $i \neq j$) e λ é a viscosidade volumétrica ($\lambda = -2\mu/3$ para a hipótese de Stokes). A viscosidade da mistura, μ , é dada pela seguinte expressão [Bird *et al.*, 1960]:

$$\mu = \frac{y_s \mu_s}{y_r \Phi_{sr}} \quad (3.16)$$

onde

$$\mu_s = 2.6693 \times 10^6 \frac{\sqrt{M_s T}}{\sigma_s^2 \Omega_s} \quad (3.17)$$

e

$$\Phi_{sr} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_s}{M_r}\right)^{-\frac{1}{2}} \left[1 + \left(\frac{\mu_s}{\mu_r}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_r}{M_s}\right)^{\frac{1}{4}}\right]^2 \quad (3.18)$$

A integral de colisão, Ω_s , pode ser aproximada pela seguinte expressão [White, 1991]:

$$\Omega_s \cong 1.147 \left(\frac{T}{T_{\epsilon,s}}\right)^{-0.145} + \left(\frac{T}{T_{\epsilon,s}} + 0.5\right)^{-2.0} \quad (3.19)$$

3.4 Conservação de energia

3.4.1 Quantas temperaturas?

Para calcular-se adequadamente escoamentos de alta velocidade, especial cuidado deve ser tomado em relação à conservação de energia. Para escoamentos com reações químicas a altas temperaturas, a temperatura vibracional é de grande importância, uma vez que ela controla a taxa de dissociação molecular [Brown, 1986]. Park [1990] chega a afirmar que sem levar em consideração a temperatura vibracional, há pouca chance de uma análise por CFD reproduzir o fenômeno observado experimentalmente. Além disso, há um benefício adicional ao se incluir a energia vibracional como uma variável dependente: a computação torna-se menos sensível aos erros numéricos e as reações químicas tornam-se mais suaves atrás de uma onda de choque. No modelo de uma temperatura, a temperatura no primeiro ponto atrás de uma onda de choque é muito alta e, portanto, as taxas de reações químicas também são muito altas. Um pequeno erro numérico nas condições logo atrás do choque provoca um grande erro nas taxas de dissociação nesse ponto. Em um modelo de duas temperaturas, a temperatura vibracional é baixa atrás do choque e, portanto, as taxas de reações químicas são praticamente zero ali. As taxas de reações químicas tornam-se grandes apenas após um determinado número de pontos atrás do choque.

Lee [1985] apresentou um modelo de 3 temperaturas — temperaturas translacional-rotacional, vibracional e eletrônica — para ser aplicado a problemas de veículos de transferência orbital aeroassistida, AOTV (*Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles*), que viajam nas camadas mais altas da atmosfera, onde a densidade é baixa, em uma velocidade superorbital. Neste ambiente, o escoamento atrás da onda de choque tende a ficar fora de equilíbrio térmico e químico. A energia do escoamento pode ser suficientemente alta para causar ionização. Em tais condições, a distribuição de energia entre os vários modos não pode mais ser representada por uma única temperatura (não equilíbrio térmico), ou seja, as temperaturas translacional, rotacional, vibracional e eletrônica podem ter valores diferentes. Entretanto, a temperatura rotacional tende a atingir rapidamente o equilíbrio com a temperatura translacional, por isso são consideradas iguais entre si.

O modelo de 3 temperaturas exige, entretanto, o conhecimento dos coeficientes de taxa de reação química como função das 3 temperaturas. Devido a esta dificuldade, Park [1985] apresentou um modelo mais simples, de 2 temperaturas, onde as temperaturas vibracional e eletrônica são consideradas iguais entre si. Esta hipótese é baseada no fato de que a troca de energia entre os modos vibracional e de translação eletrônica é muito rápida. O modelo de 2 temperaturas de Park é utilizado no presente trabalho.

3.4.2 Conservação da energia vibracional

A equação que descreve a conservação de energia vibracional é a seguinte [Men'shov & Nakamura, 2000]:

$$\frac{\partial(\rho e_v)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho e_v u_j) = \frac{\partial q_{v,j}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}(h_{v,s} J_{s,j}) + \omega_v, \quad (3.20)$$

onde e_v é a energia vibracional específica e $h_{v,s}$ é a entalpia vibracional por unidade de massa da espécie s , definidas mais adiante, na subseção 3.4.4. $q_{v,j}$ é o vetor de fluxo de calor vibracional, dado por

$$q_{v,j} = \eta_v \frac{\partial T_v}{\partial x_j}, \quad (3.21)$$

onde η_v é um coeficiente que atua como coeficiente de condutividade térmica vibracional, calculado da seguinte forma:

$$\eta_v = \eta_r = k \sum_{molec.} \frac{\gamma_s}{\gamma_r \Delta_{sr}^{(1)}(T)} \quad (3.22)$$

onde η_r é o coeficiente de condutividade térmica rotacional, k é a constante de Boltzmann ($k = 1.380622 \times 10^{-23}$ J/K) e $\Delta_{sr}^{(1)}(T)$ é a primeira integral de colisão modificada, que pode ser obtida através da seguinte expressão:

$$\Delta_{sr}^{(1)}(T) = \frac{8}{3} \left[\frac{2M_s M_r}{\pi \overline{RT} (M_s + M_r)} \right]^{1/2} \pi \Omega_{sr}, \quad (\text{sem soma em } s \text{ e } r) \quad (3.23)$$

O termo fonte da equação de conservação de energia vibracional, eq.(3.20), é definido da seguinte forma [Men'shov & Nakamura, 2000]:

$$\omega_v = \rho_s \frac{e_{v,s}(T) - e_{v,s}(T_v)}{\tau_s} + [e_{v,s}(T_v) + e_{e,s}(T_v)] \omega_s \quad (3.24)$$

onde $e_{v,s}$ e $e_{e,s}$ são as energias internas vibracional e eletrônica, respectivamente, definidas mais adiante, na subseção 3.4.4. τ_s é dado por

$$\tau_s = \left(\sum_{r=1}^{N_s} \frac{y_r}{\tau_{sr}} \right)^{-1} \quad (3.25)$$

onde τ_{sr} é o tempo de relaxação da espécie s em um banho de espécie r calculado como a soma da fórmula semi-empírica de Millikan & White [1963],

$$\tau_{sr} = \frac{\exp \left[A_{sr} \left(T^{-1/3} - 0.015 B_{sr}^{1/4} \right) - 18.42 \right]}{p} \quad (3.26)$$

onde

$$A_{sr} = 1.16 \times 10^{-3} B_{sr}^{0.5} \theta_{v,s}^{4/3}, \quad (3.27)$$

$$B_{sr} = \frac{M_s M_r}{M_s + M_r}. \quad (3.28)$$

Na equação (3.26), a pressão deve ser inserida em atmosferas para se obter o tempo de relaxação em segundos.

3.4.3 Conservação da energia total

A equação que descreve a conservação de energia total é a seguinte [Men'shov & Nakamura, 2000]:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\rho e + p) u_j] = \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (h_s J_{s,j}) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(u_j \sum_{k=1}^3 \tau_{jk} \right) \quad (3.29)$$

onde e é a energia total específica e h_s é a entalpia total por unidade de massa da espécie s , definidas na subseção 3.4.4. q_j é o vetor de fluxo de calor total, dado por

$$q_j = \eta \frac{\partial T}{\partial x_j} + \eta_v \frac{\partial T_v}{\partial x_j} \quad (3.30)$$

onde η é a condutividade térmica da mistura para as energias translacional e rotacional, calculada através da seguinte soma:

$$\eta = \eta_t + \eta_v. \quad (3.31)$$

A condutividade térmica para a energia translacional, η_t , é definida da seguinte forma:

$$\eta_t = \frac{15}{4} k \frac{\gamma_s}{a_{sr} \gamma_r \Delta_{sr}^{(2)}(T)}, \quad (3.32)$$

onde

$$a_{sr} = 1 + \frac{(1 - M_s/M_r)(0.45 - 2.54M_s/M_r)}{(1 + M_s/M_r)^2}. \quad (3.33)$$

e $\Delta_{sr}^{(2)}(T)$ é a segunda integral de colisão modificada, dada por

$$\Delta_{sr}^{(2)}(T) = \frac{16}{5} \left[\frac{2M_s M_r}{\pi \bar{R} T (M_s + M_r)} \right]^{1/2} \pi \Omega_s, \text{ (sem soma em } s \text{ e } r) \quad (3.34)$$

3.4.4 Energia interna e entalpia

As energias específicas vibracional, e_v , e total, e , são definidas pelas seguintes somas:

$$e_v = c_s (e_{v,s} + e_{e,s}) \quad (3.35)$$

$$e = \frac{1}{2} u_j u_j + c_s (e_{t,s} + e_{v,s} + e_{e,s} + e_{o,s}) \quad (3.36)$$

onde c_s é a fração mássica da espécie s ($c_s = \rho_s / \rho$). $e_{t,s}$, $e_{v,s}$ e $e_{e,s}$ são as energias internas translacional, vibracional e eletrônica da espécie s , respectivamente, calculadas através das seguintes expressões:

$$e_{t,s} = \begin{cases} \frac{3}{2} R_s T, & s = \text{átomo} \\ \frac{5}{2} R_s T, & s = \text{molécula} \end{cases} \quad (3.37)$$

$$e_{v,s} = \begin{cases} 0, & s = \text{átomo} \\ \frac{R_s \theta_{v,s}}{\exp(\theta_{v,s}/T_v) - 1}, & s = \text{molécula} \end{cases} \quad (3.38)$$

$$e_{e,s} = \frac{R_s G_s \theta_{e,s}}{\exp(\theta_{e,s}/T_v) + G_s} \quad (3.39)$$

A energia de formação, $e_{o,s}$, a constante do gás, R_s , e os parâmetros $\theta_{v,s}$, $\theta_{e,s}$ e G_s são listados na Tabela 3.2 para as espécies presentes.

As entalpias vibracional, $h_{v,s}$, e total, h_s , da espécie s por unidade de massa, são dadas por

$$h_{v,s} = \left(\frac{de_{v,s}}{dT_v} + \frac{de_{e,s}}{dT_v} \right) T_v \quad (3.40)$$

$$h_s = R_s T + e_{t,s} + e_{o,s} + h_{v,s} \quad (3.41)$$

3.5 Modelo cinético-químico

A taxa de produção da espécie química s por unidade de volume é dada pela seguinte expressão [Gnoffo *et al.*, 1989; Men'shov & Nakamura, 2000; Ait-Ali-Yahia & Habashi, 1997]:

$$\omega_s = M_s \sum_{r=1}^{N_r} (b_{s,r} - f_{s,r}) (R_{f,r} - R_{b,r}), \quad (\text{sem soma em } s) \quad (3.42)$$

onde N_r é o número de reações químicas, $f_{s,r}$ e $b_{s,r}$ são, respectivamente, os coeficientes estequiométricos para os reagentes e os produtos na reação r e $R_{f,r}$ e $R_{b,r}$ são, respectivamente, as taxas de reação para frente e para trás para a reação r . Estas taxas são definidas por

$$R_{f,r} = k_{f,r} \prod_{s=1}^{N_s} \left(\frac{\rho_s}{M_s} \right)^{f_{s,r}} \quad (3.43)$$

$$R_{b,r} = k_{b,r} \prod_{s=1}^{N_s} \left(\frac{\rho_s}{M_s} \right)^{b_{s,r}} \quad (3.44)$$

onde $k_{f,r}$ e $k_{b,r}$ são, respectivamente, os coeficientes de taxa de reação para frente e para trás.

Para completar a equação (3.42), um modelo cinético-químico deve ser definido. Isto se dá quando um conjunto de N_r reações é fornecido com as expressões apropriadas para os coeficientes de taxa de reação para frente e para trás. Gnoffo *et al.* [1989] compararam dois modelos cinético-químicos disponíveis: o de Dunn e Kang, de 1973, e o de Park [1989]. Eles concluíram que o modelo de Park se aproximava melhor dos resultados obtidos com Simulação Direta de Monte-Carlo (DSMC). No presente trabalho, adota-se o modelo de duas temperaturas de Park. As reações e os parâmetros referentes a cada uma delas pode ser observado na Tabela 3.3 (os parâmetros apresentados foram atualizados em Park [1993]).

Neste modelo, Park assume que certas classes de reações podem ser descritas por uma única temperatura de controle de taxa de reações, T_a , que é uma média apropriada

Tabela 3.3 – Parâmetros para o cálculo dos coeficientes de taxa de reação para o ar [Park, 1986].

Reações ^a	T_x	T_d	$n_{f,r}$	M	$C_{f,r}$
$N_2 + M \rightleftharpoons N + N + M$	T_a	113200	-1.6	N_2	$3.7 \cdot 10^{21}$
				O_2	$3.7 \cdot 10^{21}$
				NO	$3.7 \cdot 10^{21}$
				N	$1.11 \cdot 10^{22}$
				O	$1.11 \cdot 10^{22}$
$O_2 + M \rightleftharpoons O + O + M$	T_a	59500	-1.0	N_2	$2.75 \cdot 10^{19}$
				O_2	$2.75 \cdot 10^{19}$
				NO	$2.75 \cdot 10^{19}$
				N	$8.25 \cdot 10^{19}$
				O	$8.25 \cdot 10^{19}$
$NO + M \rightleftharpoons N + O + M$	T_a	75500	-0.5	N_2	$2.3 \cdot 10^{17}$
				O_2	$2.3 \cdot 10^{17}$
				NO	$2.3 \cdot 10^{17}$
				N	$4.6 \cdot 10^{17}$
				O	$4.6 \cdot 10^{17}$
$NO + O \rightleftharpoons O_2 + N$	T	19450	1.29		$2.16 \cdot 10^8$
$N_2 + O \rightleftharpoons NO + N$	T	38400	0.1		$3.18 \cdot 10^{13}$

^a As reações para frente são endotérmicas.

das temperaturas translacional e vibracional locais. Ele sugere o uso de uma temperatura definida pela equação

$$T_a = \sqrt{TT_v} \quad (3.45)$$

para caracterizar reações dissociativas.

Os coeficientes de taxa de reação para frente e para trás podem ser expressos, respectivamente, por

$$k_{f,r} = C_{f,r} T_x^{n_{f,r}} \exp(-T_d/T_x), \quad (3.46)$$

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}(T)}{K_{eq,r}}, \quad (\text{sem soma em } r) \quad (3.47)$$

onde $K_{eq,r}$ é a constante de equilíbrio para a reação r . O parâmetro $n_{f,r}$, a constante de taxa de reação, $C_{f,r}$, a temperatura de ativação, T_d , e a temperatura de controle de taxa de reação, T_x , estão definidos na Tabela 3.3 para todas as reações químicas consideradas. As reações, a partir das quais $b_{s,r}$ e $f_{s,r}$ podem ser deduzidas, também estão presentes na Tabela 3.3.

A constante de equilíbrio, $K_{eq,r}$, pode ser determinada a partir da energia de ativação da reação para frente e funções dos reagentes e produtos. Park [1986] empregou uma interpolação para a constante de equilíbrio da seguinte forma:

$$K_{eq,r} = \exp(B_{1,r} + B_{2,r} \ln Z + B_{3,r} Z + B_{4,r} Z^2 + B_{5,r} Z^3) \quad (3.48)$$

onde

$$Z = \frac{10^4}{T} \quad (3.49)$$

e as constantes $B_{i,r}$ são apresentadas na Tabela 3.4.

Tabela 3.4 – Constantes para cálculo do coeficiente de equilíbrio, $K_{eq,r}$, onde $M = N_2, O_2, NO, N$ e O [Park, 1986].

Reações	$B_{1,r}$	$B_{2,r}$	$B_{3,r}$	$B_{4,r}$	$B_{5,r}$
$N_2 + M \rightleftharpoons N + N + M$	1.858	-1.325	-9.856	-0.174	0.008
$O_2 + M \rightleftharpoons O + O + M$	2.855	0.988	-6.181	-0.023	-0.001
$NO + M \rightleftharpoons N + O + M$	0.792	-0.492	-6.761	-0.091	0.004
$NO + O \rightleftharpoons O_2 + N$	-2.063	-1.480	-0.580	-0.114	0.005
$N_2 + O \rightleftharpoons NO + N$	1.066	-0.833	-3.095	-0.084	0.004

3.6 Condições de contorno: superfícies catalíticas

Nas superfícies de contornos sólidos, a parede pode ser feita de um material que provoque a catalisação das reações químicas. Tais superfícies são chamadas de *catalíticas*. A partir do grau de catalisação, pode-se estabelecer as seguintes definições (ilustradas na Figura 3.1):

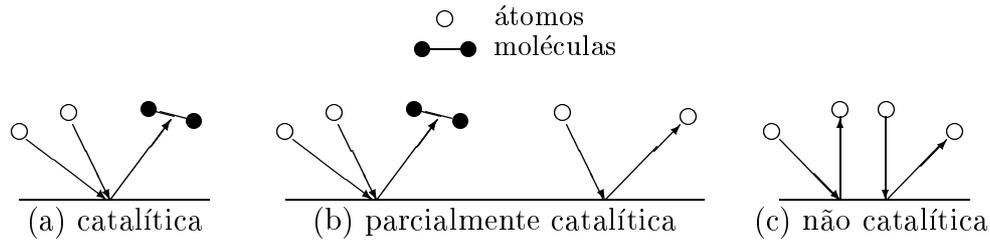


Figura 3.1 – Efeito da catalisação da superfície na recombinação de átomos [Bertin, 1994].

1. *Parede totalmente catalítica*: onde as reações químicas são catalisadas numa *taxa infinita*, ou seja, as frações mássicas na parede atingem os seus valores de equilíbrio (Figura 3.1a);
2. *Parede parcialmente catalítica*: onde as reações químicas são catalisadas numa taxa finita (Figura 3.1b);
3. *Parede não catalítica*: onde não acontecem reações químicas (Figura 3.1c).

Para cada caso apresentado acima, há uma condição de contorno adequada que deve ser empregada na superfície correspondente, da seguinte forma [Anderson, 1989]:

1. *Parede totalmente catalítica*:

$$c_s = (c_s)_{equil.} \quad (3.50)$$

2. *Parede parcialmente catalítica*:

$$(\omega_s)_c = \rho D_s \left(\frac{\partial c_s}{\partial n} \right)_w \quad (3.51)$$

onde $(\omega_s)_c$ é a taxa de produção da espécie s na parede devido à catalisação e n é a direção normal à superfície.

3. *Parede não catalítica*:

$$\left(\frac{\partial c_s}{\partial n} \right)_w = 0 \quad (3.52)$$

No presente trabalho, considera-se superfícies não catalíticas.

3.7 Forma compacta das equações

As equações de conservação apresentadas acima podem ser escritas em forma compacta, da seguinte forma:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \mathbf{G}_j}{\partial x_j} + \mathbf{H} = 0 \quad (3.53)$$

onde

$$\mathbf{U} = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho_s \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ \rho e_v \\ \rho e \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{F}_j = \begin{Bmatrix} \rho u_j \\ \rho_s u_j \\ \rho u_1 u_j + p \delta_{ij} \\ \rho u_2 u_j + p \delta_{ij} \\ \rho u_3 u_j + p \delta_{ij} \\ \rho e_v u_j \\ (\rho e + p) u_j \end{Bmatrix}, \quad (3.54)$$

$$\mathbf{G}_j = \begin{Bmatrix} 0 \\ -J_{s,j} \\ -\tau_{j1} \\ -\tau_{j2} \\ -\tau_{j3} \\ -q_{v,j} - h_{v,s} J_{s,j} \\ -q_j - h_s J_{s,j} - u_j \sum_{k=1}^3 \tau_{jk} \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{Bmatrix} 0 \\ -\omega_s \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\omega_v \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (3.55)$$

Capítulo 4

Aplicação do Método de Taylor-Galerkin

4.1 Introdução

Neste capítulo, o método de Taylor-Galerkin introduzido por Donea [1984] é aplicado sobre as equações governantes apresentadas no capítulo 3. Em um primeiro momento, uma expansão em série de Taylor é aplicada sobre o termo temporal das equações. Posteriormente, o método de Galerkin tradicional (ou *Bubnov-Galerkin*) é aplicado para obter-se a aproximação espacial. Este procedimento é aplicado sobre a forma compacta das equações, definida no capítulo anterior como

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \mathbf{G}_j}{\partial x_j} + \mathbf{H} = 0 \quad (4.1)$$

4.2 Discretização Temporal: Série de Taylor

No método de Taylor-Galerkin, as variáveis são expandidas no tempo segundo uma série de Taylor, da seguinte forma [Yoon *et al.*, 1998]:

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right)^{n+s_1} + \frac{\Delta t^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} \right)^{n+s_2} + O(\Delta t^3) \quad (4.2)$$

onde o superescrito indica o passo de tempo. Dessa forma, pode-se obter os valores das variáveis em um passo de tempo $n + 1$, a partir do passo de tempo anterior, n . Além disso, define-se

$$\frac{\partial \mathbf{U}^{n+s_1}}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} + s_1 \frac{\partial \Delta \mathbf{U}^{n+1}}{\partial t} \quad 0 \leq s_1 \leq 1 \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^{n+s_2}}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} + s_2 \frac{\partial^2 \Delta \mathbf{U}^{n+1}}{\partial t^2} \quad 0 \leq s_2 \leq 1 \quad (4.4)$$

onde s_1 e s_2 são parâmetros que definem se o esquema é implícito, semi-implícito ou explícito (*implicitness parameters*), dependendo dos valores tomados [Yoon *et al.*, 1998]. Adotando $s_1 = s_2 = 1/2$ e substituindo na equação (4.2), obtém-se

$$\Delta \mathbf{U}^{n+1} = \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial \Delta \mathbf{U}^{n+1}}{\partial t} \right) + \frac{\Delta t^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Delta \mathbf{U}^{n+1}}{\partial t^2} \right) \quad (4.5)$$

A equação acima define o esquema de avanço no tempo. Entretanto, ainda é necessário substituir as expressões para as derivadas de \mathbf{U}^n e $\Delta \mathbf{U}^{n+1}$ com relação ao tempo a partir das equações de conservação. Estas últimas podem ser expressas a partir da eq. (4.1) da seguinte forma:

$$\frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{F}_j^n}{\partial x_j} - \frac{\partial \mathbf{G}_j^n}{\partial x_j} - \mathbf{H}^n \quad (4.6)$$

Analogamente, para o incremento $\Delta \mathbf{U}^{n+1}$, obtém-se

$$\frac{\partial \Delta \mathbf{U}^{n+1}}{\partial t} = -\frac{\partial \Delta \mathbf{F}_j^{n+1}}{\partial x_j} - \frac{\partial \Delta \mathbf{G}_j^{n+1}}{\partial x_j} - \Delta \mathbf{H}^{n+1} \quad (4.7)$$

Derivando em relação ao tempo, tem-se

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{\partial \mathbf{F}_j^n}{\partial x_j} - \frac{\partial \mathbf{G}_j^n}{\partial x_j} - \mathbf{H}^n \right) \quad (4.8)$$

ou, rearranjando,

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{\partial \mathbf{F}_j^n}{\partial t} - \frac{\partial \mathbf{G}_j^n}{\partial t} \right) - \frac{\partial \mathbf{H}^n}{\partial t} \quad (4.9)$$

Aplicando a regra da cadeia, tem-se

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{\partial \mathbf{F}_j^n}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} - \frac{\partial \mathbf{G}_j^n}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} \right) - \frac{\partial \mathbf{H}^n}{\partial t} \quad (4.10)$$

Observando-se que

$$\frac{\partial \mathbf{F}_j^n}{\partial \mathbf{U}} = \mathbf{u}_j^n \quad (4.11)$$

e denominando

$$\mathbf{b}_j^n = \frac{\partial \mathbf{G}_j^n}{\partial \mathbf{U}} \quad (4.12)$$

tem-se

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\mathbf{u}_j^n \frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} - \mathbf{b}_j^n \frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} \right) - \frac{\partial \mathbf{H}^n}{\partial t} \quad (4.13)$$

Substituindo a eq.(4.6) na equação acima, obtém-se

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-(\mathbf{u}_j^n + \mathbf{b}_j^n) \left(-\frac{\partial \mathbf{F}_k^n}{\partial x_k} - \frac{\partial \mathbf{G}_k^n}{\partial x_k} - \mathbf{H}^n \right) \right] - \frac{\partial \mathbf{H}^n}{\partial t} \quad (4.14)$$

Adotando-se a seguinte linearização,

$$\frac{\partial \mathbf{H}_j^n}{\partial t} = \frac{\Delta \mathbf{H}_j^{n+1}}{\Delta t} = \frac{\mathbf{H}_j^{n+1} - \mathbf{H}_j^n}{\Delta t} \quad (4.15)$$

tem-se

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-(\mathbf{u}_j^n + \mathbf{b}_j^n) \left(-\frac{\partial \mathbf{F}_k^n}{\partial x_k} - \frac{\partial \mathbf{G}_k^n}{\partial x_k} - \mathbf{H}^n \right) \right] - \frac{\Delta \mathbf{H}^{n+1}}{\Delta t} \quad (4.16)$$

Analogamente, para o incremento $\Delta \mathbf{U}^{n+1}$, obtém-se

$$\frac{\partial^2 \Delta \mathbf{U}^{n+1}}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-(\mathbf{u}_j^n + \mathbf{b}_j^n) \left(-\frac{\partial \Delta \mathbf{F}_k^{n+1}}{\partial x_k} - \frac{\partial \Delta \mathbf{G}_k^{n+1}}{\partial x_k} - \Delta \mathbf{H}^{n+1} \right) \right] - \frac{\Delta (\Delta \mathbf{H}^{n+1})}{\Delta t} \quad (4.17)$$

As equações (4.6), (4.7), (4.16) e (4.17) podem ser substituídas na equação (4.5). Considera-se que os componentes do vetor \mathbf{b}_j^n são desprezíveis em relação ao vetor \mathbf{u}_j^n , de modo que o termo $\mathbf{u}_j^n + \mathbf{b}_j^n$ é substituído apenas por \mathbf{u}_j^n . Além disso, os termos

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial \mathbf{G}_k^n}{\partial x_k}, \quad \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial \Delta \mathbf{G}_k^{n+1}}{\partial x_k}, \\ & \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\Delta (\Delta \mathbf{H}^{n+1})}{\Delta t}, \quad \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\partial \Delta \mathbf{H}^{n+1}}{\partial x_j} \end{aligned}$$

são desprezados por serem de ordem superior. Ainda, os termos $\Delta t \Delta \mathbf{H}^{n+1}$ e $\partial (\mathbf{u}_j^n \mathbf{H}^n) / \partial x_j$ são eliminados para simplificação do processo de cálculo. Obtém-se, dessa forma,

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{U}^{n+1} = \Delta t \left[-\frac{\partial \mathbf{F}_j^n}{\partial x_j} - \frac{\partial \mathbf{G}_j^n}{\partial x_j} - \mathbf{H}^n + \frac{1}{2} \left(-\frac{\partial \Delta \mathbf{F}_j^{n+1}}{\partial x_j} - \frac{\partial \Delta \mathbf{G}_j^{n+1}}{\partial x_j} \right) \right] \\ + \frac{\Delta t^2}{2} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mathbf{u}_j^n \frac{\partial \mathbf{F}_k^n}{\partial x_k} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mathbf{u}_j^n \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_k^{n+1}}{\partial x_k} \right) \right] \quad (4.18) \end{aligned}$$

Reunindo os termos de mesmo passo de tempo, obtém-se

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{U}^{n+1} = \Delta t \left[-\frac{\partial \mathbf{F}_j^n}{\partial x_j} - \frac{\partial \mathbf{G}_j^n}{\partial x_j} - \mathbf{H}^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mathbf{u}_j^n \frac{\partial \mathbf{F}_k^n}{\partial x_k} \right) \right] \\ + \frac{\Delta t}{2} \left[-\frac{\partial \Delta \mathbf{F}_j^{n+1}}{\partial x_j} - \frac{\partial \Delta \mathbf{G}_j^{n+1}}{\partial x_j} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mathbf{u}_j^n \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_k^{n+1}}{\partial x_k} \right) \right] \quad (4.19) \end{aligned}$$

Na equação acima, os incrementos das variáveis, $\Delta \mathbf{U}$, devem ser obtidas através de um processo iterativo, uma vez que estão definidos no mesmo passo de tempo que os termos incrementais do lado direito da equação (segundo colchete). Por isso, adiciona-se um contador de iterações, I , de modo que a eq. (4.19) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{U}_{I+1}^{n+1} = \Delta t \left[-\frac{\partial \mathbf{F}_j^n}{\partial x_j} - \frac{\partial \mathbf{G}_j^n}{\partial x_j} - \mathbf{H}^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mathbf{u}_j^n \frac{\partial \mathbf{F}_k^n}{\partial x_k} \right) \right] \\ + \frac{\Delta t}{2} \left[-\frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{jI}^{n+1}}{\partial x_j} - \frac{\partial \Delta \mathbf{G}_{jI}^{n+1}}{\partial x_j} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mathbf{u}_j^n \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{kI}^{n+1}}{\partial x_k} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.20)$$

4.3 Discretização Espacial: Galerkin

Na equação (4.20), as funções envolvidas foram discretizadas no tempo, mas não no espaço. Os vetores dessa equação são funções contínuas da posição, ou seja,

$$\mathbf{U}^n = \mathbf{U}^n(x_1, x_2, x_3) \quad (4.21)$$

$$\Delta \mathbf{U}^{n+1} = \Delta \mathbf{U}^{n+1}(x_1, x_2, x_3) = \mathbf{U}^{n+1}(x_1, x_2, x_3) - \mathbf{U}^n(x_1, x_2, x_3) \quad (4.22)$$

Para a discretização espacial, aplica-se o Método dos Elementos Finitos, FEM (do inglês, *Finite Element Method*), o qual consiste em dividir o domínio em elementos e aproximar as variáveis de campo nos elementos através de polinômios que interpolam os valores destas variáveis a partir dos valores delas nos nós dos elementos. Dessa forma, as variáveis aproximadas passam a ser obtidas por interpolação, dadas pela seguinte expressão:

$$\mathbf{U}^n = [\Phi] \{U\}^n \quad (4.23)$$

onde $[\Phi]$ é a matriz linha das funções de interpolação e $\{U\}^n$ é o vetor de valores nodais da variável. Aqui está sendo representado apenas o vetor \mathbf{U}^n , mas este procedimento é estendido a todas variáveis. No presente trabalho, utiliza-se elementos tridimensionais trilineares hexaédricos de 8 nós, de modo que $[\Phi]$ pode ser definida como

$$[\Phi] = [\Phi_1 \quad \Phi_2 \quad \Phi_3 \quad \Phi_4 \quad \Phi_5 \quad \Phi_6 \quad \Phi_7 \quad \Phi_8] \quad (4.24)$$

No contexto do FEM, as funções de interpolação, Φ_i , são conhecidas (polinômios, em geral), ficando como incógnitas apenas os valores nodais das variáveis aproximadas. É

necessário, portanto, adotar um método que permita estabelecer equações para determinar tais valores. Nesse sentido, estabelece-se um critério de maneira que a diferença entre os valores das variáveis aproximadas e os valores reais (incógnitas originais do modelo contínuo) seja mínima.

