

**Simulação computacional de  
escoamentos reativos com baixo  
número de Mach aplicando técnicas de  
refinamento adaptativo de malhas**

Priscila Cardoso Calegari

TESE APRESENTADA  
AO  
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA  
DA  
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
PARA  
OBTENÇÃO DO TÍTULO  
DE  
DOUTOR EM CIÊNCIAS

Área de Concentração: Matemática Aplicada  
Orientador: Prof. Dr. Alexandre Megiorin Roma

Durante o desenvolvimento deste trabalho o autor recebeu  
auxílio financeiro do CNPq e da CAPES

São Paulo, agosto de 2012



# **Simulação computacional de escoamentos reativos com baixo número de Mach aplicando técnicas de refinamento adaptativo de malhas**

Priscila Cardoso Calegari

Esta versão da tese contém as correções e alterações sugeridas pela Comissão Julgadora durante a defesa da versão original do trabalho, realizada em 12/06/2012. Uma cópia da versão original está disponível no Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo.

Comissão Julgadora:

- Prof. Dr. Alexandre Megiorin Roma (orientador) - IME-USP
- Prof. Dr. Luis Carlos de Castro Santos - IME-USP
- Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto - UFU
- Prof. Dr. Ricardo Serfaty - PETROBRAS
- Prof. Dr. Antonio Castelo Filho - ICMC-USP



---

# Agradecimentos

Ao professor Alexandre pela paciência e disposição em me orientar, por sua luta diária em melhorar nosso ambiente de trabalho, por todo apoio, confiança e conselhos para o meu crescimento profissional e pessoal. Ao professor Guenther por apresentar o problema e por toda sua disposição e contribuição. Ao professor Luis Carlos por todas as sugestões e envolvimento na realização deste trabalho. Aos membros da banca por todas as sugestões e correções que enriqueceram o trabalho. Aos meus pais, por todo carinho e apoio ao longo destes onze anos que estive distante, amo vocês. À pessoa maravilhosa que acompanhou a realização deste trabalho diariamente: Álvaro, que sempre foi meu maior incentivador, companheiro de todas as horas, por todo o seu amor, envolvimento e compreensão. À toda minha família (em Santa Catarina e em Goiás), principalmente meus sobrinhos, por compreenderem minha ausência em suas comemorações. Aos colegas do LabMap que me acompanharam nesta jornada, Anderson, Daniel, Diane, Luciane, Marcelo, Nelson, Pedro e Tatiane. Em especial aos meus *irmãos* Wellington e Catalina. Ao Rudimar pela disposição em ler a versão preliminar. Ao Nils, ao Newton e ao Fernando, colegas engenheiros. Ao pessoal do MFLab, da Universidade Federal de Uberlândia, pela disposição em responder minhas dúvidas, em especial Millena, Pivello, Rafael, João Marcelo e Leonardo. Aos administradores do LabMap, Oda, Chico e Marcello por manterem nosso laboratório de pé. Aos meus amigos por me apoiarem. À todas as pessoas que de alguma maneira contribuíram com a realização deste trabalho. Agradeço ao IME pelo auxílio financeiro e à CAPES e ao CNPq pelo suporte financeiro durante a realização deste trabalho.

---

“Embora ninguém possa voltar atrás e fazer um novo começo, qualquer um pode começar agora e  
fazer um novo fim.”

Chico Xavier.

---

# Resumo

Calegari, P. C. **Simulação computacional de escoamentos reativos com baixo número de Mach aplicando técnicas de refinamento adaptativo de malhas.** 2012. Tese (Doutorado) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, 2012.

