

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

DESENVOLVIMENTO DE UM SISTEMA DE DINÂMICA DOS FLUIDOS
COMPUTACIONAL EMPREGANDO O MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS E
TÉCNICAS DE ALTO DESEMPENHO

por

João Américo Aguirre Oliveira Jr.

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, outubro de 2006

DESENVOLVIMENTO DE UM SISTEMA DE DINÂMICA DOS FLUIDOS
COMPUTACIONAL EMPREGANDO O MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS E
TÉCNICAS DE ALTO DESEMPENHO

por

João Américo Aguirre Oliveira Jr.
Engenheiro Mecânico

Dissertação 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

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de transporte

Orientador: Prof^ª. Dr^ª. Adriane Prisco Petry

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Argimiro Resende Secchi

Prof. Dr. Armando Miguel Awruch

Prof. Dr. Horácio Antônio Vielmo

Prof. Dr. Sérgio Luiz Frey

Prof. Dr. Flávio José Lorini
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 06 de outubro de 2006.

RESUMO

O presente trabalho apresenta o desenvolvimento de um código numérico computacional, baseado no método de elementos finitos, para simulação de grandes escalas de escoamentos bi- e tridimensionais, transientes, incompressíveis, isotérmicos e turbulentos.

O código aproxima as equações médias espaciais de Navier-Stokes e da continuidade escritas utilizando a hipótese de quase-incompressibilidade. O uso dessa hipótese permite a aplicação de aproximações de mesma ordem para os campos de pressão e velocidade. Junto com a hipótese de quase-incompressibilidade, é implementada uma forma proposta pelo grupo de diagonalização das matrizes formadas no problema, de forma a simplificar e estabilizar a solução do sistema linear.

Para a modelagem sub-malha é utilizado o modelo clássico de Smagorinsky para contabilizar os efeitos das menores estruturas turbulentas (estruturas sub-malha) sobre o escoamento resolvido (com grandes escalas turbulentas).

Toda a abordagem numérica utilizada é detalhada e apresentada na forma em que foi implementada no código. Em resumo é utilizado o método de elementos finitos, aplicando os métodos de Newton ou de Picard para aproximar o sistema não linear de equações e um esquema de avanço no tempo variável, permitindo o uso das formas explícita e semi-implícita de avanço.

Uma importante parte do trabalho é dedicada à estruturação e aplicação de técnicas de alto desempenho na elaboração do código. O objetivo é obter um código que permita melhorias e implementação de novos métodos e modelos de forma simples e que, ao mesmo tempo, tenha um bom desempenho computacional. São aplicados métodos de armazenagem compacta de matrizes para a redução da quantidade de memória necessária e para viabilizar o uso de esquema semi-implícitos de avanço no tempo. Uma técnica de paralelização do processamento para permitir o uso de *clusters* foi implementada, sendo a mesma adequada para uso em máquinas de memória compartilhada.

Dois casos de teste são apresentados. O escoamento em uma cavidade, bi- e tridimensional, em regimes laminar e turbulento e o escoamento bidimensional, também laminar e turbulento, sobre um degrau (expansão em um canal).

Por fim são apresentadas as conclusões obtidas e sugestões para melhorias, novas implementações e novas linhas oriundas desse trabalho são feitas.

ABSTRACT

“Development of a Computational Fluid Dynamics System Applying the Finite Element Method and High Performance Techniques”

The present work presents the development of a computational code, based on the finite elements method, for large eddy simulation of two and three dimensional, transient, incompressible, isothermal and turbulent flows.

The code approximates the spatial average of the Navier-Stokes and continuity equations. The hypothesis of *slight-compressibility* is used allowing the application of equal order approximations for pressure and velocity fields. A form of matrix diagonalization is implemented, in order to simplify and stabilize the solution of the linear system.

For the sub-grid modeling, the classical Smagorinsky model is employed, in order to account for the effects of small turbulent structures (sub-grid structures).

The numerical approach employed in this work is detailed and presented in the form that was implemented in the code. In summary, the finite elements method is employed, applying Newton or Picard techniques to solve the non-linear system of equations and a variable time marching scheme, allowing the use of explicit and semi-implicit forms schemes.

An important part of this work is dedicated to the structuring and application of high performance techniques in the code elaboration. The objective is to obtain a code which allows improvements and implementation of new methods and models in a simple way and conserving, at the same time, a good computational performance. Methods of compact matrix storage are applied to reduce the required memory when semi-implicit schemes are used. A parallelization technique is also employed in order to enable the use of clusters, the implemented technique is suitable to be used in shared memory machines.

Two test cases are presented. The two and three dimensional laminar and turbulent flow in a lid-driven cavity and the two-dimensional laminar and turbulent flow over a backward-facing step (a channel with an expansion).

Finally, the conclusions are presented, and suggestions for improvements, new implementations and new subjects of future researches are given.

ÍNDICE

1. Introdução.....	1
2. Equações básicas e Escoamentos turbulentos	6
2.1. Equações básicas da dinâmica dos fluidos	6
2.2. Formulação de quase-incompressibilidade	8
2.2.1. Equações básicas quase-incompressíveis na forma adimensional	10
2.3. Escoamentos turbulentos.....	12
2.3.1. Grandes escalas do escoamento turbulento e estruturas coerentes	15
3. Simulação numérica de escoamentos turbulentos	17
3.1. Simulação numérica direta de escoamentos turbulentos.....	18
3.2. Modelagem clássica de escoamentos turbulentos	19
3.3. Simulação de grandes escalas	21
3.3.1. Filtragem espacial para simulação de grandes escalas.....	23
3.3.2. Modelos sub-malha	31
4. Método numérico	38
4.1. Forma variacional das equações de conservação de massa e quantidade de movimento ..	40
4.2. Aproximação de elementos finitos e formação do problema matricial.....	42
4.3. Discretização do avanço no tempo.....	47
4.4. Método de Newton para sistemas de equações algébricas não-lineares	50
4.5. Oscilações no campo de pressão e diagonalização seletiva da matriz de massa.....	52
4.6. Método de Picard para sistemas de equações algébricas não-lineares.....	55
4.7. Método explícito simplificado e explícito diagonalizado	57
4.8. Solução do sistema linear	58
5. ASPECTOS COMPUTACIONAIS	59
5.1. Estruturação do novo código.....	59
5.2. Armazenagem compacta de matrizes	60
5.3. Implementação de processamento paralelo utilizando a técnica OpenMP	63
6. RESULTADOS	65
6.1. Escoamento em uma cavidade bidimensional.....	65
6.2. Escoamento em uma cavidade tridimensional	74
6.2.1. Escoamento em uma cavidade tridimensional a $Re_{cavidade} = 3200$	74
6.2.2. Escoamento em uma cavidade tridimensional a $Re_{cavidade} = 10000$	82

6.3. Escoamento em um degrau bidimensional.....	88
7. Conclusão	93
8. Referências bibliográficas	95

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Matriz de termos advectivos [-]
A'	Matriz da derivada da matriz de termos advectivos [-]
B	Dimensão da cavidade tridimensional no eixo de coordenadas x [m]
c	Velocidade do som no meio [m/s]
C	Termos cruzados da SGE [m^2/s^2]
C	Parâmetro de viscosidade do modelo dinâmico [-]
C	Matriz de termos viscosos [-]
C_s	Constante de Smagorinsky [-]
D	Dimensão da cavidade tridimensional no eixo de coordenadas y [m]
D	Matriz de termos do divergente de velocidade [-]
f	Componente do vetor de forças externas por unidade de massa [N/kg]
F	Vetor de forças externas por unidade de volume [N/m^3]
F	Vetor de carregamento (forças externas) [N]
F	Componente do vetor de forças externas por unidade de volume [N/m^3]
g	Variável genérica [-]
G	Função filtro (para simulação de grandes escalas) [-]
G	Matriz de termos do gradiente de pressão [-]
h	Tamanho característico da malha [m]
h	Altura do degrau [m]
H	Altura do canal de entrada [m]
H	Dimensão da cavidade tridimensional no eixo de coordenadas z [m]
ija	Vetor de índices [-]
J	Matriz jacobiana, ou matriz tangente [-]
k	Número de onda do espaço de Fourier [m^{-1}]
K	Matriz de rigidez não linear [-]
l	Comprimento característico das menores escalas turbulentas [m]
l	Comprimento da seção de entrada do degrau [m]
L	Comprimento do canal após o degrau [m]
L	Comprimento característico da geometria [m]
L	Termos de Leonard da SGE [m^2/s^2]
Mc	Número de Mach [-]

M	Matriz de massa [-]
n	número de variáveis [-]
N	Número de nós que compõem o elemento [-]
p	Pressão estática [Pa]
q	Função peso associada à pressão [-]
Re	Número de Reynolds [-]
R	Vetor de valores residuais da equação matricial aproximada do problema [-]
sa	Vetor de valores [-]
S	Razão entre a altura do canal de entrada (H) e a altura do degrau (h)
\bar{S}	Tensor taxa de deformação de grandes escalas [-]
\bar{S}	Tensor taxa de cisalhamento [-]
S	Vetor de forças de tração sobre a fronteira do elemento [N]
t	Tempo [s]
T	Temperatura [K] ou tempo característico [s]
T	Tensor de tensões sub-malha [Pa]
u	Vetor velocidade [m/s]
u	Componente genérica ou componente na direção x do vetor velocidade [m/s]
U	Velocidade de referência do problema [m/s]
U	Velocidade média do perfil parabólico na entrada do canal [m/s]
U	Vetor de incógnitas [-]
v	Componente genérica ou componente na direção y do vetor de velocidade [m/s]
V	Matriz de termos viscosos volumétricos [-]
w	Componente genérica ou componente na direção z do vetor de velocidade [m/s]
x	Direção genérica, direção x do sistema cartesiano de coordenadas ou componente genérica do vetor de posição [m]
x_R	Distância de recolamento da recirculação principal [m]
x	Vetor posição [m]
y	Direção genérica, direção y do sistema cartesiano de coordenadas ou componente genérica do vetor de posição [m]
z	Direção genérica, direção z do sistema cartesiano de coordenadas ou componente genérica do vetor de posição [m]
Δt	Passo de tempo [s]
w	Função peso associada à velocidade [-]

γ	Constante da aproximação dos termos de Leonard e Cruzados [-]
δ	Função delta de Kroneker [-]
Γ	Contorno do domínio do problema [-]
λ	Viscosidade volumétrica do fluido [$Pa \cdot s$]
μ	Viscosidade absoluta do fluido [$Pa \cdot s$]
ν	Viscosidade cinemática do fluido [m^2/s]
θ	Parâmetro de avanço no tempo [-]
ρ	Massa específica [kg/m^3]
$\bar{\Delta}$	Dimensão característica de um filtro [m]
$\tilde{\Delta}$	Tamanho característico de um filtro de teste [m]
τ	Tensões sub-malha por unidade de massa específica da SGE [m^2/s^2]
ω	Vorticidade [s^{-1}]
ψ	Função de forma [-]
Ω	Domínio do problema [-]

Subscritos

o	Valor inicial ou valor definido de uma variável
ef	Valor efetivo de uma variável
i, j, k	Componentes das grandezas vetoriais e matriciais
c	Variável característica de uma estrutura coerente
D	Variável com condição de primeira espécie (condição de Dirichlet)
L	Variável baseada no comprimento característico da geometria L
$n, n+1$	Indicador do instante de tempo de cada equação
N	Variável com condição de segunda espécie (condição de Neumann)
RMS	Valor flutuante médio da variável
$()_S$	Processo à entropia constante
λ	Variável baseada na viscosidade volumétrica do fluido
T	Variável associada localmente ao escoamento
T	Variável associada à turbulência

Sobrescritos

T	Transposto (matriz ou vetor)
e	Representa o elemento
m	Variável associada ao nó m do elemento
$p, p+1$	Indicador do número da iteração no método de Newton
\bullet	
\square	Derivada no tempo da incógnita
$\bar{\square}$	Variável média temporal ou filtrada (média espacial)
$\tilde{\square}$	Variável associada ao filtro teste
\square'	Valor flutuante da variável
$*$	Variável adimensional
$\hat{\square}$	Variável definida no espaço de Fourier
\square	Variável referente à matriz totalmente diagonalizada
$\tilde{\square}$	Variável referente à matriz diagonalizada seletivamente
\square	Variável referente à matriz diagonalizada na pressão
\square	

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 3.1. a) Forma da função filtro tipo “caixa”; b) Forma da função filtro gaussiana.....	25
Figura 4.1. Esquema do domínio Ω e das fronteiras Γ_D e Γ_N para o método de elementos finitos.	39
Figura 5.1. Esquema da estrutura do programa dividido por módulos.	60
Figura 5.2. Trecho do código mostrando as diretivas de compilação <i>in-line</i> para o uso de paralelização.....	64
Figura 6.1. Esquema com descrição do problema da cavidade bidimensional, valores de condições de contorno, iniciais e propriedades do fluido.	66
Figura 6.2. Malha mais grosseira (25x25 elementos) e malha mais refinada (200x200 elementos) utilizadas no caso da cavidade para comparação.	67
Figura 6.3. Perfil de velocidade u^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $x = 0.5m$), comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 100$	68
Figura 6.4. Perfil de velocidade v^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $y = 0.5m$), comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 100$	69
Figura 6.5. Perfil de velocidade u^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $x = 0.5m$), comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 400$	70
Figura 6.6. Perfil de velocidade v^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $y = 0.5m$), comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 400$	70
Figura 6.7. Perfil de velocidade u^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $x = 0.5m$), comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 1000$	71
Figura 6.8. Perfil de velocidade v^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $y = 0.5m$), comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 1000$	71
Figura 6.9. Campo de velocidade (módulo) para $Re_{cavidade} = 1000$	72
Figura 6.10. Isolinhas de pressão para $Re_{cavidade} = 1000$	72
Figura 6.11. Linhas de corrente obtidas sobre o campo resolvido para $Re_{cavidade} = 1000$	73
Figura 6.12. Linhas de corrente publicadas por Elias et al., 2004, para $Re_{cavidade} = 1000$	73
Figura 6.13. Descrição do problema da cavidade 3D com domínio, condições de contorno e propriedades do fluido.....	75
Figura 6.14. Vista frontal e tridimensional da malha para o caso da cavidade 3D, $Re_{cavidade} =$ 3200.....	76

Figura 6.15. Perfil de velocidade u^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $x = 0,5$) no plano central, comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 3200$	77
Figura 6.16. Perfil de velocidade v^* (adimensional) ao longo da linha horizontal central da cavidade (em $y = 0,5$) no plano central, comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 3200$	77
Figura 6.17. Perfil de velocidade u'_{RMS} (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $x = 0,5$) no plano central, comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 3200$	78
Figura 6.18. Perfil de velocidade v'_{RMS} (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $y = 0,5$) no plano central, comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 3200$	79
Figura 6.19. Campo de velocidade média (magnitude do vetor) no plano central da cavidade ($z = 0,5m$). $Re_{cavidade} = 3200$	80
Figura 6.20. Isolinhas de pressão estática média no plano central da cavidade, com escala de valores reduzida entre $-1,0 \cdot 10^{-4} Pa$ e $1,0 \cdot 10^{-4} Pa$. $Re_{cavidade} = 3200$	80
Figura 6.21. Linha de corrente partindo do ponto central da cavidade colorida pelo módulo da velocidade média (local). $Re_{cavidade} = 3200$	81
Figura 6.22. Isosuperfícies de pressão dentro da cavidade. Pressão estática com escala reduzida entre $-1,0 \cdot 10^{-4} Pa$ e $1,0 \cdot 10^{-4} Pa$. $Re_{cavidade} = 3200$	82
Figura 6.23. Isosuperfícies de pressão dentro da cavidade. Pressão estática com escala reduzida entre $-1,0 \cdot 10^{-4} Pa$ e $1,0 \cdot 10^{-4} Pa$. $Re_{cavidade} = 10000$	83
Figura 6.24. Perfil de velocidade u^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $x = 0,5$) no plano central, comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 10000$	84
Figura 6.25. Perfil de velocidade v^* (adimensional) ao longo da linha horizontal central da cavidade (em $y = 0,5$) no plano central, comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 10000$	84
Figura 6.26. Perfil de velocidade u'_{RMS} (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $x = 0,5$) no plano central, comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 10000$	85

Figura 6.27. Perfil de velocidade v'_{RMS} * (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $y = 0,5$) no plano central, comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 10000$	85
Figura 6.28. Campo de velocidade média (magnitude do vetor) no plano central da cavidade ($z = 0,5m$). $Re_{cavidade} = 10000$	86
Figura 6.29. Isolinhas de pressão estática média no plano central da cavidade, com escala de valores reduzida entre $-2,0 \cdot 10^{-4} Pa$ e $2,0 \cdot 10^{-4} Pa$. $Re_{cavidade} = 10000$	87
Figura 6.30. Linha de corrente partindo do ponto central da cavidade colorida pelo módulo da velocidade média (local). $Re_{cavidade} = 10000$	87
Figura 6.31. Isosuperfícies de pressão dentro da cavidade. Pressão estática com escala reduzida entre $-2,0 \cdot 10^{-4} Pa$ e $2,0 \cdot 10^{-4} Pa$. $Re_{cavidade} = 10000$	88
Figura 6.32. Diagrama esquemático do problema do degrau, com dimensões, condições de contorno e propriedades do fluido.....	89
Figura 6.33. Malha utilizada no caso do degrau bidimensional, região próxima ao degrau.....	90
Figura 6.34. Campo de velocidades obtido para $Re_{degrau} = 800$	91
Figura 6.35. Campo de pressão estática obtido para $Re_{degrau} = 800$	91
Figura 6.36. Comparação dos pontos de recolamento obtidos com valores publicados por Armaly et al., 1893.	91

1. INTRODUÇÃO

1.1. Apresentação e motivação

Cada vez mais o uso de ferramentas de simulação de processos fluidodinâmicos vem se tornando importante no desenvolvimento de novos projetos industriais. Aplicações desse tipo de ferramenta são conhecidas em diversos campos como, por exemplo, na indústria aeronáutica, petrolífera, mecânica, civil, etc. Vários códigos comerciais para a simulação numérica de processos estão disponíveis, cabendo ao engenheiro, através de seu conhecimento dos fenômenos e diferentes modelos disponíveis, decidir quais ferramentas são mais ajustadas ao caso em questão.

Assim o estudo de métodos numéricos e de dinâmica dos fluidos computacional, junto com um conhecimento do problema físico, é de extrema importância para a qualidade da pesquisa realizada.

No presente trabalho é apresentado um estudo sobre a modelagem numérica de escoamentos turbulentos empregando o método de elementos finitos e a simulação de grandes escalas. A partir deste estudo é elaborado um código numérico para a aproximação das equações de conservação.

1.2. Objetivos

O principal objetivo deste trabalho é o desenvolvimento de um sistema de dinâmica dos fluidos computacional que será utilizado como base para futuros trabalhos do grupo. Nesta primeira etapa esse código deverá ser capaz de simular escoamentos bi- e tridimensionais, transientes, isotérmicos, incompressíveis e turbulentos (via simulação de grandes escalas) de fluidos newtonianos.

É necessário que este código permita alterações e implementação de novos métodos e modelos de forma simples, porém ao mesmo tempo tenha um desempenho computacional adequado ao estudo de problemas de escoamentos transientes e turbulentos sobre geometrias complexas.

1.3. Estrutura do trabalho

O presente trabalho é apresentado utilizando a seguinte estrutura:

No capítulo 2 é detalhada uma revisão bibliográfica sobre a análise de escoamentos turbulentos. São apresentadas as equações básicas da mecânica dos fluidos, a equação de conservação de massa (equação da continuidade) e a equação de conservação da quantidade de movimento para fluidos newtonianos (Equação de Navier-Stokes). Essas equações fundamentais [Schlichting, 1979; White, 1999; Fox e McDonald, 2001] são baseadas na hipótese do contínuo e descrevem o movimento de um fluido sob uma perspectiva euleriana.

A equação da conservação da massa é re-escrita utilizando a hipótese de quase-incompressibilidade [Kawahara e Hirano, 1983; Sonntag et al., 1998; Zienkiewicz e Taylor, 2000] obtendo-se uma forma que é fisicamente mais coerente (principalmente para escoamentos turbulentos) e com vantagens na sua implementação em códigos numéricos.

Uma discussão sobre escoamentos turbulentos, características gerais, definição, apresentação dos conceitos físicos de escalas turbulentas, grandes escalas e estruturas coerentes da turbulência também é feita nesse capítulo. Uma lista de referências bibliográficas sobre o assunto é apresentada [Silva Freire et al., 2002; Schlichting, 1979; Hinze, 1975; Tennekes e Lumley, 1994; Lesieur et al., 1995; Ferziger, 1993] mas sobre o assunto uma vastíssima gama de trabalhos está disponível.

No capítulo 3 são exibidas as diferentes metodologias utilizadas para a simulação numérica de escoamentos turbulentos. As três metodologias são:

Simulação numérica direta de escoamentos turbulentos, onde todas as escalas (de comprimento e tempo) do escoamento turbulento são resolvidas na aproximação numérica das equações de Navier-Stokes e da continuidade. Os resultados são mais completos e comparáveis a qualquer dado experimental de qualidade. A grande dificuldade aqui é o imenso esforço computacional requerido, o qual inviabiliza a solução de escoamentos muito complexos e a altos valores do número de Reynolds.

Modelagem clássica da turbulência, na qual o escoamento turbulento é dividido em uma componente média no tempo e uma componente flutuante (decomposição de Reynolds). A parte média no tempo é então resolvida e a parte flutuante é modelada, aqui entrando diversos modelos de turbulência para resolver o problema de fechamento (aparecimento de incógnitas adicionais nas equações médias nas quais está a contribuição da componente flutuante na componente média). A grande maioria dos modelos de turbulência na abordagem clássica se baseia na hipótese de Boussinesq (“viscosidade turbulenta”) e alguns trabalham com equações adicionais

de transporte das componentes do tensor de Reynolds (tensor de tensões turbulentas) [Wilcox, 1994].

Simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos, aqui apenas as maiores escalas dos escoamentos turbulentos (mais fisicamente significativas na maioria dos fenômenos e processos presentes nos escoamentos) são resolvidas e as pequenas escalas (que são mais uniformes e isotrópicas, mais simples de modelar) são aproximadas. A separação das escalas é equivalente à decomposição de Reynolds, porém ao invés do uso de médias no tempo se utilizam filtros espaciais. A simulação de grandes escalas é mais cara computacionalmente em relação à modelagem clássica e mais barata que a simulação numérica direta. Seus resultados são muito bons e também bastante detalhados (resultados sempre ao longo do tempo, simulações não-estacionárias) quando bem conduzidas. A maior quantidade de informação obtida (quando comparada a simulação usando a metodologia clássica) permite a análise de fenômenos mais complexos, como, por exemplo, interação fluido-estrutura (vibrações induzidas pelo escoamento).

Em detalhes são apresetadas as diferentes abordagens para a simulação de grandes escalas (métodos de filtragem espacial para divisão entre grandes e pequenas escalas e modelos de turbulência sub-malha) utilizados. Boas revisões sobre simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos são encontradas nos trabalhos de Rogallo e Moin, 1984, Lesieur et al., 1995 e Piomelli, 1999, entre outros.

No capítulo 4 toda a modelagem numérica, baseada no método de elementos finitos [Hughes, 1987; Zienkiewicz e Taylor, 2000; Reddy e Gartling, 1994] é mostrada. Todo o processo de obtenção da forma de resíduos ponderados das equações de conservação (a partir de suas formas adimensionais e quase-incompressíveis) é exibido. A partir dessa forma de resíduos ponderados é feita discretização do domínio em um domínio de elementos finitos e a aproximação de elementos finitos (na qual são definidas funções teste e funções de forma para representar os diferentes campos dentro da discretização de elementos finitos) até chegar-se ao problema matricial (ainda diferencial no tempo e não-linear) é definida.

O esquema de avanço no tempo utilizado para tornar o problema algébrico (esquema de família θ) permite o uso de diferentes aproximações (totalmente implícito, semi-implícito e totalmente explícito). Para solução do sistema de equações não-lineares são implementados os métodos de Picard e Newton. É utilizada também a diagonalização seletiva das matrizes para estabilização e aceleração da solução do problema, sendo uma das formas implementadas sugeridas na literatura e outra proposta no trabalho. Por fim são citadas as diferentes soluções implementadas para atacar o problema matricial algébrico e linear obtido.

No capítulo 5 são apresentados aspectos computacionais do trabalho elaborado. Questões sobre o desenvolvimento do código computacional utilizado e sua estruturação, para futuros incrementos e melhorias, são apresentadas e discutidas. Dois pontos dentro do código também são focados, são eles a estrutura de armazenagem compacta de matrizes; utilizada para economia de memória, redução do número de operações realizadas e conseqüente aumento na velocidade do código; e a paralelização do processamento; utilizando a técnica OpenMP que possibilitou a solução de problemas maiores e mais complexos com o mesmo código apenas pela distribuição de carga computacional aproveitando todos os recursos disponíveis.

O capítulo 6 contém uma série de resultados de casos de referência obtidos utilizando o código desenvolvido para validação do programa e início do estudo da turbulência utilizando a simulação computacional.

Por fim no capítulo 7 são mostradas as conclusões e propostas para novos trabalhos e no capítulo 8 está disponível a lista completa de referências bibliográficas citadas ao longo do texto.

1.4. Desenvolvimento do código

Como brevemente apresentado na seção anterior, o código desenvolvido utiliza o método de elementos finitos para aproximação das equações de conservação. O método é aplicado sobre as equações de balanço escritas utilizando a hipótese de quase-incompressibilidade, o que permite o uso de funções de interpolação de mesma ordem para os campos de velocidade e pressão dos escoamentos.

Para permitir as simulações bi- e tridimensionais, são criados elementos quadriláteros e hexaédricos na biblioteca base do programa. Lembrando que outros elementos podem ser facilmente implementados.

Para a simulação de escoamentos turbulentos a técnica utilizada de aproximação é a simulação de grandes escalas, onde as maiores escalas turbulentas do escoamento (que carregam a maior parte da energia e que promovem a parte significativa da mistura de propriedades do escoamento) são resolvidas e apenas os efeitos das menores escalas (menores que a resolução da malha utilizada) são modelados. Para modelar esses efeitos sub-malha o modelo de Smagorinsky é utilizado.

O código é escrito em FORTRAN 95, utilizando técnicas de alto desempenho. Para garantir sua portabilidade e viabilizar alterações ele é escrito de forma modular (cada módulo é um conjunto de sub-rotinas armazenadas em um arquivo diferente), isso permite também uma compilação seletiva, acrescentando ou excluindo rotinas de acordo com o caso. Para permitir a

solução de grandes problemas são utilizadas técnicas de armazenagem compacta de matrizes e de processamento em paralelo.

2. ANÁLISE DE ESCOAMENTOS TURBULENTOS

2.1. Equações básicas da dinâmica dos fluidos

Para estudar-se o problema de simulação numérica de escoamentos turbulentos, parte-se sempre das equações básicas da mecânica dos fluidos [Schlichting, 1979; White, 1999; Fox e McDonald, 2001], que são a equação da conservação de massa e a equação da conservação da quantidade de movimento (com alguma relação constitutiva adicional).

As equações de conservação são deduzidas baseadas na hipótese do contínuo, na qual um fluido é considerado uma distribuição contínua da matéria e todas as propriedades do fluido podem ser expressas por funções contínuas das coordenadas espaciais e do tempo. As propriedades do fluido são então representadas por campos (visão euleriana).

A equação da conservação de massa é obtida através de um balanço entre o fluxo de massa que entra e que sai de um volume de controle diferencial e a variação da massa específica no interior desse volume. Essa equação também é chamada de equação da continuidade, pois não requer nenhuma hipótese para sua dedução exceto a do meio contínuo. Na forma apresentada na equação (2.1) ela não leva em conta nenhuma fonte ou sumidouro de massa no interior do volume de controle.

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0 \quad \text{sobre } \Omega, t \geq 0 \quad (2.1)$$

onde t é o tempo, ρ é a massa específica e \mathbf{u} o vetor velocidade.

A equação da conservação da quantidade de movimento é obtida por um balanço entre o fluxo de quantidade de movimento (também chamado de momentum), que entra e que sai de um volume de controle diferencial, e as forças externas (de corpo e de superfície) agindo sobre o volume de controle. Essa relação é uma forma da segunda lei de Newton, onde as forças são representadas pelas tensões sobre o volume de controle. Os valores das tensões são obtidos a partir de relações constitutivas (de um fluido newtoniano no caso) envolvendo as deformações sofridas pelo volume de controle e pelas propriedades do fluido.

Para um fluido newtoniano a relação entre as tensões e as deformações sofridas pelo volume de controle é linear. Expressando então as relações através das propriedades do fluido e dos gradientes de velocidade obtém-se a equação (2.2), também chamada de equação de Navier-Stokes, expressa em termos de variáveis primárias e na forma mais geral.

$$\frac{D\rho\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \mu \left[(\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T \right] + \nabla (\lambda \nabla \cdot \mathbf{u}) + \mathbf{F} \quad \text{sobre } \Omega, t \geq 0 \quad (2.2)$$

onde μ é a viscosidade absoluta e λ a viscosidade volumétrica do fluido, p a pressão estática e \mathbf{F} o vetor de forças externas por unidade de volume.

Nesta forma da equação de Navier-Stokes está mantido o termo do divergente de velocidade que multiplica a viscosidade volumétrica. Para essa viscosidade volumétrica normalmente se aplica a hipótese de Stokes, que estabelece uma relação desta com a viscosidade absoluta (cisalhante) do fluido, esta relação é dada pela equação (2.3).

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu \quad (2.3)$$

Essa hipótese garante uma relação de igualdade entre a tensão normal sobre o fluido e a pressão termodinâmica. Sendo então bastante conveniente, pouca discussão é feita a esse respeito. A interpretação física da viscosidade volumétrica é que ela representa uma dissipação de energia quando um volume de fluido é comprimido ou expandido devido unicamente à tensões normais. Usualmente não se tem preocupação a respeito de seu significado e seus efeitos quando nas investigações (numéricas e experimentais) se trabalha com a hipótese (ou condição) de incompressibilidade, na qual o divergente de velocidade que aparece multiplicando essa propriedade se anula.

Essas equações, exibidas na forma vetorial, são mais comumente utilizadas na área de análise numérica na forma indicial [Petry, 2002], como mostradas nas equações (2.4) e (2.5).

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (j=1,2,3), \text{ sobre } \Omega, t \geq 0 \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_j \rho u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) + F_i \quad (i, j, k = 1, 2, 3), \text{ sobre } \Omega, t \geq 0 \quad (2.5)$$

onde u_i , u_j e u_k são as componentes do vetor velocidade e F_i as componentes do vetor de forças externas por unidade de volume nas direções x_i , x_j ou x_k , respectivamente.

2.2. Formulação de quase-incompressibilidade

A formulação de quase-incompressibilidade, também chamada de leve compressibilidade (do inglês *slight compressibility*), se baseia na relação entre a pressão e a massa específica do fluido. Essa formulação parte da suposição de que, nos escoamentos em questão, as variações de massa específica são desprezíveis. Usualmente essa suposição (de escoamentos incompressíveis) implica em que a velocidade de propagação de uma perturbação de pressão no meio (velocidade do som) seja infinita, o que caracteriza uma condição idealizada. Na formulação de quase-incompressibilidade trabalha-se com a hipótese de que apesar da massa específica do fluido permanecer praticamente constante, uma perturbação de pressão se propaga com velocidade finita no meio (velocidade do som finita); por isso essa formulação também é chamada de incompressibilidade real.

O uso da formulação de quase-incompressibilidade é bastante conveniente para aplicação no método de elementos finitos, pois, como discutido mais tarde, evita problemas de aparecimento de zeros na diagonal principal do sistema linear formado. Isso é devido ao aparecimento de um termo de derivada no tempo da pressão na equação da continuidade, derivado como se segue.

Conforme explicitado na literatura [Kawahara e Hirano, 1983; Sonntag et al., 1998; Zienkiewicz e Taylor, 2000] as equações de balanço são completadas através de relações de estado para a obtenção das propriedades do fluido. Para a massa específica, a equação de estado fornece:

$$\rho = \rho(p, T) \quad (2.6)$$

Onde T é a temperatura local do fluido. Considerando um escoamento isotérmico e invertendo-se a relação, chega-se à:

$$p = p(\rho) \quad (2.7)$$

Derivando-se essa relação e utilizando-se a regra da cadeia obtém-se:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (2.8)$$

Utilizando a definição de velocidade do som dada pela equação (2.9) e considerando a variação de pressão causada por uma onda sonora isentrópica, obtém-se a relação da equação (2.10).

$$c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{S=\text{constante}} \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = c^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (2.10)$$

onde c é a velocidade do som no meio. A hipótese de considerar-se o processo isentrópico é justificada pelo fato de que uma onda sonora é uma variação de pressão muito pequena como argumentado em Sonntag et al., 1998. Pela equação (2.9) conclui-se também que para um escoamento incompressível a velocidade do som assume um valor constante.

Inserindo a relação (2.10) na equação da conservação de massa na forma da equação (2.4) chega-se a:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial p}{\partial t} + \rho \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (j = 1, 2, 3) \quad (2.11)$$

Percebe-se que se considerarmos a velocidade do som como infinita a equação (2.11) reduz-se à comumente utilizada equação da continuidade para fluidos incompressíveis, dada por:

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (j = 1, 2, 3) \quad (2.12)$$

Para o escoamento transiente, isotérmico e quase-incompressível de um fluido newtoniano, considera-se que as propriedades do fluido (massa específica, viscosidades e velocidade do som) sejam constantes. Com isso chega-se nas formas finais (utilizadas no restante do trabalho) das equações de conservação de massa, equação (2.13), e de quantidade de movimento, equação (2.14).

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \rho c^2 \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (j = 1, 2, 3) \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_j u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) + f_i \quad (2.14)$$

Onde f_i é a componente do vetor de forças externas por unidade de massa e ν a viscosidade cinemática do fluido. Observa-se que o termo que multiplica a viscosidade volumétrica não desaparece, já que a equação da continuidade na forma quase-incompressível não anula o divergente de velocidade. Entretanto, como serão discutidos apenas escoamentos incompressíveis, o valor da viscosidade volumétrica será tomado como nulo.

A forma mais comumente encontrada das equações de conservação é aquela para escoamentos incompressíveis (considerando a massa específica do fluido, ρ , constante) mostrada nas equações (2.15) e (2.16).

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + f_i \quad (2.16)$$

Onde a equação (2.16) foi obtida através do uso da equação (2.15) na conservação de quantidade de movimento (2.5).

2.2.1. Equações básicas quase-incompressíveis na forma adimensional

Para facilitar a análise de diferentes escoamentos através da variação de poucos parâmetros se utiliza a análise dimensional. Através da adimensionalização das equações básicas se obtém grupos adimensionais (variáveis) que caracterizam um grupo de escoamentos que apresentam a mesma solução, guardadas as relações de semelhança. O uso das equações adimensionalizadas também tem vantagens associadas aos métodos numéricos para solução, como será discutido adiante.

A adimensionalização das equações (2.13) e (2.14) são baseadas nos parâmetros característicos do problema (o comprimento característico da geometria L , a velocidade de referência do problema U e a velocidade do som no meio c) e seguem as seguintes definições:

$$x_i^* = \frac{x_i}{L}, \quad t^* = \frac{tU}{L}, \quad u_i^* = \frac{u_i}{U}, \quad p^* = \frac{p}{\rho U c}, \quad f_i^* = \frac{f_i L}{U^2} \quad (2.17)$$

Onde t^* e p^* são o tempo e a pressão adimensionais e x_i^* , u_i^* e f_i^* são as componentes adimensionais do vetor posição, da velocidade e da força por unidade de massa respectivamente. Aplicando essas definições nas equações (2.13) e (2.14) chega-se a:

$$\frac{\partial p^*}{\partial t^*} + \frac{1}{Mc} \frac{\partial u_j^*}{\partial x_j^*} = 0 \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial u_i^*}{\partial t^*} + \frac{\partial u_j^* u_i^*}{\partial x_j^*} = -\frac{1}{Mc} \frac{\partial p^*}{\partial x_i^*} + \frac{1}{Re_L} \left(\frac{\partial u_j^*}{\partial x_i^*} + \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j^*} \right) + \frac{1}{Re_\lambda} \left(\frac{\partial u_k^*}{\partial x_k^*} \right) + f_i^* \quad (2.19)$$

Na equação (2.19) aparecem, além das variáveis adimensionais, três números adimensionais que são o número de Mach (Mc) e o número de Reynolds baseado na viscosidade cinemática e na dimensão característica (Re_L) e baseado na viscosidade volumétrica e na dimensão característica (Re_λ), obtido pelas expressões (2.20), (2.21) e (2.22).

$$Mc = \frac{U}{c} \quad (2.20)$$

$$Re_L = \frac{UL}{\nu} \quad (2.21)$$

$$Re_\lambda = \frac{\rho UL}{\lambda} \quad (2.22)$$

O número de Mach expressa a relação entre a velocidade característica do escoamento e a velocidade do som no fluido, utilizada como um parâmetro de compressibilidade. Para números de Mach até 0,3 (para alguns autores 0,4) o escoamento é considerado incompressível, ou seja, as variações de massa específica são desprezíveis. Para valores maiores efeitos de compressibilidade não podem mais ser desprezados.

O número de Reynolds expressa a relação entre a inércia e as forças viscosas do escoamento; esse valor é utilizado como referência para definir o regime dos escoamentos. Cada

tipo de escoamento (cada combinação geometria – condição de operação) possui um valor de Reynolds crítico a partir do qual o escoamento transita para o regime turbulento. Este valor é como uma média do valor de transição, já que essa transição não é instantânea. Seu início e fim dependem das perturbações presentes no escoamento. O número de Reynolds baseado no comprimento característico da geometria é utilizado para referência em trabalhos e para comparação com valores experimentais. Por exemplo, para o escoamento em um duto circular o número de Reynolds crítico é 2300, acima do qual o escoamento é considerado turbulento.

O número de Reynolds baseado na viscosidade volumétrica não tem grande significado no problema em questão, já que o valor de λ será mantido nulo (por considerar o escoamento incompressível). Existem outras representações do número de Reynolds, que serão discutidas no momento apropriado.

2.3. Escoamentos turbulentos

A grande maioria dos escoamentos de interesse em engenharia está no regime turbulento. O escoamento do ar sobre a asa de um avião, da água em contato com o casco de um navio ou de derivados de petróleo através de uma linha de transmissão são exemplos de situações onde o regime turbulento é predominante. A turbulência se origina de pequenas perturbações presentes nos escoamentos que são amplificadas devido a instabilidades que aparecem quando o escoamento atinge altos números de Reynolds (entrando nas faixas consideradas de escoamentos turbulentos). Tais perturbações se propagam e se degeneram fazendo com que o escoamento entre no regime turbulento [Silva Freire et al., 2002].

Vários autores procuraram definir mais precisamente o conceito de turbulência [Schlichting, 1979; Hinze, 1975; Tennekes e Lumley, 1994; Lesieur et al., 1995]. A idéia básica é que o escoamento turbulento consiste no movimento de um fluido no qual uma flutuação irregular é sobreposta a uma corrente principal. Sobre essa idéia se acrescentam os seguintes pontos:

- Irregularidade: a aleatoriedade das flutuações presentes no escoamento turbulento o torna imprevisível, obrigando o uso de ferramentas estatísticas para a análise;
- Difusividade aumentada: devido aos movimentos turbulentos as quantidades do escoamento (como massa, quantidade de movimento, energia) são misturadas de forma mais eficiente; esse efeito faz com que aparentemente a viscosidade (e outros coeficientes de difusão do escoamento) seja aumentada;

- Altos números de Reynolds: como já citado as perturbações que geram o escoamento turbulento só se amplificam a altos números de Reynolds;
- Flutuações tridimensionais de vorticidade: intensas flutuações de vorticidade estão presentes nos escoamentos turbulentos, flutuações que não conseguem se manter em escoamentos bidimensionais, o que força o escoamento turbulento a ser tridimensional por definição;
- Alta dissipação de energia: o aumento nas taxas de cisalhamento interno do fluido, a constante produção de energia cinética turbulenta e a dissipação de energia nas menores escalas torna o escoamento turbulento altamente dissipativo; por esse mesmo motivo a turbulência necessita de uma fonte constante de energia para ser mantida;
- Fenômeno contínuo: embora as menores escalas do escoamento turbulento sejam, algumas vezes, muitas ordens de grandeza inferiores às maiores escalas, elas continuam bem maiores que as escalas moleculares, assim o fenômeno pode ser tratado como um problema contínuo governado pelas equações da mecânica dos fluidos;
- Escoamentos turbulentos são escoamentos e não fluidos: a turbulência é uma propriedade dos escoamentos, não dos fluidos;
- Larga faixa de escalas de comprimento e tempo: um escoamento turbulento deve envolver vórtices de uma larga faixa de escalas de comprimento e tempo (ou números de onda num domínio de Fourier).

As equações que descrevem escoamentos nesse regime são as mesmas para o escoamento laminar, especificamente as equações da continuidade (2.4) e de Navier-Stokes (2.5). Devido a sua complexidade essas equações possuem solução analítica apenas em casos com diversas simplificações, sendo necessário então o uso de alguma ferramenta numérica para obter uma solução em casos de interesse prático (mais complexos geométrica ou fisicamente). A dificuldade aumenta ainda mais quando outros fenômenos que afetam a turbulência estão presentes como em escoamentos com estratificação, com empuxo, rotacionais, com reações químicas ou compressíveis [Ferziger, 1993].

A dificuldade nesse tipo de solução é devida justamente ao fato de que os escoamentos turbulentos são compostos por movimentos em várias escalas de comprimento e tempo. As maiores escalas de comprimento (L) da ordem da geometria do problema e as menores escalas (l) estão na ordem da dissipação viscosa. Uma estimativa para a ordem de grandeza da escala dissipativa e da relação entre as duas escalas são mostradas nas equações (2.23) e (2.24) respectivamente [Silva Freire et al., 2002].

$$1 = \left(\frac{\nu^3 L}{U^3} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (2.23)$$

$$\frac{L}{1} = Re_L^{\frac{3}{4}} \quad (2.24)$$

A equação (2.24) mostra que a relação de escalas aumenta com o aumento do número de Reynolds. Assim para uma mesma geometria as menores escalas ficam cada vez menores até o ponto em que se torna inviável (para os recursos computacionais disponíveis atualmente) simular-se numericamente todas as escalas presentes no escoamento devido à imensa capacidade computacional requerida.

As diversas escalas de movimento presentes num escoamento interagem entre si; algumas interações de vórtices são já bem conhecidas e também são de interesse particular como o enrolamento de uma esteira de vórtices, o pareamento, formação de dipolo e vórtices tipo grampo de cabelo. Seus papéis na transição e na influência nas propriedades do escoamento são freqüentemente objeto de estudo. Uma das principais características dessas escalas é a “cascata de energia” formada. Os maiores vórtices recebem energia do escoamento principal e passam para os menores, que por sua vez a repassam aos menores ainda, até as escalas dissipativas, onde essa energia é convertida em calor pelo atrito viscoso.

Apesar de que a transferência de energia ser normalmente das maiores para as menores escalas, o fluxo inverso de energia (transferência de energia das menores escalas para as maiores) ocorre em diversas situações, especialmente nas primeiras etapas da transição para o regime turbulento em escoamentos parietais. Um estudo sobre esse efeito e uma melhor descrição é apresentada no trabalho de Piomelli et al., 1991. Comumente o fenômeno da transferência inversa de energia é citado pela expressão consagrada do inglês *backscatter*.

Por sua característica estocástica (randômica), muitas vezes sobreposta a estruturas organizadas, e fortemente não-linear, muitos trabalhos tentaram gerar teorias estatísticas para descrição dos escoamentos turbulentos. Todas as tentativas se defrontaram com o problema do fechamento, ou seja, em algum ponto aparecem variáveis (quantidades estatísticas de alguma ordem) que não possuem equações governantes. Para resolver esse problema diversas aproximações baseadas em análise dimensional ou em medições experimentais foram desenvolvidas. Porém muitas dessas tentativas, como fechamentos de um ou dois pontos, estão limitados a escoamentos homogêneos (normalmente isotrópicos) onde simetrias permitem a redução de variáveis.

2.3.1. Grandes escalas do escoamento turbulento e estruturas coerentes

A definição de grandes e pequenas escalas num escoamento turbulento é de grande utilidade tanto no meio experimental quanto na pesquisa em dinâmica dos fluidos computacional.

As grandes escalas de um escoamento turbulento são aquelas que dominam a dinâmica do mesmo. Elas são responsáveis pela maior parte do transporte de quantidade de movimento e pela produção da turbulência [Ferziger, 1993]. A valores elevados do número de Reynolds essas grandes escalas compreendem as estruturas da escala da geometria até aquelas na escala inercial de Kolmogorov. Essas grandes estruturas são diretamente influenciadas pela geometria e condições de contorno do escoamento. Dessa forma a obtenção de modelos genéricos para descrição desses movimentos é complexa. Os modelos clássicos disponíveis são dependentes de parâmetros empíricos ajustados para um ou alguns escoamentos específicos e sob condições bem controladas. Esses valores podem ser muito diferentes do ideal para escoamentos em condições diversas, o que prejudica a qualidade dos resultados obtidos.

As menores escalas tendem a ser mais homogêneas e isotrópicas e menos afetadas pelas condições de contorno. Assim modelos mais universais e independentes em relação àqueles utilizados na metodologia média clássica podem ser aplicados para sua descrição [Silva Freire et al., 2002].

A descrição “grandes escalas” não está ligada unicamente ao comprimento característico dos movimentos, em alguns casos importantes estruturas do escoamento são extremamente pequenas, como ocorre em regiões próximas de contornos sólidos. Nesse tipo de condição, além do tamanho reduzido dos vórtices, esses ainda apresentam elevada anisotropia o que dificulta uma modelagem correta.

Como já citado o movimento turbulento apresenta estruturas organizadas, chamadas estruturas coerentes. Em seu trabalho, Hussain, 1983, define uma estrutura coerente como sendo uma massa de fluido turbulenta (de grandes escalas) conectada exibindo vorticidade correlacionada em fase sobre sua extensão. Lesieur et al., 1995, complementa essa definição afirmando que além de serem concentrações locais de vorticidade (ω) essas estruturas também devem ter forma reconhecível e devem apresentar um “tempo de vida” (T_c) muito maior que o tempo de giro local do vórtice. A definição de vorticidade e do tempo de vida estão nas equações (2.25) e (2.26), respectivamente.

$$\omega = \nabla \times \mathbf{u} \quad (2.25)$$

$$T_c = |\boldsymbol{\omega}|^{-1} \quad (2.26)$$

Uma estrutura coerente também é caracterizada por apresentar (na região ocupada) uma variação de pressão, usualmente uma queda.

As estruturas coerentes são responsáveis por parte significativa do transporte (de grandes escalas) de massa, calor e momentum, sem necessariamente serem elas mesmas energéticas. O que quer dizer que uma estrutura coerente mostra altos níveis de vorticidade, produção e transporte de calor e massa coerentes, mas não necessariamente altos níveis de energia cinética (a maior parte da energia cinética turbulenta está então associada à turbulência incoerente). Em alguns escoamentos, entretanto, o transporte dessas grandezas devido à turbulência incoerente pode se tornar comparativamente significativo, como, por exemplo, em escoamentos plenamente desenvolvidos [Hussain, 1983].

3. SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS TURBULENTOS

Uma alternativa aos métodos experimentais para análise de problemas envolvendo escoamentos de fluidos é a dinâmica dos fluidos computacional (do inglês *computational fluid dynamics* – *CFD*). A simulação numérica de escoamentos turbulentos está se difundindo cada vez mais e se tornando uma ferramenta prática de engenharia. Códigos comerciais com algoritmos cada vez mais eficientes e incorporando cada vez mais modelos para diferentes fenômenos já se encontram a disposição.

Apesar da facilidade de se obter bons resultados para problemas bastante complexos, assim como qualquer outra ferramenta em engenharia, deve-se tomar muito cuidado na hora de se usar uma ferramenta tão poderosa.

Diversos métodos, tais como os métodos de diferenças finitas, volumes finitos, elementos finitos e métodos espectrais, podem ser empregados. Cada um apresentando vantagens e restrições próprias. Uma vez escolhido o método numérico resta ainda definir os modelos a serem utilizados de acordo com as necessidades do problema em questão. Simulações numéricas podem prover informações detalhadas sobre os escoamentos e são vantajosas quando muitas variáveis dos escoamentos são necessárias ao mesmo tempo, ou onde trabalhos experimentais são de difícil controle ou perigosas. Alguns casos, como por exemplo combustão, requerem o conhecimento de detalhes finos do campo de escoamento, enquanto outros se satisfazem com dados relativamente grosseiros. O grau de detalhamento desejado para uma dada análise está diretamente ligado ao custo computacional necessário.

A simulação numérica da turbulência requer julgamentos adequados com respeito às equações governantes, condições iniciais e de contorno e esquemas de solução utilizados nos diferentes métodos. Um das maiores questões é a especificação de condições de contorno, especialmente na região de entrada dos escoamentos e em contornos sólidos.

Nas regiões de entrada onde o escoamento incidente é turbulento as variáveis do escoamento dependem do escoamento desconhecido fora do domínio. No caso de indisponibilidade de condições bem conhecidas nesses contornos deve-se utilizar uma que melhor represente o escoamento de entrada e ao mesmo tempo minimize a propagação de erros de contorno. Valores equivocados nesse tipo de condição podem causar transição antecipada na camada limite e também produzir aumento na turbulência, isso pode mover o ponto de separação da camada limite resultante, alterando bastante os resultados da simulação. Em outro caso a turbulência no escoamento de entrada pode causar um aumento nas forças flutuantes agindo sobre um corpo imerso no escoamento [Ferziger, 1993].

Nas regiões próximas a contornos sólidos o principal problema é a resolução necessária para captar corretamente os efeitos de camada limite. Devido aos altos gradientes das variáveis do escoamento nessa região, e a grande influência de seus efeitos sobre os resultados uma má representação da camada limite pode comprometer seriamente a validade dos campos obtidos. Além das condições de contorno usuais nesse tipo de contorno, alguns autores utilizam alternativas como condições tipo “lei da parede” no intuito de diminuir a requisição de malha nessas regiões.

Existem três linhas principais para a modelagem de escoamentos turbulentos: a simulação numérica direta (sem modelagem), a modelagem clássica (baseada em médias de Reynolds) e a simulação de grandes escalas. Mais detalhes dessas linhas serão discutidos nas seções seguintes.

Apesar de ainda haver muito a ser feito na análise de escoamentos turbulentos muitos resultados úteis para elaboração e comprovação de novas bases teóricas para o estudo da turbulência já foram obtidos. Lesieur et al., 1995, em seu trabalho argumenta de forma otimista sobre os avanços no estudo da turbulência dizendo: “Graças à dinâmica dos fluidos computacional e ao grande progresso em técnicas experimentais é claro agora que a estrutura da turbulência é muito mais simples do que se pensava”.

3.1. Simulação numérica direta de escoamentos turbulentos

A simulação numérica direta (do inglês *direct numerical simulation* – DNS) consiste na resolução direta de todas as escalas do escoamento turbulento. A principal vantagem desse tipo de simulação é a eliminação da necessidade de modelos *ad hoc* e a obtenção de resultados detalhados de todo o movimento turbulento [Rogallo e Moin, 1984].

Para que seja feita uma simulação numérica direta de um escoamento as equações de conservação são resolvidas sem o uso de qualquer modelagem. Porém, para que isto seja possível, é necessário que a resolução de malha seja capaz de captar até os menores movimentos turbulentos (o que coloca limitações também na resolução no tempo da simulação), e que a precisão dos métodos numéricos utilizados nessas simulações garantam que o erro introduzido não seja significativo.

Quando devidamente conduzidas, os resultados obtidos através da simulação numérica direta são comparáveis de todas as formas a dados experimentais de qualidade. Ainda com as vantagens de que são obtidos dados detalhados de todas as variáveis de interesse no campo de escoamento e as condições de contorno e iniciais são definidas de forma clara [Ferziger, 1993].

Apesar de todas essas vantagens, a aplicação da simulação numérica direta ainda é muito limitada. O principal fator limitante é a resolução numérica necessária para a solução completa de todas as escalas do escoamento turbulento. Tal resolução cresce ainda mais com o aumento do número de Reynolds. Como já discutido, a relação entre as maiores escalas (delimitadas pela geometria) e as menores aumenta com o aumento do número de Reynolds. O número de variáveis necessárias para uma simulação numérica direta é da ordem de $Re^{9/4}$ em três dimensões, o que limita seu uso a casos com baixos números de Reynolds. Outro problema é a precisão do método numérico, o que força o uso de esquemas numericamente eficientes os quais normalmente conduzem a limitações geométricas.

As principais aplicações da simulação numérica direta atualmente são o estudo do fenômeno da transição e da formação de estruturas turbulentas e a geração de uma massa de dados sobre casos de referência para uso na validação de novos métodos, numéricos e experimentais.

3.2. Modelagem clássica de escoamentos turbulentos

Devido aos problemas já discutidos relativos à simulação de escoamentos turbulentos, uma metodologia foi desenvolvida baseada na idéia de O. Reynolds de que as variáveis de campo em um escoamento turbulento (como velocidade e pressão) podem ser decompostas em uma parte média e uma parte flutuante.

$$\begin{aligned} u_i &= \bar{u}_i + u'_i \\ p &= \bar{p} + p' \end{aligned} \quad (3.1)$$

Onde \bar{u}_i e \bar{p} são as parcelas médias da componente i da velocidade e da pressão e u'_i , e p' as parcelas flutuantes das mesmas variáveis. Para a obtenção do valor médio é utilizado o seguinte processo de integração no tempo. Para uma variável genérica g o valor médio é obtido através da integral da equação (3.2) e o valor flutuante pela expressão (3.3), respectivamente.

$$\bar{g} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0 - \Delta t}^{t_0 + \Delta t} g(t) dt \quad (3.2)$$

$$g' = g - \bar{g} \quad (3.3)$$

onde Δt é um tempo suficientemente longo para que todas as escalas significativas sejam consideradas e t_0 um determinado instante de tempo na integração. O operador de média possui as seguintes propriedades importantes.

$$\begin{aligned}\overline{\overline{g}} &= \overline{g} \\ \overline{g'} &= 0 \\ \overline{\frac{\partial g}{\partial x_i}} &= \frac{\partial \overline{g}}{\partial x_i}\end{aligned}\tag{3.4}$$

Com essa integração no tempo, apenas fenômenos com escalas de tempo maiores do que a dos maiores vórtices turbulentos poderão ser consideradas (como variações no tempo das condições de contorno). Aplicando a definição das variáveis dadas pela relação (3.1) nas equações (2.15) e (2.16) obtém-se as seguintes expressões.

$$\frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_j} = 0\tag{3.5}$$

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} + \overline{u}_j \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} - \overline{u'_i u'_j} \right) + \overline{f}_i\tag{3.6}$$

Observa-se que a equação da continuidade permanece inalterada, indicando que o campo médio deve respeitar a conservação de massa, já na equação de conservação de quantidade de movimento aparece um termo adicional, que representa o efeito das flutuações sobre o campo médio de escoamento.

Essas equações são conhecidas como as equações médias de Reynolds (do inglês *Reynolds averaged Navier-Stokes equations – RANS*) que dão nome a essa metodologia de aproximação, hoje conhecida também como modelagem clássica da turbulência.

Todos os termos das equações (3.5) e (3.6) representam o movimento do escoamento médio, exceto o termo que envolve a média do produto das flutuações conhecido como tensor de Reynolds, ou tensor de tensões turbulentas. O aparecimento desse termo leva ao problema de fechamento, que é a ausência de equações de conservação bem conhecidas para representar essas flutuações. Dessa forma aparecem mais incógnitas que equações no sistema a ser resolvido, modelos devem então ser utilizados para representar essas variáveis adicionais em função das variáveis médias.

A fim de modelar-se os efeitos do tensor de Reynolds sobre o escoamento médio a ser resolvido, duas principais linhas de aproximação foram desenvolvidas. Uma segue a hipótese de Boussinesq (discutida em detalhe adiante) e a outra trabalha com equações de transporte do próprio tensor de Reynolds.

Por resolver apenas as variáveis médias do escoamento, a modelagem clássica da turbulência permite o uso de diversas simplificações para os problemas em estudo. Simplificações como simetrias, escoamentos bidimensionais e em regime permanente são aproximações frequentemente utilizadas com modelos clássicos.

Também por essas características, os modelos de turbulência também ditos convencionais, devem levar em consideração todas as escalas do movimento turbulento. Isso é a grande dificuldade na elaboração desses modelos, principalmente pelo fato de que as grandes escalas da turbulência são enormemente influenciadas pela geometria e pelas condições de contorno, o que dificulta a obtenção de um modelo universal. Muitos modelos utilizados possuem parâmetros que são ajustados empiricamente, porém para alguns escoamentos de referência como turbulência isotrópica ou escoamentos turbulentos em canais. Em algumas situações, bastante diferente daquelas para os quais foram ajustados, os modelos fornecem resultados bastante imprecisos. Um dos exemplos mais conhecidos é a dificuldade do modelo k- ϵ em escoamentos com separação de camada limite, o que prejudica, por exemplo, a previsão da sustentação ou do arrasto de um perfil aerodinâmico a partir de um campo resolvido com esse modelo.

Outra grande dificuldade no uso desses modelos é de se obter resultados práticos quando as propriedades de interesse na simulação são justamente aquelas ligadas às flutuações no campo de escoamento. O que ocorre no estudo de vibrações induzidas pelo escoamento em um banco de tubos, por exemplo.

3.3. Simulação de grandes escalas

A simulação de grandes escalas - SGE (do inglês *large-eddy simulation* – *LES*) é uma alternativa intermediária entre a simulação numérica direta e a modelagem clássica da turbulência por médias de Reynolds. Ela foi introduzida pelo meteorologista Smagorinsky, 1963, e desde então vem sendo estudada e aprimorada. Com a possibilidade de se tornar, num futuro próximo, uma ferramenta prática de engenharia.

A simulação de grandes escalas consiste em resolver diretamente as maiores estruturas presentes no escoamento (as maiores escalas) e modelar o efeito das menores estruturas (menores escalas ou escalas sub-malha) naquelas resolvidas. Isso é feito através de uma

operação de filtragem (ou média espacial) aplicada sobre as equações de conservação (de massa e quantidade de movimento) e uso de um modelo para os termos necessários para fechamento. Esta metodologia permite o uso de malhas menos refinadas do que aquelas necessárias para simulação numérica direta, sendo então mais viável.

A idéia da simulação de grandes escalas é de aproveitar as características das diferentes escalas da turbulência já discutidas anteriormente. As menores escalas sendo mais universais, permitem utilizar modelos de turbulência mais simples do que aqueles utilizados na modelagem clássica para simular seus efeitos. As grandes escalas do escoamento, que são dependentes da geometria e das condições de contorno, portanto peculiares a um problema específico, são diretamente resolvidas. Lembrando-se que em muitas situações é o movimento das grandes escalas que domina a dinâmica e dos escoamentos, esse tipo de simulação é bem mais realista que a modelagem clássica, possibilitando a detecção de fenômenos que são “mascarados” na modelagem por médias de Reynolds.

Boas revisões sobre a metodologia da simulação de grandes escalas podem ser encontradas nos trabalhos de Rogallo e Moin, 1984, Lesieur et al., 1995 e Piomelli, 1999. Em linhas gerais um bom texto (um pouco mais resumido) também é encontrado na referência Silva Freire et al., 2002. Outros trabalhos citados ao longo deste ressaltam diferentes aspectos e cuidados especiais a serem tomados na aplicação da simulação de grandes escalas.

A separação entre grandes escalas (resolvidas) e pequenas escalas (modeladas) é feita pelo operador de filtragem; os movimentos de ordem superior ao comprimento característico do filtro são as grandes escalas, e os de ordem inferior são as menores. Essa definição não é necessariamente a definição utilizada no estudo teórico da turbulência, onde para altos valores do número de Reynolds as maiores escalas são aquelas da ordem da geometria até a ordem da escala inercial de Kolmogorov, e as menores são desta última até as escalas dissipativas. Por isso alguns autores definem dois tipos de simulação de grandes escalas: a simulação de grandes escalas física, onde a divisão de escalas é a mesma aplicada ao estudo teórico da turbulência; e a simulação de grandes escalas numérica, onde essa condição não é cumprida [Pope, 2003]. Uma classificação alternativa é apresentada por Ferziger, 1993. Ele classifica como captura de estruturas coerentes (do inglês *coherent structure capture – CSC*) uma simulação nas bases da simulação de grandes escalas, porém com uma resolução numérica suficiente apenas para capturar os efeitos dos maiores vórtices. Com isso em casos onde os valores de interesse de um dado escoamento são dependentes apenas das maiores escalas e das maiores flutuações de pressão, bons resultados são obtidos com um baixo custo computacional. Entretanto, a captura de

estruturas coerentes falha em casos onde efeitos de arraste viscoso ou de estruturas menores que a malha são predominantes.

As menores escalas do escoamento, que não são resolvidas na simulação de grandes escalas, são também chamadas de escalas sub-malha (do inglês *subgrid-scales* – *SGS*). Seus efeitos sobre o desenvolvimento do campo de escoamento resolvido são modelados através de modelos especiais de fechamento [Findikakis e Street, 1982].

Como a simulação de grandes escalas tem o objetivo de simular grandes estruturas da turbulência (como anteriormente apresentadas, tridimensionais) ela é tridimensional por definição, alguma descrição bidimensional de um escoamento feita utilizando essa metodologia só pode ser considerada em situações em que evidências físicas validam a hipótese de que as grandes estruturas são predominantemente bidimensionais. Nesses casos as variáveis obtidas representariam médias das variáveis reais na terceira dimensão [Findikakis e Street, 1982].

A qualidade de um resultado obtido numa simulação de grandes escalas é dependente de diversos fatores como o método numérico, a resolução da discretização utilizada, o tamanho característico do filtro, o modelo utilizado para as menores escalas e as condições de contorno aplicadas. Cada um desses fatores tem uma influência sobre a resposta e diferentes combinações destes também influenciam qualitativa e quantitativamente os resultados. Discussões sobre cada alternativa serão feitas nas seções subseqüentes.

3.3.1. Filtragem espacial para simulação de grandes escalas

Para a separação de escalas (em resolvidas e modeladas) em simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos é aplicado um filtro sobre as equações de conservação [Silva Freire et al., 2002]. As variáveis do problema são divididas em uma componente de grandes escalas (a ser resolvida) e uma componente de pequenas escalas (chamadas escalas sub-malha, a serem modeladas), assim:

$$\begin{aligned} u_i &= \bar{u}_i + u'_i \\ p &= \bar{p} + p' \end{aligned} \quad (3.7)$$

Onde \bar{u}_i e \bar{p} são os valores filtrados (também chamados de valores médios espaciais) da componente i do vetor velocidade e da pressão e u'_i e p' são os valores de flutuação da componente i do vetor velocidade e da pressão.

A operação de filtragem é definida como uma convolução entre a variável de campo e a função filtro [Leonard, 1974]. Os valores filtrados são obtidos a partir do operador filtro mostrado na equação (3.8).

$$\bar{g}(\mathbf{x}, t) = \int G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') g(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}' \quad (3.8)$$

Onde g é uma variável genérica, \bar{g} seu valor filtrado e G a função filtro, que pode assumir diversas formas, sendo mais comum o uso do filtro “caixa”. O filtro “caixa” é uma função que apresenta um valor constante dentro do raio característico do filtro, como dado pela equação (3.9) e mostrado na Figura 3.1a. Outros filtros freqüentemente utilizados são o filtro gaussiano, definido pela equação (3.10) e mostrado também na Figura 3.1b, e o filtro passa alta (filtro de corte) no espaço de Fourier (em números de onda) dado pela equação (3.11) [Leonard, 1974; Silveira Neto et al., 1993; Piomelli, 1999]. Outros filtros são descritos nos artigos de Leonard, 1974, e Findikakis e Street, 1982.

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \begin{cases} \frac{1}{\Delta^3} & \text{se } |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \leq \frac{\bar{\Delta}}{2} \\ 0 & \text{se } |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| > \frac{\bar{\Delta}}{2} \end{cases} \quad (3.9)$$

Onde $\bar{\Delta}$ é a dimensão característica do filtro.

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \left(\frac{6}{\pi \Delta} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\left(\frac{-9|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2}{\Delta^2} \right)} \quad (3.10)$$

$$\hat{G}(k) = \begin{cases} 1 & \text{se } k \leq \frac{\pi}{\Delta} \\ 0 & \text{se } k > \frac{\pi}{\Delta} \end{cases} \quad (3.11)$$

Onde \hat{G} é a função filtro e k é o número de onda definidos no espaço de Fourier.

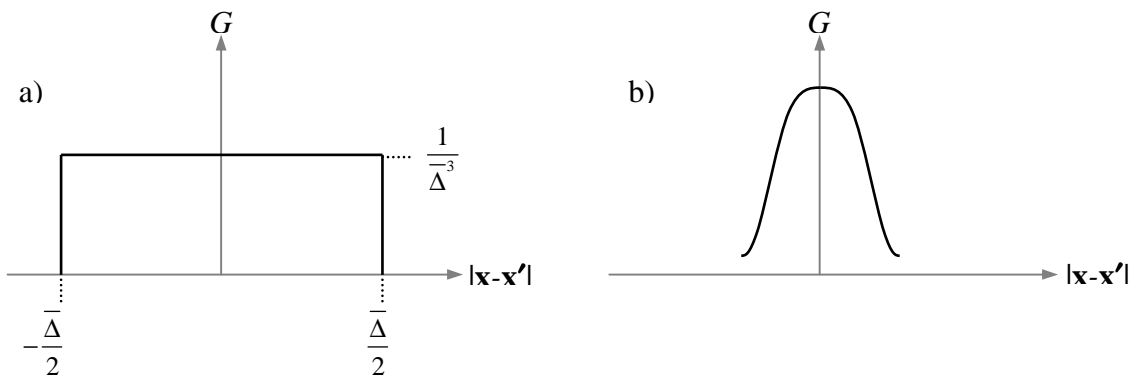


Figura 3.1. a) Forma da função filtro tipo “caixa”; b) Forma da função filtro gaussiana.

A operação de filtragem possui as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned}
 \overline{gf} &\neq \overline{g}f \\
 \overline{gf'} &\neq \overline{g}f' \\
 \overline{gf'} &\neq 0
 \end{aligned}
 \tag{3.12}$$

Essas propriedades a diferenciam da operação de média temporal da decomposição de Reynolds. Além disso, se um filtro é uniforme (com comprimento característico $\bar{\Delta}$ constante, dependente apenas de $|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|$) é empregado, as operações de filtragem e derivação são comutativas, ou seja:

$$\begin{aligned}
 \overline{\frac{\partial g}{\partial x_i}} &= \frac{\partial \overline{g}}{\partial x_i} \\
 \overline{\frac{\partial g}{\partial t}} &= \frac{\partial \overline{g}}{\partial t}
 \end{aligned}
 \tag{3.13}$$

Quando um filtro não-uniforme é utilizado aparecem erros de comutação nas derivadas espaciais. Piomelli, 1999, cita trabalhos que demonstram que esse erro é da ordem do quadrado do tamanho característico do filtro, $O(\bar{\Delta}^2)$, e que quando são utilizados esquemas numéricos de segunda ordem na discretização do problema o erro passa a ser da mesma ordem do erro de truncamento. O tamanho característico do filtro não é necessariamente igual ao tamanho característico da malha (h). Em alguns casos o tamanho característico do filtro é definido como a raiz cúbica do produto dos comprimentos característicos da malha nas três dimensões, em outros,

como em malhas bastante anisotrópicas, utiliza-se uma escala proporcional à norma euclidiana da dimensão dos elementos [Findikakis e Street, 1982].

Uma das diferenças entre o filtro tipo caixa e o filtro gaussiano é que o filtro tipo caixa possui contribuição de todas as escalas sub-malha, “absorvendo” seus movimentos. Por esse motivo, não é possível obter um espectro completo da turbulência com o uso desse tipo de função filtro. Para evitar esse tipo de problema muitos autores utilizam o filtro gaussiano, que não elimina totalmente os movimentos das menores escalas [Findikakis e Street, 1982].

Aplicando-se a filtragem nas equações de conservação na forma incompressível, dadas pelas equações (2.15) e (2.16), obtém-se as equações de conservação para as variáveis filtradas (para simulação de grandes escalas) na forma incompressível, escritas como as equações (3.14) para a conservação de massa filtrada e (3.15) para a conservação da quantidade de movimento filtrada.

$$\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_j \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \bar{f}_i \quad (3.15)$$

A equação da continuidade permanece inalterada em sua forma, passando apenas a trabalhar com a velocidade filtrada. O campo filtrado de velocidades então deve satisfazer também a conservação de massa. Já na equação de Navier-Stokes, o termo advectivo aparece com o produto filtrado das velocidades, o que não pode ser trabalhado de forma direta.

Inserindo a definição de velocidade filtrada e flutuante dada pela equação (3.7) no produto filtrado das velocidades chega-se à:

$$\overline{u_j u_i} = \overline{(\bar{u}_j + u'_j)(\bar{u}_i + u'_i)} = \bar{u}_j \bar{u}_i + \overline{u'_j \bar{u}_i} + \overline{\bar{u}_j u'_i} + \overline{u'_j u'_i} \quad (3.16)$$

Agrupando-se os termos e inserindo os termos de Leonard chega-se à equação (3.17).

$$\overline{u_j u_i} = \bar{u}_j \bar{u}_i + \tau_{ij} + C_{ij} + L_{ij} \quad (3.17)$$

onde τ_{ij} representa as tensões das escalas sub-malha (produto filtrado das flutuações de velocidade), C_{ij} os termos cruzados (com contribuições das variáveis filtradas e das variáveis sub-malha) e L_{ij} os termos de Leonard, e que são dados pelas expressões (3.18), (3.19) e (3.20) respectivamente.

$$\tau_{ij} = \overline{u'_j u'_i} \quad (3.18)$$

$$C_{ij} = \overline{\overline{u_j u'_i} + \overline{u'_j u_i}} \quad (3.19)$$

$$L_{ij} = \overline{\overline{u_j u_i}} - \overline{u_j u_i} \quad (3.20)$$

Inserindo a equação (3.17) na equação (3.15) chega-se à forma filtrada completa da equação de Navier-Stokes para a forma incompressível.

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_j \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \tau_{ij} - C_{ij} - L_{ij} \right] + \bar{f}_i \quad (3.21)$$

Os termos de tensões sub-malha e cruzados representam os efeitos das escalas sub-malha sobre as escalas resolvidas e a interação entre as duas escalas. O termo de Leonard representam exatamente a diferença entre o valor do produto filtrado das velocidades filtradas e o produto simples das velocidades filtradas, como mostrado na equação (3.20). Esse termo foi definido por Leonard, 1974, para melhor representar a cascata de energia no escoamento turbulento, fazendo com que os efeitos das menores escalas não fosse capturado apenas pelo modelo sub-malha utilizado, diminuindo a dependência sobre esse modelo.

Os termos de Leonard e termos cruzados são aproximados por uma expansão em série de Taylor a partir do centro do volume filtrado, obtendo-se a seguinte expressão [Findikakis e Street, 1982; Silveira Neto et al., 1993]:

$$C_{ij} + L_{ij} \approx \frac{\Delta_k^2}{2\gamma} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} \quad (3.22)$$

Onde $\bar{\Delta}_k$ é o tamanho característico do filtro na direção k e γ é um valor constante definido pela função filtro utilizada; para um filtro tipo caixa, por exemplo, o valor de γ é 6. Leonard, 1974, apresentou em seu trabalho uma análise da contribuição desses termos na representação da cascata de energia, chegando à conclusão de que eles não podiam ser desprezados. Porém em análises posteriores e mais detalhadas, diversos autores, como Silveira Neto et al., 1993, e Petry e Awruch, 1997, concluíram que na verdade esses termos apresentam valores desprezíveis.

No trabalho de Rogallo e Moin, 1984, é dito que a forma correta de medir-se a importância dos termos de Leonard é medir-se a transferência de energia associada ao termo advectivo em um campo previamente resolvido (como em uma simulação direta da turbulência). É citado também que alguns estudos nesse sentido já haviam sido realizados e que existia sim transferência de energia, porém em uma ordem de grandeza muito inferior àquela prevista por Leonard, 1974.

Na prática, quando se utiliza um filtro tipo caixa (no domínio físico) ou um filtro passa de corte (no domínio de Fourier) e esquemas de discretização de baixa ordem, a contribuição desses termos é da ordem do erro numérico [Piomelli, 1999]. O que faz com que muitos autores nem escrevam tais termos, ou considere seus efeitos como inseridos no termo de tensões sub-malha [Lesieur et al., 1995; Piomelli, 1999].

O termo de tensões sub-malha sim recebe atenção especial. Ele representa diretamente a contribuição das menores escalas para o escoamento resolvido, e não pode ser considerado desprezível. A aproximação usual é feita através da hipótese de Boussinesq, mostrada na equação (3.23).

$$\tau_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \tau_{kk} \approx -2\nu_T \bar{S}_{ij} \quad (3.23)$$

Onde δ_{ij} é a função delta de Kroneker, ν_T é a viscosidade turbulenta associada localmente ao escoamento e \bar{S}_{ij} é o tensor taxa de deformação de grandes escalas, calculado pela equação (3.24). Essa é a primeira aproximação feita para contabilizar a influência das menores escalas no escoamento médio como função do movimento das grandes escalas. O termo envolvendo as tensões normais é relacionado com a energia cinética turbulenta, como mostrado pela equação (3.25).

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.24)$$

$$\tau_{kk} = \overline{u'_k u'_k} = 2\overline{k'} \quad (3.25)$$

Onde $\overline{k'}$ é a energia cinética turbulenta filtrada. O termo surge para considerar-se apenas a parte anisotrópica do tensor de tensões sub-malha, inserindo a parte isotrópica junto com a pressão estática do fluido (por ser uma tensão normal flutuante). O termo é necessário também por se estar trabalhando (até este ponto do presente trabalho) com as equações de conservação na forma incompressível. O que, na ausência desse termo adicional, geraria valores nulos de tensão sub-malha quando $i=j$ [Hinze, 1975].

Inserindo a aproximação (3.23) na equação (3.21) e, conforme justificado, desprezando os termos cruzados e de Leonard, chega-se à:

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u}_j \overline{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(v + \nu_T) \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] + \overline{f}_i \quad (3.26)$$

Onde a pressão foi redefinida como:

$$\overline{P} \equiv \overline{p} + \frac{\rho}{3} \tau_{kk} \quad (3.27)$$

Onde \overline{P} é a pressão filtrada redefinida na equação de Navier-Stokes [Lesieur et al., 1995].

A única variável sem alguma equação de conservação ou constitutiva é a viscosidade turbulenta, para ela é necessário algum tipo de equação de aproximação para fechamento do problema. Apesar de representar os efeitos das escalas sub-malha no escoamento médio, uma aproximação deve ser feita em função das escalas resolvidas do problema. Esses são os diferentes modelos sub-malha utilizados na simulação de grandes escalas.

A aplicação da filtragem nas equações de Navier-Stokes fornece equações que são semelhantes às utilizadas na modelagem por médias de Reynolds. Porém a modelagem clássica envolve um campo médio estacionário (ou com pequena variação no tempo) que varia suavemente no espaço. Já a simulação de grandes escalas envolve um campo que é bastante caótico no espaço e no tempo quando a malha é suficientemente pequena. Se o tamanho característico da malha aumenta muito (e com ele o tamanho característico do filtro), o resultado obtido com a simulação de grandes escalas de certa forma se aproxima daquele obtido usando-se a modelagem clássica [Lesieur et al, 1995].

Trabalhando-se com as equações de conservação com hipótese de quase-incompressibilidade, como apresentadas nas equações (2.13) e (2.14) obtém-se uma expressão um pouco diferente. Principalmente pelo fato de que não é necessária a redefinição da pressão, já que a parte relativa à energia cinética turbulenta na hipótese de Boussinesq não é necessária. A forma da aproximação de Boussinesq utilizada para o termo de tensões sub-malha é vista na equação (3.28) [Petry, 2002].

$$\tau_{ij} \approx -2\nu_T \bar{S}_{ij} \quad (3.28)$$

Com a mesma definição do tensor taxa de cisalhamento mostrada anteriormente, efetuando a operação de filtragem espacial nas equações de conservação para quase-incompressibilidade, inserindo a essa aproximação para o tensor de tensões sub-malha e desprezando os termos cruzados e de Leonard, chega-se à forma quase-incompressível das equações de conservação para simulação de grandes escalas.

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \rho c^2 \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_j \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\nu + \nu_T) \left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \right] + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) + \bar{f}_i \quad (3.30)$$

As equações (3.29) e (3.30) representam então as equações de conservação de massa e quantidade de movimento, respectivamente, para o campo filtrado (de grandes escalas) de um escoamento turbulento, tridimensional, transiente e isotérmico de um fluido newtoniano com hipótese de quase-compressibilidade. Essas equações serão utilizadas no restante do trabalho.

Pode-se definir ainda uma nova viscosidade, chamada viscosidade efetiva, que é a soma da viscosidade molecular do fluido com o valor de viscosidade turbulenta obtido para o escoamento, essa viscosidade efetiva (ν_{ef}) é dada então por:

$$\nu_{ef} = \nu + \nu_T \quad (3.31)$$

Na forma adimensional, obtida tanto pela adimensionalização das equações (3.29) e (3.30) ou pela aplicação da operação de filtragem e aproximações nas equações (2.18) e (2.19), é mostrada nas equações (3.32) e (3.33).

$$\frac{\partial \bar{p}^*}{\partial t^*} + \frac{1}{Mc} \frac{\partial \bar{u}_j^*}{\partial x_j^*} = 0 \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i^*}{\partial t^*} + \frac{\partial \bar{u}_j^* \bar{u}_i^*}{\partial x_j^*} = -\frac{1}{Mc} \frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i^*} + \frac{\partial}{\partial x_j^*} \left[\left(\frac{1}{Re_L} + \frac{1}{Re_T} \right) \left(\frac{\partial \bar{u}_j^*}{\partial x_i^*} + \frac{\partial \bar{u}_i^*}{\partial x_j^*} \right) \right] + \frac{1}{Re_\lambda} \frac{\partial}{\partial x_i^*} \left(\frac{\partial \bar{u}_k^*}{\partial x_k^*} \right) + \bar{f}_i^* \quad (3.33)$$

Onde Re_T é o número de Reynolds turbulento, definido em função da viscosidade turbulenta.

$$Re_T = \frac{UL}{\nu_T} \quad (3.34)$$

3.3.2. Modelos sub-malha

O modelo sub-malha é utilizado para representar a influência das escalas não-resolvidas (movimentos sub-malha) sobre as escalas resolvidas. Em modelos baseados no conceito de viscosidade turbulenta (pela hipótese de Boussinesq), a função do modelo sub-malha é calcular um valor para a viscosidade turbulenta que, quando inserido na equação do movimento filtrada, cause uma dissipação de energia que simule a transferência de energia para as pequenas escalas (a cascata de energia), e em casos especiais o efeito contrário, o fenômeno de *backscatter*.

O papel do modelo então não é de fornecer essas estatísticas para as grandes escalas, mas prevenir que a omissão das pequenas escalas (modeladas) comprometa o cálculo do campo de grandes escalas sobre o qual as estatísticas são tomadas.

A elaboração de um modelo sub-malha ideal ainda é um desafio para os estudiosos de turbulência e, principalmente, para os numericistas que desenvolvem a simulação de grandes escalas. As características desejadas para tal modelo é que ele seja capaz de prever corretamente a dissipação geral de energia no escoamento, que seja capaz de se anular em escoamentos laminares, que dependa fortemente das menores escalas resolvidas (mais do que do espectro completo de movimentos) e que preveja precisamente a troca local de energia entre as escalas resolvidas e as modeladas [Piomelli, 1999].

Nas sub-seções a seguir serão discutidos alguns dos principais modelos sub-malha.

a. Modelo de Smagorinsky

O primeiro modelo sub-malha foi proposto por Smagorinsky, 1963, em seu trabalho pioneiro, para simulação de grandes escalas de escoamentos atmosféricos quase-bidimensionais. A partir da hipótese de equilíbrio para as menores escalas, que diz que as menores escalas dissipam instantaneamente toda a energia que é transferida para elas, ele deduziu uma expressão para a viscosidade turbulenta mostrada na equação (3.35).

$$\nu_T = (C_S \bar{\Delta})^2 |\bar{S}| \quad (3.35)$$

Onde C_S é a constante de Smagorinsky e $|\bar{S}|$ é o módulo do tensor taxa de cisalhamento calculado pela equação (3.36).

$$|\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}} \quad (3.36)$$

A constante de Smagorinsky foi calculada para turbulência isotrópica apresentando valores entre 0,18 e 0,23. Em escoamentos com cisalhamento médio, próximo a contornos sólidos e em escoamentos em transição esse valor deve ser reduzido, isso se deve ao fato de que o modelo de Smagorinsky ser muito dissipativo.

Em escoamentos em transição, essa dissipação aumentada faz com que as primeiras perturbações no escoamento sejam amortecidas e não causem a transição. Também em escoamentos em transição e em escoamentos próximos a superfícies sólidas (escoamentos que não satisfazem a condição de equilíbrio de energia para as menores escalas), ocorre o fenômeno da transferência inversa de energia (o *backscatter*), fenômeno esse que não é captado pelo modelo de Smagorinsky, que só permite transferência de energia das maiores para as menores escalas. A capacidade de captar esse fenômeno é imprescindível para garantir-se a qualidade dos resultados obtidos. Um estudo interessante sobre o fenômeno de transferência inversa de energia no escoamento em um canal é apresentado em Piomelli et al., 1991.

Outra dificuldade do modelo é que ele não é capaz de anular as tensões turbulentas sub-malha quando o escoamento é laminar [Findikakis e Street, 1982; Piomelli et al., 1993; Ferziger, 1993; Lesieur et al., 1995; Piomelli, 1999].

Para superar essas dificuldades muitos autores propuseram modificações no modelo de Smagorinsky; funções de intermitência para “desligar” o modelo onde necessário e funções de amortecimento tipo van Driest próximo a paredes são exemplos dessas modificações [Piomelli et al., 1991; Ferziger, 1993]. Em Piomelli et al. 1988, são citados trabalhos que propuseram uma decomposição do modelo de Smagorinsky em duas partes, uma para modelar os vórtices isotrópicos e outra para modelar as não-homogeneidades locais nas paredes.

Apesar dessas dificuldades, muitos trabalhos foram realizados utilizando o modelo de Smagorinsky com resultados de qualidade, trabalhando com escoamentos adequados às suas limitações. Uma crítica feita sobre o modelo de Smagorinsky é de que os bons resultados obtidos com sua aplicação refletem sua habilidade de estabilizar os cálculos realizados e não de reproduzir com precisão os efeitos das escalas sub-malha, o que indicaria também que as maiores escalas dos escoamentos são insensíveis aos detalhes dos movimentos sub-malha naqueles escoamentos onde são obtidos resultados satisfatórios [Rogallo e Moin, 1984].

Um detalhe sobre o uso do modelo de Smagorinsky é a combinação dele com alguns tipos de filtro, como mostrado no trabalho de Piomelli, 1999, a aplicação do modelo de Smagorinsky só é adequada quando se tem o tamanho das escalas sub-malha bem definidos (ou seja, quando se tem claramente a escala de corte das menores estruturas) como acontece quando se utiliza uma função filtro tipo caixa. O modelo de Smagorinsky impede que se contabilize o efeito de todas as escalas sobre o campo filtrado, que é uma das características do filtro gaussiano. Dessa forma a combinação do modelo de Smagorinsky com um filtro gaussiano leva a resultados ruins, sendo mais apropriada sua combinação com o filtro tipo caixa.

b. Modelo dinâmico

Um dos modelos sub-malha que fornece os melhores resultados para escoamentos sob diversas condições é o modelo dinâmico. O modelo dinâmico pode ser visto também como uma estrutura de modelagem, não só como um modelo sub-malha específico, já que ele pode ser aplicado sobre diversos outros modelos sub-malha. O modelo dinâmico baseia-se a idéia de que as constantes do modelo sub-malha sobre o qual é utilizado podem ser avaliadas localmente no escoamento a partir das menores escalas resolvidas. Desta forma as “constantes” se adaptam as características locais (no espaço e no tempo) do escoamento, simulando com mais precisão os efeitos das escalas modeladas.

O modelo dinâmico foi apresentado no trabalho de Germano et al., 1991, e mais tarde Lilly, 1992, modificou a forma apresentada para o cálculo do coeficiente dinâmico. A proposta é

de se aplicar uma segunda filtragem sobre o escoamento resolvido e relacionar as tensões turbulentas das menores escalas resolvidas como as tensões das escalas sub-malha.

A aplicação mais comum da modelagem dinâmica é sobre o modelo de Smagorinsky (para o qual foi derivado). Nesse caso a constante de Smagorinsky C_s é substituída por um valor dinâmico C . Para a obtenção de uma expressão para o cálculo de C aplica-se uma segunda filtragem (filtro teste) sobre a equação da conservação da quantidade de movimento na forma (3.15). O tamanho característico do filtro teste $\tilde{\Delta}$ é sempre tomado maior que o tamanho característico da filtragem de grandes escalas, geralmente o dobro. A nova equação de conservação com a segunda filtragem é escrita como:

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{u_j u_i}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \tilde{f}_i \quad (3.37)$$

Define-se então um novo tensor de tensões sub-malha (no nível do filtro teste) como mostrado na equação (3.38).

$$T_{ij} = \widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j \quad (3.38)$$

Onde T_{ij} é o tensor de tensões sub-malha. Define-se então um outro tensor que representa as tensões causadas pelas menores escalas resolvidas da malha, essas escalas estão em uma faixa de comprimento denominada “janela de teste”.

$$L_{ij} = \widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j = T_{ij} - \tilde{\tau}_{ij} \quad (3.39)$$

Aqui L_{ij} é o tensor de tensões turbulentas das menores escalas resolvidas, escalas de comprimento maior do que o primeiro filtro $\bar{\Delta}$ e menor do que o filtro teste $\tilde{\Delta}$, e $\tilde{\tau}$ é o tensor filtrado no nível teste de tensões sub-malha no nível da primeira filtragem.

Supondo que ambos os tensores de tensões turbulentas possam ser modelados pelo mesmo funcional, o modelo de Smagorinsky, na forma da equação (3.35), chega-se as equações (3.40), (3.41) e (3.42).

$$\tau_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \tau_{kk} \approx -2C\bar{\Delta}^2 \left| \bar{S} \right| \bar{S}_{ij} \quad (3.40)$$

$$T_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} T_{kk} \approx -2C\tilde{\Delta}^2 \left| \widetilde{S} \right| \widetilde{S}_{ij} \quad (3.41)$$

$$L_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} L_{kk} \approx -2CM_{ij} \quad (3.42)$$

com o tensor M_{ij} calculado a partir das equações (3.39), (3.40) e (3.41) como:

$$M_{ij} = 2C\tilde{\Delta}^{-2} \left| \widetilde{S} \right| \widetilde{S}_{ij} - 2C\tilde{\Delta}^2 \left| \widetilde{S} \right| \widetilde{S}_{ij} \quad (3.43)$$

Com a definição da equação (3.43), pode-se calcular o valor de C a partir da equação (3.42). O problema que surge é que a equação (3.42) não fornece um único valor para C ; isso foi resolvido pela aplicação de uma aproximação de mínimos quadráticos para o erro total da equação

$$Q = \left(L_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} L_{kk} + 2CM_{ij} \right)^2 \quad (3.44)$$

onde Q é o erro quadrático da equação (3.42). O valor de C para o mínimo erro é obtido pela operação:

$$\frac{\partial Q}{\partial C} = 0 \quad (3.45)$$

chegando-se a:

$$C = -\frac{1}{2} \left(\frac{L_{ij} M_{ij}}{M_{ij}^2} \right) \quad (3.46)$$

A viscosidade turbulenta, utilizada na equação de Navier-Stokes filtrada para simulação de grandes escalas (equação (3.26), (3.30) ou (3.33)), é calculada então a partir da fórmula:

$$\nu_T = C\tilde{\Delta}^2 \left| \widetilde{S} \right| \quad (3.47)$$

com o valor de C obtido a partir da equação (3.46).

Utilizando esse modelo o valor da viscosidade turbulenta se anula para escoamentos laminares e próximos a contornos sólidos (já que L_{ij} se anula nesses casos), o que é o comportamento correto nesses casos. Além disso o modelo é capaz de reproduzir o fenômeno da transferência inversa de energia (*backscatter*) o que o torna adequado a simular, por exemplo, escoamentos em transição.

O único parâmetro definido fora do processo de cálculo é a razão entre o comprimento característico do filtro teste ($\tilde{\Delta}$) e o comprimento característico do filtro para simulação de grandes escalas ($\bar{\Delta}$). O que se tem definido é que esse valor tem que ser maior que a unidade. Testes demonstraram que o modelo não é muito sensível a esse número, mas um valor ótimo conhecido é em torno de 2.

Um inconveniente do modelo dinâmico é o aparecimento de variações abruptas no espaço e no tempo dos valores do coeficiente dinâmico (e portanto da viscosidade turbulenta). Isso pode ser resolvido através de médias (no espaço ou no tempo) do valor do coeficiente. Em seu trabalho, Germano et al., 1991, fez médias sobre todas as direções homogêneas dos casos testados, resolvendo o problema. Uma média na escala de comprimento do filtro teste é justificada pelo fato de que o mesmo coeficiente deve ser aplicado para as tensões turbulentas sub-malha e para aquelas dentro do filtro teste [Piomelli, 1999].

Uma proposta de algoritmo para cálculo do coeficiente dinâmico e para a média espacial no nível do filtro teste é apresentada em Petry e Awruch, 2004, onde o processo de cálculo e média espacial é baseado no método de elementos finitos. No mesmo trabalho é empregado um limitador para valores negativos de viscosidade turbulenta, sendo este limitador também usado por Zang et al, 1993. O limitador faz com que a soma das viscosidades molecular e turbulenta (a viscosidade efetiva) seja sempre maior ou igual a zero, como mostra a equação (3.48).

$$\nu_{ef} = \nu + \nu_T \geq 0 \quad (3.48)$$

Isso também evita que o processo numérico se torne instável, além do fato de que um valor de viscosidade efetiva negativo não teria um sentido físico aceitável.

Como o modelo dinâmico foi aplicado sobre a base do modelo de Smagorinsky, deve-se utilizar uma função filtro tipo caixa na filtragem das equações de conservação, sob pena de perda de qualidade nos resultados se for utilizado um filtro tipo gaussiano, por exemplo.

Outros modelos sub-malha, como modelos mistos ou tipo função de estrutura também são bastante utilizados. Detalhes sobre tais modelos podem ser encontrados nas revisões escritas por Lesieur et al., 1995, e Piomelli, 1999.

4. MODELAGEM MATEMÁTICA E NUMÉRICA

O método numérico utilizado no trabalho para a aproximação das equações de conservação é o método de elementos finitos. Inicialmente deduzido para trabalhar com problemas estruturais, o método de elementos finitos tornou-se uma ferramenta completa para lidar com diversos tipos de problemas de engenharia. A bibliografia sobre o método é bastante extensa e detalhada. Alguns trabalhos indicados para estudo do método em geral e sua aplicação no problema de dinâmica de fluidos computacional são aqueles de Hughes, 1987, Zienkiewicz e Taylor, 2000, e Reddy e Gartling, 1994.

Através da aplicação do método de elementos finitos o sistema de equações diferenciais formado pela equação da conservação de massa e pelas equações de conservação da quantidade de movimento (duas no caso bidimensional e três no caso tridimensional) é transformado em um sistema algébrico passível de solução. No presente trabalho as equações de conservação utilizadas são aquelas na forma exibida pelas equações (2.18) e (2.19). Essas equações governam o escoamento, tridimensional (ou bidimensional), isotérmico, transiente e turbulento, das grandes escalas de um fluido newtoniano com hipótese de quase-incompressibilidade escritas na forma indicial e adimensionalizadas. Para facilitar a leitura do trabalho essas equações são repetidas abaixo.

$$\frac{\partial \bar{p}^*}{\partial t^*} + \frac{1}{Mc} \frac{\partial \bar{u}_j^*}{\partial x_j^*} = 0 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i^*}{\partial t^*} + \frac{\partial \bar{u}_j^* \bar{u}_i^*}{\partial x_j^*} = -\frac{1}{Mc} \frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i^*} + \frac{\partial}{\partial x_j^*} \left[\left(\frac{1}{Re_L} + \frac{1}{Re_T} \right) \left(\frac{\partial \bar{u}_j^*}{\partial x_i^*} + \frac{\partial \bar{u}_i^*}{\partial x_j^*} \right) \right] + \frac{1}{Re_\lambda} \frac{\partial}{\partial x_i^*} \left(\frac{\partial \bar{u}_k^*}{\partial x_k^*} \right) + \bar{f}_i^* \quad (4.2)$$

Para que o sistema formado por essas equações seja completo e passível de solução são necessárias também condições iniciais e condições de contorno, apresentadas nas equações (4.3) e (4.4) como em Reddy e Gartling, 1994.

$$\begin{aligned} \bar{u}_i^* &= \bar{u}_{i0}^* & \text{em } t = 0 \\ \bar{p} &= \bar{p}_0^* & \text{em } t = 0 \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \bar{u}_i^* &= \hat{u}_i^* && \text{sobre } \Gamma_D \\ \bar{T}_i^* &= \frac{\sigma_{ij}^*}{\rho} n_j = \hat{T}_i^* && \text{sobre } \Gamma_N \end{aligned} \quad (4.4)$$

Onde \bar{u}_{i0}^* e \bar{p}_0^* são valores prescritos de velocidade e pressão para o tempo inicial. σ_{ij}^* é a tensão no fluido, \bar{T}_i^* é a tração sobre o fluido na direção i e \hat{u}_i^* e \hat{T}_i^* são os valores da velocidade e da tração no fluido nos contornos, todos na forma adimensional. Γ representa o contorno do domínio do problema chamado de Ω ; o contorno é dividido em duas partes, uma chamada Γ_D onde é aplicada uma condição de valor prescrito das variáveis primárias, chamada de condição de primeira espécie (condição de Dirichlet) e outra chamada Γ_N onde é aplicada uma condição de segunda espécie (condição de Neumann) envolvendo derivadas das variáveis primárias. Deve-se ressaltar que não existe sobreposição entre as fronteiras Γ_D e Γ_N , ou seja, $\Gamma_D \cap \Gamma_N = 0$. A Figura 4.1 mostra um esquema do domínio e suas fronteiras.

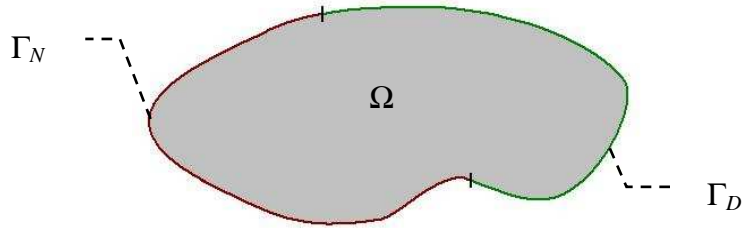


Figura 4.1. Esquema do domínio Ω e das fronteiras Γ_D e Γ_N para o método de elementos finitos.

A tração de grandes escalas no fluido é obtida a partir da equação (4.5).

$$\bar{T}_i = \frac{\sigma_{ij}}{\rho} n_j = \left[-\frac{p}{\rho} \delta_{ij} + (v + v_T) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{\lambda}{\rho} \left(\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \right] n_j \quad (4.5)$$

Na forma adimensional, a equação (4.5) é dada por:

$$\bar{T}_i^* = \sigma_{ij}^* n_j = \left[-\frac{p^*}{Mc} \delta_{ij} + \left(\frac{1}{Re_L} + \frac{1}{Re_T} \right) \left(\frac{\partial \bar{u}_i^*}{\partial x_j^*} + \frac{\partial \bar{u}_j^*}{\partial x_i^*} \right) + \frac{1}{Re_\lambda} \left(\frac{\partial \bar{u}_k^*}{\partial x_k^*} \right) \delta_{ij} \right] n_j \quad (4.6)$$

4.1. Forma de resíduos ponderados das equações de conservação de massa e quantidade de movimento

Para aplicar a aproximação de elementos finitos sobre alguma equação diferencial é necessário aplicar o princípio de resíduos ponderados sobre essa equação. Utilizando o processo descrito em Reddy, 1985, a forma de resíduos ponderados de uma equação é obtida seguindo-se os passos mostrados a seguir.

Primeiro todos os termos não-nulos das equações são passados para um dos lados da igualdade, multiplica-se então cada equação por uma função peso e integram-se as equações resultantes sobre o domínio. Essas etapas aplicadas sobre as equações (4.1) e (4.2) levam a:

$$\int_{\Omega} q \frac{\partial \bar{p}^*}{\partial t^*} d\Omega + \frac{1}{Mc} \int_{\Omega} q \frac{\partial \bar{u}_j^*}{\partial x_j^*} d\Omega = 0 \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} w_i \frac{\partial \bar{u}_i^*}{\partial t^*} d\Omega + \int_{\Omega} w_i \frac{\partial \bar{u}_j^* \bar{u}_i^*}{\partial x_j^*} d\Omega + \frac{1}{Mc} \int_{\Omega} w_i \frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i^*} d\Omega - \\ & + \int_{\Omega} w_i \frac{\partial}{\partial x_j^*} \left[\left(\frac{1}{Re_L} + \frac{1}{Re_T} \right) \left(\frac{\partial \bar{u}_j^*}{\partial x_i^*} + \frac{\partial \bar{u}_i^*}{\partial x_j^*} \right) \right] d\Omega - \int_{\Omega} w_i \frac{1}{Re_{\lambda}} \frac{\partial}{\partial x_i^*} \left(\frac{\partial \bar{u}_k^*}{\partial x_k^*} \right) d\Omega - \int_{\Omega} w_i \bar{f}_i^* d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (4.8)$$

Onde q é a função peso associada à pressão e w_i a função peso associada a componente i da velocidade. Ambas as funções peso são arbitrárias, devendo apenas satisfazer às condições de primeira espécie na forma homogênea.

Após isto se distribui a diferenciação entre as variáveis do problema e as funções peso (usando as regras de derivação do produto de funções ou de integração por partes, regra da cadeia e teorema de Gauss-Green). Chega-se então nas equações (4.9) e (4.10).

$$\int_{\Omega} q \frac{\partial \bar{p}^*}{\partial t^*} d\Omega + \frac{1}{Mc} \int_{\Omega} q \frac{\partial \bar{u}_j^*}{\partial x_j^*} d\Omega = 0 \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} w_i \frac{\partial \bar{u}_i^*}{\partial t^*} d\Omega + \int_{\Omega} w_i \frac{\partial \bar{u}_j^* \bar{u}_i^*}{\partial x_j^*} d\Omega - \int_{\Gamma} w_i \bar{T}_i^* d\Gamma - \int_{\Omega} w_i \bar{f}_i^* d\Omega + \\ & + \int_{\Omega} \frac{\partial w_i}{\partial x_j^*} \left[-\frac{\bar{p}^*}{Mc} \delta_{ij} + \left(\frac{1}{Re_L} + \frac{1}{Re_T} \right) \left(\frac{\partial \bar{u}_j^*}{\partial x_i^*} + \frac{\partial \bar{u}_i^*}{\partial x_j^*} \right) + \frac{1}{Re_{\lambda}} \left(\frac{\partial \bar{u}_k^*}{\partial x_k^*} \right) \delta_{ij} \right] d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (4.10)$$

A equação da continuidade mantém a forma da equação (4.7). Na equação de Navier-Stokes a distribuição da diferenciação, o uso do teorema de Gauss-Green e da definição da condição de Neumann da equação (4.6), alteraram a equação passando algumas das derivadas para a função peso e fazendo aparecer um termo de integração no contorno que não estava presente na equação original. O fato da condição de contorno de segunda espécie ser utilizada na derivação da forma variacional das equações de conservação faz com que esse tipo de condição de contorno seja naturalmente satisfeita na resolução do problema. Assim a condição de contorno de segunda espécie é também chamada em elementos finitos de condição natural. A condição de primeira espécie é chamada de condição essencial, já que é necessário algum valor pré-determinado das variáveis primárias para que o problema seja bem posto.

Observando as equações (4.10), (4.4) e (4.6) chega-se à conclusão de que a imposição de condições de contorno na variável de pressão não é feita de forma trivial. Como a pressão não aparece nas condições de contorno essenciais e sim nas naturais, prescrever uma condição de contorno de pressão requer trabalhar-se com integrais de contorno na formulação do problema. No trabalho de Gresho e Sani, 1987, a questão da imposição das condições de contorno de pressão é discutida mais detalhadamente. Como a idéia do presente trabalho é o desenvolvimento de um código a ser melhorado com futuros trabalhos, esta questão não irá ser abordada diretamente e na primeira versão do código não serão utilizadas condições de contorno de pressão prescrita.

O uso da formulação de quase-incompressibilidade iguala os requerimentos de derivação das funções que descrevem os campos de velocidade e pressão através do aparecimento de um termo de derivada do campo de pressões na equação da continuidade. Assim pode-se utilizar elementos de mesma ordem para ambos os campos. Usualmente a condição de Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi impede o uso deste tipo de elemento, a aplicação da formulação de quase-incompressibilidade “burla” essa imposição. O termo de derivada no tempo da pressão também faz com que não apareçam zeros na diagonal principal do sistema algébrico a ser formado, o que facilita a solução numérica do mesmo.

Utilizando essa forma fraca das equações de conservação será possível transformar o sistema de equações íntegro-diferenciais, dado pelas equações (4.9) e (4.10), em um sistema algébrico de equações. Para tanto é feita uma aproximação de elementos finitos sobre as equações citadas.

4.2. Aproximação de elementos finitos e formação do problema matricial

A aproximação de elementos finitos do problema consiste em discretizar o domínio do problema em um número de elementos e definir funções para as funções peso e para as funções aproximação. As funções aproximação (ou funções teste) são as funções utilizadas para representar o comportamento das variáveis primárias dentro do domínio de cada elemento.

As funções peso, por serem arbitrárias, são responsáveis pela formação do sistema de equações. Já que para cada função peso diferente escolhida se obtém um conjunto de equações diferente. Podendo assim igualar o número de incógnitas do problema.

A discretização do domínio transforma o domínio Ω do problema em uma coleção de subdomínios Ω^e de cada elemento, os quais não apresentam sobreposição, exceto na fronteira. Cada elemento apresenta um número de nós e em cada nó são definidos valores das variáveis primárias. O valor dessas variáveis no restante do domínio do elemento são dados pelas funções de forma e pelos valores nodais das variáveis. As funções de forma têm esse nome justamente por definirem a “forma” dos campos no interior do elemento, que pode ser linear, quadrática, etc., dependendo da ordem das funções de forma utilizadas. O número de nós no interior do elemento também está associado à ordem das funções de forma.

As funções de forma utilizadas no método de elementos finitos possuem “suporte local”, ou seja, possuem valores não nulos apenas no interior do elemento a qual estão associadas. Isso simplifica a montagem do sistema global de equações já que cada nó será influenciado apenas pelos nós vizinhos a ele.

Uma forma de simplificar ainda mais a aplicação do método é utilizar as mesmas funções de forma para as funções peso e para as funções aproximação. Esse esquema é conhecido como método de Bubnov-Galerkin [Hughes, 1987]. As funções utilizadas no presente trabalho são mostradas abaixo.

Para as funções peso, as aproximações são dadas por:

$$\begin{aligned} q &= \psi^m \\ w_i &= \psi^m \end{aligned} \tag{4.11}$$

Onde ψ^m é a função de forma associada ao nó m do elemento, ou seja, existe uma função de forma associada a cada um dos nós que compõem o elemento.

Para as funções teste as funções de forma são dadas pela combinação linear das funções de forma definidas no interior do elemento, como mostrado na equação (4.12).

$$\begin{aligned}
\bar{p}^* &= \sum_{m=1}^N \psi^m p^m \\
\bar{u}_i^* &= \sum_{m=1}^N \psi^m u_i^m \\
\bar{T}_i^* &= \sum_{m=1}^N \psi^m T_i^m \\
\bar{f}_i^* &= \sum_{m=1}^N \psi^m f_i^m
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Aqui p^m , u_i^m , T_i^m e f_i^m são os valores da pressão e da componente i da velocidade, da tração no fluido e das forças de corpo adimensionais no nó m . N é o número de nós que compõe o elemento. Apesar de poder gerar alguma confusão com os símbolos utilizados para pressão e velocidade nas equações básicas, por simplicidade de escrita e de leitura serão utilizados esses símbolos. No contexto atual a diferença das definições é claramente percebida.

As funções de forma são definidas como variáveis apenas no espaço (constantes no tempo) e os valores nodais variáveis apenas no tempo (constantes no espaço), como mostrado na equação (4.13).

$$\begin{aligned}
\psi^m &= \psi^m(\mathbf{x}^*) \\
p^m &= p^m(t^*) \\
u_i^m &= u_i^m(t^*)
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Inserindo as aproximações das equações (4.11) e (4.12) nas equações de conservação na forma fraca, dadas pelas equações (4.9) e (4.10), obtém-se:

$$\int_{\Omega^e} \psi^m \frac{\partial \sum_{n=1}^N \psi^n p^n}{\partial t^*} d\Omega + \frac{1}{Mc} \int_{\Omega^e} \psi^m \frac{\partial \sum_{n=1}^N \psi^n u_j^n}{\partial x_j^*} d\Omega = 0 \tag{4.14}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega^e} \psi^m \frac{\partial \sum_{n=1}^N \psi^n u_i^n}{\partial t^*} d\Omega + \int_{\Omega^e} \psi^m \frac{\partial \sum_{n=1}^N \psi^n u_i^n \sum_{l=1}^N \psi^l u_j^l}{\partial x_j^*} d\Omega + \\
& - \int_{\Gamma^e} \psi^m \sum_{n=1}^N \psi^n T_i^n d\Gamma - \int_{\Omega^e} \psi^m \sum_{n=1}^N \psi^n f_i^n d\Omega + \\
& + \int_{\Omega^e} \frac{\partial \psi^m}{\partial x_j^*} \left[\begin{aligned} & - \frac{\sum_{n=1}^N \psi^n p^n}{Mc} \delta_{ij} + \frac{1}{Re_\lambda} \left(\frac{\partial \sum_{n=1}^N \psi^n u_k^n}{\partial x_k^*} \right) \delta_{ij} + \\ & + \left(\frac{1}{Re_L} + \frac{1}{Re_T} \right) \left(\frac{\partial \sum_{n=1}^N \psi^n u_j^n}{\partial x_i^*} + \frac{\partial \sum_{n=1}^N \psi^n u_i^n}{\partial x_j^*} \right) \end{aligned} \right] d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{4.15}$$

onde Ω^e e Γ^e são o domínio e a fronteira de cada elemento. Como as funções de forma de um elemento se anulam fora deste a integral é definida somente no interior do elemento ao qual é associada. Utilizando as propriedades das funções de forma e dos valores nodais das variáveis mostradas na equação (4.13) e evidenciando derivações e somatórios chega-se nas equações (4.16) e (4.17).

$$\sum_{n=1}^N \left(\int_{\Omega^e} \psi^m \psi^n d\Omega \cdot \frac{\partial p^n}{\partial t^*} + \frac{1}{Mc} \int_{\Omega^e} \psi^m \frac{\partial \psi^n}{\partial x_j^*} d\Omega \cdot u_j^n \right) = 0 \tag{4.16}$$

$$\sum_{n=1}^N \left(\begin{aligned} & \int_{\Omega^e} \psi^m \psi^n d\Omega \cdot \frac{\partial u_i^n}{\partial t^*} + \sum_{l=1}^N \left(\int_{\Omega^e} \psi^m u_j^l \frac{\partial \psi^n \psi^l}{\partial x_j^*} d\Omega \right) \cdot u_i^n - \int_{\Gamma^e} \psi^m \psi^n d\Gamma \cdot T_i^n + \\ & - \int_{\Omega^e} \psi^m \psi^n d\Omega \cdot f_i^n - \frac{\delta_{ij}}{Mc} \int_{\Omega^e} \frac{\partial \psi^m}{\partial x_j^*} \psi^n d\Omega \cdot p^n + \frac{\delta_{ij}}{Re_\lambda} \int_{\Omega^e} \frac{\partial \psi^m}{\partial x_j^*} \frac{\partial \psi^n}{\partial x_k^*} d\Omega \cdot u_k^n + \\ & + \left(\frac{1}{Re_L} + \frac{1}{Re_T} \right) \left(\int_{\Omega^e} \frac{\partial \psi^m}{\partial x_j^*} \frac{\partial \psi^n}{\partial x_i^*} d\Omega \cdot u_j^n + \int_{\Omega^e} \frac{\partial \psi^m}{\partial x_j^*} \frac{\partial \psi^n}{\partial x_j^*} d\Omega \cdot u_i^n \right) \end{aligned} \right) = 0 \tag{4.17}$$

Assim para cada função peso, ou melhor, para cada valor de m , se obtém um conjunto de equações diferente para as n variáveis. Como tomamos $m=n$, forma-se um conjunto de n equações e n incógnitas. Escrevendo na forma matricial tem-se:

$$\mathbf{M} \cdot \dot{\mathbf{U}} + \mathbf{K}(\mathbf{U}) \cdot \mathbf{U} = \mathbf{F} + \mathbf{S} \tag{4.18}$$

onde \mathbf{M} é a matriz de massa do problema, $\mathbf{K}(\mathbf{U})$ é a matriz de rigidez (matriz de coeficientes) não-linear, $\dot{\mathbf{U}}$ é o vetor de derivadas no tempo das incógnitas, \mathbf{U} o vetor de incógnitas, \mathbf{F} o vetor de carregamento (forças externas) e \mathbf{S} o vetor de forças de tração sobre a fronteira do elemento. No sistema acima ainda permanecem duas dificuldades: primeiro, ainda existe um termo de derivadas dos valores das incógnitas em relação ao tempo e segundo, a matriz de rigidez do problema é não-linear, o que impede a solução direta do problema. Um tratamento especial a cada uma desses problemas será dado nas seções subseqüentes. As matrizes e vetores da equação (4.18), para o caso tridimensional, são definidos abaixo.

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{M}_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{M}_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{M}_p \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

$$M_i^{mn} = M_p^{mn} = \int_{\Omega^e} \psi^m \psi^n d\Omega \quad (4.20)$$

$$\mathbf{F} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F}_x \\ \mathbf{F}_y \\ \mathbf{F}_z \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{Bmatrix} \mathbf{S}_x \\ \mathbf{S}_y \\ \mathbf{S}_z \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix} \quad (4.21)$$

$$F_i^m = \sum_{n=1}^N \int_{\Omega^e} \psi^m \psi^n d\Omega \cdot f_i^n \quad (4.22)$$

$$S_i^m = \sum_{n=1}^N \int_{\Gamma^e} \psi^m \psi^n d\Gamma \cdot T_i^n$$

$$\dot{\mathbf{U}} = \begin{Bmatrix} \{\dot{u}^m\} \\ \{\dot{v}^m\} \\ \{\dot{w}^m\} \\ \{\dot{p}^m\} \end{Bmatrix} \quad (4.23)$$

$$\mathbf{U} = \begin{Bmatrix} \{u^m\} \\ \{v^m\} \\ \{w^m\} \\ \{p^m\} \end{Bmatrix} \quad (4.24)$$

Onde \dot{u}^m , \dot{v}^m , \dot{w}^m e \dot{p}^m são os valores das derivadas no tempo das variáveis nos nós e u^m , v^m , w^m e p^m são os valores das variáveis nos nós do elemento. A matriz de coeficientes é na verdade o somatório de outras matrizes, como mostrado na equação (4.25).

$$\mathbf{K}(\mathbf{U}) = \mathbf{A}(\mathbf{U}) + \mathbf{C} + \mathbf{V} + \mathbf{G} + \mathbf{D} \quad (4.25)$$

onde $\mathbf{A}(\mathbf{U})$ é a matriz de termos advectivos, sendo a parte não-linear do problema, \mathbf{C} é a matriz de termos viscosos, \mathbf{V} a matriz de termos viscosos volumétricos, \mathbf{G} a matriz de termos do gradiente de pressão e \mathbf{D} a matriz de termos do divergente de velocidade da equação da continuidade. Cada matriz é definida como mostrado abaixo, novamente para o caso tridimensional.

$$\mathbf{A}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{A}_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{A}_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.26)$$

$$A_i^{mn} = \sum_{l=1}^N \left(\int_{\Omega^e} \psi^m u_j^l \frac{\partial \psi^n \psi^l}{\partial x_j^*} d\Omega \right) \quad (4.27)$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{xx} & \mathbf{C}_{xy} & \mathbf{C}_{xz} & 0 \\ \mathbf{C}_{yx} & \mathbf{C}_{yy} & \mathbf{C}_{yz} & 0 \\ \mathbf{C}_{zx} & \mathbf{C}_{zy} & \mathbf{C}_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V} = \begin{bmatrix} \mathbf{V}_{xx} & \mathbf{V}_{xy} & \mathbf{V}_{xz} & 0 \\ \mathbf{V}_{yx} & \mathbf{V}_{yy} & \mathbf{V}_{yz} & 0 \\ \mathbf{V}_{zx} & \mathbf{V}_{zy} & \mathbf{V}_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.28)$$

$$C_{ij}^{mn} = \left(\frac{1}{Re_L} + \frac{1}{Re_T} \right) \left(\int_{\Omega^e} \frac{\partial \psi^m}{\partial x_j^*} \frac{\partial \psi^n}{\partial x_i^*} d\Omega + \int_{\Omega^e} \frac{\partial \psi^m}{\partial x_j^*} \frac{\partial \psi^n}{\partial x_j^*} d\Omega \cdot \delta_{ij} \right) \quad (4.29)$$

$$V_{ij}^{mn} = \frac{1}{Re_\lambda} \int_{\Omega^e} \frac{\partial \psi^m}{\partial x_i^*} \frac{\partial \psi^n}{\partial x_j^*} d\Omega$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \mathbf{G}_x \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{G}_y \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{G}_z \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{D}_x & \mathbf{D}_y & \mathbf{D}_z & 0 \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

$$G_i^{mn} = -\frac{1}{Mc} \int_{\Omega^e} \frac{\partial \psi^m}{\partial x_i^*} \psi^n d\Omega \quad (4.31)$$

$$D_i^{mn} = \frac{1}{Mc} \int_{\Omega^e} \psi^m \frac{\partial \psi^n}{\partial x_i^*} d\Omega$$

O sistema mostrado na equação (4.18) junto com as condições de contorno e iniciais dadas nas equações (4.3) e (4.4) aproximam as equações de balanço sobre um domínio discretizado Ω .

4.3. Discretização do avanço no tempo

Existem diversas formas de se tratar o problema no avanço no tempo disponíveis para aplicação no método de elementos finitos. O avanço no tempo, no caso atual, é na verdade é a forma utilizada para aproximar o vetor de derivadas temporais das variáveis primárias que multiplica a matriz de massa na equação (4.18).

Usualmente para a simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos se opta por esquemas totalmente explícitos [Petry, 2002; Popiolek et al., 2006], o que simplifica esse avanço no tempo (e também o problema da não-linearidade) e diminui o requerimento de armazenagem de valores. O problema associado a um esquema totalmente explícito é que o passo de tempo passível de ser utilizado é muito pequeno. Algumas vezes pesando mais no custo computacional do que a economia de memória do esquema. Para a formulação explícita utilizada no presente trabalho, em problemas de advecção dominante, esse fator é bastante crítico, já que o passo de tempo está limitado a valores abaixo do obtido através da equação (4.32), sob a pena de divergência da solução caso se use um valor superior.

$$\Delta t_{\text{máximo}} \leq \frac{\Delta x_i}{U + c} \quad (4.32)$$

onde $\Delta t_{\text{máximo}}$ é o máximo valor do passo de tempo para que a solução tenha convergência garantida e Δx_i é a menor dimensão dos elementos da malha.

O esquema de avanço no tempo escolhido para o presente trabalho é a aproximação de família θ [Hughes, 1987; Reddy, 1985]. Esse esquema pode, a partir da escolha do parâmetro θ , reproduzir esquemas explícito, semi-implícito e totalmente implícito. O esquema é baseado na aproximação de uma média ponderada da derivada no tempo das variáveis dependentes em dois passos de tempo consecutivos por uma interpolação linear dos valores dessas variáveis nos dois passos de tempo. Para aplicar essa aproximação, primeiro se reescreve a equação (4.18) para dois passos de tempo subseqüentes, já que esta equação é válida para qualquer instante de tempo. Chega-se então nas equações (4.33) e (4.34).

$$\mathbf{M} \cdot \dot{\mathbf{U}}_n + \mathbf{K}(\mathbf{U})_n \cdot \mathbf{U}_n = \mathbf{F}_n + \mathbf{S}_n \quad (4.33)$$

$$\mathbf{M} \cdot \dot{\mathbf{U}}_{n+1} + \mathbf{K}(\mathbf{U})_{n+1} \cdot \mathbf{U}_{n+1} = \mathbf{F}_{n+1} + \mathbf{S}_{n+1} \quad (4.34)$$

Onde o subscrito n e $n+1$ são indicadores do instante de tempo de cada equação. Entre os instantes de tempo n e $n+1$ existe uma diferença Δt (passo de tempo). A aproximação da família θ aproxima as derivadas no tempo nos instantes n e $n+1$ por:

$$\theta \cdot \dot{\mathbf{U}}_{n+1} + (1 - \theta) \cdot \dot{\mathbf{U}}_n = \frac{\mathbf{U}_{n+1} - \mathbf{U}_n}{\Delta t} \quad (4.35)$$

Onde θ é o parâmetro de avanço no tempo.

Isolando em cada uma das equações (4.33) e (4.34) os vetores de derivada no tempo das variáveis dependentes, tem-se:

$$\dot{\mathbf{U}}_n = \mathbf{M}^{-1} \cdot (\mathbf{F}_n + \mathbf{S}_n - \mathbf{K}(\mathbf{U})_n \cdot \mathbf{U}_n) \quad (4.36)$$

$$\dot{\mathbf{U}}_{n+1} = \mathbf{M}^{-1} \cdot (\mathbf{F}_{n+1} + \mathbf{S}_{n+1} - \mathbf{K}(\mathbf{U})_{n+1} \cdot \mathbf{U}_{n+1}) \quad (4.37)$$

Inserindo as equações (4.36) e (4.37) na equação (4.35) chega-se a forma do problema apresentada na equação .

$$\begin{aligned} & \Delta t \cdot \theta (\mathbf{F}_{n+1} + \mathbf{S}_{n+1} - \mathbf{K}(\mathbf{U}_{n+1}) \cdot \mathbf{U}_{n+1}) + \\ & + \Delta t (1 - \theta) (\mathbf{F}_n + \mathbf{S}_n - \mathbf{K}(\mathbf{U}_n) \cdot \mathbf{U}_n) = \mathbf{M} \cdot \mathbf{U}_{n+1} - \mathbf{M} \cdot \mathbf{U}_n \end{aligned} \quad (4.38)$$

Agrupando-se os termos para cada instante de tempo.

$$\begin{aligned} & (\mathbf{M} + \Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_{n+1})) \cdot \mathbf{U}_{n+1} = (\mathbf{M} - \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_n)) \cdot \mathbf{U}_n + \\ & + (\Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{F}_{n+1} + \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{F}_n) + (\Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{S}_{n+1} + \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{S}_n) \end{aligned} \quad (4.39)$$

Considerando que o problema transiente irá sempre partir de um campo inicial dado e que as condições de contorno são bem definidas para todos os passos de tempo, o lado direito da equação (4.39) é sempre conhecido. Assim pode-se resolver o sistema algébrico para obter-se os campos de pressão e velocidade para o passo de tempo $n+1$.

A escolha do valor de θ define o tipo de aproximação no tempo. Em princípio, θ pode assumir qualquer valor entre 0 e 1. Porém classicamente são utilizados os valores mostrados na Tabela 4.1).

Valor de θ	Nome do esquema
$\theta = 0$	Esquema totalmente explícito (de Euler) ou esquema de diferença adiantada
$\theta = 1/2$	Esquema de Crank-Nicholson semi-implícito
$\theta = 2/3$	Esquema de Galerkin semi-implícito
$\theta = 1$	Esquema totalmente implícito ou esquema de diferença atrasada

Tabela 4.1. Valores do parâmetro de avanço no tempo.

Os dois esquemas semi-implícitos são teoricamente incondicionalmente estáveis para problemas lineares, enquanto os outros dois são condicionalmente estáveis [Reddy, 1985]. A condição para esta estabilidade implica numa limitação no valor máximo de passo de tempo que pode ser utilizado. Como mostrado em Lange, 1992, tomando-se $\theta = 1/2$ (esquema semi-implícito de Crank-Nicholson) obtém-se um esquema de segunda ordem para a aproximação no tempo.

Para o esquema explícito o limite no valor do passo de tempo para convergência condicional é dado pela equação (4.40).

$$\Delta t_{\text{máximo}} \leq \frac{\Delta x_i}{U} \quad (4.40)$$

Como pode ser percebido pela análise desta equação, em comparação com a equação (4.32), dependendo da relação entre a velocidade característica do problema e da velocidade do som no fluido o valor do passo de tempo fornecido pela equação (4.40) é consideravelmente maior do que aquele obtido a partir da equação (4.32). Isto significa uma economia computacional em termos de número de passos de tempo para se atingir os valores estatísticos desejáveis em uma simulação de grandes escalas.

Com essa aproximação o sistema de equações diferenciais dado pela equação (4.18) é aproximado por um sistema de equações algébricas dado pela equação (4.39).

O sistema de equações algébricas obtido ainda não pode ser resolvido diretamente, já que ainda apresenta termos não-lineares.

4.4. Método de Newton para sistemas de equações algébricas não-lineares

Para tratar o problema da não-linearidade do sistema de equações algébricas formado na aproximação de elementos finitos das equações de conservação, é utilizado o método de Newton [Reddy e Gartling, 1994]. Este método resolve um sistema algébrico não-linear através de um processo iterativo, resolvendo a cada passo um sistema linear. O método de Newton é um método de segunda ordem e fornece uma solução geralmente com um número pequeno de iterações (convergência rápida) porém requer um campo inicial adequado (pequeno raio de convergência).

Sendo uma extensão do método de Newton-Raphson para encontrar raízes de equações não-lineares, o método é baseado em uma expansão em séries de Taylor truncada do resíduo. Esse resíduo para o problema em questão é dado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\mathbf{U}) = & (\mathbf{M} + \Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_{n+1})) \cdot \mathbf{U}_{n+1} - (\mathbf{M} - \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_n)) \cdot \mathbf{U}_n + \\ & - (\Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{F}_{n+1} + \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{F}_n) - (\Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{S}_{n+1} + \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{S}_n) \end{aligned} \quad (4.41)$$

Onde $\mathbf{R}(\mathbf{U})$ é o vetor de valores residuais da equação matricial aproximada do problema. O valor do vetor de incógnitas \mathbf{U}_{n+1} que anula esse resíduo é a solução do sistema não-linear. Expandindo o resíduo em séries de Taylor ao redor da solução \mathbf{U}^p tem-se:

$$\mathbf{R}(\mathbf{U}^p) + \left. \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{U}} \right|_{\mathbf{U}^p} \cdot \Delta \mathbf{U} + O(\Delta \mathbf{U}^2) = 0 \quad (4.42)$$

onde \mathbf{U}^p é a solução da iteração p do processo iterativo do método de Newton, $\Delta \mathbf{U}$ é a variação da solução entre as iterações p e $p+1$, ou seja, $\Delta \mathbf{U} = (\mathbf{U}^{p+1} - \mathbf{U}^p)$, e $O(\Delta \mathbf{U}^2)$ é o erro de truncamento da ordem de $\Delta \mathbf{U}^2$. Omitindo-se os termos de segunda ordem e superiores chega-se à equação (4.43).

$$\left. \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{U}} \right|_{\mathbf{U}^p} \cdot (\mathbf{U}^{p+1} - \mathbf{U}^p) \equiv \mathbf{J}(\mathbf{U}^p) \cdot (\mathbf{U}^{p+1} - \mathbf{U}^p) = -\mathbf{R}(\mathbf{U}^p) \quad (4.43)$$

onde a matriz \mathbf{J} é chamada de matriz jacobiana, ou matriz tangente. Essa matriz contém os termos da derivada do resíduo em relação as variáveis do problema. Para o problema em questão o sistema não-linear é aproximado pelo processo iterativo de se obter uma solução \mathbf{U}^{p+1} para o sistema linear dado pela equação, para o qual o valor de $\Delta \mathbf{U}$ seja menor do que um critério de convergência.

$$\mathbf{J}(\mathbf{U}_{n+1}^p) \cdot (\mathbf{U}_{n+1}^{p+1} - \mathbf{U}_{n+1}^p) = -\mathbf{R}(\mathbf{U}_{n+1}^p, \mathbf{U}_n) \quad (4.44)$$

onde os subscritos p e $p+1$ se referem ao número da iteração no método de Newton e os subscritos n e $n+1$ se referem ao passo de tempo no processo transiente. A matriz jacobiana é obtida a partir da expressão abaixo.

$$\mathbf{J}(\mathbf{U}_{n+1}^p) = \mathbf{M} + \Delta t \cdot \theta \left(\mathbf{K}(\mathbf{U}_{n+1}^p) + \mathbf{A}'(\mathbf{U}_{n+1}^p) \right) \quad (4.45)$$

Onde \mathbf{A}' é a matriz da derivada da matriz de termos advectivos em relação as variáveis do problema, dada pelas equações (4.46) e (4.47).

$$\mathbf{A}'(\mathbf{U}_{n+1}^p) = \begin{bmatrix} \mathbf{A}'_{xx} & \mathbf{A}'_{xy} & \mathbf{A}'_{xz} & 0 \\ \mathbf{A}'_{yx} & \mathbf{A}'_{yy} & \mathbf{A}'_{yz} & 0 \\ \mathbf{A}'_{zx} & \mathbf{A}'_{zy} & \mathbf{A}'_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.46)$$

$$A_{ij}^{mn} = \sum_{l=1}^N \left(\int_{\Omega^e} \psi^m \frac{\partial \psi^n \psi^l}{\partial x_j^*} d\Omega \right) u_i^l \quad (4.47)$$

A solução transiente do problema é então obtida a partir dos seguintes passos:

1. A partir das condições iniciais e de contorno monta-se o primeiro passo do sistema linear dado pela equação (4.44), com $\mathbf{U}_{n+1}^p = \mathbf{U}_n$;
2. Resolve-se o sistema e calcula-se $\mathbf{U}_{n+1}^{p+1} = \left| \Delta \mathbf{U}_{n+1}^p \right| + \mathbf{U}_{n+1}^p$;
3. O valor de \mathbf{U}_{n+1}^{p+1} obtido passa a ser \mathbf{U}_{n+1}^p e monta-se novamente o sistema linear;
4. Resolve-se o sistema novamente e recalcula-se $\left| \Delta \mathbf{U}_{n+1}^p \right|$, se este valor estiver abaixo do critério de convergência a solução é considerada convergida para esse passo de tempo, se o valor obtido estiver acima do critério de convergência volta-se ao passo 3;
5. O valor obtido de \mathbf{U}_{n+1}^{p+1} passa a ser \mathbf{U}_n e o processo é reiniciado a partir do passo 1 para o novo passo de tempo.

4.5. Oscilações no campo de pressão e diagonalização seletiva da matriz de massa

Um dos problemas enfrentados quando se utiliza o método de elementos finitos para aproximar as equações de conservação para simulação de escoamentos é a compatibilização dos campos de pressão e velocidade e a instabilidade do campo de pressão. No presente trabalho a primeira dificuldade já foi superada pela aplicação da formulação de quase-incompressibilidade, a segunda, porém, ainda requer algum tratamento especial.

Uma das formas de instabilidade do campo de pressão, que ocorre mesmo quando se utilizam elementos de baixa ordem para o campo de pressão (respeitando a condição de Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi) é o efeito “tabuleiro de xadrez” (conhecido pela expressão em inglês *checkerboard*, que significa “tabuleiro de damas”) que recebe este nome pela aparência do campo de pressão obtido com a instabilidade. O problema desses modos de pressão instáveis é discutido em Gresho e Sani, 1999, onde algumas soluções também são apontadas. Selvam, 1997, utiliza em seu trabalho um esquema de solução alternada dos campos de velocidade e pressão em quatro passos, conseguindo assim evitar a instabilização da pressão.

Em seu trabalho, Lee et al., 1979 sugerem algumas técnicas de suavização dos campos de pressão (e vorticidade) entre cada passo de tempo ou entre cada iteração do método de solução

do sistema não-linear. Diferentes formas de suavização são testadas. Todas com resultados próximos porém com variados custos computacionais.

Uma outra alternativa para a estabilização do sistema é o uso de diagonalização seletiva da matriz de massa. Esse método é utilizado nos trabalhos anteriores do grupo [Petry, 2002] e é discutido e utilizado no trabalho de Kawahara e Hirano, 1983. A diagonalização consiste em concentrar os valores obtidos na matriz de massa do problema na diagonal principal da mesma, através de algum tipo de média, conservando a massa do elemento. Essa técnica também é chamada de amortecimento da matriz de massa (já que esta é a matriz mais característica do problema transiente). O uso de alguma forma de diagonalização da matriz de massa pode trazer consigo uma certa perda na precisão numérica da solução, porém é conveniente pelo ganho em eficiência e estabilidade do esquema de solução, o que compensa a teórica perda numérica. Algumas vezes a diagonalização da matriz de massa pode até aumentar a precisão numérica do sistema. Isso ocorre em casos onde a não-utilização desse tipo de subterfúgio faz com que apareçam oscilações numéricas (instabilidades como o efeito de tabuleiro de xadrez). Tais oscilações são amortecidas pelo uso de esquemas de diagonalização da matriz de massa, melhorando assim a precisão do método.

Diferentes alternativas de diagonalização são utilizadas; algumas são mostradas no trabalho de Zienkiewicz e Taylor, 2000. A alternativa aplicada em trabalhos anteriores do grupo vem do trabalho de Kawahara e Hirano, 1983, em que a parte da matriz de massa referente às variáveis de velocidade é totalmente diagonalizada e aquela referente às variáveis de pressão são diagonalizadas de forma seletiva, o que leva ao aparecimento de um novo parâmetro arbitrário para o problema.

Durante a elaboração do código utilizado no presente trabalho, foram testadas duas formas de diagonalização da matriz de massa, aquela igual à citada de Kawahara e Hirano, 1983, e uma nova proposta de diagonalização completa apenas da parte da matriz de massa referente aos termos de pressão.

A diagonalização seletiva proposta por Kawahara e Hirano, 1983, se dá pelo uso de duas matrizes de massa adicionais, uma consistente, uma totalmente diagonalizada e uma diagonalizada seletivamente, como mostradas nas equações (4.48) e (4.50).

$$\underline{\mathbf{M}} = \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{M}}_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \underline{\mathbf{M}}_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \underline{\mathbf{M}}_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \underline{\mathbf{M}}_p \end{bmatrix} \quad (4.48)$$

$$\underline{M}_i^{mn} = \underline{M}_P^{mn} = \sum_{n=1}^N \int_{\Omega^e} \psi^m \psi^n d\Omega \cdot \delta_{mn} \quad (4.49)$$

$$\underline{\tilde{M}} = \begin{bmatrix} \underline{M}_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \underline{M}_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \underline{M}_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \underline{M}_P \end{bmatrix} \quad (4.50)$$

$$\underline{\tilde{M}}_P^{mn} = e \cdot \sum_{n=1}^N \int_{\Omega^e} \psi^m \psi^n d\Omega \cdot \delta_{mn} + (1-e) \cdot \int_{\Omega^e} \psi^m \psi^n d\Omega \quad (4.51)$$

onde as \underline{M} é a matriz de massa totalmente diagonalizada e $\underline{\tilde{M}}$ a matriz de massa diagonalizada seletivamente. As sub-matrizes \underline{M}_i (diagonais) e $\underline{\tilde{M}}_P$ (diagonalizada seletivamente) são calculadas como mostrado nas equações (4.49) e (4.51). Na equação (4.51) e é o parâmetro de diagonalização seletiva que pode variar entre os valores $0 \leq e \leq 1$ (geralmente adota-se $e=0,7$ ou $e=0,8$).

Utilizando esta primeira forma de diagonalização seletiva, o sistema de equações a ser resolvido em cada iteração do método de Newton se mantém o mesmo.

$$\mathbf{J}(\mathbf{U}_{n+1}^p) \cdot (\mathbf{U}_{n+1}^{p+1} - \mathbf{U}_{n+1}^p) = -\mathbf{R}(\mathbf{U}_{n+1}^p, \mathbf{U}_n) \quad (4.52)$$

Porém com as definições de \mathbf{R} e \mathbf{J} alteradas para:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\mathbf{U}_{n+1}^p) = & (\underline{\tilde{M}} + \Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_{n+1}^p)) \cdot \mathbf{U}_{n+1} - (\underline{\tilde{M}} - \Delta t \cdot (1-\theta) \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_n)) \cdot \mathbf{U}_n + \\ & -(\Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{F}_{n+1} + \Delta t \cdot (1-\theta) \cdot \mathbf{F}_n) - (\Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{S}_{n+1} + \Delta t \cdot (1-\theta) \cdot \mathbf{S}_n) \end{aligned} \quad (4.53)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{U}_{n+1}^p) = \underline{\tilde{M}} + \Delta t \cdot \theta (\mathbf{K}(\mathbf{U}_{n+1}^p) + \mathbf{A}'(\mathbf{U}_{n+1}^p)) \quad (4.54)$$

A segunda forma de diagonalização da matriz de massa, proposta no trabalho, altera apenas as linhas da matriz de massa referentes às variáveis de pressão. Assim o sistema se mantém inalterado para as variáveis de velocidade, mantendo sua precisão, e as variáveis de

pressão são amortecidas como desejado. A matriz de massa diagonalizada na pressão $\underline{\mathbf{M}}$ fica então na forma:

$$\underline{\mathbf{M}} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{M}_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{M}_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \underline{\mathbf{M}}_P \end{bmatrix} \quad (4.55)$$

Com os termos da matriz de massa diagonalizada na pressão $\underline{\mathbf{M}}_P$ calculados como mostrado pela equação (4.56).

$$\underline{M}_P^{mn} = \sum_{n=1}^N \int_{\Omega^e} \psi^m \psi^n d\Omega \cdot \delta_{mn} \quad (4.56)$$

O sistema de equações lineares a ser resolvido a cada iteração do método de Newton, dado pela equação (4.44), permanece inalterado. Porém, assim como na primeira forma de diagonalização seletiva apresentada as definições de \mathbf{R} e \mathbf{J} são alteradas para:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\mathbf{U}_{n+1}^p) = & (\underline{\mathbf{M}} + \Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_{n+1}^p)) \cdot \mathbf{U}_{n+1} - (\mathbf{M} - \Delta t \cdot (1-\theta) \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_n)) \cdot \mathbf{U}_n + \\ & - (\Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{F}_{n+1} + \Delta t \cdot (1-\theta) \cdot \mathbf{F}_n) - (\Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{S}_{n+1} + \Delta t \cdot (1-\theta) \cdot \mathbf{S}_n) \end{aligned} \quad (4.57)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{U}_{n+1}^p) = \mathbf{M} + \Delta t \cdot \theta (\mathbf{K}(\mathbf{U}_{n+1}^p) + \mathbf{A}'(\mathbf{U}_{n+1}^p)) \quad (4.58)$$

As equações (4.57) e (4.58) mostram que a forma de diagonalização proposta além de preservar as equações das variáveis de velocidade ainda mantém a forma original da matriz de massa multiplicando os valores do passo de tempo anterior, conservando ainda mais a precisão e coerência dos resultados.

4.6. Método de Picard para sistemas de equações algébricas não-lineares

Uma alternativa para solução do problema da não-linearidade do sistema de equações mostrado na equação (4.39) é o método de Picard [Reddy e Gartling, 1994], ou método da substituição progressiva. Esse método, diferente do método de Newton, é um método de primeira

ordem (com convergência e precisão um pouco menores), mas que apresenta um maior raio de convergência quando comparado ao método de Newton.

O raio de convergência é importante no sentido de que se o campo inicial fornecido para o início do processo iterativo estiver muito longe da solução real, um método com um pequeno raio de convergência pode não conseguir resolver o problema. Assim o método de Picard, que apresenta um raio de convergência maior que o método de Newton, pode ser utilizado em casos onde o segundo falhe nos passos iniciais. Assim um resultado intermediário obtido com o método de Picard pode ser passado para o método de Newton como um campo inicial mais próximo da solução real, facilitando a convergência do método de Newton.