O método dos resíduos ponderados (*weighted residual method*) consiste em tomar as funções aproximadas em um elemento, que não satisfarão a eq. (4.20) por não serem a sua solução exata, deixando um resíduo para cada equação. Este resíduo é definido como

$$\mathbf{R} = \Delta \mathbf{U}_{I+1}^{n+1} - \Delta t \left\{ -\frac{\partial \mathbf{F}_j^n}{\partial x_j} - \frac{\partial \mathbf{G}_j^n}{\partial x_j} - \mathbf{H}^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mathbf{u}_j^n \frac{\partial \mathbf{F}_k^n}{\partial x_k} \right] \right\} - \frac{\Delta t}{2} \left\{ -\frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{jI}^{n+1}}{\partial x_j} - \frac{\partial \Delta \mathbf{G}_{jI}^{n+1}}{\partial x_j} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mathbf{u}_j^n \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{kI}^{n+1}}{\partial x_k} \right] \right\} \quad (4.25)$$

Estes resíduos devem ser ponderados de alguma forma e obrigados a satisfazer alguma condição para minimizá-los. Entre os métodos que podem ser usados, o método de Galerkin é aquele no qual se pondera o resíduo em relação às variações das variáveis do problema, exigindo que o produto interno entre ambos seja nulo. Assim, definindo o produto interno como a integral de volume no elemento do produto entre o resíduo e a variação do vetor das variáveis, tem-se

$$\int_{\Omega_e} \delta \mathbf{U} \mathbf{R} \, d\Omega = 0 \quad \implies \quad \{\delta U\}^T \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \mathbf{R} \, d\Omega = \{0\} \quad (4.26)$$

onde \mathbf{R} é o resíduo e Ω_e é o domínio do elemento. Resulta, portanto,

$$\int_{\Omega_e} [\Phi]^T \mathbf{R} \, d\Omega = \{0\} \quad (4.27)$$

A solução do problema discretizado é obtida resolvendo-se a equação acima para os valores nodais das variáveis, pois eles minimizam o resíduo.

4.3.1 Modelo numérico para escoamentos não difusivos

A aproximação de Galerkin é aplicada sobre a *forma fraca* das equações, obtida através da aplicação do teorema de Green (ou Gauss-Green) sobre as equações. Os termos difusivos, \mathbf{G}_j^n e $\Delta \mathbf{G}_{jI}^{n+1}$, são retirados da equação (4.25) no desenvolvimento que se segue, pois são muito complexos e exigem um tratamento especial [Burbridge, 1999]. Além

disso, para cada equação de conservação, os termos difusivos têm características particulares. Integrando-se a eq. (4.20) sobre o domínio do elemento e ponderando-se em relação a uma função peso, tem-se

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \Delta \mathbf{U}_{I+1}^{n+1} d\Omega = \Delta t \left\{ - \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial \mathbf{F}_j^n}{\partial x_j} d\Omega - \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \mathbf{H}^n d\Omega \right. \\ \left. + \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mathbf{u}_j^n \frac{\partial \mathbf{F}_k^n}{\partial x_k} \right) d\Omega \right\} \\ + \frac{\Delta t}{2} \left\{ - \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{jI}^{n+1}}{\partial x_j} d\Omega + \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mathbf{u}_j^n \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{kI}^{n+1}}{\partial x_k} \right] d\Omega \right\} \quad (4.28) \end{aligned}$$

Aplicando-se o teorema de Green (integração por partes) sobre a equação acima e desprezando-se os termos de contorno resultantes da integral contendo $\Delta \mathbf{F}_k^{n+1}$, obtém-se

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \Delta \mathbf{U}_{I+1}^{n+1} d\Omega = \Delta t \left\{ - \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial \mathbf{F}_j^n}{\partial x_j} d\Omega - \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \mathbf{H}^n d\Omega \right. \\ \left. - \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_j} \left(\mathbf{u}_j^n \frac{\partial \mathbf{F}_k^n}{\partial x_k} \right) d\Omega + \frac{\Delta t}{2} \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left(\mathbf{u}_j^n \frac{\partial \mathbf{F}_k^n}{\partial x_k} \right) d\Gamma \right\} \\ + \frac{\Delta t}{2} \left\{ - \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{jI}^{n+1}}{\partial x_j} d\Omega - \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_j} \left(\mathbf{u}_j^n \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{kI}^{n+1}}{\partial x_k} \right) d\Omega \right\} \quad (4.29) \end{aligned}$$

onde Γ_e é o contorno do elemento.

Introduzindo-se as variáveis aproximadas, eq. (4.23), na equação acima, tem-se,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} [\Phi]^T [\Phi] d\Omega \{ \Delta U \}_{I+1}^{n+1} = \Delta t \left\{ - \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} d\Omega \{ F_j \}^n - \int_{\Omega_e} [\Phi]^T [\Phi] d\Omega \{ H \}^n \right. \\ \left. - \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega_e} ([\Phi] \{ u_j \}^n) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} d\Omega \{ F_k \}^n + \frac{\Delta t}{2} \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T ([\Phi] \{ u_j \}^n) n_k \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{ F_k \}^n d\Gamma \right\} \\ + \frac{\Delta t}{2} \left\{ - \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} d\Omega \{ \Delta F_j \}_I^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega_e} ([\Phi] \{ u_j \}^n) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} d\Omega \{ \Delta F_k \}_I^{n+1} \right\} \quad (4.30) \end{aligned}$$

onde n_k são as componentes do vetor normal ao contorno (apontando para fora do domínio, por convenção). Definindo-se as seguintes matrizes e vetores

$$[M] = \int_{\Omega_e} [\Phi]^T [\Phi] d\Omega \quad (4.31)$$

$$[B]_i = \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} d\Omega \quad (4.32)$$

$$[C]_i = \int_{\Omega_e} ([\Phi] \{u_j\}^n) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} d\Omega \quad (4.33)$$

$$\{f\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T ([\Phi] \{u_j\}^n) n_k \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{F_k\}^n d\Gamma \quad (4.34)$$

a equação (4.30) pode ser reescrita sob forma matricial, do seguinte modo:

$$[M] \{\Delta U\}_{I+1}^{n+1} = \Delta t \left\{ -[B]_i \{F_i\}^n - [M] \{H\}^n - \frac{\Delta t}{2} [C]_i \{F_i\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{f\}^n \right\} \\ + \frac{\Delta t}{2} \left\{ -[B]_i \{\Delta F_i\}_I^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} [C]_i \{\Delta F_i\}_I^{n+1} \right\} \quad (4.35)$$

Fazendo

$$[B^C]_i = [B]_i + \frac{\Delta t}{2} [C]_i \quad (4.36)$$

obtem-se

$$[M] \{\Delta U\}_{I+1}^{n+1} = \Delta t \left\{ -[B^C]_i \{F_i\}^n - [M] \{H\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{f\}^n \right\} \\ + \frac{\Delta t}{2} \left\{ -\frac{\Delta t}{2} [B^C]_i \{\Delta F_i\}_I^{n+1} \right\} \quad (4.37)$$

A equação acima foi definida para um elemento genérico. Para resolver as equações é necessário efetuar a montagem das equações de elemento para obter o sistema completo. O uso da matriz de massa consistente, $[M]$, gera um sistema de equações acopladas que não podem ser resolvidas explicitamente. Entretanto, adota-se a chamada matriz de massa diagonal, $[M_D]$, definida como

$$[M_D] = [m_{MN}] \quad (4.38)$$

onde

$$m_{MN} = \begin{cases} \alpha M_{MN}, & \text{se } M = N \\ 0, & \text{se } M \neq N \end{cases} \quad (4.39)$$

$$\alpha = \frac{\sum_{N=1}^8 M_{MN}}{\sum_{N=1}^8 \sum_{M=1}^8 M_{MN}}$$

sendo M_{MN} os elementos da matriz $[M]$. Assim, obtém-se o seguinte esquema, que pode ser resolvido de forma explícita:

$$\begin{aligned} \{\Delta U\}_{I+1}^{n+1} = \Delta t [M_D]^{-1} \left\{ - [B^C]_i \{F_i\}^n - [M] \{H\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{f\}^n \right\} \\ + \frac{\Delta t}{2} [M_D]^{-1} \left\{ - \frac{\Delta t}{2} [B^C]_i \{\Delta F_i\}_I^{n+1} \right\} \quad (4.40) \end{aligned}$$

A equação acima representa o esquema de Taylor-Galerkin para escoamentos hiper-sônicos não difusivos.

4.3.2 Modelo numérico para escoamentos difusivos

Os termos difusivos presentes no vetor \mathbf{G}_i^n não podem ser interpolados em forma direta. Além disso, estes termos têm características especiais para cada equação de conservação e, por isso, não serão interpolados aqui (a maneira como é realizada a expansão dos termos difusivos pode ser observada no Anexo B).

Para simplificar a notação, adota-se

$$F_i^\rho = \rho u_i \quad (4.41)$$

$$F_i^s = \rho_s u_i \quad (4.42)$$

$$F_{ij}^u = \rho u_i u_j + p \delta_{ij} \quad (4.43)$$

$$F_i^v = \rho e_v u_i \quad (4.44)$$

$$F_i^e = (\rho e + p) u_i \quad (4.45)$$

As equações de conservação ficam, então, expressas da seguinte forma:

a) Equação de conservação de massa da mistura:

$$\begin{aligned} \{\Delta \rho\}_{I+1}^{n+1} = \Delta t [M_D]^{-1} \left\{ - [B^C]_i \{F_i^\rho\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{f\}^n \right\} \\ + \frac{\Delta t}{2} [M_D]^{-1} \left\{ - [B^C]_i \{\Delta F_i^\rho\}_I^{n+1} \right\} \quad (4.46) \end{aligned}$$

b) Equação de conservação de massa para cada espécie química:

$$\begin{aligned} \{\Delta \rho_s\}_{I+1}^{n+1} = \Delta t [M_D]^{-1} \left\{ - [B^C]_i \{F_i^s\}^n - [K^s] \{y_s\}^n + [M] \{\omega_s\}^n + \{g^s\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{f\}^n \right\} \\ + \frac{\Delta t}{2} [M_D]^{-1} \left\{ - [B^C]_i \{\Delta F_i^s\}_I^{n+1} - [K^s] \{\Delta y_s\}_I^{n+1} \right\} \quad (4.47) \end{aligned}$$

c) Equação de conservação da quantidade de movimento:

$$\begin{aligned} \{\Delta \rho u_j\}_{I+1}^{n+1} = \Delta t [M_D]^{-1} & \left\{ - [B^C]_i \{F_{ij}^u\} - [D]_{ij} \{u_j\}^n + \{g_j^u\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{f\}^n \right\} \\ & + \frac{\Delta t}{2} [M_D]^{-1} \left\{ - [B^C]_i \{\Delta F_{ij}^u\}_I^{n+1} - [D]_i \{\Delta u_i\}_I^{n+1} \right\} \end{aligned} \quad (4.48)$$

d) Equação de conservação da energia vibracional:

$$\begin{aligned} \{\Delta \rho e_v\}_{I+1}^{n+1} = \Delta t [M_D]^{-1} & \left\{ - [B^C]_i \{F_j^v\}^n \right. \\ & \left. - [K^v] \{T_v\}^n - [K^{sv}] \{y_s\}^n + [M] \{\omega_v\}^n + \{g^v\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{f\}^n \right\} \\ & + \frac{\Delta t}{2} [M_D]^{-1} \left\{ - [B^C]_i \{\Delta F_i\}_I^{n+1} - [K^v] \{\Delta T_v\}_I^{n+1} - [K^{sv}] \{\Delta y_s\}_I^{n+1} \right\} \end{aligned} \quad (4.49)$$

e) Equação de conservação da energia total:

$$\begin{aligned} \{\Delta \rho e\}_{I+1}^{n+1} = \Delta t [M_D]^{-1} & \left\{ - [B^C]_i \{F_i^e\}^n - [E]_i \{u_i\} \right. \\ & \left. - [K^v] \{T_v\}^n - [K^e] \{T\}^n - [K^{se}] \{y_s\}^n + \{g^e\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{f\}^n \right\} \\ & + \frac{\Delta t}{2} [M_D]^{-1} \left\{ - [B^C]_i \{\Delta F_i\}_I^{n+1} - [E^*]_i \{\Delta u_i\}_I^{n+1} \right. \\ & \left. - [K^v] \{\Delta T_v\}_I^{n+1} - [K^e] \{\Delta T\}_I^{n+1} - [K^{se}] \{\Delta y_s\}_I^{n+1} \right\} \end{aligned} \quad (4.50)$$

onde

$$[D]_{ij} = \begin{cases} \int_{\Omega_e} \mu \left(2 + \frac{\lambda}{\mu} \right) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega + \int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} d\Omega, & \text{(sem soma em } i) \\ \text{se } i = j, \text{ sendo } \begin{cases} i = 1 \rightarrow k = 2, 3 \\ i = 2 \rightarrow k = 1, 3 \\ i = 3 \rightarrow k = 1, 2 \end{cases} \\ \int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega_e} \lambda \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega, & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (4.51)$$

$$\begin{aligned} [E]_i = \int_{\Omega_e} & \left[\mu ([\Phi] \{u_i\}^n) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} + \mu ([\Phi] \{u_k\}^n) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \right. \\ & \left. + \lambda ([\Phi] \{u_k\}^n) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \right] d\Omega \end{aligned} \quad (4.52)$$

$$[E^*]_i = [E]_i + \int_{\Omega_e} \left[\mu \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{u_j\}^n + \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} \{u_i\}^n \right) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_j} [\Phi] \right. \\ \left. + \lambda \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{u_k\}^n \right) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_j} [\Phi] \right] d\Omega \quad (4.53)$$

$$[K^v] = \int_{\Omega_e} \eta_v \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \quad (4.54)$$

$$[K^e] = \int_{\Omega_e} \eta \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \quad (4.55)$$

$$[K^s] = \int_{\Omega_e} D_s ([\Phi] \{\rho\}^n) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \quad (4.56)$$

$$[K^{sv}] = \int_{\Omega_e} h_{v,s} D_s ([\Phi] \{\rho\}^n) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \quad (4.57)$$

$$[K^{se}] = \int_{\Omega_e} h_s D_s ([\Phi] \{\rho\}^n) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \quad (4.58)$$

$$\{g^s\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T D_s ([\Phi] \{\rho\}^n) \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{y_s\} \right) n_i d\Gamma \quad (4.59)$$

$$\{g_j^u\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left[\mu \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{u_j\}^n + \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} \{u_i\}^n \right) + \lambda \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{u_k\}^n \right) \delta_{ij} \right] n_i d\Gamma \quad (4.60)$$

$$\{g^v\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left[\eta_v \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{T_v\} \right) + h_{v,s} D_s ([\Phi] \{\rho\}^n) \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{y_s\} \right) \right] n_i d\Gamma \quad (4.61)$$

$$\{g^e\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left\{ \eta_v \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{T_v\} \right) + \eta \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{T\} \right) + h_s D_s ([\Phi] \{\rho\}^n) \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{y_s\} \right) \right\} \\ + ([\Phi] \{u_j\}^n) \left[\mu \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{u_j\}^n + \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} \{u_i\}^n \right) + \lambda \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{u_k\}^n \right) \delta_{ij} \right] n_i d\Gamma \quad (4.62)$$

4.4 Esquema de difusividade artificial

Em problemas envolvendo escoamentos compressíveis, aparecem fortes discontinuidades (ondas de choque). A solução através do esquema de Taylor-Galerkin para esses pro-

blemas gera fortes oscilações ao redor dos choques. Várias técnicas computacionais foram desenvolvidas para tentar evitar tais oscilações. No presente trabalho, emprega-se o método de *difusividade artificial*, descrito a seguir [Burbridge, 1999].

Uma vez obtidos os incrementos $\{\Delta U\}^{n+1}$, os valores das variáveis para o tempo $(n+1)\Delta t$ ficam:

$$\{U\}^{n+1} = \{U\}^n + \{\Delta U\}^{n+1} \quad (4.63)$$

O método de difusividade artificial consiste em adicionar termos dissipativos que simulem a ação da difusividade nas proximidades das discontinuidades. Desta forma,

$$\{U_S\}^{n+1} = \{U\}^{n+1} + [M_D]^{-1} \{D\}^n \quad (4.64)$$

onde $\{U_S\}^{n+1}$ é o vetor de variáveis suavizadas e $\{D\}^n$ é o vetor de amortecimento numérico, definido da seguinte forma:

$$\{D\}^n = \sum_e \{C_e C_{AF} S_e ([M] - [M_D])_e \{U\}_e^n\} \quad (4.65)$$

onde C_{AF} é o coeficiente de amortecimento fictício, definido pelo usuário, C_e é o número de Courant local, dado por

$$C_e = \frac{\Delta t}{\Delta t_e} \quad (4.66)$$

S_e é a média dos valores nodais do sensor de pressões, calculada pela seguinte expressão:

$$S_e = \frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 s_N \quad (4.67)$$

onde s_N são os valores do sensor de pressões em cada um dos nós do elemento, extraídos do vetor global $\{s\}^n$, definido como

$$\{s\}^n = \frac{\sum_e |([M] - [M_D])_e \{p\}_e^n|}{\sum_e [|([M] - [M_D])_e \{p\}_e^n|]} \quad (4.68)$$

Para as espécies químicas, é utilizada a pressão parcial correspondente à espécie s , da seguinte forma:

$$\{s_s\}^n = \frac{\sum_e |([M] - [M_D])_e \{p_s\}_e^n|}{\sum_e [|([M] - [M_D])_e \{p_s\}_e^n|]} \quad (4.69)$$

Capítulo 5

Integração Explícita das Matrizes de Elemento

5.1 Elementos isoparamétricos hexaédricos de oito nós

Neste trabalho, é utilizado o elemento hexaédrico trilinear de oito nós — que pode ser observado na Figura 5.1 —, empregando-se as funções de interpolação clássicas para expandir as variáveis do problema.

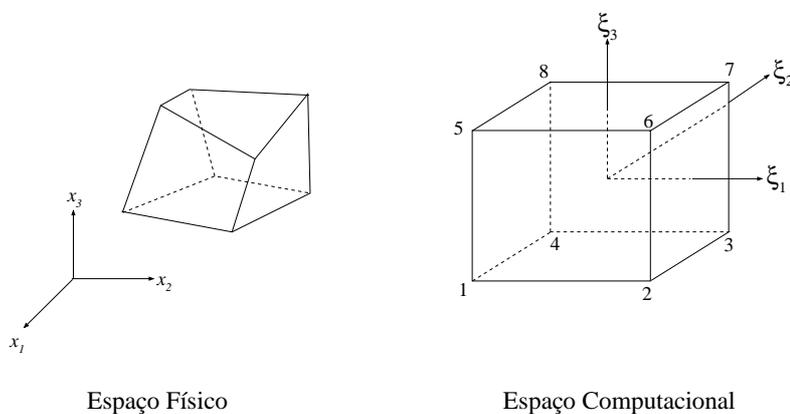


Figura 5.1 – Espaços físico e computacional do elemento isoparamétrico de 8 nós.

As funções de interpolação são dadas pela seguinte expressão:

$$\Phi_N = \frac{1}{8} [1 + \xi_{1N}\xi_1] [1 + \xi_{2N}\xi_2] [1 + \xi_{3N}\xi_3] \quad (5.1)$$

onde o índice N indica o número do nó local, que varia de 1 a 8. Portanto, ξ_{1N} , ξ_{2N} e ξ_{3N} são

as coordenadas naturais do nó N e são valores conhecidos e fixos que podem ser agrupados nos seguintes arranjos:

$$\begin{aligned}\{\xi_1\}^T &= \left\{ -1 \quad 1 \quad 1 \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad -1 \right\} \\ \{\xi_2\}^T &= \left\{ -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \right\} \\ \{\xi_3\}^T &= \left\{ -1 \quad -1 \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \right\}\end{aligned}\tag{5.2}$$

Observe-se que a expressão (5.1) está escrita em forma indicial e não matricial. As funções assim obtidas compõem a matriz linha descrita na seguinte expressão:

$$[\Phi] = \left[\Phi_1 \quad \Phi_2 \quad \Phi_3 \quad \Phi_4 \quad \Phi_5 \quad \Phi_6 \quad \Phi_7 \quad \Phi_8 \right]\tag{5.3}$$

Como já foi mencionado anteriormente, todas as variáveis são interpoladas da seguinte forma:

$$f = [\Phi] \{f\}\tag{5.4}$$

ou, de maneira equivalente:

$$f = \sum_{N=1}^8 \Phi_N f_N\tag{5.5}$$

isto é, o produto escalar da matriz de funções de interpolação e o vetor contendo os valores nodais de uma determinada variável de campo ou de um produto de variáveis de campo. As expressões (5.4) e (5.5) são equivalentes, sendo que a primeira foi escrita em forma matricial e a segunda em forma indicial. Como pode ser observado, para os subíndices nodais a forma indicial aqui adotada não segue a convenção de Einstein, a qual continua sendo utilizada para os subíndices que indicam componentes espaciais.

Pelo fato de se tratar de um elemento isoparamétrico, a geometria do elementos pode ser interpolada da mesma forma que as variáveis, a partir dos valores nodais das coordenadas espaciais, da seguinte maneira:

$$x_i = [\Phi] \{x_i\}\tag{5.6}$$

$$x_i = \sum_{N=1}^8 \Phi_N x_{iN}\tag{5.7}$$

5.2 Transformação do domínio de integração

As matrizes em nível de elemento, já definidas, foram expressas em termos das funções de interpolação e suas derivadas. Genericamente, pode-se escrever:

$$\int_{\Omega_e} f \left([\Phi], \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \right) d\Omega \quad (5.8)$$

Entretanto, o domínio de integração deve ser transformado do espaço físico para o espaço computacional, transformando a expressão genérica acima na seguinte expressão (também genérica):

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 I(\xi_1, \xi_2, \xi_3) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (5.9)$$

Para isto, as derivadas das funções de interpolação com respeito às coordenadas espaciais devem ser expressas em termos de derivadas com respeito às coordenadas naturais.

Da expressão (5.1), sabe-se que

$$\Phi_N = \Phi_N(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \quad (5.10)$$

e da expressão (5.7), que

$$x_i = x_i(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \quad (5.11)$$

Pela regra da cadeia, tem-se

$$\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_j} = \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \quad (5.12)$$

ou, em forma matricial,

$$\frac{\partial [\Phi]}{\partial \xi_j} = \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \quad (5.13)$$

Desenvolvendo a equação acima para os subscritos espaciais i e j , segundo a convenção da soma de Einstein, tem-se

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial [\Phi]}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial [\Phi]}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial [\Phi]}{\partial \xi_3} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_1} \\ \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_2} \\ \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_3} \end{Bmatrix} \quad (5.14)$$

onde a matriz contendo as derivadas $\partial x_j / \partial \xi_i$ é a *matriz jacobiana* da transformação, ou seja,

$$\mathbf{J} = [J_{ij}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

Observando-se que $J_{ij} = \partial x_j / \partial \xi_i = f(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ e que $x_i = [\Phi] \{x_i\}$, tem-se

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial [\Phi] \{x_1\}}{\partial \xi_1} & \frac{\partial [\Phi] \{x_2\}}{\partial \xi_1} & \frac{\partial [\Phi] \{x_3\}}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial [\Phi] \{x_1\}}{\partial \xi_2} & \frac{\partial [\Phi] \{x_2\}}{\partial \xi_2} & \frac{\partial [\Phi] \{x_3\}}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial [\Phi] \{x_1\}}{\partial \xi_3} & \frac{\partial [\Phi] \{x_2\}}{\partial \xi_3} & \frac{\partial [\Phi] \{x_3\}}{\partial \xi_3} \end{bmatrix} \quad (5.16)$$

ou

$$J_{ij} = \frac{\partial [\Phi] \{x_j\}}{\partial \xi_i} \quad (5.17)$$

Entretanto, as derivadas $\partial [\Phi] / \partial x_i$ devem ser expressas em função das derivadas $\partial [\Phi] / \partial \xi_j$, de modo que é necessário inverter o sistema das expressões (5.12), (5.13) e (5.14), da seguinte forma:

$$\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} = J_{ij}^{-1} \frac{\partial [\Phi]}{\partial \xi_j} \quad (5.18)$$

onde a inversa da matriz jacobiana pode ser obtida através da seguinte expressão:

$$\mathbf{J}^{-1} = \frac{\overline{\mathbf{J}}}{|\mathbf{J}|} \quad (5.19)$$

onde $\overline{\mathbf{J}}$ é a transposta da matriz adjunta de \mathbf{J} e $|\mathbf{J}|$ é o determinante da matriz jacobiana.

Para transformar as integrais da forma (5.8) em integrais da forma (5.9), define-se o diferencial de volume em termos das coordenadas naturais, da seguinte forma:

$$d\Omega = |\mathbf{J}| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (5.20)$$

Uma vez obtidas as integrais da forma (5.9), deve-se aplicar algum método (analítico ou numérico) para efetuar a integração de tais expressões.

5.3 Integração analítica das matrizes de elemento

As integrais do tipo (5.9) podem ser resolvidas tanto numericamente quanto analiticamente. Normalmente, em elementos finitos, aplica-se a quadratura gaussiana com polinômios

de Legendre (quadratura de Gauss-Legendre). Entretanto, para reduzir o tempo computacional e a memória necessária para a simulação (além de facilitar a otimização do código computacional), emprega-se a integração analítica.

No presente trabalho, utiliza-se apenas um ponto de integração no centro do elemento ($\xi_1 = \xi_2 = \xi_3 = 0$), onde a matriz jacobiana e seu determinante são calculados. A integração será exata para casos de elementos de faces paralelas e terá boa aproximação para elementos pouco distorcidos [Burbridge, 1999].

Segundo a expressão (5.17), calculando as derivadas $\partial[\Phi]/\partial\xi_i$ no centro do elemento, obtém-se a seguinte matriz jacobiana:

$$\mathbf{J}(0) = \begin{bmatrix} J_{11}(0) & J_{12}(0) & J_{13}(0) \\ J_{21}(0) & J_{22}(0) & J_{23}(0) \\ J_{31}(0) & J_{32}(0) & J_{33}(0) \end{bmatrix} = \frac{1}{8} \begin{bmatrix} \{\xi_1\}^T \{x_1\} & \{\xi_1\}^T \{x_2\} & \{\xi_1\}^T \{x_3\} \\ \{\xi_2\}^T \{x_1\} & \{\xi_2\}^T \{x_2\} & \{\xi_2\}^T \{x_3\} \\ \{\xi_3\}^T \{x_1\} & \{\xi_3\}^T \{x_2\} & \{\xi_3\}^T \{x_3\} \end{bmatrix} \quad (5.21)$$

A sua inversa pode ser escrita da seguinte forma:

$$\mathbf{J}^{-1}(0) = \frac{\overline{\overline{\mathbf{J}(0)}}}{|\mathbf{J}(0)|} \quad (5.22)$$

onde a transposta da matriz adjunta é dada por:

$$\overline{\overline{\mathbf{J}(0)}} = \begin{bmatrix} [J_{22}J_{33} - J_{23}J_{32}]_{(0)} & [J_{13}J_{32} - J_{12}J_{33}]_{(0)} & [J_{12}J_{23} - J_{13}J_{22}]_{(0)} \\ [J_{23}J_{31} - J_{21}J_{33}]_{(0)} & [J_{11}J_{33} - J_{13}J_{31}]_{(0)} & [J_{31}J_{21} - J_{11}J_{23}]_{(0)} \\ [J_{21}J_{32} - J_{22}J_{31}]_{(0)} & [J_{12}J_{31} - J_{11}J_{32}]_{(0)} & [J_{11}J_{22} - J_{12}J_{21}]_{(0)} \end{bmatrix} \quad (5.23)$$

Integrando analiticamente as matrizes de elemento apresentadas no capítulo anterior, tem-se:

• Matriz [M]:

$$M_{MN} = \int_{\Omega_e} \Phi_M \Phi_N d\Omega = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \Phi_M \Phi_N |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (5.24)$$

Integrando, obtém-se

$$M_{MN} = \frac{\Omega_e}{64} \left[1 + \frac{1}{3}\xi_{1M}\xi_{1N} \right] \left[1 + \frac{1}{3}\xi_{2M}\xi_{2N} \right] \left[1 + \frac{1}{3}\xi_{3M}\xi_{3N} \right] \quad (5.25)$$

para a matriz diagonalizada:

$$M_{D_{MN}} = \frac{\Omega_e}{8} \delta_{MN} \quad (5.26)$$

onde δ_{MN} é o delta de Kronecker.

- Matrizes $[B]_i$:

$$B_{iMN} = \int_{\Omega_e} \Phi_M \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \Phi_M \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_i} J_{ij}^{-1} |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (5.27)$$

integrando

$$B_{iMN} = \frac{1}{8} \left\{ \overline{\overline{J_{i1}(0)}} \xi_{1N} \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{2M} \xi_{2N} \right] \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{3M} \xi_{3N} \right] \right. \\ \left. + \overline{\overline{J_{i2}(0)}} \xi_{2N} \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{1M} \xi_{1N} \right] \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{3M} \xi_{3N} \right] \right. \\ \left. + \overline{\overline{J_{i3}(0)}} \xi_{3N} \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{1M} \xi_{1N} \right] \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{2M} \xi_{2N} \right] \right\} \quad (5.28)$$

- Matrizes $[C]_i$:

$$C_{iMN} = \int_{\Omega_e} \left(\sum_{M=1}^8 \Phi_M u_{kM}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_k} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega \\ = \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 u_{kM}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_j} J_{kj}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} J_{ih}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (5.29)$$

Na expressão acima, o fator escalar entre parênteses $(\sum_{M=1}^8 \Phi_M u_{kM}^n)$ foi simplificado tomando as funções de interpolação no centro do elemento. Isto equivale a tomar a média dos valores nodais que, por ser definido para todo o elemento, pode sair da integral. A perda de exatidão será menor quanto menor for o tamanho do elemento [Burbridge, 1999].

Integrando, obtém-se

$$C_{iMN} = \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 u_{kM}^n \right) \frac{1}{\Omega_e} a_{kiMN} \quad (5.30)$$

onde

$$a_{kiMN} = \overline{\overline{J_{kj}(0) J_{ih}(0) A_{jhMN}}} \quad (5.31)$$

e

$$A_{ijMN} = \begin{cases} \xi_{iM} \xi_{jN} \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{kM} \xi_{kN} \right], & \text{(sem soma em } k) \\ \text{para } i \neq j, \text{ sendo: } \begin{cases} \text{se } i = 1 \text{ e } j = 2 \rightarrow k = 3 \\ \text{se } i = 2 \text{ e } j = 3 \rightarrow k = 1 \\ \text{se } i = 4 \text{ e } j = 1 \rightarrow k = 2 \end{cases} \\ \xi_{iM} \xi_{jN} \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{kM} \xi_{kN} \right] \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{hM} \xi_{hN} \right], & \text{(sem soma em } k \text{ e } h) \\ \text{para } i = j, \text{ sendo: } \begin{cases} \text{se } i = j = 1 \rightarrow k = 2 \text{ e } h = 3 \\ \text{se } i = j = 2 \rightarrow k = 1 \text{ e } h = 3 \\ \text{se } i = j = 3 \rightarrow k = 1 \text{ e } h = 2 \end{cases} \end{cases} \quad (5.32)$$

- Matrizes $[D]_{ij}$:

No caso de $i \neq j$, tem-se

$$\begin{aligned}
D_{ijMN} &= \int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega_e} \lambda \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega \\
&= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mu \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} J_{ik}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} J_{jh}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \\
&\quad + \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \lambda \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} J_{jk}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} J_{ih}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (5.33)
\end{aligned}$$

Deve-se notar que $D_{ijMN} = D_{jiMN}$ ou, em forma matricial, $[D]_{ij} = [D]_{ji}^T$. Integrando a expressão acima, obtém-se

$$D_{ijMN} = \mu \frac{1}{\Omega_e} a_{ijMN} + \lambda \frac{1}{\Omega_e} a_{jiMN} \quad (5.34)$$

Para o caso $i = j$, condicionando-se que

$$\text{se } i = 1 \rightarrow k = 2, 3, \quad \text{se } i = 2 \rightarrow k = 1, 3, \quad \text{se } i = 3 \rightarrow k = 1, 2, \quad \text{e } l, h = 1, 2, 3$$

tem-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
D_{iiMN} &= \int_{\Omega_e} (2\mu + \lambda) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega + \int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_k} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_k} d\Omega \\
&= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (2\mu + \lambda) \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_l} J_{il}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} J_{ih}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \\
&\quad + \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mu \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_l} J_{kl}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} J_{kh}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3, \quad (\text{sem soma em } i) \quad (5.35)
\end{aligned}$$

Integrando a expressão acima, obtém-se

$$D_{iiMN} = (2\mu + \lambda) \frac{1}{\Omega_e} a_{iiMN} + \mu \frac{1}{\Omega_e} a_{kkMN}, \quad (\text{sem soma em } i) \quad (5.36)$$

- Matrizes $[K^v]$, $[K^e]$, $[K^s]$, $[K^{sv}]$ e $[K^{se}]$:

$$\begin{aligned}
K_{MN} &= \int_{\Omega_e} C^K \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega \\
&= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 C^K \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_j} J_{ij}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} J_{ih}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (5.37)
\end{aligned}$$

Integrando, tem-se

$$K_{MN} = C^K \frac{1}{\Omega_e} a_{ii MN} \quad (5.38)$$

onde a constante C^K da equação acima deve ser substituída pela constante correspondente.

• Matrizes $[E]_i$:

$$\begin{aligned} E_{i MN} &= \int_{\Omega_e} \mu \left(\sum_{M=1}^8 \Phi_M u_{i M}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega_e} \mu \left(\sum_{M=1}^8 \Phi_M u_{j M}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_j} d\Omega \\ &\quad + \int_{\Omega_e} \lambda \left(\sum_{M=1}^8 \Phi_M u_{j M}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega \\ &= \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 u_{i M}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mu \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} J_{jk}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} J_{jh}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \\ &\quad + \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 u_{j M}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mu \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} J_{ik}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} J_{jh}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \\ &\quad + \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 u_{j M}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \lambda \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} J_{jk}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} J_{ih}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (5.39) \end{aligned}$$

Integrando, tem-se

$$\begin{aligned} E_{i MN} &= \mu \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 u_{i M}^n \right) \frac{1}{\Omega_e} a_{ii MN} + \mu \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 u_{j M}^n \right) \frac{1}{\Omega_e} a_{ij MN} \\ &\quad + \lambda \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 u_{j M}^n \right) \frac{1}{\Omega_e} a_{ji MN} \quad (5.40) \end{aligned}$$

• Matrizes $[E^*]_i$:

$$\begin{aligned} E_{i MN}^* &= E_{i MN} + \int_{\Omega_e} \mu \left(\sum_{N=1}^8 \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} u_{j N}^n + \sum_{N=1}^8 \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_j} u_{i N}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \Phi_N d\Omega \\ &\quad + \int_{\Omega_e} \lambda \left(\sum_{N=1}^8 \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} u_{k N}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \Phi_N d\Omega \\ &= \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{k N} J_{ik}^{-1} u_{j N}^n + \sum_{N=1}^8 \xi_{k N} J_{jk}^{-1} u_{i N}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mu \frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_h} \Phi_N J_{jh}^{-1} |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \\ &\quad + \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{k N} J_{lk}^{-1} u_{l N}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \lambda \frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_h} \Phi_N J_{ih}^{-1} |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 + E_{i MN} \quad (5.41) \end{aligned}$$

Integrando, obtém-se

$$E_{iMN}^* = E_{iMN} + \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} J_{ik}^{-1} u_{jN}^n + \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} J_{jk}^{-1} u_{iN}^n \right) B_{jNM} + \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} J_{lk}^{-1} u_{lN}^n \right) B_{iNM} \quad (5.42)$$

Na expressão acima, a matriz $[B]_i$ aparece com os subíndices nodais invertidos, indicando a transposição da matriz.

5.4 Tratamento das integrais de contorno

As integrais de contorno, apresentadas no capítulo anterior, são as seguintes:

$$\{f\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left(u_k^n \frac{\partial F_i^n}{\partial x_i} \right) n_k d\Gamma \quad (5.43)$$

$$\{g^s\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left(\rho D_s \frac{\partial y_s^n}{\partial x_j} \right) n_i d\Gamma \quad (5.44)$$

$$\{g_j^u\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \tau_{ij}^n n_i d\Gamma \quad (5.45)$$

$$\{g^v\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left(\eta_v \frac{\partial T^n}{\partial x_i} \right) n_i d\Gamma + \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left(h_{v,s} \rho D_s \frac{\partial y_s^n}{\partial x_j} \right) n_i d\Gamma \quad (5.46)$$

$$\begin{aligned} \{g^e\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T (\tau_{ij}^n u_j^n) n_i d\Gamma + \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left(\eta_v \frac{\partial T^n}{\partial x_i} \right) n_i d\Gamma \\ + \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left(\eta \frac{\partial T^n}{\partial x_i} \right) n_i d\Gamma + \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left(h_s \rho D_s \frac{\partial y_s^n}{\partial x_j} \right) n_i d\Gamma \end{aligned} \quad (5.47)$$

onde n_i são as componentes do vetor normal ao contorno (apontando para fora) e $[\Phi^*]$ é a matriz de funções de interpolação da face de contorno no elemento, que pode ser expressa por

$$\Phi_N^* = \begin{cases} 0, & \text{se } N \text{ não é nó de contorno} \\ \frac{1}{4} [1 + \eta_1 \eta_{1N}] [1 + \eta_2 \eta_{2N}], & \text{se } N \text{ é nó de contorno} \end{cases} \quad (5.48)$$

onde η_1 e η_2 são as coordenadas na face de contorno do elemento.

No capítulo anterior, foram expressos os vetores equivalentes às ações de contorno, uma vez que as variáveis foram substituídas pelas correspondentes variáveis aproximadas.

Dessa forma, tem-se

$$\{f\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T ([\Phi] \{u_k\}^n) n_k \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{F_i\}^n \right) d\Gamma \quad (5.49)$$

$$\{g^s\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T D_s ([\Phi] \{\rho\}^n) \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{y_s\} \right) n_i d\Gamma \quad (5.50)$$

$$\{g_j^u\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left[\mu \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{u_j\}^n + \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} \{u_i\}^n \right) + \lambda \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{u_k\}^n \right) \delta_{ij} \right] n_i d\Gamma \quad (5.51)$$

$$\{g^v\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left[\eta_v \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{T_v\} \right) + h_{v,s} D_s ([\Phi] \{\rho\}^n) \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{y_s\} \right) \right] n_i d\Gamma \quad (5.52)$$

$$\begin{aligned} \{g^e\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T & \left\{ \eta_v \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{T_v\} \right) + \eta \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{T\} \right) + h_s D_s ([\Phi] \{\rho\}^n) \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{y_s\} \right) \right. \\ & \left. + ([\Phi] \{u_j\}^n) \left[\mu \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{u_j\}^n + \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} \{u_i\}^n \right) + \lambda \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{u_k\}^n \right) \delta_{ij} \right] \right\} n_i d\Gamma \end{aligned} \quad (5.53)$$

Entretanto, para simplificar a integração destes termos, tomam-se os valores médios das ações atuantes no elemento como sendo o valor atuante na face de contorno. Como existem quatro nós pertencentes à face de contorno (para cada elemento), essa ação resulta distribuída uniformemente entre estes quatro nós.

Assim, obtém-se os respectivos vetores equivalentes às ações de contorno, da seguinte forma:

$$\{f\}^n = \frac{1}{4} (u_k^n|_0 n_k) \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} J_{ik}^{-1} F_{iN}^n \right) \{U\} \int_{\Gamma_e} d\Gamma \quad (5.54)$$

$$\{g^s\}^n = \frac{1}{4} D_s (\rho^n|_0 n_k) \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} J_{ik}^{-1} y_N^n \right) \{U\} \int_{\Gamma_e} d\Gamma \quad (5.55)$$

$$\{g_j^u\}^n = \frac{1}{4} \tau_{ij}^n|_0 n_i \{U\} \int_{\Gamma_e} d\Gamma \quad (5.56)$$

$$\begin{aligned} \{g^v\}^n = \frac{1}{4} \left[\eta_v \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} J_{ik}^{-1} T_{vN}^n \right) n_i \right. \\ \left. + h_{v,s} D_s (\rho^n|_0 n_k) \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} J_{ik}^{-1} y_N^n \right) \right] \{U\} \int_{\Gamma_e} d\Gamma \end{aligned} \quad (5.57)$$

$$\begin{aligned}
\{g^e\}^n &= \left(u_j^n|_0 \tau_{ij}^n|_0 n_i \right) \{U\} \int_{\Gamma_e} d\Gamma + \frac{1}{4} \left[\eta_v \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} J_{ik}^{-1} T_{vN}^n \right) n_i \right. \\
&\quad \left. + \eta \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} J_{ik}^{-1} T_N^n \right) n_i + h_s D_s (\rho^n|_0 n_k) \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} J_{ik}^{-1} y_N^n \right) \right] \{U\} \int_{\Gamma_e} d\Gamma \quad (5.58)
\end{aligned}$$

onde

$$\rho^n|_0 = \frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 \rho_N^n \quad (5.59)$$

$$u_j^n|_0 = \frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 u_{jN}^n \quad (5.60)$$

$$\tau_{ij}^n|_0 = \mu \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} J_{ik}^{-1} u_{jN}^n + \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} J_{jk}^{-1} u_{iN}^n \right) + \lambda \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} J_{lk}^{-1} u_{lN}^n \right) \quad (5.61)$$

e

$$\mathcal{U}_N = \begin{cases} 1, & \text{se } N \text{ é nó de contorno} \\ 0, & \text{se } N \text{ não é nó de contorno} \end{cases} \quad (5.62)$$

Capítulo 6

Aspectos Computacionais

6.1 Introdução

Neste capítulo, apresenta-se algumas características do código computacional desenvolvido durante este trabalho para realizar as análises numéricas de problemas de escoamentos hipersônicos. Partiu-se do código em Fortran90 desenvolvido por Burbridge [1999] para problemas supersônicos e acrescentou-se as equações de conservação e os termos exigidos pela formulação de problemas hipersônicos. Este código já estava otimizado para supercomputadores vetoriais Cray (especificamente, para o Supercomputador Cray T90 do Centro Nacional de Supercomputação da Universidade Federal do Rio Grande do Sul — CESUP/UFRGS) e as modificações introduzidas nesse código durante o presente trabalho foram feitas de maneira a beneficiar-se de tal otimização.

6.2 Condição de estabilidade

Uma vez montadas as equações de elemento, o sistema resultante tem as características de um sistema *explícito*, uma vez que tais equações não ficam acopladas [Burbridge, 1999]. Os esquemas explícitos são *condicionalmente estáveis* e devem, portanto, cumprir alguma condição de estabilidade que limite o valor do incremento de tempo utilizado. No caso do esquema explícito de Taylor-Galerkin para escoamentos compressíveis, a condição de estabilidade é a condição CFL (*Courant-Friedrichs-Lewy*), que é um importante critério de estabilidade para equações hiperbólicas [Anderson, 1995] e pode ser expressa da seguinte forma:

$$\Delta t_e = \beta \frac{L_e}{a + \sqrt{u_i u_i}} \quad (6.1)$$

onde Δt_e é o incremento de tempo crítico do elemento, L_e é um comprimento característico do elemento, a é a velocidade do som e β é um coeficiente de segurança definido pelo usuário. O incremento de tempo crítico adotado é o menor incremento de todos os elementos.

6.3 Estado estacionário

O encerramento do processo de solução ocorre quando atinge-se o estado estacionário (ou em um tempo definido previamente pelo usuário). Tal estado é determinado através do resíduo temporal médio da massa específica da mistura, da seguinte forma [Burbridge, 1999]:

$$R_\rho^{n+1} = \sqrt{\sum_{N_{\text{nós}}} |\rho^{n+1} - \rho^n|^2} \quad (6.2)$$

onde $N_{\text{nós}}$ é o número de nós da malha. Quando o resíduo acima passa a ser menor que um determinado valor (ou tolerância) definido pelo usuário, então o processo é considerado estacionário e interrompido imediatamente (ou após um número de passos de tempo previamente definido).

6.4 Convergência do processo iterativo

A convergência do processo iterativo é realizada analisando-se a média das variáveis, através das seguintes expressões:

$$r_{I+1}^\rho = \frac{\sqrt{\sum_{N_{\text{nós}}} |\rho_{I+1} - \rho_I|^2}}{\sqrt{\sum_{N_{\text{nós}}} \rho_I^2}} \quad (6.3)$$

$$r_{I+1}^{\rho u} = \frac{\sqrt{\sum_{N_{\text{nós}}} |\rho u_{i I+1} - \rho u_{i I}| |\rho u_{i I+1} - \rho u_{i I}|}}{\sqrt{\sum_{N_{\text{nós}}} \rho u_{i I} \rho u_{i I}}} \quad (6.4)$$

$$r_{I+1}^{\rho e} = \frac{\sqrt{\sum_{N_{\text{nós}}} |\rho e_{I+1} - \rho e_I|^2}}{\sqrt{\sum_{N_{\text{nós}}} \rho e_I^2}} \quad (6.5)$$

A convergência do processo iterativo é atingida quando os valores das expressões acima passa a ser menor que um determinado valor (ou tolerância) definido pelo usuário.

6.5 Condição de contorno de deslizamento

Em escoamentos não viscosos (do tipo Euler), a condição de não deslizamento nos contornos sólidos é desprezada, o que significa que nestes contornos a velocidade não é obrigatoriamente nula — apenas a componente normal à superfície é forçosamente nula (*slip condition*). Dessa forma, a velocidade nos nós de contorno sólido é calculada da mesma forma que os nós do interior do domínio. Posteriormente, força-se que a velocidade seja tangente ao contorno anulando-se a sua componente normal. Isto é obtido através da aplicação do chamado *Processo de Ortogonalização de Gram-Schmidt*, apresentado a seguir [Boldrini *et al.*, 1986; Lay, 1999].

Supõe-se conhecidos os vetores normais, \mathbf{n} , aos nós de contorno sólido, como é mostrado na Figura 6.1 para um nó N localizado em um plano π .

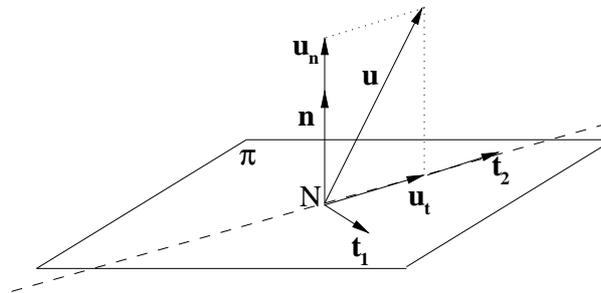


Figura 6.1 – Vetores utilizados para a aplicação de condição de contorno de deslizamento.

A partir do vetor normal \mathbf{n} e do vetor velocidade \mathbf{u} , determina-se um novo vetor (\mathbf{t}_1), normal a ambos, através do seguinte produto vetorial:

$$\mathbf{t}_1 = \mathbf{u} \times \mathbf{n} \quad (6.6)$$

Em seguida, cria-se um novo vetor, \mathbf{t}_2 , normal a \mathbf{n} e a \mathbf{t}_1 , também a partir de um produto vetorial:

$$\mathbf{t}_2 = \mathbf{n} \times \mathbf{t}_1 \quad (6.7)$$

sendo que o vetor \mathbf{t}_2 posiciona-se sobre a mesma linha que a projeção tangencial do vetor velocidade \mathbf{u} (\mathbf{u}_t), como pode ser observado na Figura 6.1. Finalmente, a projeção tangencial do vetor velocidade \mathbf{u} , é dada por

$$\mathbf{u}_t = \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{t}_2}{\mathbf{t}_2 \cdot \mathbf{t}_2} \mathbf{t}_2 \quad (6.8)$$

Dessa forma, o vetor velocidade, \mathbf{u} , é substituído por sua componente tangencial, \mathbf{u}_t .

6.6 Cálculo da temperatura vibracional

O sistema de equações apresentado no capítulo 3 calcula apenas as variáveis contidas no vetor de incógnitas \mathbf{U} :

$$\mathbf{U} = \left\{ \begin{array}{c} \rho \\ \rho_s \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ \rho e_v \\ \rho e \end{array} \right\} \quad (6.9)$$

Como pode ser observado acima, as temperaturas (T e T_v) não estão incluídas entre as incógnitas, devendo, portanto, ser calculadas a partir das expressões para energia (apresentadas na subseção 3.4.4)

$$e_v = c_s e_{v,s}, \quad (6.10)$$

$$e = \frac{1}{2} u_j u_j + c_s (e_{t,s} + e_{v,s} + e_{o,s}) \quad (6.11)$$

onde

$$e_{t,s} = \begin{cases} \frac{3}{2} R_s T, & s = \text{átomo} \\ \frac{5}{2} R_s T, & s = \text{molécula} \end{cases} \quad (6.12)$$

$$e_{v,s} = \begin{cases} 0, & s = \text{átomo} \\ \frac{R_s \theta_{v,s}}{\exp(\theta_{v,s}/T_v) - 1}, & s = \text{molécula} \end{cases} \quad (6.13)$$

A temperatura de translação (T) pode ser obtida diretamente da expressão (6.11). A temperatura vibracional (T_v), por outro lado, necessita de um esquema de procura de raiz (*root finding*) para ser obtida. O esquema empregado no presente trabalho é o Método de Newton-Raphson (ou, simplesmente, método de Newton), descrito a seguir [Press *et al.*, 1992; Faires & Burden, 1998].

Parte-se de uma série de Taylor:

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0) f'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!} f'' + \dots \quad (6.14)$$

onde $f'(x_0) = \partial f(x_0) / \partial x$ e $f''(x_0) = \partial^2 f(x_0) / \partial x^2$. Desprezando todos os termos de segunda ordem ou superiores, tem-se

$$f(x) \cong f(x_0) + (x - x_0) f'(x_0) \quad (6.15)$$

Deseja-se o valor de x quando a função $f(x)$ seja igual a zero, ou seja,

$$0 \cong f(x_0) + (x - x_0) f'(x_0) \quad (6.16)$$

Reordenando, tem-se

$$x - x_0 \cong -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = \delta \quad (6.17)$$

ou, em forma iterativa,

$$x^{n+1} - x^n \cong -\frac{f(x)^n}{f'(x)^n} = \delta^{n+1} \quad (6.18)$$

Na equação acima, x^{n+1} representa uma melhor estimativa da raiz e pode substituir x^n para calcular-se uma nova e ainda melhor estimativa. Este procedimento é realizado até que δ^{n+1} cumpra um critério definido pelo usuário.

No presente trabalho, $x = T_v$ e $f(x) = f(T_v)$. A função $f(T_v)$ e sua derivada são dadas por

$$f(T_v) = \sum_{molec.} \rho_s e_{v,s} - \rho e_v \quad (6.19)$$

$$\frac{\partial f(T_v)}{\partial T_v} = \rho_s \frac{R_s \theta_{v,s} \exp(\theta_{v,s}/T_v)}{T_v^2 (\exp(\theta_{v,s}/T_v) - 1)^2} \quad (6.20)$$

lembrando que nos somatórios acima aparecem apenas as espécies moleculares (a energia vibracional das espécies atômicas é nula).

O valor inicial de T_v pode ser o valor do passo de tempo anterior, ou pode ser dado pelas expressões seguintes, sugeridas por Ait-Ali-Yahia & Habashi [1997], onde considera-se que todas as moléculas têm a mesma temperatura vibracional característica, $\bar{\theta}_v$, definida por

$$\bar{\theta}_v = \frac{\sum_{molec.} c_s \theta_{v,s}}{\sum_{molec.} c_s} \quad (6.21)$$

O chute inicial de T_v fica, então,

$$T_v^0 = \frac{\bar{\theta}_v}{\ln \left[1 + \frac{\bar{\theta}_v}{e_v} \sum_{molec.} c_s R_s \right]} \quad (6.22)$$

Capítulo 7

Aplicações

7.1 Escoamento de nitrogênio sobre meio cilindro

Analisa-se o escoamento hipersônico ($M_\infty = 6.13$), não difusivo, de nitrogênio parcialmente dissociado sobre meio cilindro de 1 polegada de raio, como pode ser visto esquematicamente na Figura 7.1.

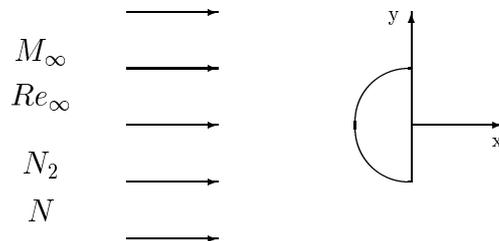


Figura 7.1 – Esquema de escoamento hipersônico de nitrogênio parcialmente dissociado sobre meio cilindro de 1 polegada (25.4 mm) de raio.

As condições da corrente-livre são as seguintes:

- $M_\infty = 6.13$
- $Re_\infty = 2.4 \times 10^4$
- $V_\infty = 5590 \text{ m/s}$
- $\rho_\infty = 5.349 \times 10^{-3} \text{ kg/m}^3$
- $T_\infty = T_{v_\infty} = 1833 \text{ K}$

- $p_\infty = 3124.0 \text{ Pa}$
- Fração mássica do nitrogênio atômico = $c_{N\infty} = 0.073$

Considera-se um escoamento laminar, estacionário, com reações químicas e não equilíbrio termo-químico. Por se tratar de um exemplo bidimensional, a malha é formada por apenas uma camada de elementos na direção do eixo do cilindro ($\Delta z = 0.005m$). Por simetria, apenas a metade superior do domínio é analisada. As únicas espécies presentes são os nitrogênios molecular e atômico. Para a solução deste problema através do código computacional desenvolvido no presente trabalho, as massas específicas das outras espécies (O_2 , NO e O) foram zeradas em todo o domínio. A superfície do cilindro é não catalítica. Este problema foi analisado experimentalmente por Hornung [1972].

A malha de elementos finitos é formada por 3162 nós e 1500 elementos hexaédricos de 8 nós (apenas uma camada de elementos na direção z : $50 \times 30 \times 1$) e pode ser vista na Figura 7.2.

Nas Figuras 7.3 a 7.7 são apresentados os campos de distribuição de número de

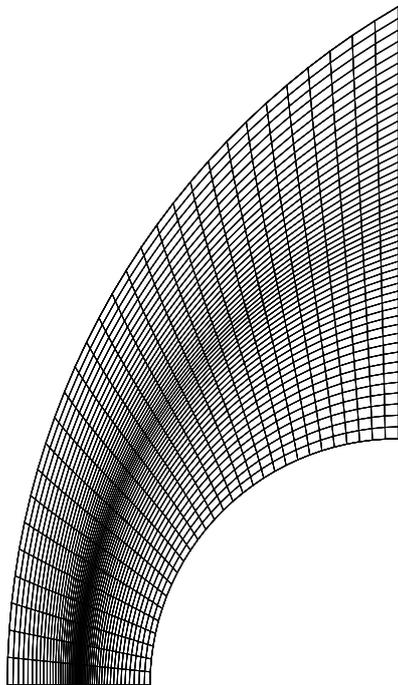


Figura 7.2 – Malha de elementos finitos utilizada para a análise do escoamento hipersônico (3162 nós e 1500 elementos).

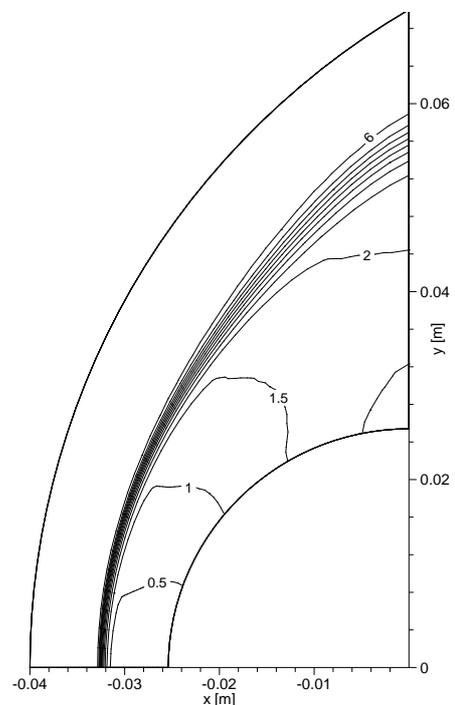


Figura 7.3 – Distribuição de número de Mach.