O foco principal do presente trabalho é estender uma metodologia numérica embasada no uso de uma técnica de refinamento adaptativo de malha (AMR - *Adaptive Mesh Refinement*) e no uso de esquemas temporais multipasso implícitos-explícitos (IMEX) a aplicações envolvendo escoamentos reativos com baixo número de Mach. Originalmente desenvolvida para escoamentos incompressíveis, a formulação euleriana daquela metodologia emprega as equações de Navier-Stokes como modelo matemático para descrever a dinâmica do escoamento e o Método da Projeção, baseado no divergente nulo da velocidade do escoamento, para tratar o acoplamento pressão-velocidade presente na formulação com variáveis primitivas. Tal formulação euleriana original é estendida para acomodar novas equações agregadas ao modelo matemático da fase contínua: *conservação de massa, fração de mistura (para representar as concentrações de combustível e oxidante), e energia.* Além disso, uma *equação termodinâmica de estado* é integrada ao modelo matemático estendido e é empregada juntamente com a equação de conservação de massa para produzir uma nova restrição (não nula desta vez) ao divergente do campo de velocidade. Assume-se que o escoamento ocorre a baixo número de Mach (hipótese principal). O Método de Diferença Finita é empregado na discretização espacial das variáveis eulerianas de estado, empregando-se uma malha AMR. As vantagens e dificuldades desta extensão são cuidadosamente investigadas e reportadas. Pela importância, do ponto de vista de aplicações práticas, alguns estudos numéricos preliminares envolvendo escoamentos incompressíveis turbulentos com *sprays* são realizados (as gotículas compõem a *fase dispersa*). Num primeiro momento, apenas *sprays* com gotículas *inertes* são considerados. Embora ainda apenas iniciais, tais estudos já se mostram importantes pois identificam com clareza, em primeira instância, algumas das dificuldades inerentes a serem enfrentadas ao se tratar dentro desta nova metodologia um conjunto “relativamente grande” de gotículas lagrangianas. No caso de escoamentos incompressíveis turbulentos com *sprays*, a integração temporal se dá com métodos IMEX para a fase contínua e com o Método de Euler Modificado para a fase dispersa. A turbulência, em todos os casos que a envolvem, é tratada pelo modelo de Simulação das Grandes Escalas (LES - *Large Eddy Simulation*). As simulações computacionais se dão em um domínio tridimensional, um paralelepípedo, e empregam uma extensão (resultante do presente trabalho) do código “AMR3D”, um programa de computador sequencial implementado em Fortran90, oriundo de uma colaboração de longa data entre o IME-USP e o MFLab/FEMEC-UFU (Laboratório de Dinâmica de Fluidos da Universidade Federal de Uberlândia). O processamento foi efetuado no LabMAP (Laboratório da Matemática Aplicada do IME-USP).

---

**Palavras-chave:** AMR, IMEX, Método da Projeção, Escoamentos Reativos, Baixo Número de Mach, *Sprays*, Métodos Multinível-*Multigrid*.



---

# Abstract

Calegari, P. C. **Computational simulation of low Mach number reacting flows applying adaptative mesh refinement techniques**. 2012. Thesis (Ph.D.) - Institute of Mathematics and Statistics, University of São Paulo, 2012.

It is the main goal of the present work to extend a numerical methodology based on both the use of an adaptive mesh refinement technique (AMR) and the use of a multistep, implicit-explicit time-step strategy (IMEX) to applications involving low Mach number reactive flows. Originally developed for incompressible flows, the Eulerian formulation of that methodology employs the Navier-Stokes equations to model the flow dynamics and the Projection Method, based on the vanishing divergence of the velocity field, to tackle the pressure-velocity coupling present when using primitive variables. That Eulerian formulation is extended by adding a new set of equations to the original mathematical model, describing the various properties of the continuous phase: *mass conservation*, *mixture fraction (to represent concentrations of fuel and oxidizer)* and *energy*. Also, a *thermodynamic equation of state* is included into the extended mathematical model which is employed, along with the equation for the conservation of mass, to derive a new restriction (this time, different from zero) to the divergence of the velocity field. It is assumed that one is dealing with a low Mach number flow (the main hypothesis). The discretization in space employs the Finite Difference Method for the Eulerian variables on a AMR mesh. Advantages and difficulties of such an extension of the previous methodology are carefully investigated and reported. For its importance in the real-world applications, few preliminary numerical studies involving incompressible turbulent flows with sprays are performed (the droplets form what it is called *the dispersed phase*). Only sprays formed by *inert* droplets are considered. Even though initial yet, such studies are most important because they clearly identify, first hand, certain difficulties in handling relatively “large” sets of Lagrangian droplets in the context of this new AMR methodology. In the context of turbulent incompressible flows with sprays, the overall time-step scheme is given by IMEX methods for the continuous phase and by the Improved Euler Method for the dispersed phase. In all the cases in which it is considered, turbulence is modeled by the Large Eddy Simulation (LES) model. The computational simulations are held in a tridimensional domain given by a parallelepiped and all of them employ the extension (resulting of the present work) of the “AMR3D” code, a sequential computer program implemented in Fortran90, whose origin is the collaborative work between IME-USP and MFLab/FEMEC-UFU (Fluid Dynamics Laboratory, Federal University of Uberlândia). Computations were performed at LabMAP (Applied Mathematics Laboratory at IME-USP).

**Keywords:** AMR, IMEX, Projection Method, Reacting Flows, Low Mach Number, Sprays, Multilevel-Multigrid Methods.



## Gracias por visitar este Libro Electrónico

Puedes leer la versión completa de este libro electrónico en diferentes formatos:

- HTML(Gratis / Disponible a todos los usuarios)
- PDF / TXT(Disponible a miembros V.I.P. Los miembros con una membresía básica pueden acceder hasta 5 libros electrónicos en formato PDF/TXT durante el mes.)
- Epub y Mobipocket (Exclusivos para miembros V.I.P.)

Para descargar este libro completo, tan solo seleccione el formato deseado, abajo:

