



X Congresso Brasileiro de Engenharia Química Iniciação Científica

“Influência da pesquisa em Engenharia Química no desenvolvimento tecnológico e industrial brasileiro”

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Universidade Severino Sombra
Vassouras – RJ – Brasil

DESENVOLVIMENTO DE UM CÓDIGO EULER PARA ESCOAMENTO COMPRESSÍVEL EM REGIMES SÔNICO E SUPERSÔNICO

Gonçalves¹, H. L.; VIANNA², S. S. V.

¹Aluno da FEQ/Unicamp ²Docente da FEQ/Unicamp

Faculdade de Engenharia Química, Unicamp - Universidade Estadual de Campinas
Rua Albert Einstein, 500 – Cidade Universitária Zeferino Vaz – Campinas/SP 13083-852
e-mail: savio@feq.unicamp.br

RESUMO - A simulação de escoamentos é uma área de estudo de enorme relevância na Engenharia Química, e a segurança de processos é um aspecto de preocupação, principalmente no que tange a incêndios e explosões. Em ambos os casos, modelar corretamente o fenômeno depende fortemente do escoamento turbulento e da taxa de mistura em nível molecular, sendo que o último viabiliza a reação química através do contato entre combustível e oxidante. Nesse contexto, o presente trabalho apresenta os resultados de uma ferramenta computacional desenvolvida para modelar escoamentos em altas velocidades. O programa, baseado na equação de Euler, resolve as equações da continuidade e energia utilizando o método de Lax-Friedrichs e amortecendo as instabilidades através da técnica de viscosidade artificial. O método dos volumes finitos é aplicado em uma modelagem bidimensional e as equações são integradas via Runge-Kutta de quarta ordem, utilizando uma malha retangular. Os pontos da malha, bem como as conectividades, são escritos no padrão VTK (Visualization ToolKit), sendo então visualizadas no Paraview. Testou-se a técnica para diversas geometrias, tendo-se alguns resultados comparados com os de outros grupos de modelagem de fluidos, e a concordância obtida é satisfatória. O programa também apresentou bons resultados para geometrias curvas, capturando adequadamente regiões de descontinuidades.

Palavras chave: escoamento compressível, CFD, detonação.

INTRODUÇÃO

No contexto de segurança e acidentes na indústria química, explosões recebem atenção especial, sendo caracterizadas como um rápido aumento de volume e liberação de grande quantidade de energia, geralmente atingindo temperaturas altíssimas e gerando gases. Assim sendo, uma explosão é categorizada no

regime de detonação ou de deflagração, conforme suas características.

O regime de deflagração caracteriza-se pela ocorrência da transmissão de calor e de massa na zona reativa, desde a zona pré-aquecida (região dos reagentes) para a zona de estabilização (região dos produtos), favorecendo a propagação da frente de chama, que segue consumindo os reagentes até que os mesmos sejam convertidos em produto, ou

seja, há transferência de calor de uma camada do material em combustão para a camada seguinte, que atinge sua temperatura de auto-ignição, e assim sucessivamente. Sua velocidade de propagação é subsônica.

Já no regime de detonação, foco desse estudo, há a formação de uma onda de choque, que comprime o material até suas moléculas atingirem a temperatura de auto-ignição, sendo que a propagação ocorre em velocidades supersônicas e, como as variações de pressão envolvidas são muito superiores às que ocorrem na deflagração, esse tipo de explosão pode ser muito destrutivo, como ocorreu no acidente no depósito de Buncefield, na Inglaterra (Drysdale, 2007). A transição entre deflagração e detonação é uma área de intensa pesquisa, aonde ferramentas computacionais que possam prever esta transição estão em fase embrionária.

Nesse contexto, pretende-se desenvolver uma ferramenta computacional gratuita utilizando-se a linguagem Fortran, que poderia ser utilizada tanto para simulação de escoamentos e acidentes, quanto para fins educacionais.

METODOLOGIA

O problema foi modelado a partir da equação de Euler em duas dimensões, tendo-se escoamentos isentálpicos com variação de massa específica (compressíveis). As equações que caracterizam o problema são (Heidari e Wen, 2011):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u)u + \nabla p = \rho g \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (u(E + p)) = \rho g \quad (3)$$

Para a resolução das equações diferenciais parciais foi utilizado o método de Lax-Friedrichs (Hirsch, 2007), que é um método de discretização utilizando diferenças centrais. A ocorrência de instabilidade é inerente ao método, e para que ocorra convergência é necessária a adição de um termo chamado *viscosidade artificial*. Ao contrário do que o nome sugere, não se trata de

um termo viscoso, mas sim de um termo necessário para aumentar a estabilidade do método, e possibilitar a obtenção do resultado sem afetar o mesmo, sendo essa denominação a utilizada no método matemático. Todas as derivadas temporais foram discretizadas com diferença central e, para garantir estabilidade, foi feita uma média entre o valor da variável em questão (prop) e o dos nós vizinhos. Tal termo adicional é proporcional a $\nabla^2 \text{prop}$, e por isso é também chamando de viscosidade artificial, por se assemelhar ao termo viscoso de Navier-Stokes.

Além disso, foi utilizado o método de Runge-Kutta de quarta ordem e as equações de balanço utilizadas foram as referentes à massa, energia e momento. (Vianna e Cant, 2010 e 2012). As condições de contorno na entrada do domínio computacional foram prescritas de acordo com a condição de estagnação, usando escoamento isentálpico. Nas paredes a velocidade é nula (*non slip condition*) e não há fluxo. Na saída do domínio computacional a pressão é fixa e não há gradiente.

Utilizando a abordagem matemática descrita, o programa realiza iterações de forma explícita no tempo. A cada cinco iterações checa-se a convergência e, caso atinja-se um valor dentro da tolerância pré-estabelecida, o programa encerra os cálculos. Abaixo está o gráfico que mostra o logaritmo do erro em cada iteração.

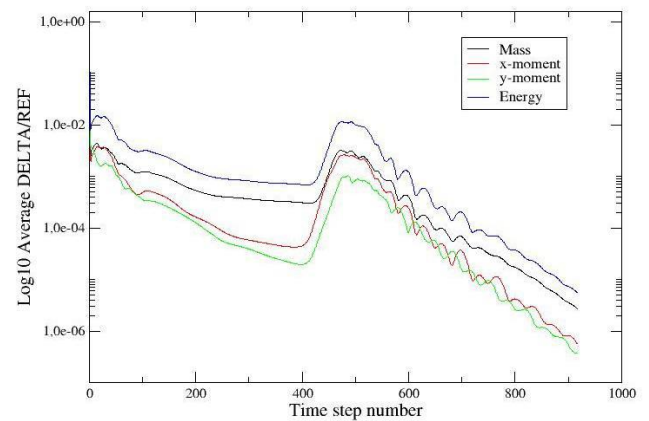


Figura 1: Iterações e seu respectivo erro

O programa faz uso de sub-rotinas em seu funcionamento, sendo as suas funções: calcular as variáveis secundárias a partir das primárias (densidade, e o seu produto pela velocidade e energia), calcular condições de

contorno nas células computacionais nas fronteiras do domínio, calcular o fluxo através da área das células e somá-los, calcular mudanças na variável considerada e interpolar os valores linearmente com os nós da célula computacional, seja em x ou em y, de forma que ocorra conservação de massa e momento.

A geometria do problema é montada a partir de um arquivo que o programa lê, e tal arquivo contém o número de linhas e colunas de células existentes, bem como as coordenadas dos pontos superiores e inferiores. Com tais dados, a geometria e sua malha podem ser então escritas, como exemplificado pelas Figuras 2 a 6.

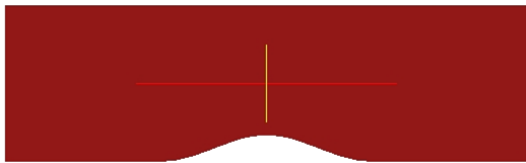


Figura 2: Geometria com estrangulamento no centro

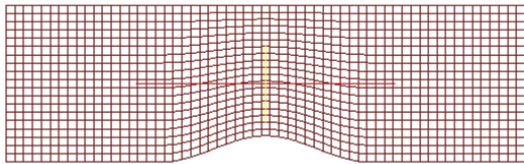


Figura 3: Malha referente à geometria com estrangulamento no centro

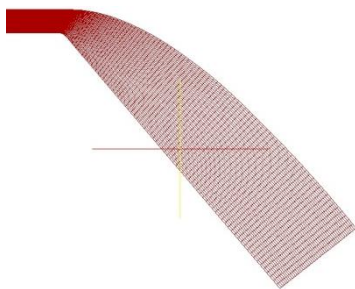


Figura 4: Malha da geometria com expansão e escoamento descendente

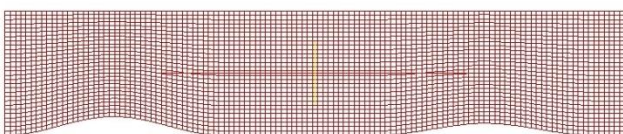


Figura 5: Malha da geometria com sequência de estrangulamentos

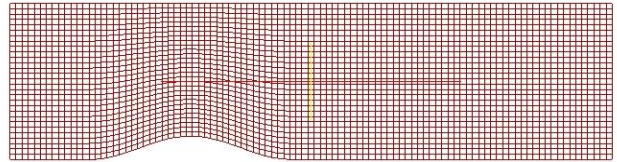


Figura 6: Malha da geometria com estrangulamento no lado esquerdo

O software desenvolvido é composto de três partes: pré-processamento, que envolve a modelagem do problema considerando as condições iniciais e de contorno, criação da malha e resolução das equações diferenciais, com sua discretização, e pós-processamento dos resultados, que envolve a organização e formatação dos resultados.

O arquivo que o programa gera está no formato VTK (Visualization ToolKit), que é então lido pelo *software* Paraview, o que permite a visualização dos resultados. Nesse formato os nós que constituem cada célula são especificados, e posteriormente são escritas as quantidades escalares e vetoriais calculadas pelo programa.

Do ponto de vista computacional, a implementação da rotina de visualização é feita em duas etapas. Na primeira etapa são gerados os contornos e as superfícies que formam a geometria, enquanto que na segunda são gerados os valores dos escalares e dos vetores calculados (Kitware, Inc., 2010).

RESULTADOS

A seguir, nas Figuras 7 e 8, têm-se alguns dos resultados obtidos pelo programa, novamente para a geometria com estrangulamento no centro:

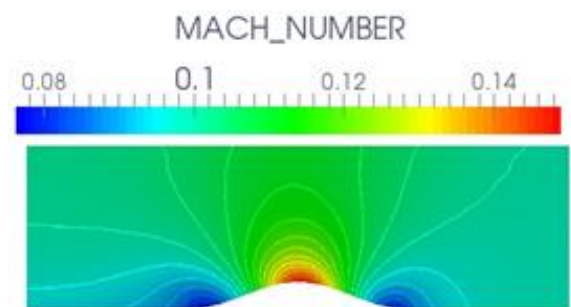


Figura 7: Número de Mach ao longo da geometria

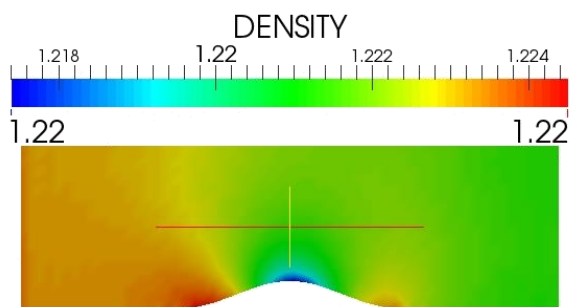


Figura 8: Densidade ao longo da geometria

Deve-se observar que esse escoamento ocorre em condições subsônicas, pois o número de Mach, razão entre a velocidade do fluido e a do som nele, é menor do que a unidade em todo o escoamento. Resultados esperados, como maior velocidade na região de menor área, também puderam ser notados.

Algo merecedor de atenção é a variação da densidade, que ocorre somente na terceira casa decimal, sendo muito pequena e indicando a validade da consideração de escoamento incompressível para aqueles que ocorrem em baixas velocidades.

Os resultados obtidos foram comparados com os obtidos pelo grupo da Universidade de Stanford. Análise das Figuras 7 e 9 apontam para resultados similares (Aerospace Design Lab, 2013).

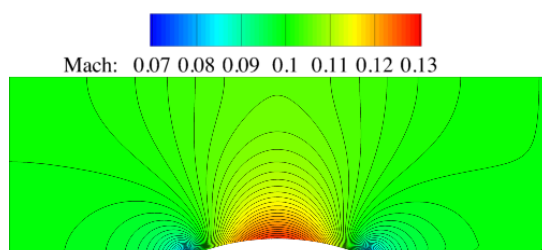


Figura 9: Resultados obtidos por outro grupo de pesquisa para a mesma geometria considerando o número de Mach

A proximidade entre os resultados corroboram a validade dos mesmos e o bom funcionamento do programa para a simulação de escoamentos.

Já quando as condições do sistema levam a um regime supersônico, os resultados obtidos podem ser observados nas Figuras 10 e 11:

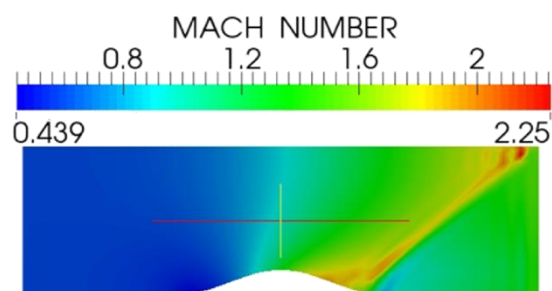


Figura 10: Número de Mach no caso supersônico

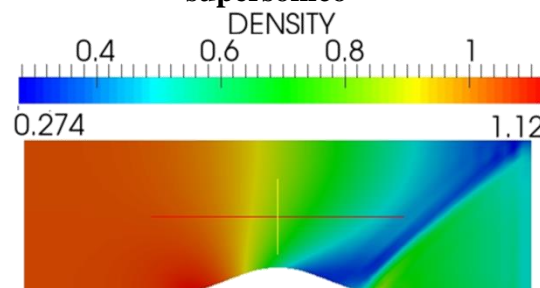


Figura 11: Densidade para o caso supersônico

Nessa situação deve-se prestar especial atenção à formação da onda de choque (*shockwave*) logo após o fim do estrangulamento. Ondas de choque são caracterizadas por mudanças abruptas nas condições de escoamento, originando assim regiões de descontinuidade, nas quais há um rápido aumento na velocidade, como é visível na Figura 10. Essas regiões ocorrem quando a velocidade do fluido é superior à do som, ou seja, em condições supersônicas.

Diferença notável entre o escoamento subsônico e o supersônico é a variação da densidade, que assume valores apreciáveis nesse último. Assim sendo, nesse caso o fluido necessariamente deve ser tratado como compressível, e uma abordagem adequada, em que o programa resolve as equações compressíveis utilizando o equacionamento isentálpico, nas condições de estagnação na entrada do domínio computacional, foi utilizado.

Outras geometrias também foram estudadas e alguns dos resultados para o número de Mach são mostrados a seguir, sendo notável a presença das ondas de choque:

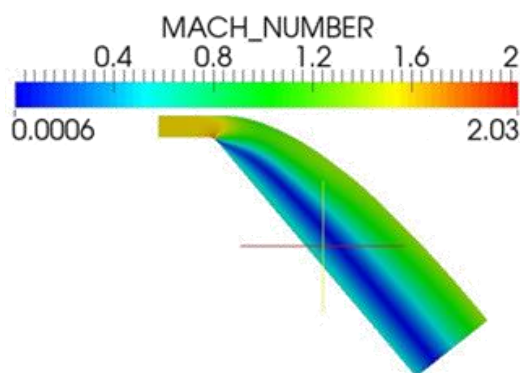


Figura 12: Expansão e escoamento descendente

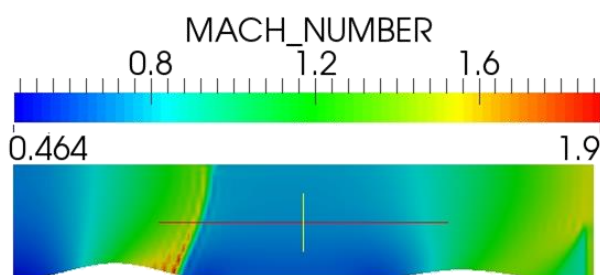


Figura 13: Sequência de estrangulamentos

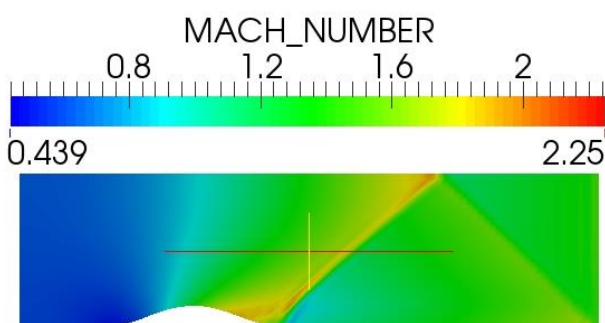


Figura 14: Estrangulamento localizado à esquerda

Desse modo, diversas geometrias foram estudadas e, em todas elas, aspectos relacionados ao escoamento compressível foram verificados, principalmente a onda de choque, cuja propagação é causa do regime de detonação.

CONCLUSÃO

Os resultados obtidos descrevem muito bem diversos tipos de escoamentos, sejam eles subsônicos ou supersônicos, incompressíveis ou compressíveis. Ocorreu a captura da onda de choque, fenômeno característico do

escoamento supersônico, e a pesquisa da fluidodinâmica, parte fundamental do escoamento reativo, está em linha com o comportamento esperado

Até o momento foi desenvolvida uma ferramenta nacional aberta para escoamento de fluidos em regimes sônico e supersônico, com todo seu pós-processamento no formato vtk. Em seu atual estado pode ser utilizada para estudos aerodinâmicos, como em carros de corrida e asas de avião, ou em aplicações de CFD, como em equipamentos, tubulações, medidores e operações unitárias.

A próxima etapa do trabalho será contemplar reações de combustão, para modelar os casos de detonação, bem como a adição da terceira dimensão às geometrias.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AEROSPACE DESIGN LAB, University of Stanford, Tutorial 1- Bump in a Channel, encontrado em <http://goo.gl/u0kGsW> no dia 09/05/2014.
- DRYSDALE, Dougal *et al.* (2007) "Explosion Mechanism Advisory Group Report", Buncefield Major Incident Investigation Board Reports.
- HEIDARI, Ali *et al.* (2011), "Numerical simulation of large scale hydrogen detonation" International Journal of Hydrogen Energy, 36(3), 2538-2544p.
- HIRSCH, Charles (2007) Numerical Computation of Internal and External Flows: The Fundamentals of Computational Fluid Dynamics, Second Edition.
- KITWARE, Inc. (2010) The VTK User's Guide, 11th Edition,
- VIANNA, S.S.V, CANT, R.S (2012) "Explosion pressure prediction via polynomial mathematical correlation based on advanced CFD modeling" Journal of Loss Prevention in the Process Industries, Volume 25, Issue 1, 81-89p.
- VIANNA, S.S.V., CANT, R.S. (2010) "Modified Porosity Approach and Laminar Flamelet modeling for Advanced Simulation of Accidental Explosions" Journal of Loss Prevention in the Process Industries, Volume 23, 3-14p.

WEN, J.X *et al.* (2011) “Numerical simulation of propane detonation in medium and large scale geometries” *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 24(2), 187-193p.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos à organização do X COBEQ-IC por permitir a apresentação desse trabalho durante a realização do evento, bem como a publicação do mesmo, e ao grupo PET (Programa de Educação Tutorial), financiado pelo MEC, pois essa iniciação científica é parte dos trabalhos ligados ao programa.