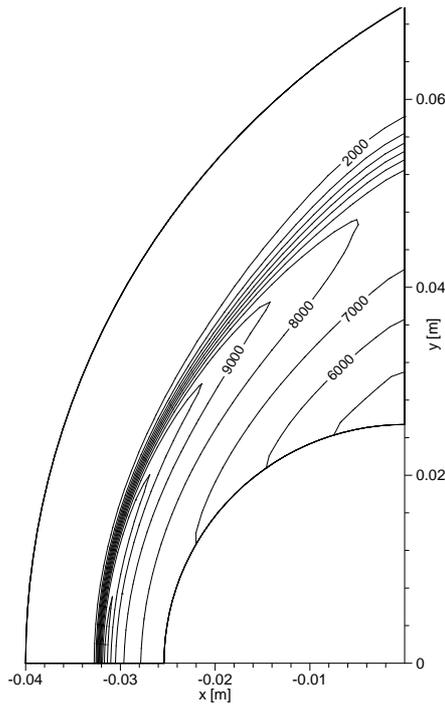


Figura 7.4 – Distribuição de temperatura translacional (valores em K).

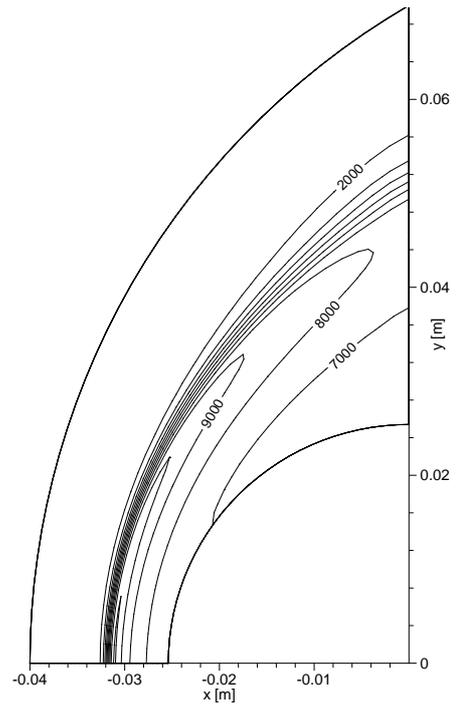


Figura 7.5 – Distribuição de temperatura vibracional (valores em K).

Mach, temperaturas translacional e vibracional, pressão e massa específica da mistura, respectivamente. Observa-se uma região de máxima temperatura logo após o choque, tanto para a temperatura translacional como para a temperatura vibracional. À medida que o fluido vai aproximando-se do cilindro, a temperatura vai diminuindo. Este fenômeno é explicado pelas reações químicas, uma vez que a dissociação de moléculas é endotérmica e provoca a redução da temperatura. As zonas de máxima pressão e massa específica da mistura ocorrem na região de estagnação.

Os campos de distribuição de frações mássicas dos nitrogênios molecular e atômico são apresentados nas Figuras 7.8 e 7.9, respectivamente. As duas distribuições de fração mássica são idênticas na forma, pois a soma das duas tem que dar obrigatoriamente igual à unidade em todo o domínio.

Na Figura 7.10 são apresentados os gráficos de temperaturas ao longo da linha de estagnação, incluindo a temperatura obtida para o caso de um gás perfeito, para comparação. É importante observar, a partir dessa figura, que a posição do choque calculado no presente trabalho coincide com a posição experimental obtida por Hornung [1972]. Os gráficos de temperatura translacional e vibracional para o caso de não equilíbrio termo-químico apresentam um comportamento ligeiramente diferente entre eles, sendo que a temperatura vibracional

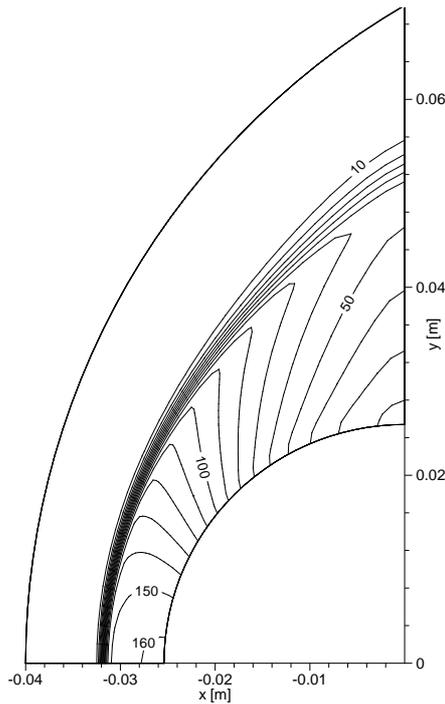


Figura 7.6 – Distribuição de pressão (valores em kPa).

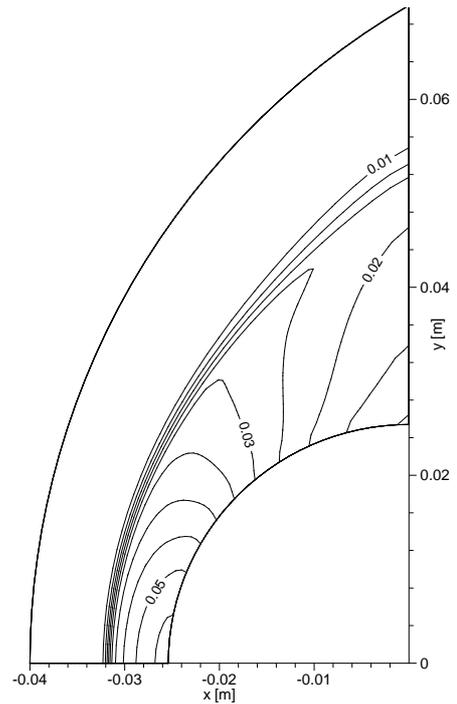


Figura 7.7 – Distribuição de massa específica da mistura (valores em kg/m^3).

possui um menor valor de pico e responde ao choque mais a jusante (apenas as espécies moleculares possuem energia vibracional e elas necessitam de um certo número de colisões para ficarem vibracionalmente excitadas).

O gráfico da temperatura para um gás perfeito tem um comportamento bem diferente do gráfico das temperaturas obtidas para o caso de não equilíbrio termo-químico. Para um gás perfeito, a temperatura aumenta mais que no caso de não equilíbrio e permanece praticamente constante (≈ 15000 K) entre o choque e a superfície do cilindro. Já no caso de não equilíbrio, as temperaturas sofrem um aumento significativamente menor que no caso de gás perfeito, apresentando um pico logo atrás do choque e diminuindo à medida que se aproximam da superfície do cilindro. Um dos efeitos deste comportamento é a grande diferença de temperatura na superfície do cilindro entre os dois casos: 15000 K para o caso de gás perfeito e menos de 8000 K para o caso de não equilíbrio. Tal efeito é altamente benéfico, uma vez que a exigência térmica exercida sobre os materiais que compõem a superfície de um veículo que viaja em regimes hipersônicos pode ser drasticamente reduzida.

Outra diferença marcante entre os casos de gás perfeito e de não equilíbrio é a distância do choque. Para um gás perfeito, esta distância é muito maior do que a do caso de não equilíbrio. Este fenômeno pode ser explicado pelo fato da massa específica da mistura

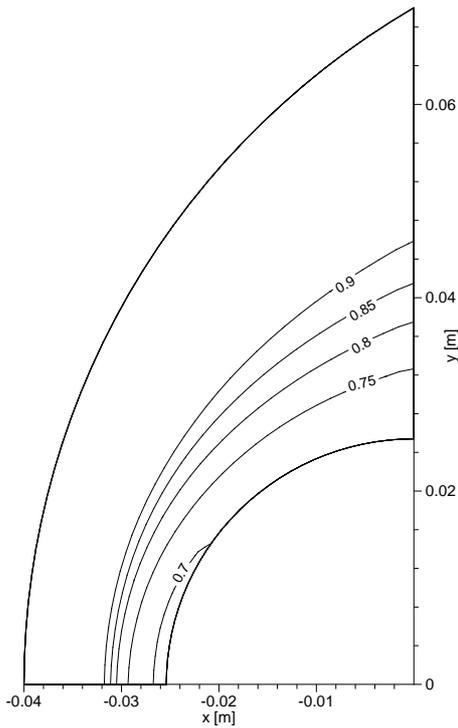


Figura 7.8 – Distribuição de fração mássica de N_2 .

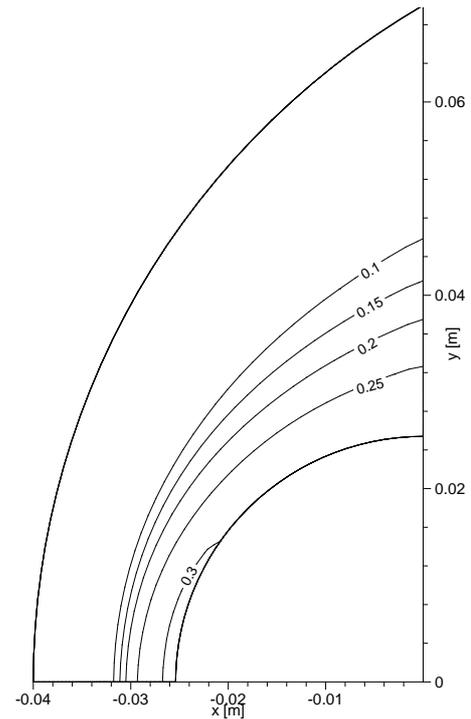


Figura 7.9 – Distribuição de fração mássica de N .

do caso de não equilíbrio ser maior entre o choque e a superfície do cilindro do que no caso do gás perfeito, como pode ser observado na Figura 7.11.

Na Figura 7.12 são apresentados os gráficos de fração mássica das espécies químicas (nitrogênios molecular e atômico) ao longo da linha de estagnação. Nota-se que as espécies químicas têm apenas uma pequena variação em sua composição junto ao choque e começam a ter a sua composição significativamente alterada após uma certa distância dele, pois as reações químicas exigem um grande número de colisões para ocorrerem. Além disso, os gradientes das frações mássicas não são tão intensos como os das temperaturas. A dissociação do nitrogênio molecular acontece gradativamente em direção ao cilindro, até atingir a sua fração mássica mínima junto à superfície dele. Por outro lado, o nitrogênio atômico tem um comportamento oposto, onde a sua fração mássica é máxima junto à superfície do cilindro.

Os parâmetros empregados no código para este exemplo foram: coeficiente de amortecimento fictício $C_{AF} = 2$, coeficiente de segurança, $\beta = 0.3$, limite de resíduo do processo iterativo = 10^{-3} e limite de resíduo do processo temporal = 10^{-6} , cuja evolução em função dos passos de tempo pode ser observada na Figura 7.13. O tempo total de execução foi de 2.22 horas no Supercomputador CRAY T90 do CESUP/UFRGS com um desempenho

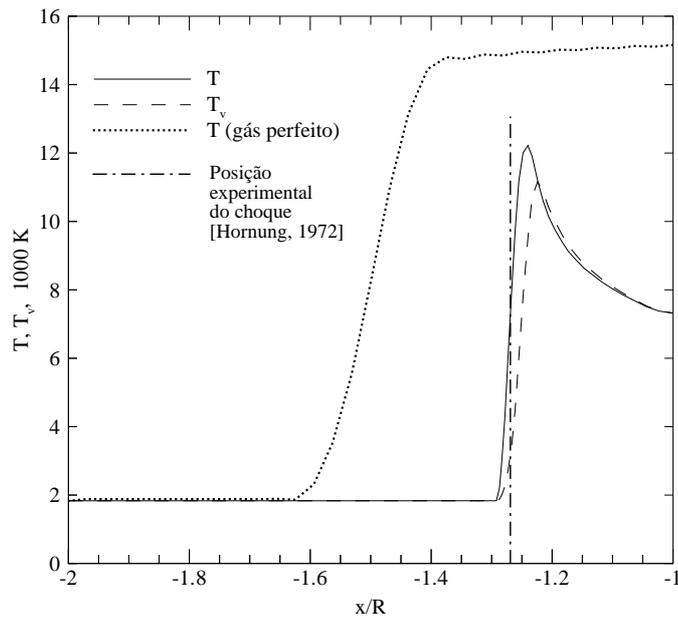


Figura 7.10 – Comparação entre os gráficos de temperatura para os casos de não equilíbrio e gás perfeito na linha de estagnação.

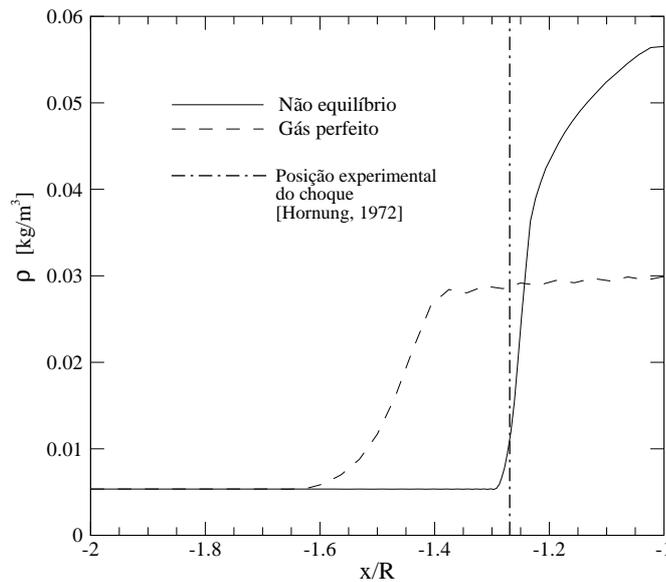


Figura 7.11 – Comparação entre os gráficos de massa específica da mistura para os casos de não equilíbrio e gás perfeito na linha de estagnação.

médio de 408 MFLOPS* e uma memória de 4 Mw (32 Mb). Comentários em relação ao baixo desempenho do código, em MFLOPS, serão realizados no próximo capítulo.

*MFLOPS = Milhões de Operações de Ponto Flutuante por Segundo.

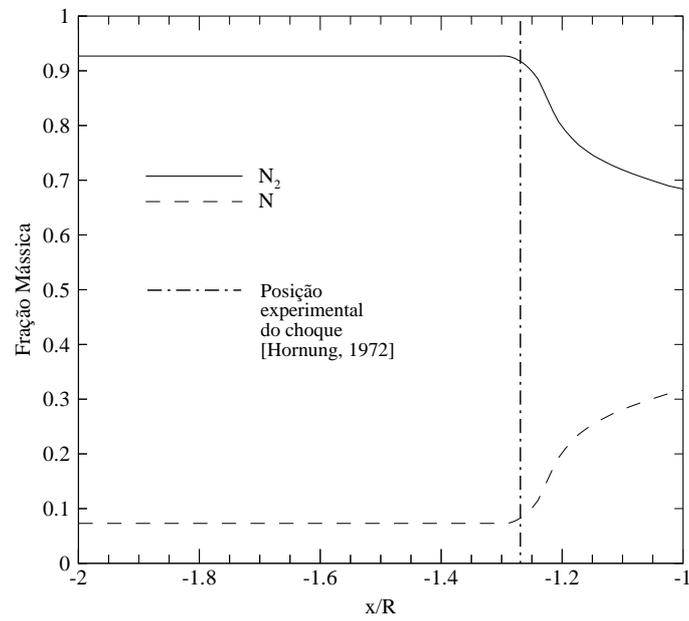


Figura 7.12 – Gráficos de frações mássicas na linha de estagnação.

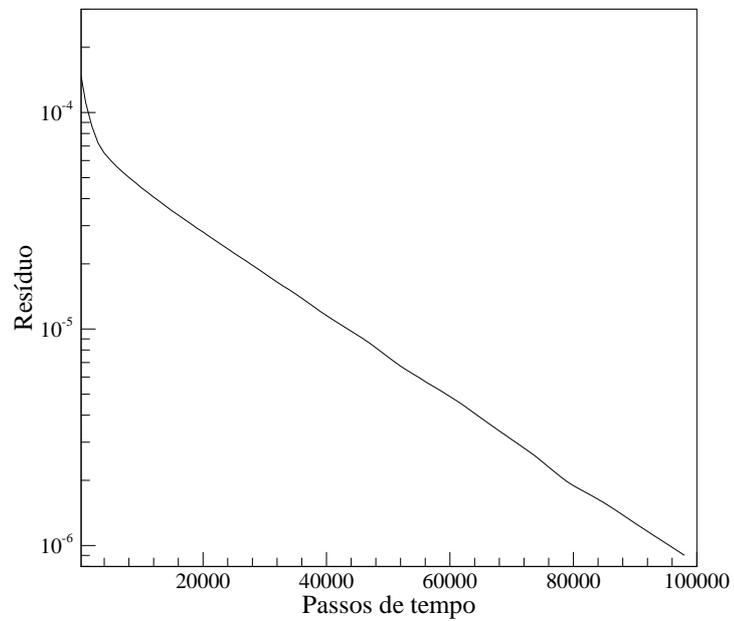


Figura 7.13 – Variação do resíduo em função do número de passos de tempo.

7.2 Escoamento de ar sobre meio cilindro

O escoamento hipersônico ($M_\infty = 12.7$), não difusivo, de ar (5 espécies) sobre meio cilindro de raio 50 mm é analisado, como pode ser observado esquematicamente na Figura 7.14.

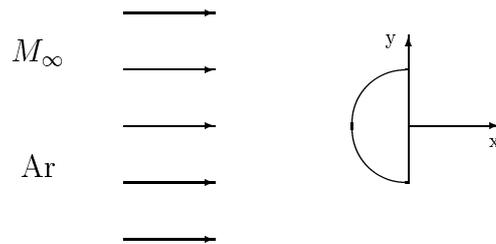


Figura 7.14 – Esquema do escoamento hipersônico de ar sobre meio cilindro de 50 mm de raio.

As condições da corrente-livre são as seguintes:

- $M_\infty = 12.7$
- $V_\infty = 3570 \text{ m/s}$
- $T_\infty = T v_\infty = 196 \text{ K}$
- $\rho_\infty = 1.6 \times 10^{-3} \text{ kg/m}^3$
- Fração mássica do nitrogênio molecular = $c_{N_{2\infty}} = 0.767$
- Fração mássica do oxigênio molecular = $c_{O_{2\infty}} = 0.233$
- Fração mássica das outras espécies = 0

Considera-se um escoamento laminar, estacionário, com reações químicas e não equilíbrio termo-químico. Por se tratar de um exemplo bidimensional, a malha é formada por apenas uma camada de elementos na direção do eixo do cilindro ($\Delta z = 0.01m$). Por simetria, apenas a metade superior do domínio é analisada. As espécies presentes são aquelas que compõem o modelo de 5 espécies para o ar (N_2 , O_2 , NO , N e O). A superfície do cilindro é não catalítica.

A malha de elementos finitos é formada por 3162 nós e 1500 elementos hexaédricos de 8 nós (apenas uma camada de elementos na direção z : $50 \times 30 \times 1$) e pode ser vista na Figura 7.15.

Nas Figuras 7.16 a 7.20 são apresentados os campos de distribuição de número de Mach, temperaturas translacional e vibracional, pressão e massa específica da mistura, respectivamente. A temperatura translacional apresenta um pico de valor máximo logo atrás da onda de choque, na região de estagnação, reduzindo o seu valor gradativamente até chegar à superfície do cilindro. Já a temperatura vibracional não apresenta um pico bem definido e seu valor máximo é quase junto à superfície do cilindro, também na região de estagnação. A exemplo do que aconteceu no caso anterior, os valores máximos de pressão e massa específica da mistura ocorrem na região de estagnação.

Os campos de distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O) são apresentados na Figura 7.21. A concentração de nitrogênio é praticamente nula no domínio do problema, com uma fração mássica máxima de $2.8 \cdot 10^{-4}$ na região de estagnação. O nitrogênio e o oxigênio moleculares apresentam valores de fração mássica

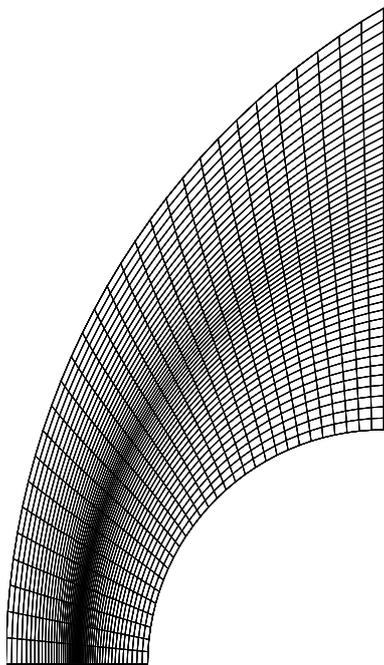


Figura 7.15 – Malha de elementos finitos utilizada para análise do escoamento hipersônico (3162 nós e 1500 elementos).

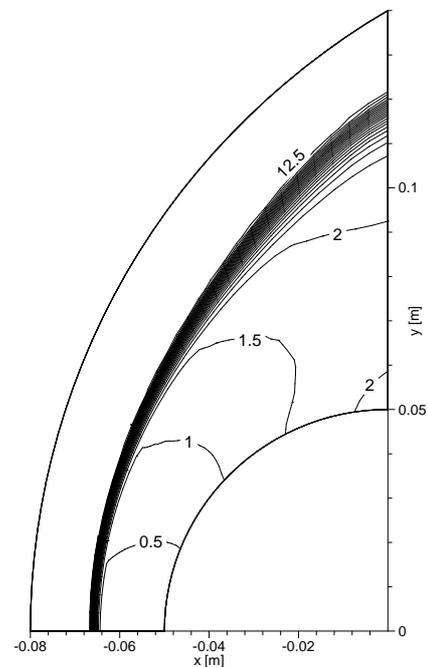


Figura 7.16 – Distribuição de número de Mach.

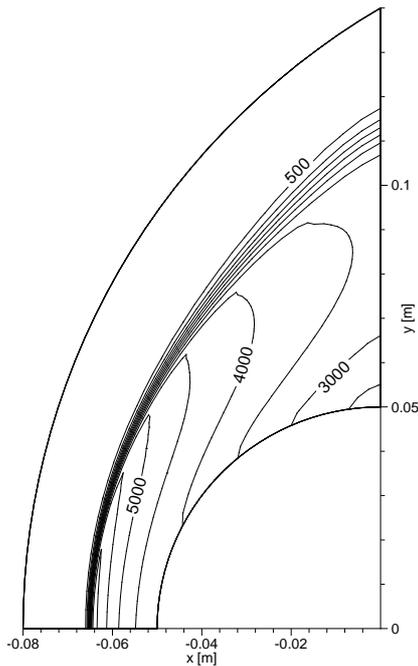


Figura 7.17 – Distribuição de temperatura translacional (valores em K).

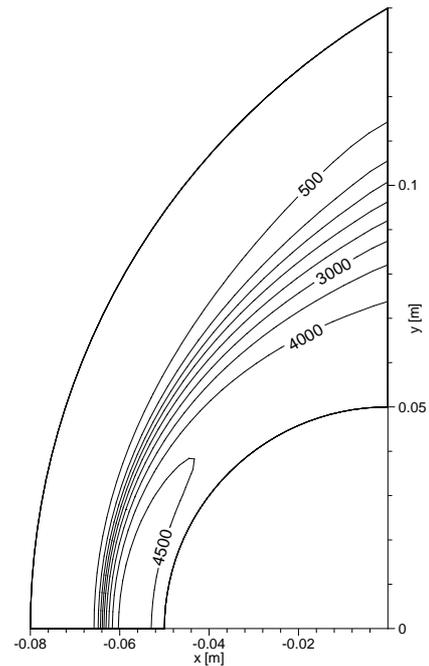


Figura 7.18 – Distribuição de temperatura vibracional (valores em K).

máximos próximo à região da onda de choque, diminuindo em direção à superfície do cilindro, apresentando valores mínimos na região de estagnação. As espécies atômicas e o monóxido de nitrogênio, NO , têm um comportamento oposto, apresentando valores máximos de frações mássicas na região de estagnação.

Na Figura 7.22 são apresentados os gráficos de número de Mach e de temperaturas translacional e vibracional ao longo da linha de estagnação. Ao contrário do que acontece no caso anterior (apenas com nitrogênio), os perfis de temperatura são bem distintos entre si, uma vez que o gráfico de temperatura vibracional não apresenta um pico logo após o choque, como acontece com a temperatura translacional, e responde ao choque ainda mais a jusante. Este fenômeno pode ser explicado pela presença de um maior número de espécies moleculares (3 espécies: N_2 , O_2 e NO), o que exigiria uma quantidade maior de energia para excitar vibracionalmente o sistema.

Na Figura 7.23 são apresentados os gráficos de fração mássica das espécies químicas ao longo da linha de estagnação. A exemplo do que acontece no caso anterior, as espécies químicas sofrem o efeito do choque mais a jusante e apenas começam a ter a sua composição alterada após uma certa distância dele. Além disso, os gradientes das frações mássicas não são tão intensos como os das temperaturas, como no caso anterior. O nitrogênio molecular apre-

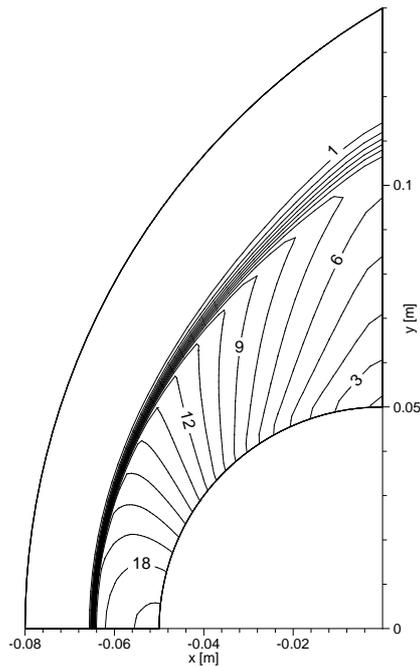


Figura 7.19 – Distribuição de pressão (valores em kPa).

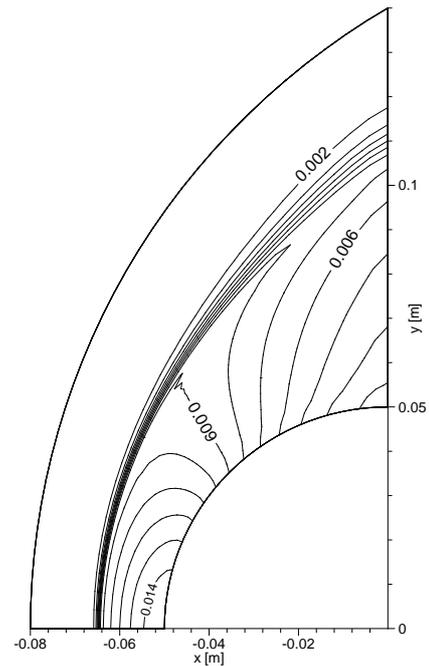


Figura 7.20 – Distribuição de massa específica da mistura (valores em kg/m^3).

senta apenas uma leve dissociação, que acontece gradativamente em direção ao cilindro, até atingir a sua fração mássica mínima junto à superfície dele. A fração mássica de nitrogênio atômico é praticamente nula e não chega a aparecer no gráfico, pois praticamente todo átomo de nitrogênio que é gerado acaba recombinando com o oxigênio atômico e formando NO . A dissociação do oxigênio molecular é mais intensa do que a do nitrogênio molecular, o que era esperado, uma vez que o oxigênio começa a dissociar-se em uma temperatura inferior ao do nitrogênio (tipicamente, para 1 atmosfera, o oxigênio começa a dissociar em torno de 2000 K enquanto o nitrogênio só começa ao redor dos 4000 K).

Uma comparação de resultados para o número de Mach na linha de estagnação obtidos para 3 densidades de malha diferentes (32x26x1, 50x30x1 e 120x120x1 elementos) é mostrada na Figura 7.24.

Os parâmetros empregados no código para este exemplo foram: coeficiente de amortecimento fictício $C_{AF} = 2$, coeficiente de segurança, $\beta = 0.3$, limite de resíduo do processo iterativo = 10^{-3} e limite de resíduo do processo temporal = 10^{-6} , cuja evolução em função dos passos de tempo pode ser observada na Figura 7.25. O tempo total de execução foi de 2.07 horas no Supercomputador CRAY T90 do CESUP/UFRGS com um desempenho médio de 275 MFLOPS e uma memória de 3.8 Mw (30.4 Mb).

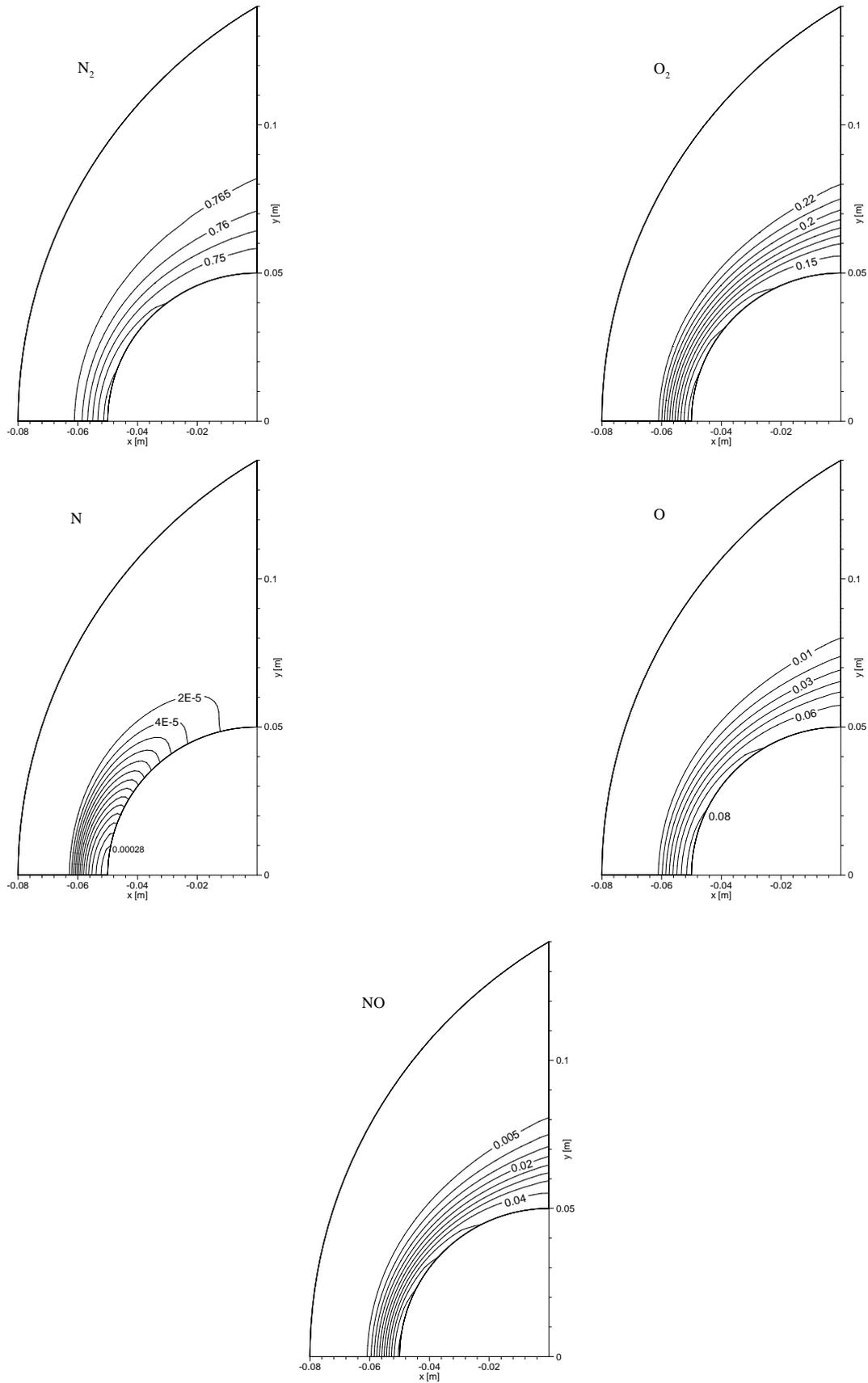


Figura 7.21 – Distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O).

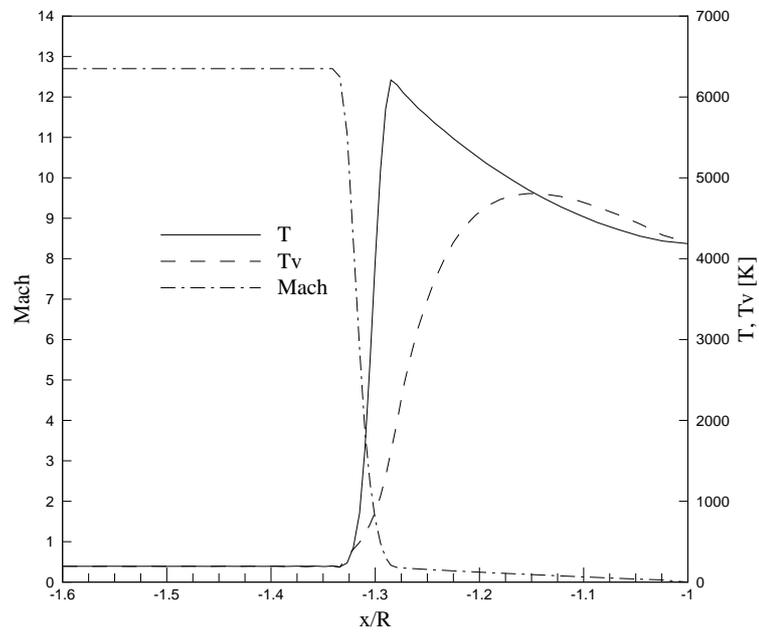


Figura 7.22 – Gráficos de número de Mach e temperaturas (em K) na linha de estagnação.

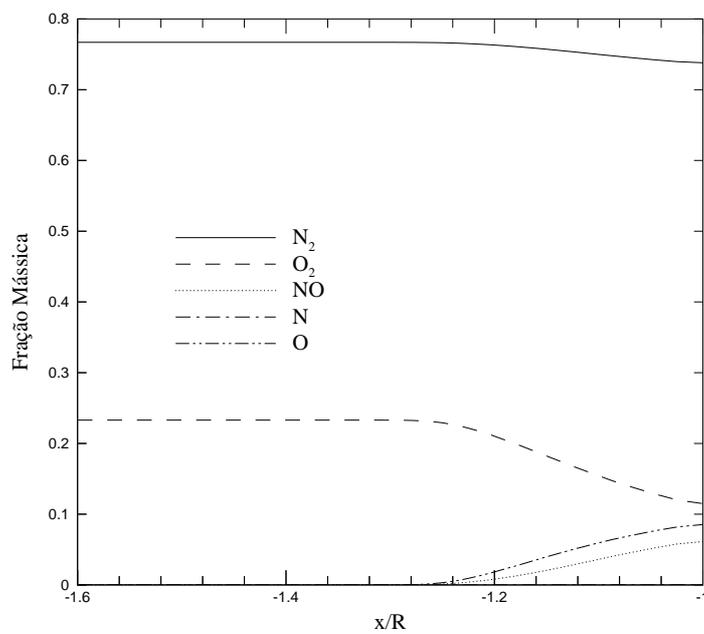


Figura 7.23 – Gráficos de frações mássicas para as 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O) na linha de estagnação.

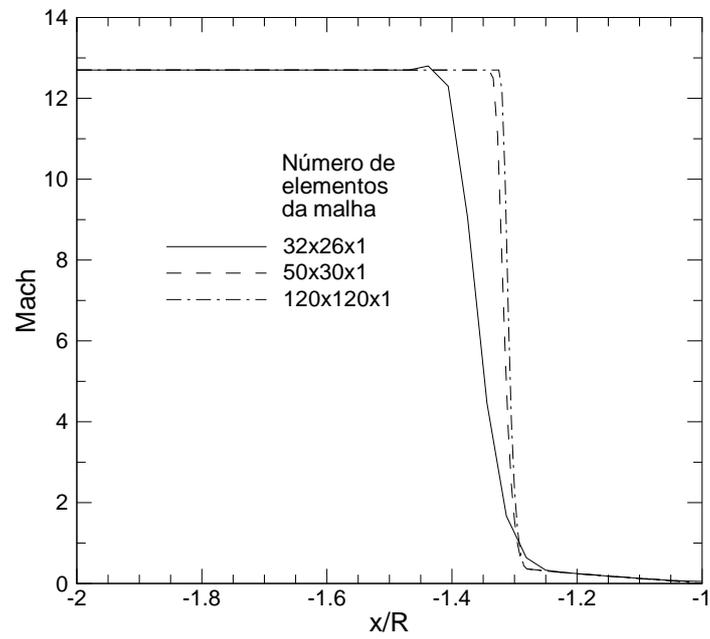


Figura 7.24 – Comparação do número de Mach na linha de estagnação para 3 densidades de malha diferentes.

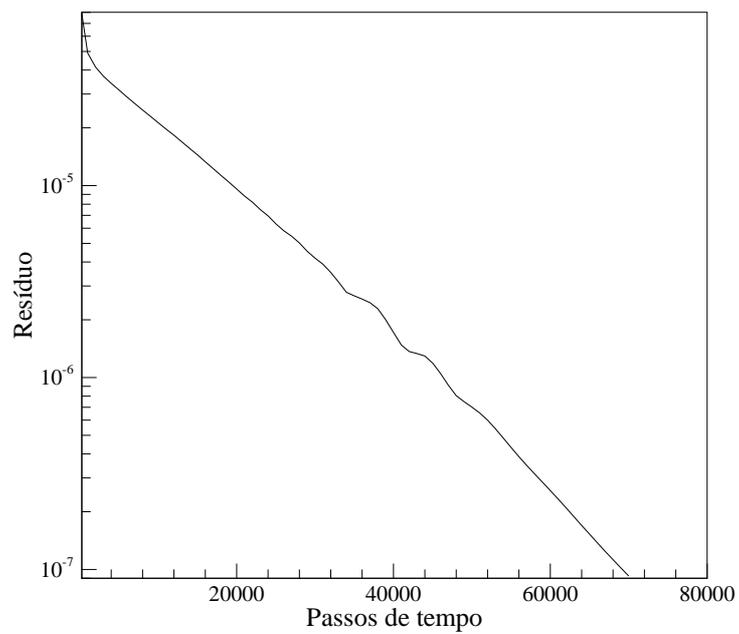


Figura 7.25 – Variação do resíduo em função do número de passos de tempo.

7.3 Escoamento de ar sobre meia elipse

O escoamento hipersônico ($M_\infty = 25$), não difusivo, de ar ao redor de meia elipse a uma altitude de 75 km é analisado. A forma da elipse é dada pela dimensão dos semi-eixos: $a = 6.0 \text{ cm}$ e $b = 1.5 \text{ cm}$. A geometria do problema pode ser observado esquematicamente na Figura 7.26.

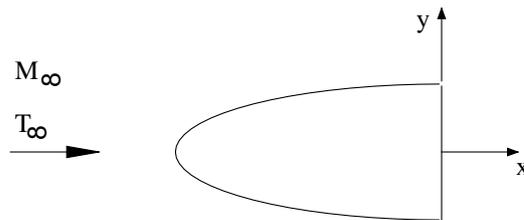


Figura 7.26 – Esquema do escoamento hipersônico ao redor de uma elipse.

As condições da corrente-livre são as seguintes:

- $M_\infty = 25$
- $V_\infty = 7250 \text{ m/s}$
- $T_\infty = 208.399 \text{ K}$
- $p_\infty = 2.388 \text{ Pa}$
- $\rho_\infty = 3.991 \times 10^{-5} \text{ kg/m}^3$
- Fração mássica do nitrogênio molecular = $c_{N_{2\infty}} = 0.767$
- Fração mássica do oxigênio molecular = $c_{O_{2\infty}} = 0.233$
- Fração mássica das outras espécies = 0

Considera-se um escoamento laminar, estacionário, não difusivo, com reações químicas e com equilíbrio térmico (apenas uma temperatura). Este problema foi analisado numericamente por Argyris *et al.* [1989, 1991]. Por simetria, a simulação é realizada apenas na parte superior do domínio. Por ser um problema bidimensional, apenas um elemento na direção z

é empregado ($\Delta z = 0.005$ m). A malha é formada por 7442 nós e 3600 elementos (60x60x1 elementos) e pode ser observada na Figura 7.27.

Nas Figuras 7.28 a 7.30 são apresentados os campos de distribuição de número de Mach, temperatura e pressão, respectivamente. A exemplo do que aconteceu nos casos anteriores, observa-se uma região de temperatura máxima logo após o choque, diminuindo os seus valores à medida que se aproxima da superfície da elipse. A pressão também reproduz o fenômeno dos casos anteriores, apresentando valores máximos na região de estagnação.

Os campos de distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O) são apresentados na Figura 7.31. Nota-se uma variação da fração mássica para o oxigênio (tanto molecular quanto atômico) maior do que para o nitrogênio (molecular e atômico). O monóxido de nitrogênio, NO , apresenta a menor variação, bem como os menores valores de fração mássica (é a espécie mais escassa do problema).

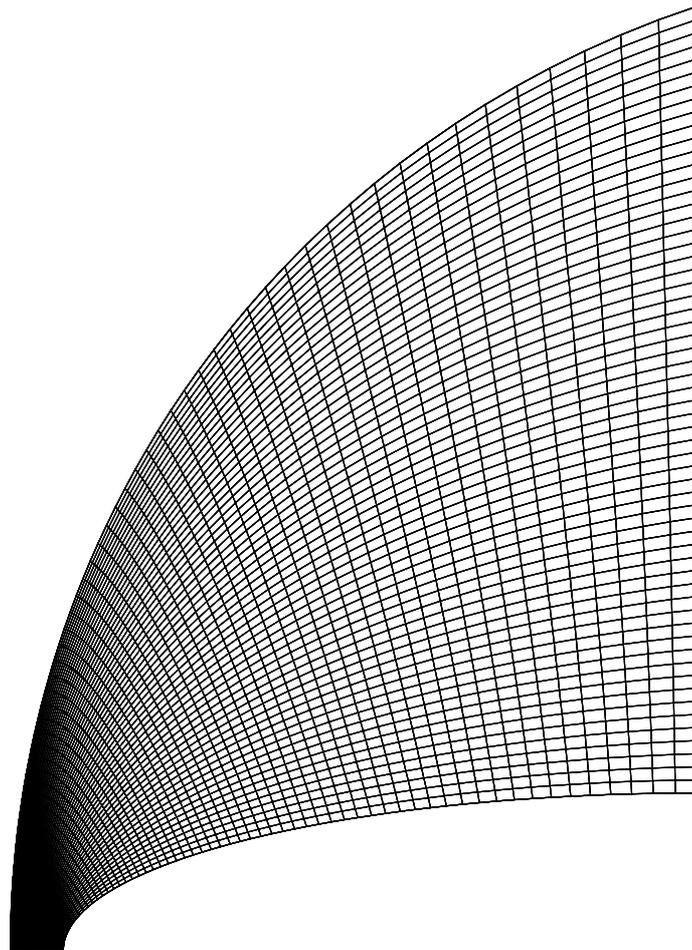


Figura 7.27 – Malha de elementos finitos formada por 7442 nós e 3600 elementos (apenas um elemento na direção z: 60x60x1).

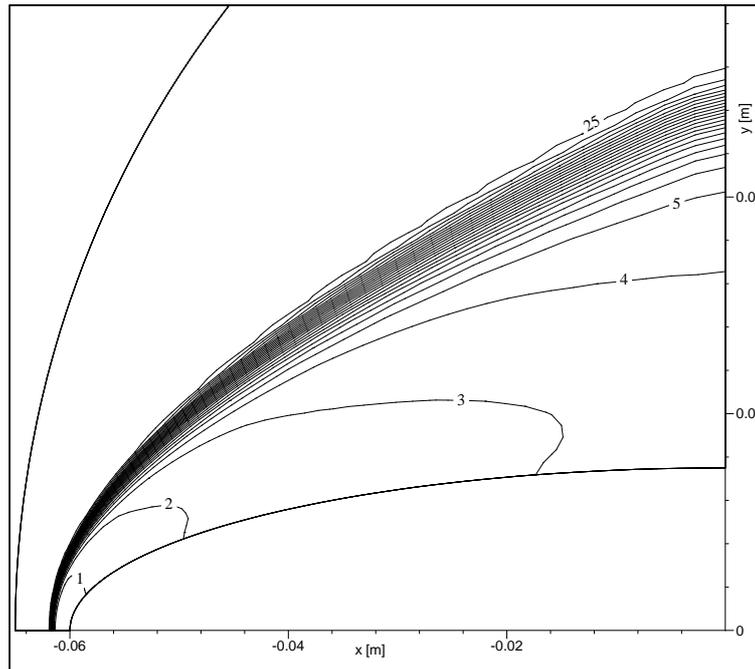


Figura 7.28 – Distribuição do número de Mach.

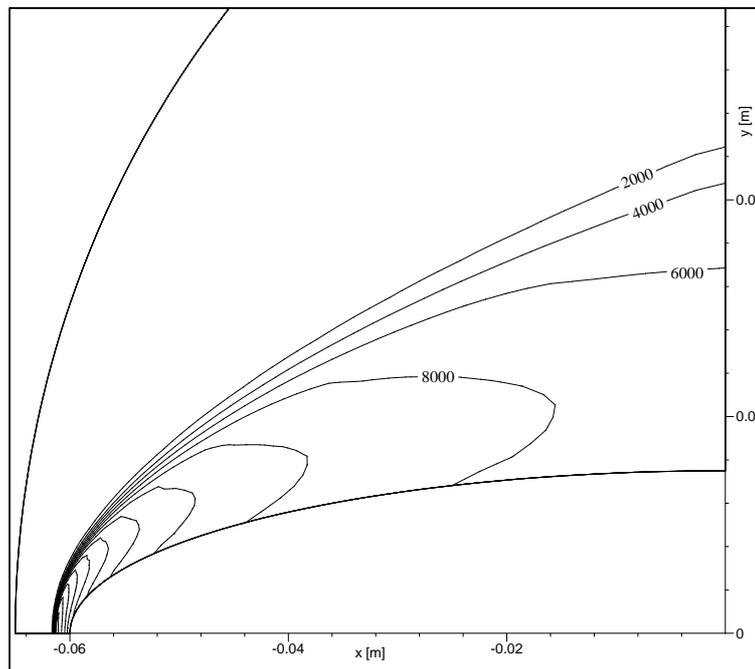


Figura 7.29 – Distribuição de temperatura (em K).

Nas Figuras 7.32 a 7.34 são apresentados os perfis de variação (em relação aos valores da corrente-livre) de temperatura, massa específica da mistura e pressão na linha de estagnação, respectivamente. Nessas figuras, os resultados obtidos pelo presente trabalho

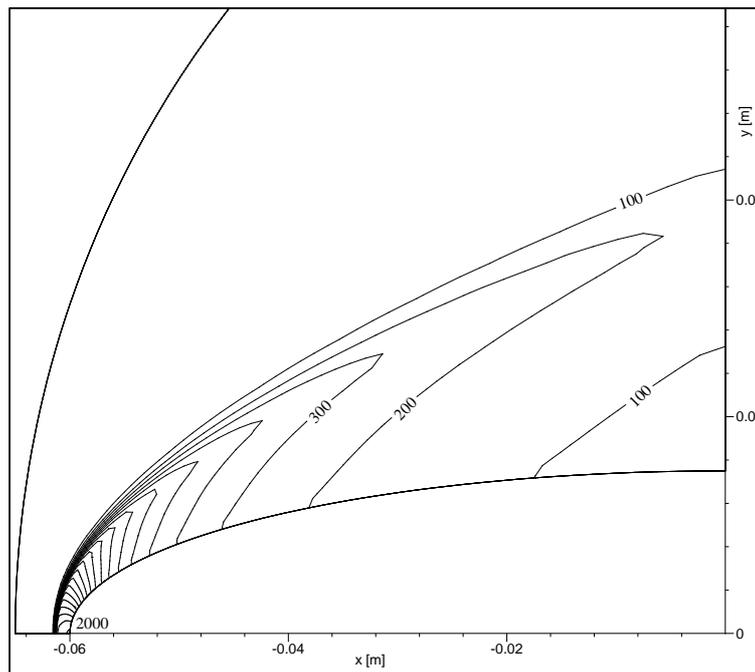


Figura 7.30 – Distribuição de pressão (em Pa).

são comparados com os obtidos por Argyris *et al.* [1991], onde pode ser observada uma boa aproximação de resultados para os três perfis, tanto em relação aos seus formatos quanto à posição da onda choque. Nota-se, ainda, uma grande variação dos valores destas variáveis ao longo da linha de estagnação. A temperatura sofre um aumento de aproximadamente 130 vezes, atingindo um pico logo atrás da onda de choque e diminuindo até atingir a superfície da elipse. A massa específica da mistura sofre um aumento de aproximadamente 6 vezes ao longo da onda de choque e permanece aumentando gradativamente até atingir a superfície da elipse, onde apresenta uma variação de aproximadamente 7,5 vezes. A pressão é a variável mais sensível à onda de choque, pois chega a aumentar 800 vezes, permanecendo praticamente constante entre o choque e a superfície da elipse.

Na Figura 7.35, as frações mássicas na linha de estagnação obtidas pelo presente trabalho são comparadas com as obtidas por Argyris *et al.* [1989], onde também nota-se uma boa aproximação de resultados, com exceção de uma pequena região junto à superfície da elipse (onde a referência apresenta uma dissociação mais acentuada do nitrogênio molecular). Nota-se que o oxigênio molecular é o primeiro a iniciar a dissociação, gerando os primeiros átomos de oxigênio. Um pouco depois começa a dissociação do nitrogênio molecular, gerando os primeiros átomos de nitrogênio. Este fenômeno é esperado, uma vez que o oxigênio

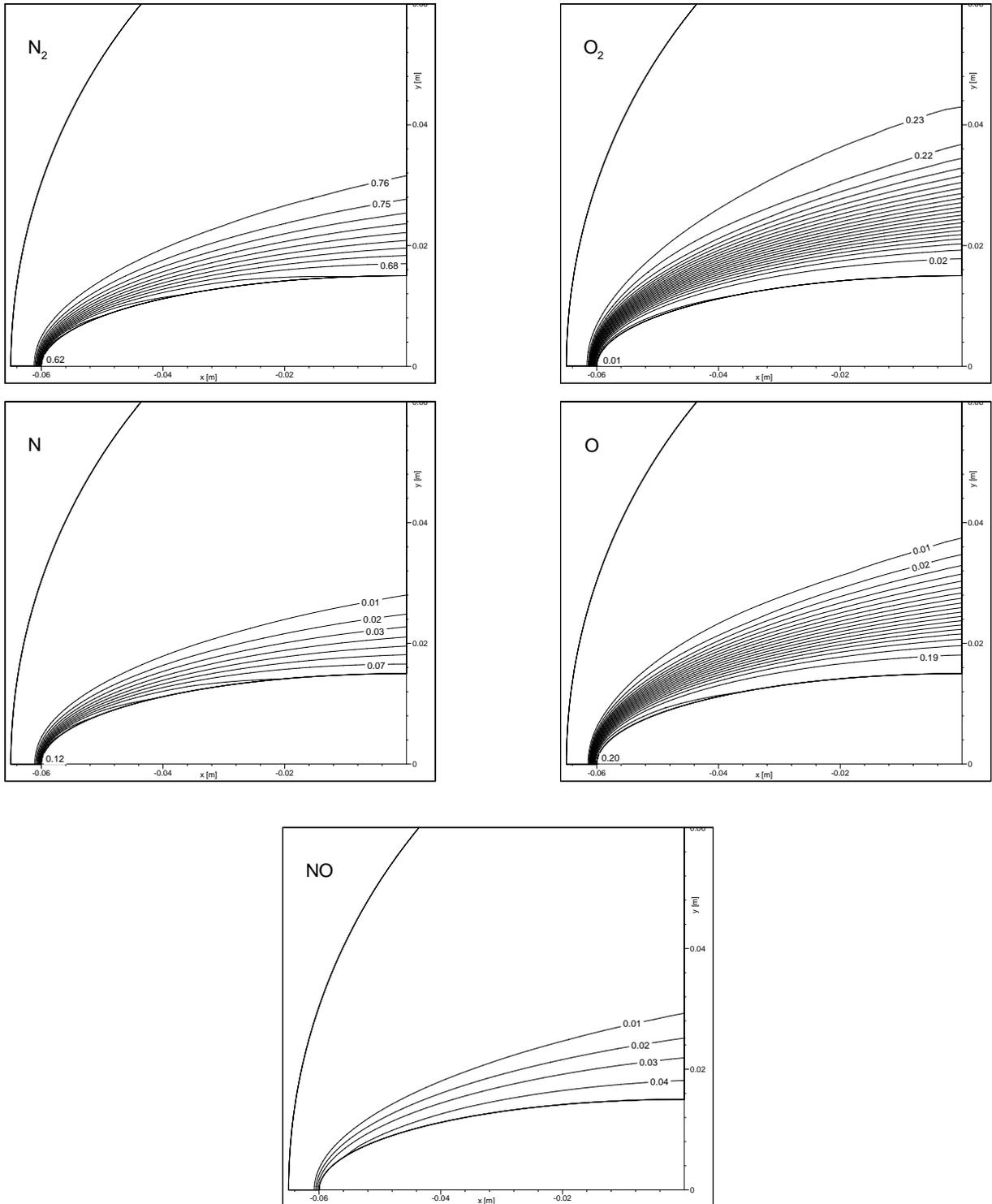


Figura 7.31 – Distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O).

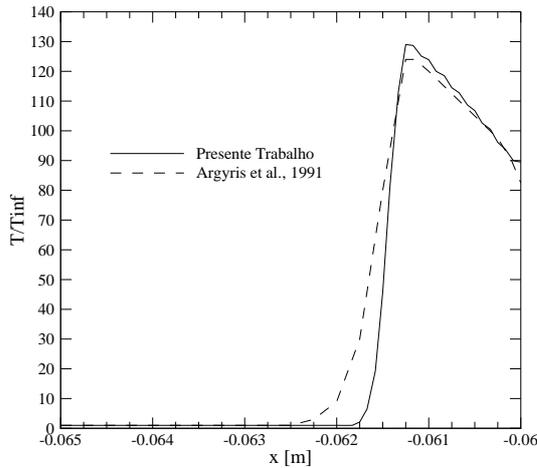


Figura 7.32 – Comparação do perfil de temperatura na linha de estagnação obtida pelo presente trabalho e por Argyris *et al.* [1991].

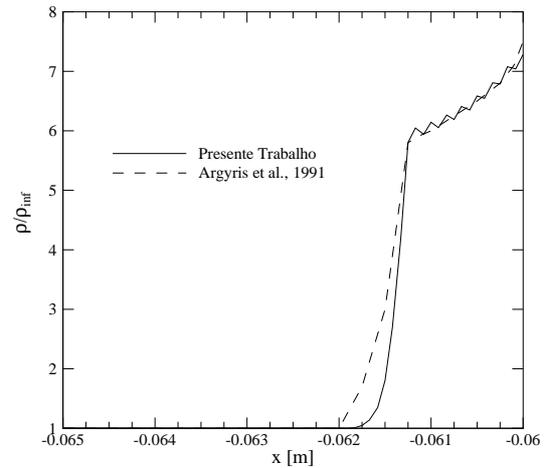


Figura 7.33 – Comparação do perfil de massa específica na linha de estagnação obtida pelo presente trabalho e por Argyris *et al.* [1991].

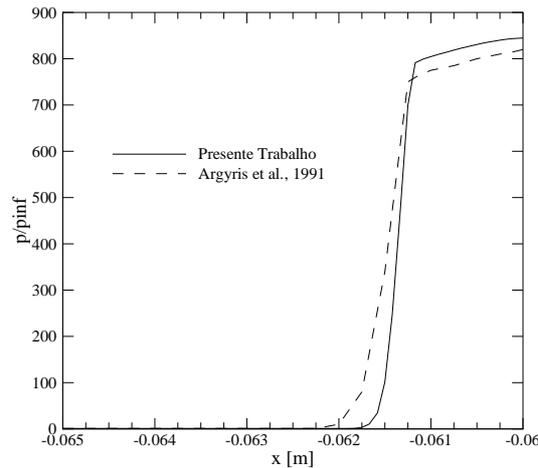


Figura 7.34 – Comparação do perfil de pressão na linha de estagnação obtida pelo presente trabalho e por Argyris *et al.* [1991].

molecular necessita de uma temperatura menor que o nitrogênio molecular para iniciar a dissociação. Junto à elipse o oxigênio está totalmente dissociado. A última espécie a surgir é o NO, pois necessita da presença de átomos de nitrogênio e de oxigênio para formar-se.

Os parâmetros empregados no código para este exemplo foram: coeficiente de amortecimento fictício $C_{AF} = 2$, coeficiente de segurança, $\beta = 0.3$, limite de resíduo do processo iterativo = 10^{-3} e limite de resíduo do processo temporal = 10^{-7} , cuja evolução em função dos passos de tempo pode ser observada na Figura 7.36. O tempo total de execução foi de 2.07 horas no Supercomputador CRAY T90 do CESUP/UFRGS com um desempenho médio

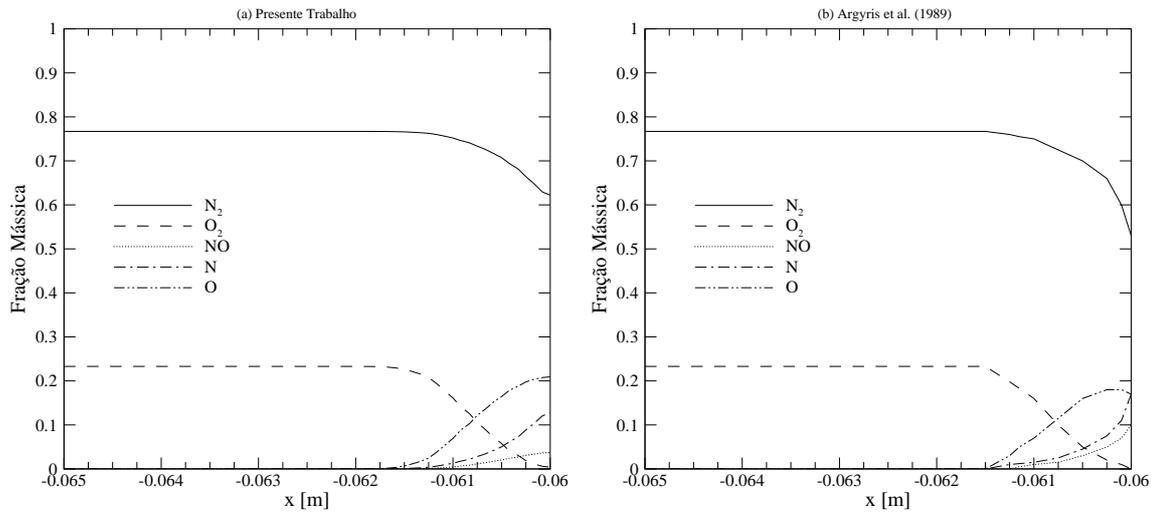


Figura 7.35 – Comparação entre as frações mássicas das espécies químicas na linha de estagnação obtidas pelo presente trabalho (a) e por Argyris *et al.* [1989] (b).

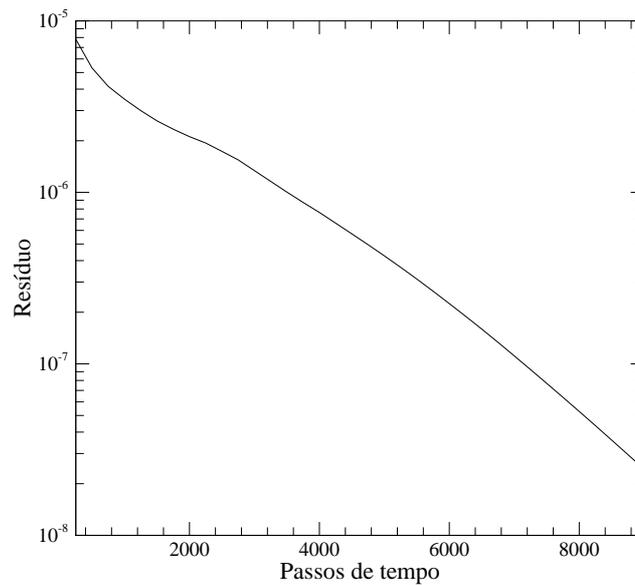


Figura 7.36 – Variação do resíduo em função do número de passos de tempo.

de 348 MFLOPS e memória de 7.33 Mw (58.6 Mb).

7.4 Escoamento de ar sobre o veículo SARA

Analisa-se o escoamento hipersônico ($M_\infty = 12.7$) não difusivo de ar sobre o veículo SARA, cuja geometria é formada por um conjunto esfera-cone e é apresentada na Figura 7.37, bem como o esquema do problema.

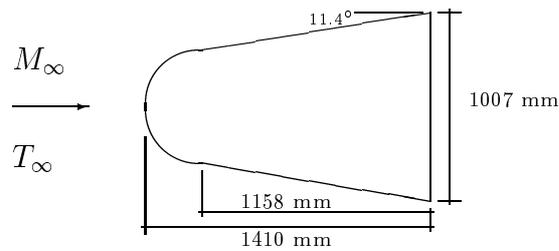


Figura 7.37 – Esquema do escoamento hipersônico e dimensões do SARA [Moraes Jr. & Pilchowski, 1997].

As condições da corrente-livre são as seguintes:

- $M_\infty = 12.7$
- $V_\infty = 3570 \text{ m/s}$
- $T_\infty = T_{v_\infty} = 196 \text{ K}$
- $\rho_\infty = 1.6 \times 10^{-3} \text{ kg/m}^3$
- $p_\infty = 90.40 \text{ Pa}$
- Fração mássica do nitrogênio molecular = $c_{N_{2\infty}} = 0.767$
- Fração mássica do oxigênio molecular = $c_{O_{2\infty}} = 0.233$
- Fração mássica das outras espécies = 0

Considera-se um escoamento laminar, estacionário, não difusivo, em não equilíbrio termo-químico. Para redução do esforço computacional, emprega-se dois planos de corte longitudinais (vertical e horizontal) e apenas um quarto do domínio é analisado. A malha de elementos finitos é formada por 48303 nós e 44278 elementos hexaédricos de 8 nós e pode ser vista na Figura 7.38.

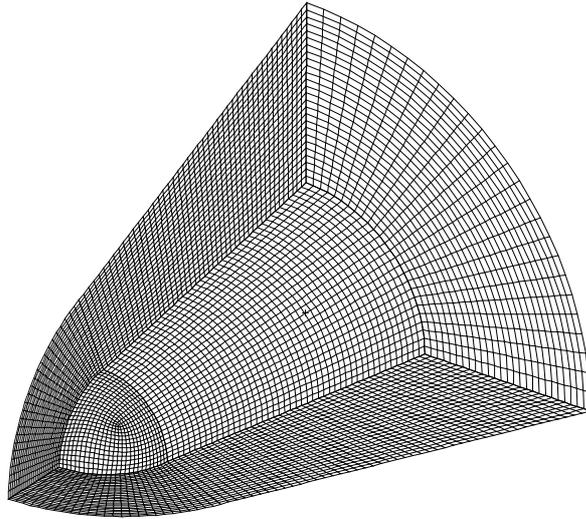


Figura 7.38 – Malha de elementos finitos utilizada para análise do escoamento hipersônico ao redor do SARA.

Nas Figuras 7.39 a 7.43 são apresentados os campos de distribuição de número de Mach, pressão, massa específica, temperatura translacional e temperatura vibracional, respectivamente, em um plano longitudinal. Aqui novamente reproduz-se a tendência dos exemplos anteriores. Os máximos valores de pressão e massa específica da mistura ocorrem na região de estagnação. A temperatura translacional apresenta um pico logo atrás do choque, reduzindo seus valores em direção à superfície do SARA. A temperatura vibracional apresenta um valor máximo mais próximo à superfície do SARA do que a posição do valor máximo da temperatura translacional.

Os campos de distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O) são apresentados na Figura 7.44. Observa-se que, a exemplo do que aconteceu nos casos anteriores, o nitrogênio e o oxigênio moleculares apresentam valores de frações mássicas máximos junto à onda de choque e valores mínimos na região de estagnação. As espécies atômicas e o monóxido de nitrogênio, NO , têm um comportamento oposto, apresentando valores de frações mássicas mínimos junto ao choque e valores máximos na região de estagnação. A concentração de nitrogênio atômico é praticamente nula em todo o domínio, pois recombina com o oxigênio para formar NO .

Na Figura 7.45 são apresentados os gráficos de número de Mach e de temperaturas translacional e vibracional ao longo da linha de estagnação. Como nos casos anteriores, observa-se a presença de um pico de temperatura translacional logo após a onda de choque e

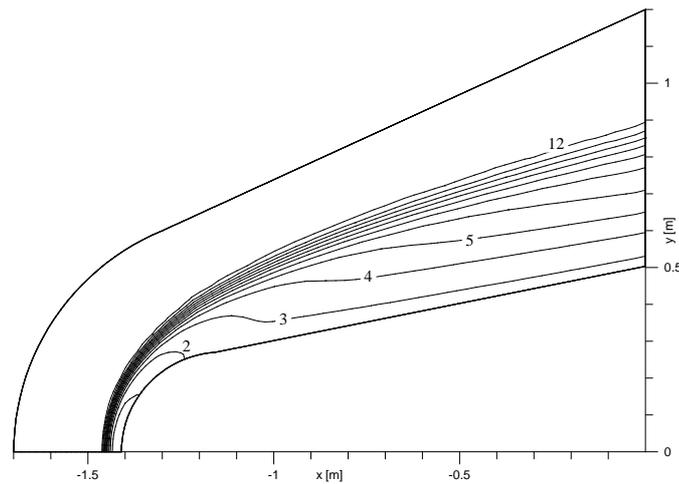


Figura 7.39 – Distribuição de número de Mach.

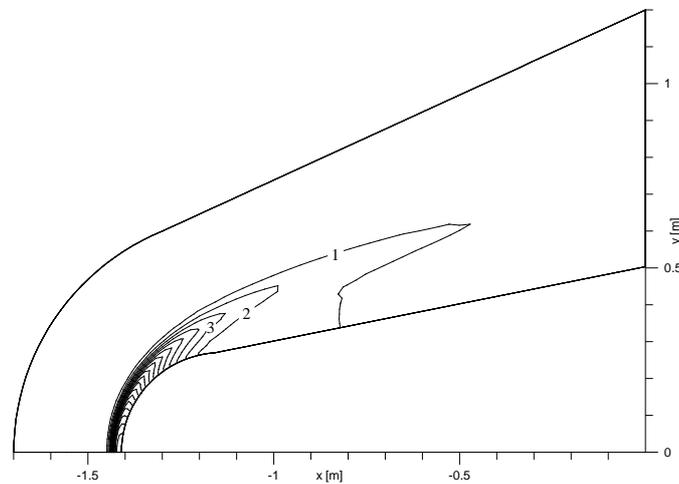


Figura 7.40 – Distribuição de pressão (em kPa).

a redução de seus valores à medida que se aproxima da superfície do SARA. Já a temperatura vibracional responde ao choque mais a jusante e possui valores máximos mais próximos da superfície do SARA do que a temperatura translacional.

Os gráficos de frações mássicas para as 5 espécies ao longo da linha de estagnação são apresentados na Figura 7.46. Observa-se que o nitrogênio molecular sofre pouca dissociação, ao contrário do oxigênio molecular, que sofre uma dissociação mais intensa. A fração mássica do nitrogênio atômico é praticamente nula, pois recombina com o oxigênio atômico para formar monóxido de nitrogênio (NO).

Os parâmetros empregados no código para este exemplo foram: coeficiente de amortecimento fictício $C_{AF} = 1$, coeficiente de segurança, $\beta = 0.3$, limite de resíduo do processo iterativo = 10^{-3} e limite de resíduo do processo temporal = 10^{-6} .

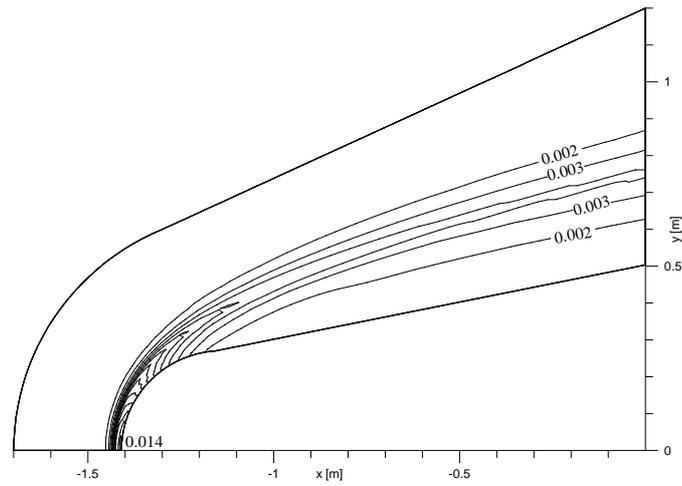


Figura 7.41 – Distribuição de massa específica da mistura (em kg/m^3).

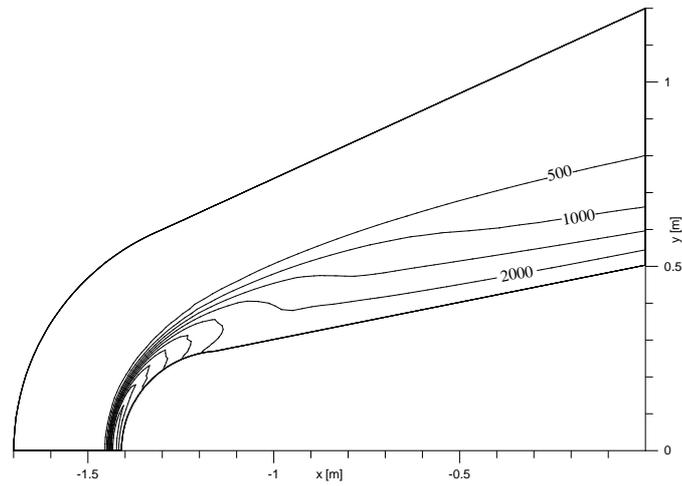


Figura 7.42 – Distribuição de temperatura translacional (em K).

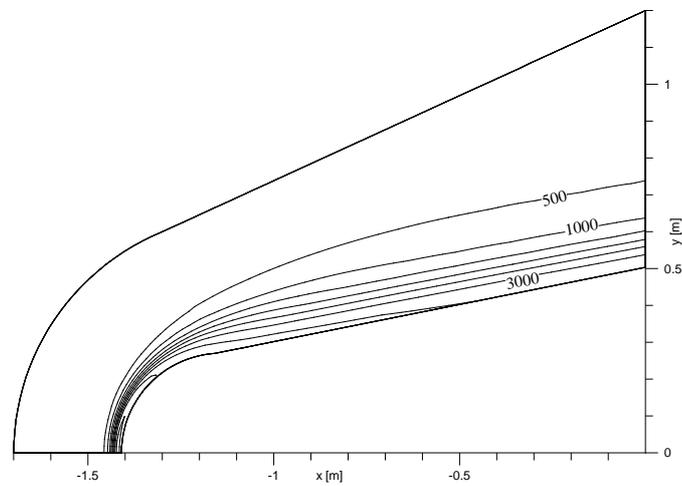


Figura 7.43 – Distribuição de temperatura vibracional (em K).

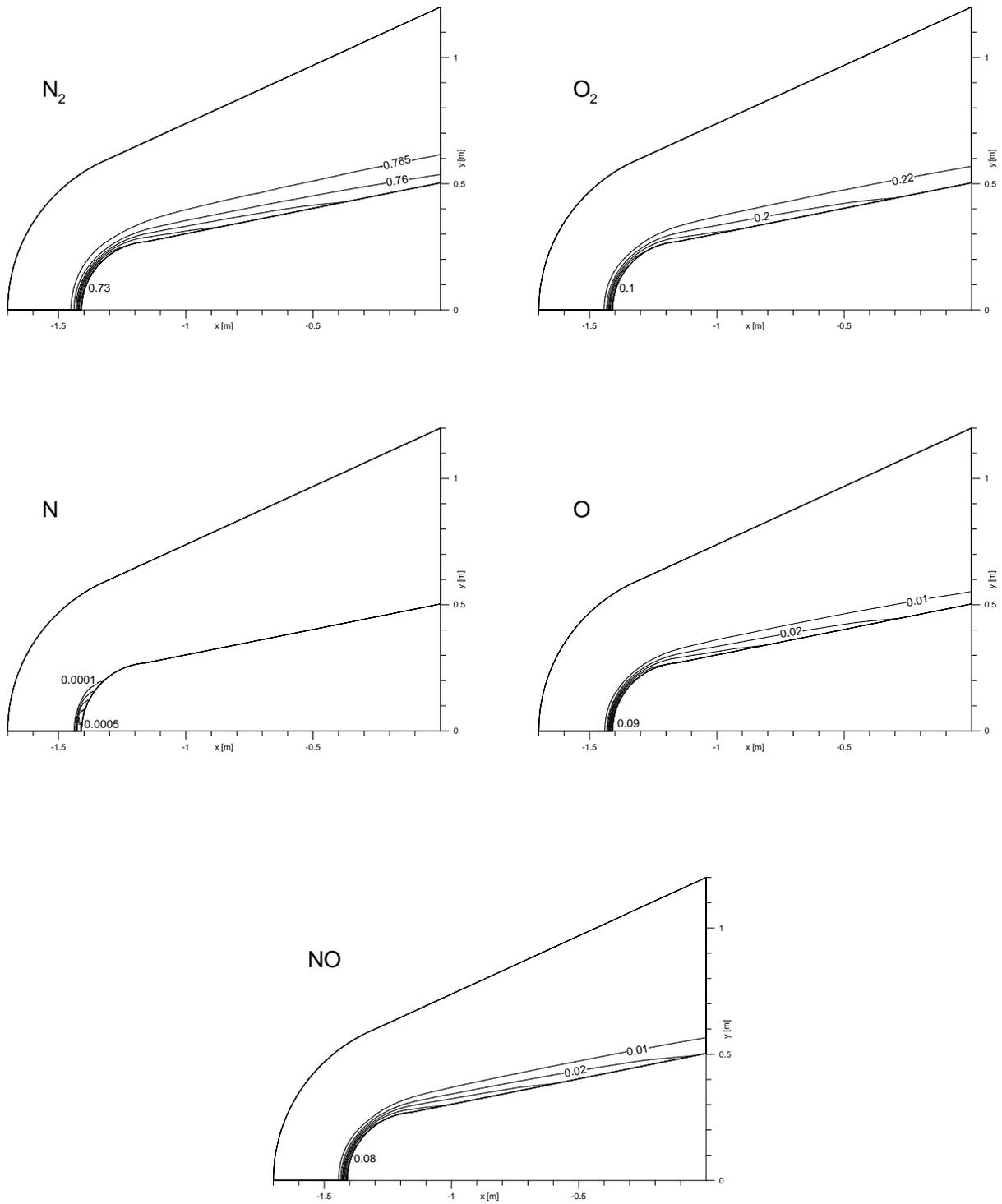


Figura 7.44 – Distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O).

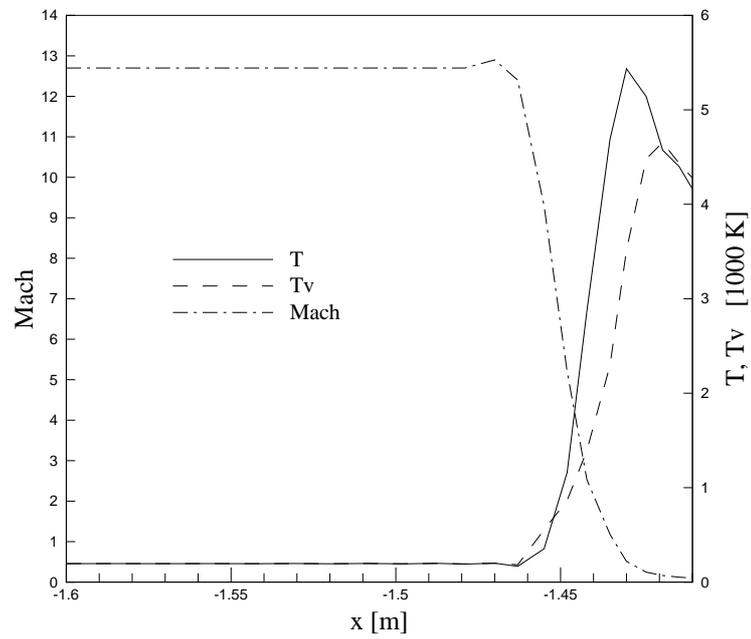


Figura 7.45 – Gráfico de número de Mach e temperaturas (em K) na linha de estagnação.

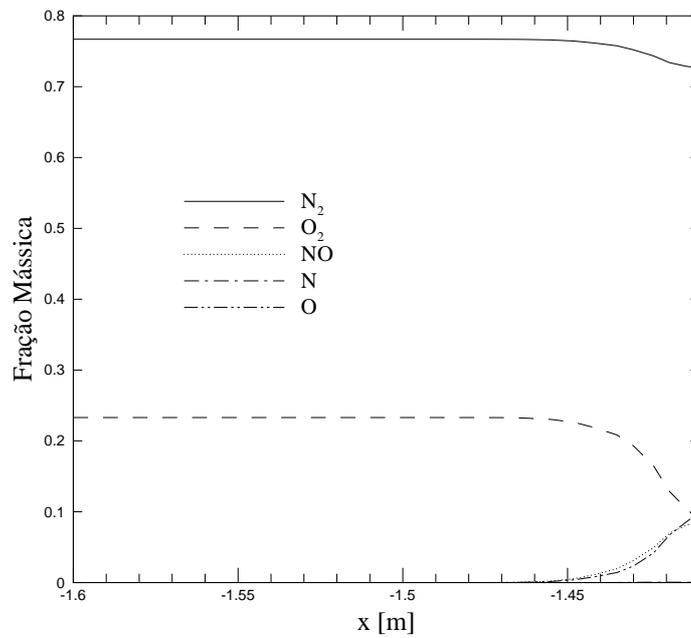


Figura 7.46 – Gráfico de frações mássicas das espécies químicas na linha de estagnação.

7.5 Escoamento de ar sobre meia elipse com ângulo de ataque

O escoamento hipersônico ($M_\infty = 25$) difusivo sobre meia elipse com ângulo de ataque de 30° é analisado. Os dados relativos ao ar referem-se a uma altitude de 75 km da atmosfera padrão (Anexo A). A forma da elipse é dada pela dimensão dos semi-eixos: $a = 0.6 \text{ m}$ e $b = 0.15 \text{ m}$ (dez vezes maior que o modelo anterior). A geometria do problema pode ser observada esquematicamente na Figura 7.47.

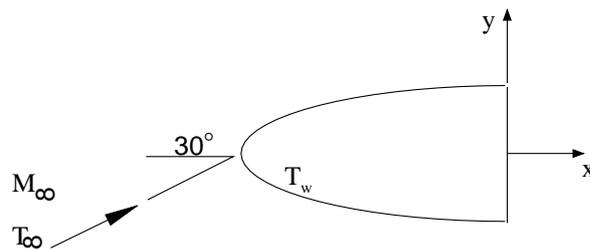


Figura 7.47 – Esquema do escoamento hipersônico de ar ao redor de meia elipse com ângulo de ataque de 30° e temperatura prescrita na parede.

As condições da corrente-livre são as seguintes:

- $M_\infty = 25$
- $V_\infty = 7196 \text{ m/s}$
- $T_\infty = T_{v_\infty} = 205.3 \text{ K}$
- $p_\infty = 2.52 \text{ Pa}$
- $\rho_\infty = 4.258 \times 10^{-5} \text{ kg/m}^3$
- Fração mássica do nitrogênio molecular = $c_{N_{2\infty}} = 0.767$
- Fração mássica do oxigênio molecular = $c_{O_{2\infty}} = 0.233$
- Fração mássica das outras espécies = 0

A temperatura da parede da elipse, T_w , é mantida constante a 1500 K . Para auxiliar na convergência, a velocidade foi sendo gradativamente alterada para incluir o ângulo de

ataque, iniciando-se apenas com a componente em x (ângulo de ataque nulo) e acrescentando-se uma parcela cada vez maior da componente em y depois de passado um determinado número de passos de tempo (2000 passos a cada alteração). O processo completou-se após 4 alterações da velocidade em y .

Considera-se um escoamento laminar, estacionário, difusivo, em não equilíbrio termoquímico. Por ser um problema bidimensional, apenas um elemento na direção z é empregado ($\Delta z = 0.05$ m). A malha é formada por 14762 nós e 7200 elementos (120x60x1 elementos) e pode ser observada na Figura 7.48.

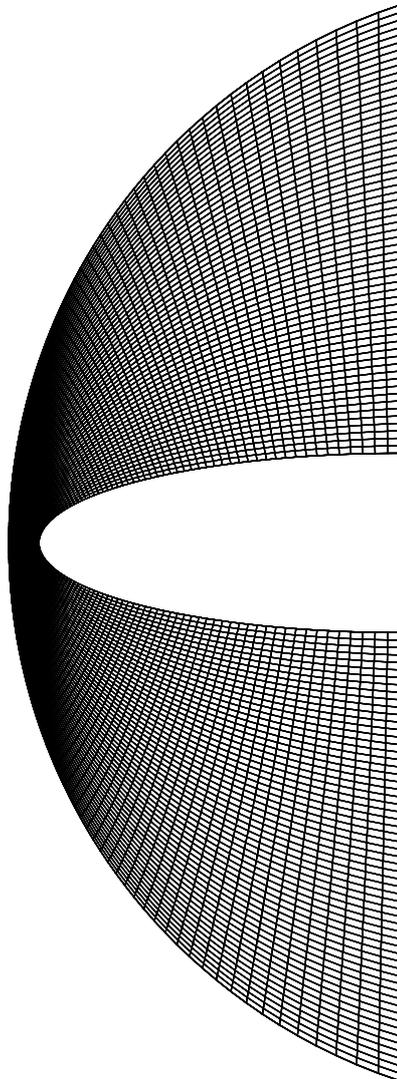


Figura 7.48 – Malha de elementos finitos formada por 14762 nós e 7200 elementos (120x60x1 elementos).

Nas Figuras 7.49 a 7.52 são apresentados os campos de distribuição de número de

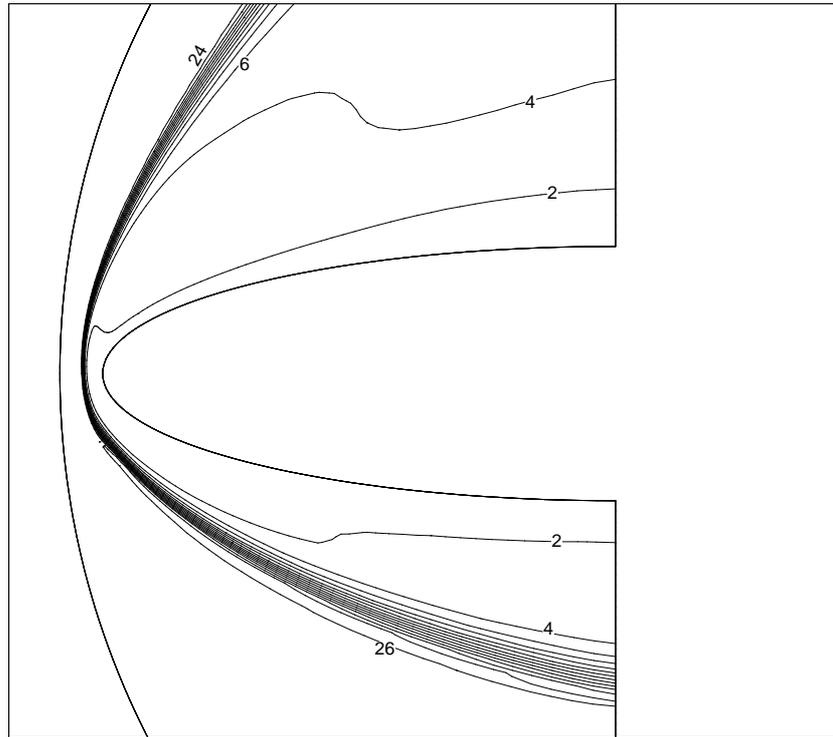


Figura 7.49 – Distribuição de número de Mach

Mach, pressão e temperaturas translacional e vibracional, respectivamente. O fenômeno observado nos exemplos anteriores pode ser novamente constatado aqui: a pressão apresenta valores máximos na região de estagnação. As temperaturas translacional e vibracional apresentam valores máximos logo atrás da onda de choque, na região de estagnação, assim como aconteceu nos exemplos anteriores.

Os campos de distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O) são apresentados na Figura 7.53. O nitrogênio molecular apresenta fração mássica máxima na região do choque ($c_{N_2} = 0.76$) e mínima na região de estagnação ($c_{N_2} = 0.52$). Há um aumento da fração mássica do nitrogênio molecular na parte superior da elipse, indicando que há recombinação nesta região. O oxigênio molecular apresenta as mesmas características que o nitrogênio molecular, com máximo na região do choque ($c_{O_2} = 0.22$), mínimo na região de estagnação ($c_{O_2} < 0.02$) e aumento da fração mássica na parte superior da elipse. As espécies atômicas apresentam valores máximos de fração mássica na região de estagnação ($c_N = 0.22$ e $c_O = 0.28$) e mínimos na região da onda de choque ($c_N = 0.02$ e $c_O = 0.02$). Ambas espécies apresentam redução de fração mássica na região superior da elipse, confirmando a ocorrência de recombinação ali. O monóxido de nitrogênio, NO , é a

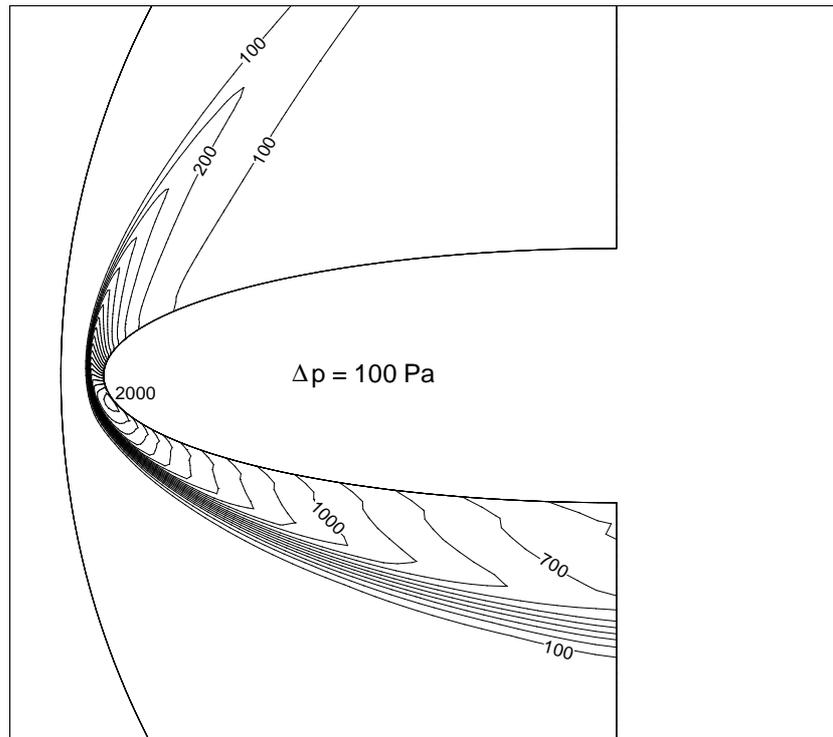


Figura 7.50 – Distribuição de pressão (em Pa).

espécie mais escassa do problema (maior fração mássica = 0.1) e a que apresenta a menor variação de fração mássica (de 0.01 a 0.1).

Os parâmetros empregados no código para este exemplo foram: coeficiente de amortecimento fictício $C_{AF} = 1$, coeficiente de segurança, $\beta = 0.1$, limite de resíduo do processo iterativo = 10^{-3} e limite de resíduo do processo temporal = 10^{-6} . O tempo total de execução foi de 28 horas no Supercomputador CRAY T90 do CESUP/UFRGS com um desempenho médio de 453 MFLOPS e memória de 22.36 Mw (178.9 Mb).

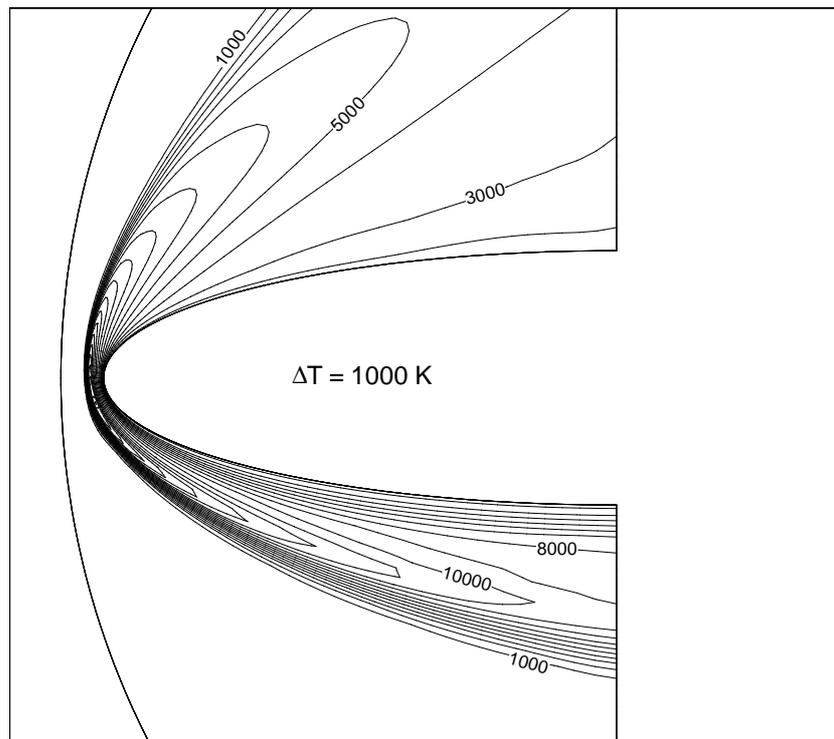


Figura 7.51 – Distribuição de temperatura translacional (em K).

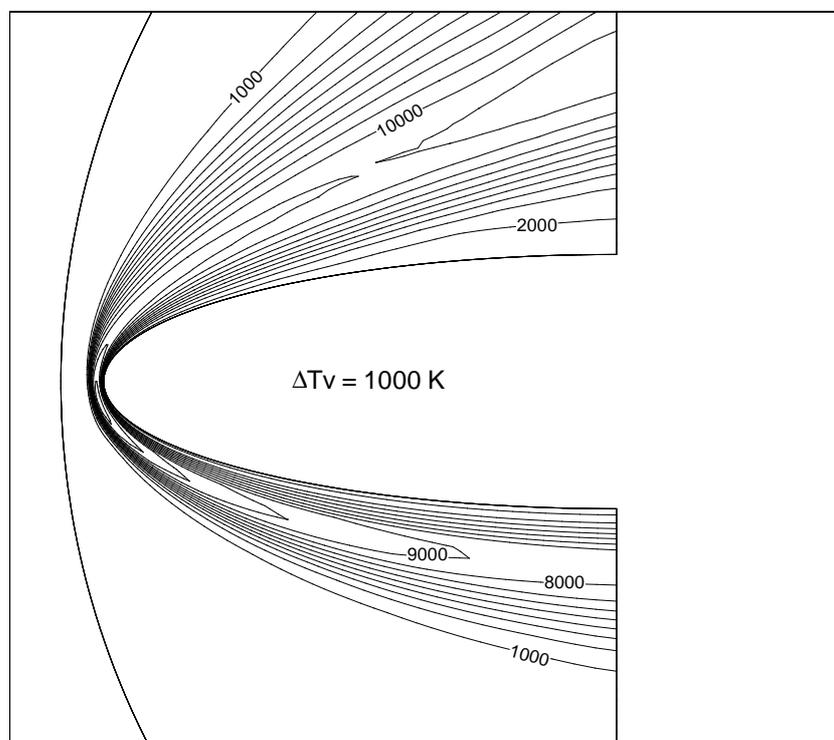


Figura 7.52 – Distribuição de temperatura vibracional (em K).

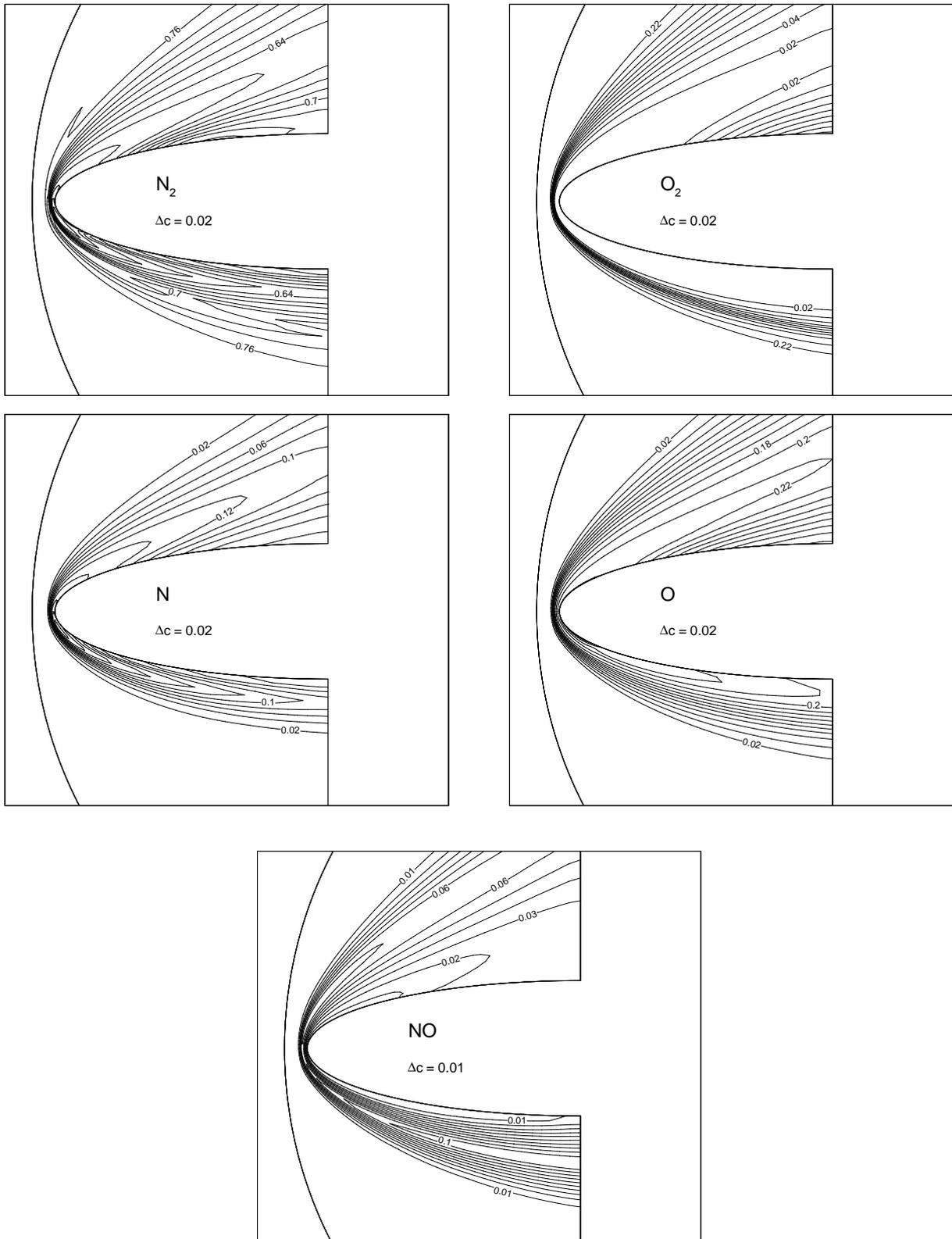


Figura 7.53 – Distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O).

7.6 Escoamento de ar sobre meia esfera

Analisa-se o escoamento hipersônico ($M_\infty = 11.16$) difusivo de ar parcialmente dissociado sobre meia esfera de 2 cm de raio. A geometria do problema pode ser observada esquematicamente na Figura 7.54.

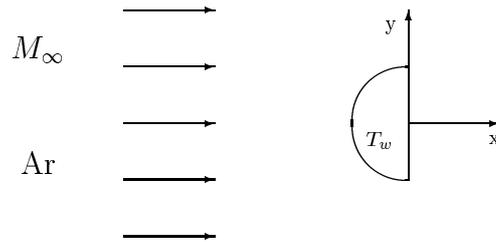


Figura 7.54 – Esquema de escoamento hipersônico de ar parcialmente dissociado sobre meia esfera de 2 cm de raio com temperatura prescrita na parede ($T_w = 300K$).

As condições da corrente-livre são as seguintes:

- $M_\infty = 11.16$
- $V_\infty = 5940 \text{ m/s}$
- $T_\infty = 705 \text{ K}$
- $\rho_\infty = 1.56 \times 10^{-3} \text{ kg/m}^3$
- Fração mássica de $N_2 = c_{N_2\infty} = 0.762$
- Fração mássica de $O_2 = c_{O_2\infty} = 0.035$
- Fração mássica de $NO = c_{NO\infty} = 0.032$
- Fração mássica de $N = c_{N\infty} = 0$
- Fração mássica de $O = c_{O\infty} = 0.171$

A temperatura da parede da esfera, T_w , é mantida constante a 300 K.

Considera-se um escoamento laminar, estacionário, difusivo, em não equilíbrio termoquímico. Para redução do esforço computacional, emprega-se dois planos de corte longitudinais (vertical e horizontal) e apenas um quarto do domínio é analisado. A malha é formada por 36771 nós e 33750 elementos e pode ser observada na Figura 7.55.

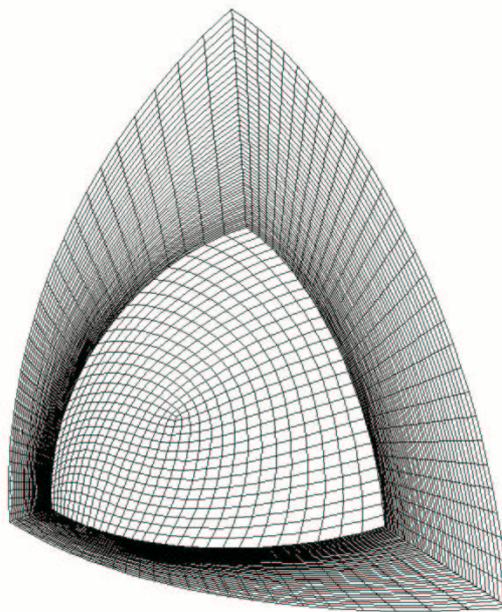


Figura 7.55 – Malha de elementos finitos formada por 36771 nós e 33750 elementos.

Nas Figuras 7.56 a 7.59 são apresentados os campos de distribuição de número de Mach, pressão e temperaturas translacional e vibracional, respectivamente, em um plano de corte longitudinal. A pressão apresenta valores máximos na região de estagnação. A temperatura translacional apresenta um pico logo atrás do choque, na região de estagnação. A temperatura vibracional também apresenta valores máximos na região de estagnação, mas em uma posição intermediária entre o choque e a superfície da esfera.

Os campos de distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O) em um plano longitudinal são apresentados na Figura 7.60. Nota-se que as espécies moleculares apresentam valores de fração mássica mínimos na região de estagnação, mas que aumentam ao se aproximarem da superfície da esfera, provavelmente devido à baixa temperatura imposta ali (300 K). As espécies atômicas, por outro lado, apresentam valores máximos na região de estagnação, mas que diminuem ao se aproximarem da superfície da esfera.

Na Figura 7.61, são apresentados os perfis de número de Mach e temperaturas

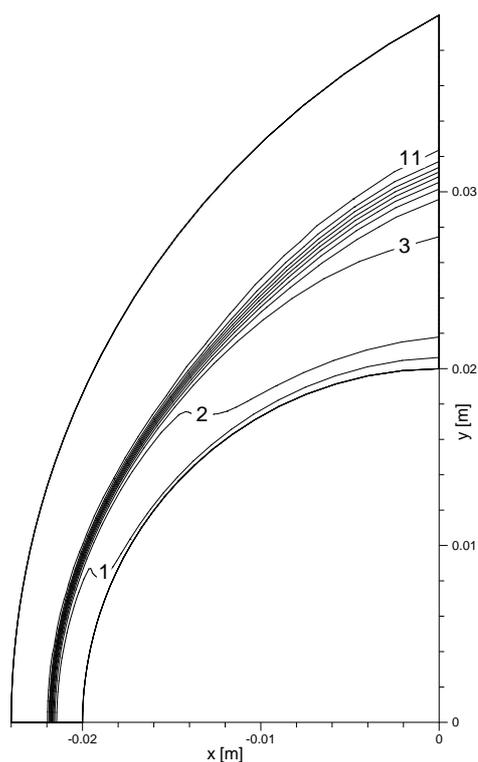


Figura 7.56 – Distribuição de número de Mach em um plano longitudinal.

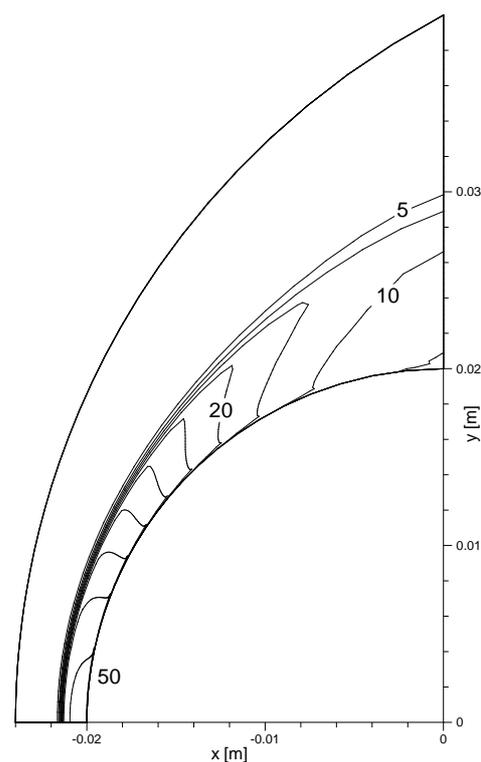


Figura 7.57 – Distribuição de pressão (em kPa) em um plano longitudinal.

translacional e vibracional na linha de estagnação. A partir desta figura, é possível observar que o choque posiciona-se aproximadamente em $-1.08x/R$ (onde R é o raio da esfera). Observa-se que os dois gráficos de temperatura são diferentes entre si. A temperatura translacional apresenta um pico logo atrás do choque e vai gradativamente reduzindo até atingir a temperatura prescrita da superfície da esfera (300 K). Já a temperatura vibracional responde ao choque mais a jusante e apresenta uma região com pouca variação (ao redor de 10000 K) que se estende por boa parte da linha de estagnação. Nota-se uma forte variação das duas temperaturas junto à superfície da esfera, provocada pela imposição do baixo valor de temperatura prescrita ali.

Os gráficos das frações mássicas na linha de estagnação são apresentadas na Figura 7.62. Observa-se que o oxigênio molecular dissocia completamente, pois a sua fração mássica é baixa na corrente-livre (0.035), e sofre uma pequena recombinação junto à superfície da esfera. O nitrogênio molecular sofre grande dissociação ao longo da linha de estagnação e forte recombinação junto à superfície da esfera. A fração mássica do oxigênio atômico sofre pequena variação ao longo da linha de estagnação, exceto junto à superfície da esfera, onde tem a sua fração mássica reduzida. A fração mássica do nitrogênio atômico sofre grande

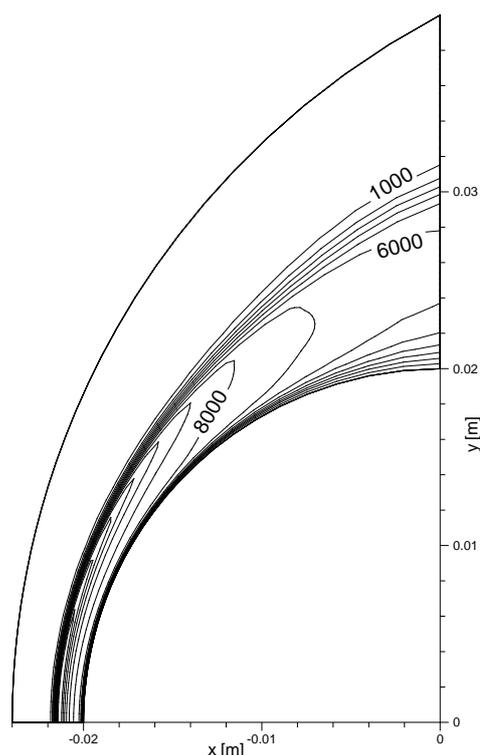


Figura 7.58 – Distribuição de temperatura translacional (em K) em um plano longitudinal.

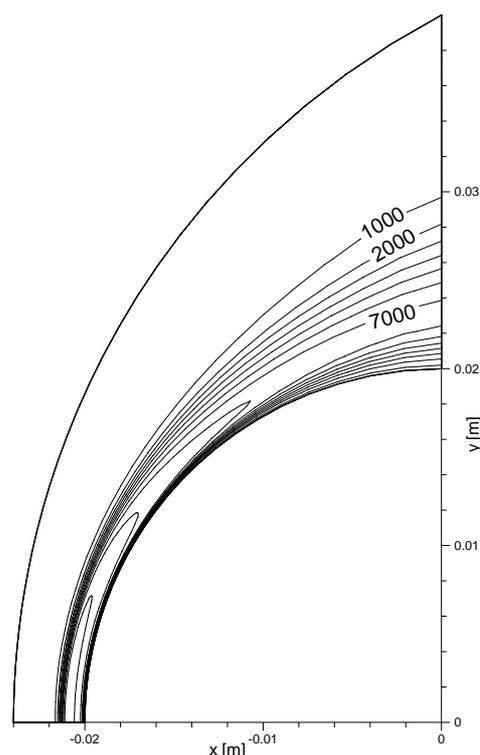


Figura 7.59 – Distribuição de temperatura vibracional (em K) em um plano longitudinal.

variação ao longo da linha de estagnação, atingindo um valor máximo de aproximadamente 0.2 ao redor da posição $x/R = -1.02$ e praticamente sendo anulado na superfície da esfera. O monóxido de nitrogênio, NO , sofre uma pequena recombinação após o choque, atingindo um valor máximo de fração mássica de aproximadamente 0.1 ao redor da posição $-1.06 x/R$, voltando a dissociar-se ao longo da linha de estagnação, à medida que se aproxima da superfície da esfera.

Este exemplo foi analisado numericamente por Men'shov & Nakamura [2000]. Apesar dos resultados obtidos pelo presente trabalho serem qualitativamente parecidos com os da referência, quantitativamente apresentam diferenças.

Os parâmetros empregados no código para este exemplo foram: coeficiente de amortecimento fictício $C_{AF} = 1$, coeficiente de segurança, $\beta = 0.1$, limite de resíduo do processo iterativo $= 10^{-3}$ e limite de resíduo do processo temporal $= 10^{-6}$, cuja evolução em função dos passos de tempo pode ser observada na Figura 7.63. O tempo total de execução foi de 123 horas no Supercomputador CRAY T90 do CESUP/UFRGS com um desempenho médio de 607 MFLOPS e memória de 90.73 Mw (725.84 Mb).

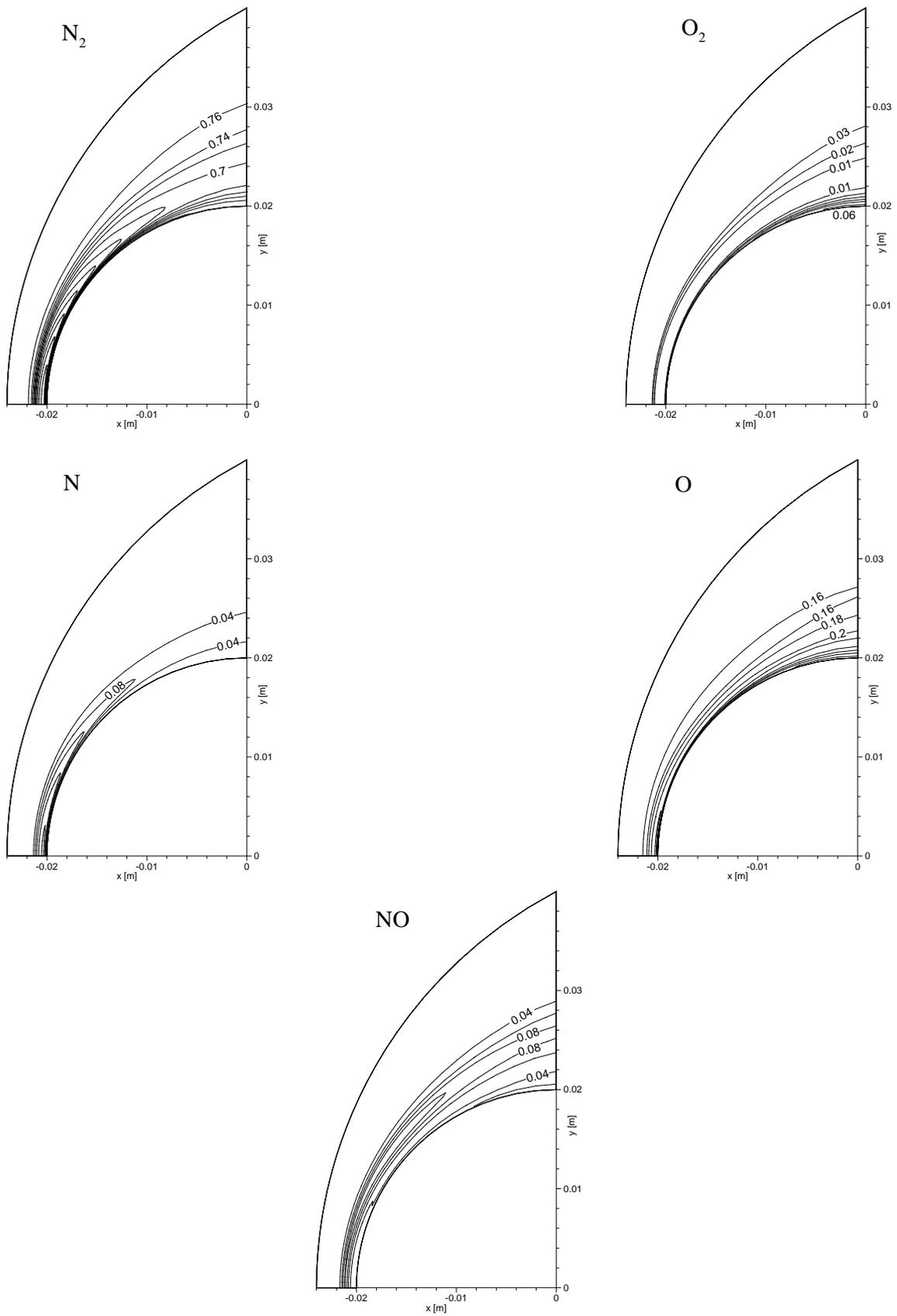


Figura 7.60 – Distribuição de frações mássicas de cada uma das 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O) em um plano longitudinal.

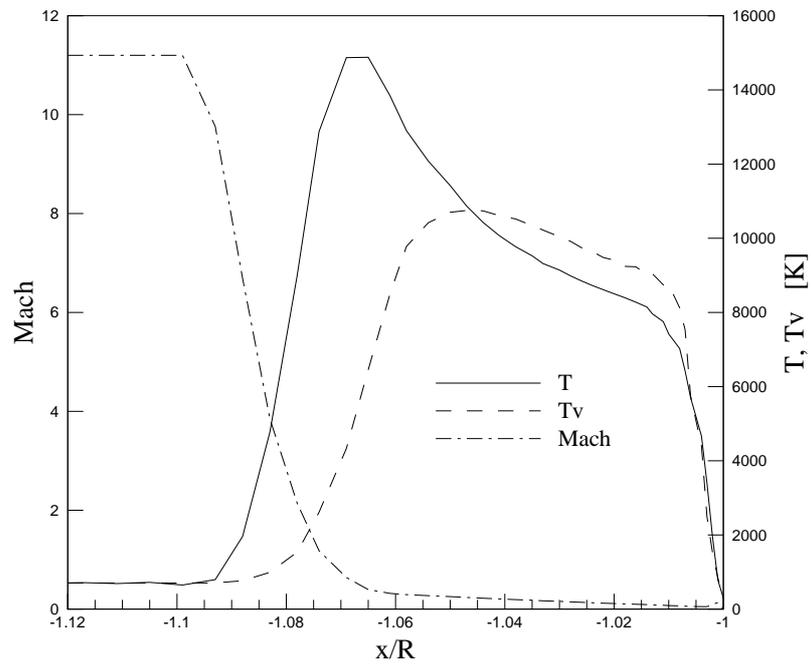


Figura 7.61 – Gráficos de número de Mach e temperaturas translacional e vibracional na linha de estagnação.

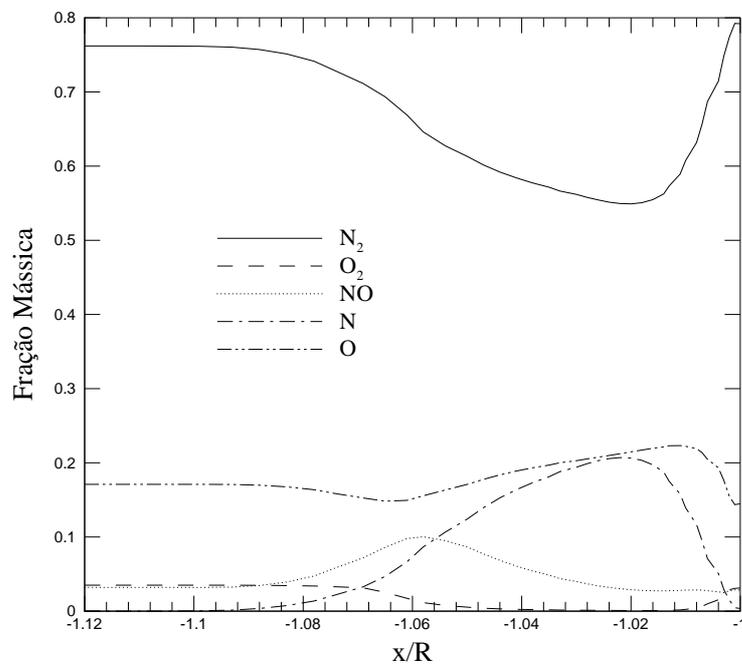


Figura 7.62 – Gráficos das frações mássicas das espécies químicas na linha de estagnação.

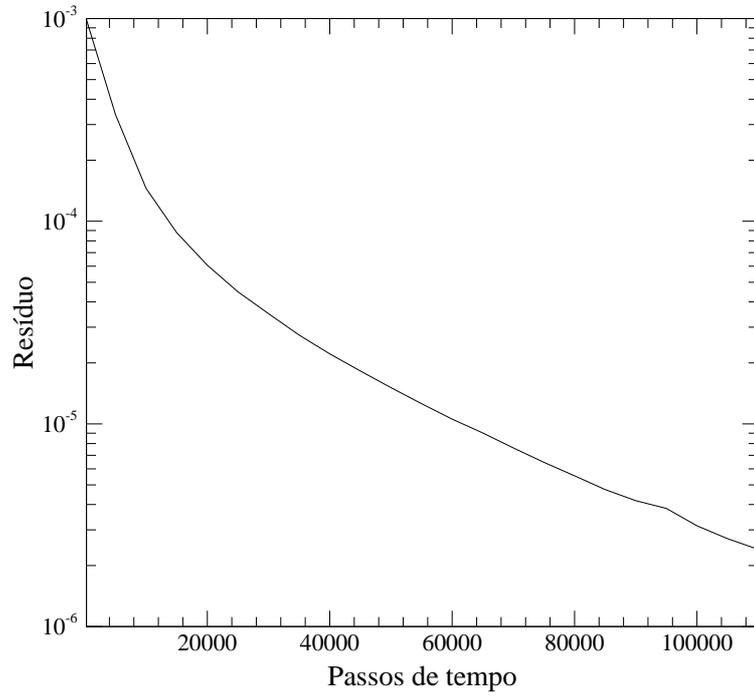


Figura 7.63 – Variação do resíduo em função do número de passos de tempo.

Capítulo 8

Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

8.1 Conclusões

O objetivo principal deste trabalho foi atingido, a saber: desenvolver um código computacional para realizar análises de escoamentos hipersônicos, em especial de problemas de reentrada de veículos espaciais na atmosfera terrestre. Este código caracteriza-se pela solução de escoamentos compressíveis hipersônicos, tridimensionais, laminares, difusivos e não difusivos, estacionários e com não equilíbrio termo-químico, usando o método dos elementos finitos através do esquema de Taylor-Galerkin e o modelo de Park de 2 temperaturas, 5 espécies (N_2 , O_2 , NO , N e O) e 17 reações químicas. Esta é considerada, inclusive, a principal contribuição do trabalho, uma vez que não há, no entender do autor, um outro código com estas características.

Devido à escassez de resultados experimentais para problemas de escoamentos hipersônicos disponíveis na literatura, a validação adequada do código poderia ficar comprometida. Entretanto, para o caso do escoamento de nitrogênio ao redor de meio cilindro, a posição do choque obtida pelo presente trabalho coincide com a posição experimental obtida por Hornung [1972], o que indica que o código é capaz de reproduzir o fenômeno físico ao qual foi projetado.

Além disso, no problema de escoamento hipersônico não difusivo ao redor de uma elipse sem ângulo de ataque, os resultados obtidos no presente trabalho são muito próximos aos obtidos por Argyris *et al.* [1989, 1991]. Neste problema, os perfis de temperatura, massa

específica da mistura e pressão ao longo da linha de estagnação coincidem tanto no formato do perfil quanto na posição do choque. Chama a atenção a variação da pressão, a variável mais sensível à onda de choque, que aumenta cerca de 800 vezes, enquanto a temperatura e a massa específica da mistura aumentam aproximadamente 130 e 6 vezes com o choque, respectivamente. Nos gráficos dos perfis de frações mássicas na linha de estagnação, os resultados obtidos no presente trabalho também coincidem com os resultados obtidos pela referência, exceto por uma pequena região junto a superfície da elipse, onde a referência obtém uma dissociação mais acentuada do nitrogênio molecular.

Em todos os casos analisados, observou-se que as espécies químicas respondem à onda de choque mais a jusante do que as outras variáveis. Isto era esperado, uma vez que as reações químicas exigem uma grande quantidade de colisões para ocorrerem. Como consequência, as espécies não apresentam fortes variações na região do choque e seus gradientes são mais suaves em todo o domínio em comparação às outras variáveis.

Nos casos onde o modelo de 2 temperaturas foi empregado (todos, exceto o problema de escoamento de ar ao redor de uma elipse sem ângulo de ataque), observou-se que a temperatura vibracional reage mais a jusante à onda de choque do que a temperatura translacional. Este fenômeno era previsto, uma vez que as moléculas só começam a ficar vibracionalmente excitadas acima de uma determinada temperatura (tipicamente, ao redor de 800 K para o ar a 1 atmosfera [Anderson, 1989]).

Observou-se uma maior diferença entre os gráficos de temperatura translacional e de temperatura vibracional ao longo da linha de estagnação nos casos com ar do que no caso apenas com nitrogênio. Em geral, para o ar, os valores de temperatura vibracional são bem inferiores aos de temperatura translacional, além de não apresentarem picos logo após o choque. Para o caso de nitrogênio, os gráficos são parecidos, inclusive com relação aos picos apresentados logo após o choque por ambas temperaturas. Supõe-se que este fenômeno seja explicado pelo maior número de espécies moleculares presentes nos escoamentos com ar (3 espécies: N_2 , O_2 e NO) do que no escoamento com nitrogênio (1 espécie molecular: N_2), pois a energia vibracional é armazenada por um número maior de moléculas, exigindo uma quantidade maior de energia para excitar vibracionalmente todo o sistema. Além disso, o nitrogênio molecular inicia a dissociação em uma temperatura muito superior à do oxigênio molecular (tipicamente, para 1 atmosfera, 2500 K para o oxigênio e 4000 K para o nitrogênio),

permitindo que a molécula de nitrogênio armazene mais energia vibracional do que a de oxigênio. Deduz-se, portanto, que quanto maior o número de espécies moleculares presentes, maior é a necessidade de um modelo que inclua energia/temperatura vibracional.

Em geral, o valor do coeficiente de amortecimento fictício, C_{AF} , para problemas difusivos (do tipo Navier-Stokes) é menor do que para problemas não difusivos (do tipo Euler). Isto provavelmente ocorre porque o modelo difusivo possui naturalmente termos que contribuem para o amortecimento de oscilações espúrias geradas pela onda de choque.

O baixo desempenho, em MFLOPS, apresentado pelo código computacional pode ser explicado pela presença do método de Newton-Raphson para a solução da temperatura vibracional, pois gera uma dependência que impede que o laço onde é aplicado o método seja adequadamente otimizado (o laço não é vetorizado). Os casos não difusivos são mais prejudicados, pois o código é menor e o esquema de Newton-Raphson representa uma parcela maior, proporcionalmente, se comparado com o código difusivo. Além disso, problemas que utilizam pouca memória não são tão bem otimizados quanto problemas que ocupam muita memória, como pode ser observado no bom desempenho do exemplo do escoamento de ar ao redor de meia esfera, que ocupa mais de 90 Mw e que ultrapassou os 600 MFLOPS (com um pico teórico máximo de 1.8 GFLOPS por processador para o CRAY T90 do CESUP/UFRGS).

8.2 Sugestões para trabalhos futuros

O presente trabalho representa um primeiro passo na direção de se desenvolver um código completo para a solução de problemas hipersônicos. Para tanto, algumas características que poderiam ser adicionadas futuramente são descritas a seguir.

A *ionização* poderia ser adicionada para permitir a solução de problemas com altíssimas temperaturas onde ocorra a formação de íons. Inicialmente, o modelo de 7 espécies para o ar (N_2 , O_2 , NO , N , O , NO^+ e e^-) poderia ser adicionado, uma vez que o monóxido de nitrogênio, NO , é a espécie com a menor energia de ionização e, portanto, é a primeira a formar elétrons. Posteriormente, o modelo completo de 11 espécies (N_2 , O_2 , NO , N , O , N_2^+ , O_2^+ , NO^+ , N^+ , O^+ e e^-) poderia ser incorporado.

A *ablação* poderia ser incorporada para analisar a perda ou injeção de material da superfície do veículo para o meio. Neste caso, várias outras espécies podem ser adicionadas, podendo-se chegar a centenas delas. Além disso, o número de reações químicas pode aumen-

tar consideravelmente, incrementando ainda mais a complexidade do problema.

Um esquema de *malhas adaptativas* poderia ser adicionado para permitir uma melhor captura das ondas de choque e outras regiões de altos gradientes, além de possibilitar o uso de malhas menos refinadas para reduzir o esforço computacional necessário à solução dos problemas.

Um modelo de *turbulência* deveria ser incorporado para a solução de problemas de altos número de Reynolds. Para casos de reentrada na atmosfera terrestre, os regimes de altos Reynolds ocorrem quando o veículo atinge as camadas mais densas da atmosfera.

A solução de *problemas transientes* permitiria analisar boa parte do processo de reentrada de um veículo espacial na atmosfera terrestre, desde as camadas onde a hipótese de meio contínuo já pode ser considerada, até a superfície da Terra (apenas a dinâmica de gases rarefeitos pode analisar processos acima do limite de validade do meio contínuo). Um esquema de condições de contorno variáveis deve ser incorporado, uma vez que as propriedades do ar sofrem grande variação com a altitude.

Para analisar adequadamente como a estrutura do veículo reage às exigências dinâmicas impostas pelo escoamento é necessário implementar um esquema de *interação fluido-estrutura*.

Em problemas hipersônicos envolvendo temperaturas muito altas (acima de 10000 K), a emissão de calor por *radiação* passa a ser importante e deve ser adicionada.

A *catalisação* deve ser considerada para analisar a influência de superfícies totalmente ou parcialmente catalíticas em problemas hipersônicos, principalmente pelo fato das reações de recombinação serem exotérmicas e poderem elevar a temperatura da superfície do veículo.

O *modelo de 3 temperaturas* (translacional, vibracional e eletrônica) pode ser implementada para análise de problemas onde a hipótese de equilíbrio entre as temperaturas vibracional e eletrônica não possa ser empregada.

Anexos

Anexo A

Atmosfera Padrão

A.1 A Atmosfera Padrão dos EUA (*U.S. Standard Atmosphere*)

O trabalho do comitê norteamericano relativo à atmosfera padrão (COESA - *Committee on Extension to the Standard Atmosphere*), estabelecido em 1953, levou à produção de 4 versões da atmosfera padrão (*U.S. Standard Atmosphere*) nos anos de 1958, 1962, 1966 e 1976. Estes modelos foram publicados conjuntamente pelos seguintes órgãos: NOAA (*National Oceanic and Atmospheric Administration*), NASA (*National Aeronautics and Space Administration*) e *U.S. Air Force*. Ao todo, 30 organizações norteamericanas representando governo, indústria, institutos de pesquisa e universidades participaram no esforço do COESA.

Baseado em dados de foguetes e de satélites e na teoria de gases perfeitos, as densidades e temperaturas atmosféricas são representadas a partir do nível do mar até 1000 km de altitude. Abaixo de 32 km, a *U.S. Standard Atmosphere* é idêntica à atmosfera padrão da Organização Internacional de Aviação Civil (ICAO - *International Civil Aviation Organization*). As atmosferas padrões de 1958, 1962 e 1976 consistem de perfis simples que representam uma atmosfera idealizada, estacionária, com atividade solar moderada. Os parâmetros listados incluem temperatura, pressão, massa específica, aceleração da gravidade, livre caminho médio, velocidade do som, viscosidade dinâmica e cinemática, entre outros. A resolução de altitude varia de 0.05 km para baixas altitudes a 5 km para altas altitudes. O suplemento de 1966 inclui tabelas de temperatura, pressão, massa específica, velocidade do som, viscosidade e condutividade térmica para 5 latitudes do hemisfério norte (15, 30, 45, 60 e 75 graus) para condições de verão e inverno.

Nas Figuras A.1 e A.2 são apresentadas as variações de temperatura, pressão, massa

específica e velocidade do som em função da altitude dadas pela *U.S. Standard Atmosphere* de 1976 para altitudes de até 86 km.

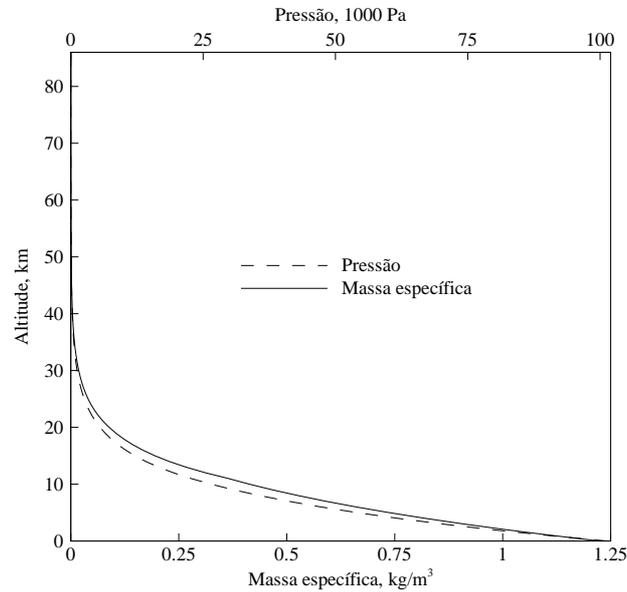


Figura A.1 – Variação da pressão e da massa específica em função da altitude para a atmosfera padrão (*U.S. Standard Atmosphere*).

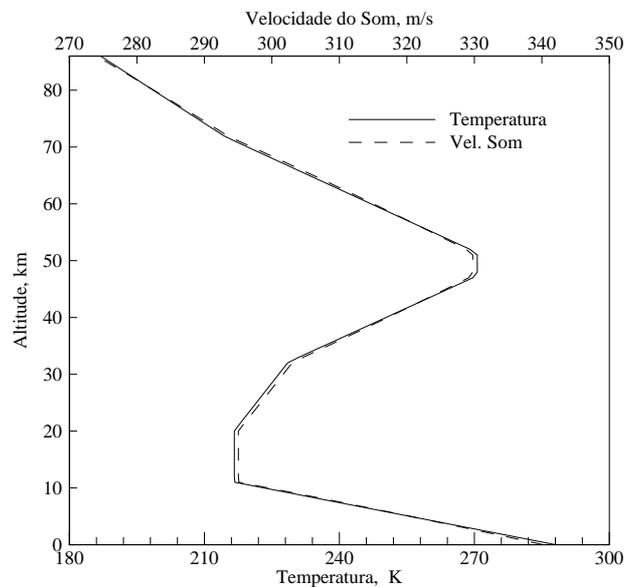


Figura A.2 – Variação da temperatura e da velocidade do som em função da altitude para a atmosfera padrão (*U.S. Standard Atmosphere*).

Anexo B

Termos Difusivos

B.1 Expansão dos termos difusivos

Neste anexo, expande-se os termos difusivos para inclusão na formulação completa de Navier-Stokes [Burbridge, 1999; Rossa, 2000].

O vetor de termos difusivos foi definido na equação (3.55), da seguinte forma:

$$G_i^n = \left\{ \begin{array}{c} 0 \\ -J_{s,i} \\ -\tau_{i1} \\ -\tau_{i2} \\ -\tau_{i3} \\ -q_{v,i} - h_{v,s}J_{s,i} \\ -q_i - h_s J_{s,i} - u_j \tau_{ij} \end{array} \right\} \quad (\text{B.1})$$

onde

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (\text{B.2})$$

Como pode ser observado nas equações acima, os termos correspondentes ao vetor G_i^n envolvem derivadas primeiras das variáveis. Levando-se em conta que nas equações de conservação aparece o termo $\partial G/\partial x_j$, verifica-se que os termos difusivos contêm derivadas segundas das variáveis. Portanto, para relaxar as condições de continuidade impostas às funções de interpolação quando é aplicado o método de Galerkin, convém trabalhar com a forma fraca da equação integral. Integrando por partes os termos difusivos, obtém-se:

$$\int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial G_i^n}{\partial x_i} d\Omega = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T G_i^n d\Gamma - \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} G d\Omega \quad (\text{B.3})$$

Pode-se observar que no lado direito da expressão acima ficam integrais contendo apenas derivadas primeiras das variáveis de campo.

A primeira integral do lado direito da expressão (B.3) corresponde aos termos de contorno. Estes termos já foram desenvolvidos no capítulo 5 e, portanto, não serão tratados aqui. Interessa, então, estudar a segunda integral do lado direito da expressão anterior.

Expandindo o vetor G_i^n nesta última integral, observa-se que não há contribuição de termos difusivos para a equação de conservação de massa da mistura. Para as demais equações de conservação, as contribuições são as seguintes:

1. Conservação de massa para cada espécie química:

$$- \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} G_i^n d\Omega = - \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} (-J_{s,j}^n) d\Omega = \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} J_{s,j}^n d\Omega \quad (\text{B.4})$$

2. Conservação de quantidade de movimento:

$$- \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} G_i^n d\Omega = - \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} (-\tau_{ij}^n) d\Omega = \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \tau_{ij}^n d\Omega \quad (\text{B.5})$$

3. Conservação de energia vibracional:

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} G_i^n d\Omega &= - \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} (-q_{v,j} - h_{v,s} J_{s,j}) d\Omega \\ &= \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} (q_{v,j} + h_{v,s} J_{s,j}) d\Omega \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

4. Conservação de energia total:

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} G_i^n d\Omega &= - \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} (-q_j - h_s J_{s,j} - u_j \tau_{jk}) d\Omega \\ &= \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} (q_j + h_s J_{s,j} + u_j \tau_{jk}) d\Omega \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

A título de ilustração, expande-se apenas a integral correspondente à equação de conservação de quantidade de movimento. Introduzindo a expressão (B.2) em (B.5), obtém-se:

$$\int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \tau_{ij}^n d\Omega = \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \right] d\Omega \quad (\text{B.8})$$

Substituem-se as variáveis aproximadas u_i^n pelas suas correspondentes expressões interpoladas, dadas por

$$u_i^n = [\Phi] \{u_i\}^n \quad (\text{B.9})$$

obtendo-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \tau_{ij}^n d\Omega = & \left(\int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} d\Omega \right) \{u_i\}^n \\ & + \left(\int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \right) \{u_j\}^n + \left(\int_{\Omega_e} \lambda \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} d\Omega \right) \{u_k\}^n \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Esta expressão poderia ser utilizada diretamente, mas é possível efetuar uma transformação que permite reduzir a quantidade de termos necessários.

Se a expressão anterior é expandida para os subscritos $i, j, k = 1, 2, 3$, obtém-se três equações contendo nove termos cada uma. Se sobre estas equações é efetuado um agrupamento dos termos extraíndo-se as componentes de velocidade como fator comum e, logo após, se levam as equações novamente à forma compacta, pode-se provar que a equação anterior é equivalente à seguinte expressão [Burbridge, 1999]:

$$\int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \tau_{ij}^n d\Omega = [D]_{ij} \{u_i\}^n \quad (\text{B.11})$$

onde

$$[D]_{ij} = \begin{cases} \int_{\Omega_e} \mu \left(2 + \frac{\lambda}{\mu} \right) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega + \int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} d\Omega, & \text{(sem soma em } i) \\ \text{se } i = j \text{ e } \begin{cases} i = 1 \rightarrow k = 2, 3 \\ i = 2 \rightarrow k = 1, 3 \\ i = 3 \rightarrow k = 1, 2 \end{cases} \\ \int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega_e} \lambda \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega, & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

Para os termos iterativos, as matrizes são as mesmas, isto é

$$-\int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \Delta G_i^{n+1} d\Omega = -\int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} (-\Delta \tau_{ij}^{n+1}) d\Omega + \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \Delta \tau_{ij}^{n+1} d\Omega \quad (\text{B.13})$$

sendo

$$\int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \Delta \tau_{ij}^n d\Omega = [D]_{ij} \{\Delta u_i\}^n \quad (\text{B.14})$$

Um processo similar ao efetuado acima deve ser realizado para expandir os termos difusivos correspondentes às outras equações de conservação. Entretanto, deve-se observar que os termos difusivos da equação de conservação de energia total envolvem um produto de funções, isto é, o termo $\tau_{ij}^n u_i^n$ que aparece na expressão (B.7). Isto leva à aparição de matrizes adicionais unicamente para os termos iterativos, devido ao fato do incremento temporal ter que ser desenvolvido através da regra da derivada de um produto, ou seja,

$$\Delta (\tau_{ij} u_i)^{n+1} = u_i^n \Delta \tau_{ij}^{n+1} + \tau_{ij}^n \Delta u_i^{n+1} \quad (\text{B.15})$$

No capítulo 4, estas matrizes adicionais foram denominadas $[E^*]_j$.

Referências Bibliográficas

- Ait-Ali-Yahia, D. & Habashi, W. G., 1997. "Finite Element Adaptive Method for Hypersonic Thermochemical Nonequilibrium Flows", **AIAA Journal**, vol. 35(8), pp. 1294–1302.
- Anderson, J. D., 1989. **Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics**. McGraw-Hill, New York.
- Anderson, J. D., 1995. **Computational Fluid Dynamics. The Basics with Applications**. McGraw-Hill, New York.
- Argyris, J., Doltsinis, I. S., & Friz, H., 1989. "Hermes Space Shuttle: Explorations of Reentry Aerodynamics", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 73, pp. 1–51.
- Argyris, J., Doltsinis, I. S., & Friz, H., 1990. "Studies on Computational Reentry Aerodynamics", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 81, pp. 257–289.
- Argyris, J., Doltsinis, I. S., Friz, H., & Urban, J., 1991. "An Exploration of Chemically Reacting Viscous Hypersonic Flow", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 89, pp. 85–128.
- Argyris, J., Doltsinis, I. S., Friz, H., & Urban, J., 1994. "Physical and Computational Aspects of Chemically Reacting Hypersonic Flows", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 111, pp. 1–35.
- Bertin, J. J., 1994. **Hypersonic Aerothermodynamics**. AIAA, Washington D.C.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N., 1960. **Transport Phenomena**. John Wiley and Sons, New York.

- Boldrini, J. L., Costa, S. I. R., Figueiredo, V. L., & Wetzler, H. G., 1986. **Álgebra Linear**. Ed. Harbra Ltda., São Paulo, 3rd edition.
- Brooks, A. N. & Hughes, T. J. R., 1982. "Streamline Upwind/Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 32(1-3), pp. 199–259.
- Brown, K. G., 1986, **Chemical and Thermal Nonequilibrium Heat-Transfer Analysis for Hypervelocity, Low Reynolds Number Flow**, pages 445–477, Volume 103 of Moss & Scott [1986].
- Burbridge, H. P., 1999. **O Esquema Explícito de Taylor-Galerkin na Simulação Numérica de escoamentos Compressíveis Tridimensionais Utilizando Elementos Finitos Hexaédricos de Oito Nós**, Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- Chapman, S. & Cowling, T. G., 1990. **The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases**. Cambridge University Press, Cambridge.
- Codina, R., 1998. "Comparison of Some Finite Element Methods for Solving the Diffusion-Convection-Reaction Equation", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 156, pp. 185–210.
- Davis, R. T., 1970. "Numerical Solution of the Hypersonic Viscous Shock-Layer Equations", **AIAA Journal**, vol. 8(5), pp. 843–851.
- Désidéri, J. A., 1991, **The Computation over Unstructured Grids of Inviscid Hypersonic Reactive Flow by Upwind Finite-Volume Schemes**, chapter 11, pages 387–446, In Murthy [1991].
- Donea, J., 1984. "A Taylor-Galerkin Method for Convective Transport Problems", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 20, pp. 101–119.
- Faires, J. D. & Burden, R., 1998. **Numerical Methods**. Brooks/Cole Publishing Company, 2nd edition.

- Gnoffo, P. A., Gupta, O. N., & Shinn, J. L., 1989. "Conservation Equations and Physical Models for Hypersonic Air Flows in Thermal and Chemical Nonequilibrium", **NASA Technical Paper**, (TP-2867), pp. 1–58.
- Gnoffo, P. A., Weilmuenster, K. J., Hamilton II, H. H., Olynick, D. R., & Venkatapathy, E., 1999. "Computational Aerothermodynamic Design Issues for Hypersonic Vehicles", **Journal of Spacecraft and Rockets**, vol. 36(1), pp. 21–43.
- Grundmann, R., 1991, **Introduction to the Physical Aspects of Hypersonic Aerodynamics**, chapter 1, pages 1–28, In Murthy [1991].
- Häuser, J., Muylaert, J., Wong, H., & Berry, W., 1991, **Computational Aerothermodynamics for 2D and 3D Space Vehicles**, chapter 12, pages 447–490, In Murthy [1991].
- Hayes, W. D. & Probstein, R. F., 1959. **Hypersonic Flow Theory**. Academic Press, New York.
- Hornung, H. G., 1972. "Non-equilibrium Dissociating Nitrogen Flow Over Spheres and Circular Cylinders", **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 53(1), pp. 149–176.
- Hughes, T. J. R., 1987a. **The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis**. Prentice Hall, New York.
- Hughes, T. J. R., 1987b. "Recent Progress in the Development and Understanding of SUPG Methods with Special Reference to the Compressible Euler and Navier-Stokes Equations", **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 7(11), pp. 1261–1275.
- Hughes, T. J. R., Mallet, M., & Mizukami, A., 1986. "A New Finite Element Formulation for Computational Fluid Dynamics: II. Beyond SUPG", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 54(3), pp. 341–355.
- Ivanov, M. S. & Gimelshein, S. F., 1998. "Computational Hypersonic Rarefied Flows", **Annual Review of Fluid Mechanics**, vol. 30, pp. 469–505.
- Lax, P. & Wendroff, B., 1960. "Systems of Conservation Laws", **Communications on Pure and Applied Mathematics**, vol. 13, pp. 217–237.

- Lax, P. & Wendroff, B., 1962. "On the Stability of Difference Schemes", **Communications on Pure and Applied Mathematics**, vol. 15, pp. 363–371.
- Lax, P. & Wendroff, B., 1964. "Difference Schemes for Hyperbolic Equations with High Order of Accuracy", **Communications on Pure and Applied Mathematics**, vol. 17, pp. 381–398.
- Lay, D. C., 1999. **Álgebra Linear e Suas Aplicações**. LTC, Rio de Janeiro.
- Lee, J. H., 1985, **Basic Governing Equations for the Flight Regimes of Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles**, pages 3–53, Volume 96 of Nelson [1985].
- Liepmann, H. W. & Roshko, A., 1957. **Elements of Gasdynamics**. John Wiley, New York.
- Maliska, C. R., 1995. **Transferência de Calor e Mecânica de Fluidos Computacional**. LTC, Rio de Janeiro.
- Meira Filho, L. G., Fortes, L. T. G., & Barcelos, E. D., 1999. "A Natureza Estratégica das Atividades Espaciais e o Papel da AEB", **Parcerias Estratégicas**, (7), pp. 7–20.
- Men'shov, I. & Nakamura, Y., 2000. "Numerical Simulations and Experimental Comparisons for High-Speed Nonequilibrium Air Flows", **Fluid Dynamics Research**, vol. 27, pp. 305–334.
- Metz, C. R., 1979. **Físico-Química**. McGraw-Hill, São Paulo.
- Millikan, R. C. & White, D. R., 1963. "Systematics of Vibrational Relaxation", **The Journal of Chemical Physics**, vol. 39(12), pp. 3209–3213.
- Moraes Jr., P. & Pilchowski, H. U., 1997, "**Plataforma Orbital Recuperável para Experimentação em Ambiente de Microgravidade**", In *XIV COBEM*.
- Moretti, G. & Abbett, M., 1966. "A Time-Dependent Computational Method for Blunt Body Flows", **AIAA Journal**, vol. 4(12), pp. 2136–2141.
- Moss, J. N. & Bird, G. A., 1985, **Direct Simulation of Transitional Flow for Hypersonic Re-entry Conditions**, pages 113–139, Volume 96 of Nelson [1985].

- Moss, J. N. & Scott, C. D., editors, 1986. **Thermophysical Aspects of Re-entry Flows. Progress in Astronautics and Aeronautics**, volume 103. AIAA.
- Murthy, T. K. S., editor, 1991. **Computational Methods in Hypersonic Aerodynamics**. Kluwer Academic Publishers.
- Nelson, H. F., editor, 1985. **Thermal Design of Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles. Progress in Astronautics and Aeronautics**, volume 96. AIAA.
- Park, C., 1985, **Problems of Rate Chemistry in the Flight Regimes of Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles**, pages 511–537, Volume 96 of Nelson [1985].
- Park, C., 1986, **Convergence of Computation of Chemical Reacting Flows**, pages 478–513, Volume 103 of Moss & Scott [1986].
- Park, C., 1989. "Assessment of Two-Temperature Kinetic Model for Ionizing Air", **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, vol. 3(3), pp. 233–244.
- Park, C., 1990. **Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics**. John Wiley, New York.
- Park, C., 1993. "Review of Chemical-Kinetic Problems of Future NASA Missions, I: Earth Entries", **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, vol. 7(3), pp. 385–398.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., & Flannery, B. P., 1992. **Numerical Recipes in Fortran: The Art of Scientific Computing**. Cambridge, 2nd edition.
- Rizzi, A. W. & Bailey, H. E., 1976. "Split Space-Marching Finite-Volume Method for Chemically Reacting Supersonic Flow", **AIAA Journal**, vol. 14(5), pp. 621–628.
- Rossa, A. L., 2000. **Um Esquema Semi-Implícito para a Simulação Numérica de escoamentos Incompressíveis Não-Isotérmicos via o M.E.F. Usando a Técnica de Taylor-Galerkin**, Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- Safjan, A. & Oden, J. T., 1995. "High-Order Taylor-Galerkin Methods for Linear Hyperbolic Systems", **Journal of Computational Physics**, vol. 120, pp. 206–230.

- Shapiro, A. H., 1953. **The Dynamics and Thermodynamics of Compressible Fluid Flow**. John Wiley, New York.
- Slabaugh, W. H. & Parsons, T. D., 1974. **Química Geral**. LTC, Rio de Janeiro.
- Souza, P. N. & Kataoka Filho, M., 1999. "O Programa Brasileiro para a Estação Espacial Internacional: Histórico, Estratégias e Objetivos", **Parcerias Estratégicas**, (7), pp. 123–136.
- Teracine, E. B., 1999. "Benefícios Sócio-Econômicos das Atividades Espaciais", **Parcerias Estratégicas**, (7), pp. 43–74.
- Van Wylen, G. J., Sonntag, R. E., & Borgnakke, C., 1994. **Fundamentals of Classical Thermodynamics**. John Wiley and Sons, New York, 4th edition.
- Vincenti, W. G. & Kruger, C. H., 1965. **Introduction to Physical Gas Dynamics**. John Wiley and Sons, New York.
- White, F. M., 1991. **Viscous Fluid Flow**. McGraw-Hill, New York.
- Wood, W. A., Gnoffo, P. A., & Rault, D. F. G., 1996. "Aerothermodynamic Analysis of Commercial Experiment Transporter (COMET) Reentry Capsule", **AIAA paper**, (AIAA 96-0316).
- Yoon, K. T., Moon, S. Y., Garcia, S. A., Heard, G. W., & Chung, T. J., 1998. "Flowfield-dependent mixed explicit-implicit (FDMEI) methods for high and low speed and compressible and incompressible flows", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 151(1-2), pp. 141–219.
- Youn, S. K. & Park, S. H., 1995. "A New Direct Higher-Order Taylor-Galerkin Finite Element Method", **Computer & Structures**, vol. 56(4), pp. 651–656.
- Zemansky, M. W., 1957. **Heat and Thermodynamics**. McGraw-Hill, New York, 4th edition.