Para o método de Picard o processo de busca da solução se dá da seguinte maneira: Monta-se o sistema dado pela equação (4.39) utilizando o campo inicial fornecido como primeira aproximação para o campo solução, $\mathbf{U}_{n+1}^p = \mathbf{U}_n$, na forma mostrada na equação (4.59).

$$\begin{aligned} (\mathbf{M} + \Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_{n+1}^p)) \cdot \mathbf{U}_{n+1}^{p+1} &= (\mathbf{M} - \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_n)) \cdot \mathbf{U}_n + \\ &+ (\Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{F}_{n+1} + \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{F}_n) + (\Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{S}_{n+1} + \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{S}_n) \end{aligned} \quad (4.59)$$

Como pode ser observado, na equação (4.59) a única incógnita é o valor de \mathbf{U}_{n+1}^{p+1} . Resolvendo-se então o sistema linear se obtém um novo valor para \mathbf{U}_{n+1}^{p+1} . Este valor é comparado com o valor da iteração anterior p , \mathbf{U}_{n+1}^p , e caso tenha sido atingido o critério de convergência se passa para o próximo passo de tempo. Caso não tenha sido atingida a convergência se utiliza o valor obtido de \mathbf{U}_{n+1}^{p+1} como \mathbf{U}_{n+1}^p e se reinicia o processo.

Para o método de Picard também foi implementada a diagonalização seletiva da matriz de massa, o que simplesmente reescreve a equação (4.59) na equação (4.60) para a diagonalização seletiva de Kawahara e Hirano, 1983, ou na equação (4.61) para a diagonalização proposta no trabalho.

$$\begin{aligned} (\underline{\mathbf{M}} + \Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_{n+1}^p)) \cdot \mathbf{U}_{n+1}^{p+1} &= (\underline{\mathbf{M}} - \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_n)) \cdot \mathbf{U}_n + \\ &+ (\Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{F}_{n+1} + \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{F}_n) + (\Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{S}_{n+1} + \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{S}_n) \end{aligned} \quad (4.60)$$

$$\begin{aligned} (\underline{\mathbf{M}} + \Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_{n+1}^p)) \cdot \mathbf{U}_{n+1}^{p+1} &= (\mathbf{M} - \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_n)) \cdot \mathbf{U}_n + \\ &+ (\Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{F}_{n+1} + \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{F}_n) + (\Delta t \cdot \theta \cdot \mathbf{S}_{n+1} + \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot \mathbf{S}_n) \end{aligned} \quad (4.61)$$

Onde a definição das matrizes de massa totalmente diagonal $\underline{\mathbf{M}}$, diagonalizada seletivamente $\underline{\underline{\mathbf{M}}}$ e diagonalizada na pressão $\underline{\underline{\underline{\mathbf{M}}}}$ continuam as mesmas dadas nas equações (4.48), (4.50) e (4.55) respectivamente.

4.7. Método explícito simplificado e explícito diagonalizado

Outra possibilidade de avanço no tempo sem o problema da não-linearidade do sistema é o uso de $\theta=0$. Que caracteriza o método totalmente explícito. Nesse método de avanço no tempo o valor dos campos de velocidade e pressão no passo de tempo futuro são dependentes apenas dos valores desses mesmos campos no passo de tempo anterior, eliminando a não-linearidade.

Reescrevendo o problema dado pela equação (4.39) para $\theta=0$ tem-se:

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{U}_{n+1} = (\mathbf{M} - \Delta t \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_n)) \cdot \mathbf{U}_n + (\Delta t \cdot \mathbf{F}_n \Delta t \cdot \mathbf{S}_n) \quad (4.62)$$

Como visto na equação (4.62) o método explícito de avanço no tempo simplifica a montagem do sistema de equações. Utilizando a diagonalização seletiva pode-se também eliminar a necessidade de um método iterativo, ou de um método direto mais caro, para a solução do sistema linear, que passa a ser simplesmente uma operação algébrica.

Aplicando sobre a equação (4.62) as duas formas de diagonalização seletiva utilizadas no trabalho são obtidas as equações (4.63) e (4.64).

$$\underline{\mathbf{M}} \cdot \mathbf{U}_{n+1} = (\underline{\mathbf{M}} - \Delta t \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_n)) \cdot \mathbf{U}_n + (\Delta t \cdot \mathbf{F}_n \Delta t \cdot \mathbf{S}_n) \quad (4.63)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{M}}} \cdot \mathbf{U}_{n+1} = (\underline{\underline{\mathbf{M}}} - \Delta t \cdot \mathbf{K}(\mathbf{U}_n)) \cdot \mathbf{U}_n + (\Delta t \cdot \mathbf{F}_n \Delta t \cdot \mathbf{S}_n) \quad (4.64)$$

onde na equação (4.63) é utilizada a diagonalização seletiva de Kawahara e Hirano, 1983, e na equação (4.64) é utilizada a matriz de massa diagonalizada na pressão, proposta no trabalho.

Na equação (4.63) percebe-se que cada incógnita é multiplicada apenas por um valor da matriz de massa totalmente diagonalizada que aparece do lado esquerdo. Desta forma não é necessária nenhuma técnica para solução do sistema linear, sendo somente preciso dividir o lado direito da equação pelo valor da diagonal principal da matriz de massa $\underline{\mathbf{M}}$ na mesma linha.

A principal limitação dos métodos totalmente explícitos é a valor máximo do passo de tempo permitido para o problema para o qual a convergência é assegurada. Utilizando as formulações discutidas nessa seção, a literatura e trabalhos anteriores do grupo mostram que o limite para o passo de tempo é dado pela equação (4.32).

A idéia de ter esses métodos todos implementados no código é, de acordo com a necessidade, utilizar um esquema com convergência mais segura para casos mais problemáticos, ou esquemas de avanço mais rápido do tempo em casos que permitam esse tipo de tratamento.

4.8. Solução do sistema linear

Em todos os métodos discutidos acima, exceto no método explícito com a diagonalização seletiva, aparece em algum estágio da aproximação um sistema de equações algébricas lineares que precisa ser resolvido. Inúmeras técnicas são utilizadas para a resolução desse tipo de sistema e, dentre essas, duas foram escolhidas para serem implementadas no método. São eles o método da sobre-relaxação sucessiva (conhecido pela sigla em inglês *SOR*, *successive over-relaxation*) e o método dos gradientes conjugados. A maioria dos livros sobre métodos dinâmica dos fluidos computacionais traz algum capítulo sobre métodos de solução de sistemas lineares; os métodos utilizados no presente trabalho são bem discutidos nos trabalhos de Ferziger e Perić, 2002, e no livro de ferramentas numéricas de Press et al., 1992.

Ambos os métodos selecionados são métodos iterativos de solução. Métodos iterativos apresentam, geralmente, um custo computacional menor do que os métodos diretos, sendo bastante atraentes para uso nas aplicações de dinâmica dos fluidos computacional.

5. ASPECTOS COMPUTACIONAIS

Como já apresentado, o objetivo principal do trabalho é elaborar um código numérico que será utilizado em trabalhos futuros do grupo. Cada parte em separado desse código base pode ser motivo de um novo estudo para sua otimização e implementação de novas técnicas e modelos.

Com essa finalidade esse código base deve apresentar aspectos computacionais que permitam a remodelagem e novas implementações de forma fácil.

Nesse sentido boa parte da atenção desse trabalho de criação do novo código foi voltada para sua estruturação de forma adequada e ao uso de técnicas computacionais de alto desempenho. Nas próximas seções serão mostrados alguns itens aplicados nesse trabalho de estruturação e desenvolvimento.

5.1. Estruturação do novo código

As principais características do novo código desenvolvido são: estruturas de programação e dados; armazenagem compacta de matrizes; e utilização de processamento paralelo.

A estrutura de programação é tal que possibilita a implementação de novos modelos de turbulência, técnicas de montagem do sistema de equações e métodos de solução de forma simplificada. Para cada etapa do processamento existe uma coleção de sub-rotinas separadas por módulos (em um arquivo distinto). Assim uma alteração em uma parte específica do programa pode ser feita editando-se apenas a parte correspondente no código, preservando-se entradas e saídas de dados como especificado. Essa estrutura também simplifica a verificação de cada alteração feita no programa. Todos os dados lidos e escritos (de arquivos externos) estão listados no código e programa gera saídas em seu formato padrão e nos formatos lidos pelos programas TecPlot (através de uma sub-rotina interna) e ParaView (através de um programa conversor externo).

A estrutura completa do código pode ser visualizada através do diagrama na figura abaixo:

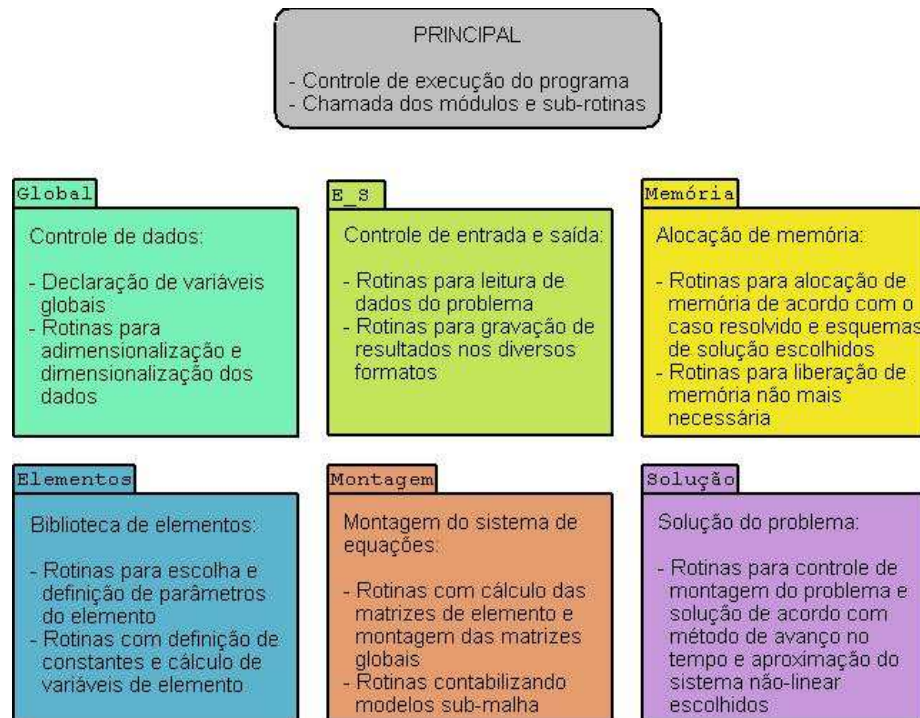


Figura 5.1. Esquema da estrutura do programa dividido por módulos.

Detalhes sobre a armazenagem compacta de matrizes esparsas e a implementação do processamento paralelo serão discutidos nas próximas seções.

5.2. Armazenagem compacta de matrizes

De acordo com o modelo numérico apresentado no capítulo 4, o programa desenvolvido pode trabalhar com esquemas de avanço no tempo semi-implícitos e explícitos. Como mostrado na formulação desses esquemas semi-implícitos, a armazenagem das matrizes globais completas do sistema de elementos finitos é necessária para sua aplicação.

O problema da armazenagem completa das matrizes formadas por métodos numéricos como diferenças, volumes e elementos finitos é o tamanho dessas matrizes. No caso de elementos finitos as matrizes na forma completa irão conter $n \times n$ posições, onde n é o número total de variáveis (número de nós multiplicado pelo número de variáveis por nó) do sistema. Isso inviabiliza completamente o uso da armazenagem completa de matrizes. Porém uma das características dessas matrizes é que elas são bastante esparsas (chegando a apresentar casos com apenas 5% de posições não-nulas). Pode-se então fazer uso desta esparsidade e armazenar apenas as posições não-nulas das matrizes, reduzindo drasticamente a requisição de memória.

Diversas técnicas para armazenagem compacta de matrizes foram desenvolvidas, dentre elas as técnicas Skyline [Hughes, 1987] e armazenagem indexada por linhas [Press et al., 1992]. Essas técnicas consistem em formas de se armazenar as matrizes de forma reduzida (eliminando o máximo possível de posições nulas), de uma maneira que seja possível a reconstrução da matriz completa ou a identificação das posições de elementos da matriz completa na armazenagem compacta.

Dentre as técnicas analisadas, a escolhida para ser implementada no código foi a armazenagem compacta de matrizes esparsas indexadas por linhas. Esta escolha se baseou em dois principais fatores: o método é extremamente eficiente, armazenando apenas a diagonal principal da matriz e os valores não-nulos fora da diagonal; e o sistema de armazenagem permite a identificação fácil e rápida das posições dos valores não-nulos na matriz completa, dados os vetores de armazenagem. Esse segundo fator é de extrema importância para um bom desempenho na manipulação das matrizes de forma compacta e na solução do sistema linear formado.

Para exemplificar o uso deste método será reproduzido aqui o exemplo apresentado em [Press et al., 1992]. Dada uma matriz \mathbf{A} de tamanho $N \times N$, por exemplo:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 7 & 5 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 5 \end{bmatrix} \quad (5.1)$$

Se utilizam as seguintes regras para a geração dos vetores para armazenagem compacta:

6. As primeiras N posições do vetor de valores \mathbf{sa} armazenam os valores da diagonal principal da matriz \mathbf{A} em ordem;
7. Cada uma das N primeiras posições do vetor de índices \mathbf{ija} armazena o índice no vetor \mathbf{sa} que contém o primeiro valor não-nulo de \mathbf{A} na linha N . Caso a linha não contenha valores fora da diagonal este valor é igual último índice armazenado de \mathbf{sa} mais 1;
8. A posição 1 do vetor \mathbf{ija} é igual a $N+2$ (pode ser lido posteriormente para determinar N);
9. A posição $N+1$ do vetor \mathbf{ija} é igual à posição do último elemento fora da diagonal armazenado no vetor \mathbf{sa} mais 1 (pode ser lido para obter o número de elementos fora da diagonal da matriz \mathbf{A} ou o tamanho dos vetores \mathbf{sa} e \mathbf{ija}). A posição $N+1$ em \mathbf{sa} não é utilizada e pode ser definida arbitrariamente;

10. As posições $N+2$ em **sa** contêm os valores não-nulos fora da diagonal da matriz **A** ordenados por linhas;
11. As posições $N+2$ em **ija** contêm os números das colunas na matriz **A** onde os valores fora da diagonal armazenados em **sa** correspondentes são localizados.

Aplicando esses passos na matriz **A** utilizada como exemplo obtemos os seguintes vetores de índices **ija** e de valores **sa**:

índice k	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$ija(k)$	7	8	8	10	11	12	3	2	4	5	4
$sa(k)$	3	4	5	0	5	x	1	7	9	2	6

(5.2)

A regra número 1 impõe que os valores da diagonal principal da matriz devem ser armazenados, mesmo se forem nulos. Isso caracterizaria uma certa ineficiência do método. Porém, como no método numérico utilizado não aparecem valores nulos na diagonal principal das matrizes, isso não gera nenhuma armazenagem desnecessária. Tais valores nulos na diagonal principal são inclusive indesejados e, como já discutido, o uso da aproximação de quase-incompressibilidade evita seu aparecimento.

O exemplo mostrado não apresenta uma grande redução na quantidade de informações armazenadas, mas para grandes matrizes esparsas o método é extremamente eficiente.

Como se pode perceber, os valores da diagonal principal da matriz **A** são facilmente acessados no vetor de valores. Outra facilidade é que os valores fora da diagonal para uma mesma linha estão todos em um único bloco e ordenados, com o número da coluna que ocupam na matriz completa na posição correspondente no vetor **ija**. Estes dois pontos simplificam a implementação de algoritmos de solução do sistema linear. Como aqueles utilizados nesse trabalho.

Na implementação dessa técnica no código desenvolvido foram criados algoritmos de busca para definir as posições de cada valor calculado diretamente na matriz compacta. Assim, após o cálculo das matrizes de elemento, o sistema de equações global já é montado diretamente na estrutura compacta. Esses algoritmos de localização ainda necessitam de melhoras no seu desempenho. Porém, acompanhando o tempo de processamento de cada etapa do programa verificou-se que essa etapa não é a mais cara computacionalmente, viabilizando seu uso.

A técnica de armazenagem de matrizes compactas indexadas por linhas é bastante apropriada para o uso com elementos finitos. Principalmente pelo fato de que todas as matrizes a serem armazenadas possuem termos não-nulos nas mesmas posições. E essas posições podem ser obtidas numa etapa de pré-processamento, já que são apenas dependentes da malha utilizada

(conectividades). O vetor **ija** pode então ser calculado antes do processamento do problema e armazenado uma única vez.

Essa semelhança entre as matrizes simplifica e muito uma série de outras operações entre as matrizes compactas armazenadas. Por exemplo, a soma de duas matrizes compactas com vetores de índices idênticos é apenas a soma dos vetores. Operações como produto das matrizes compactas por um escalar são bastante fáceis e rápidas.

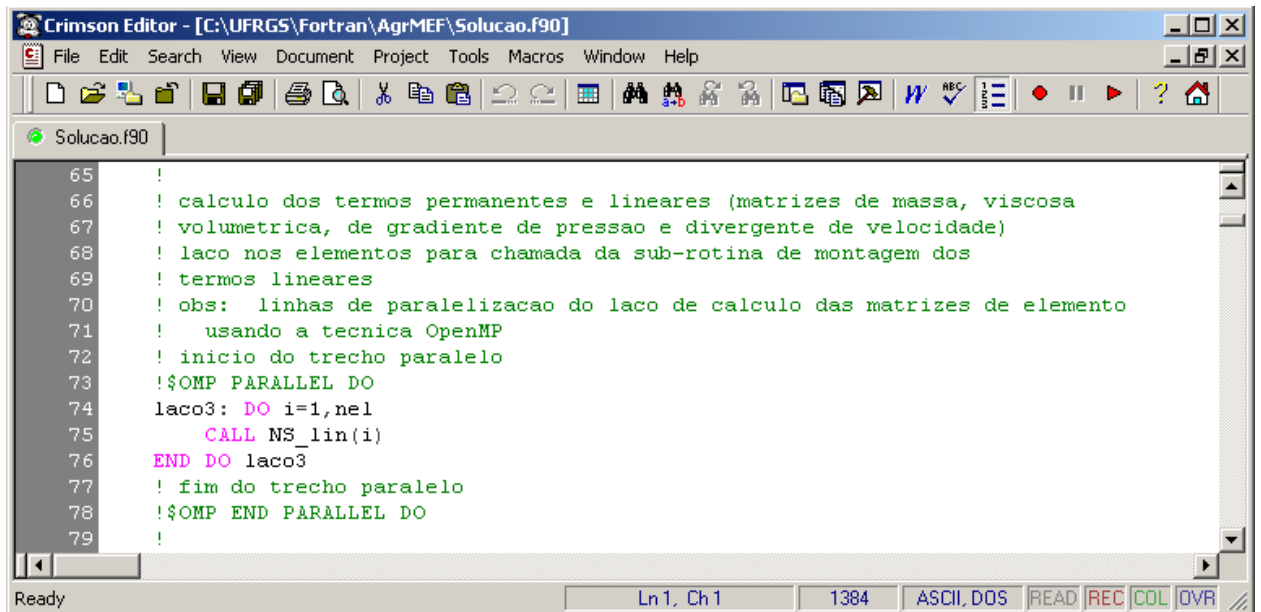
5.3. Implementação de processamento paralelo utilizando a técnica OpenMP

A parte mais pesada do código é o cálculo das matrizes de elemento. Boa parte dessas matrizes deve ser recalculada a cada iteração (dentro de cada passo de tempo) para gerar um novo sistema global a ser resolvido (o sistema global depende do esquema de solução escolhido, como mostrado no capítulo 4). Para esta etapa foi então implementado o processamento em paralelo utilizando a técnica OpenMP. Como descrito no livro de Chandra, 2001, essa técnica de paralelização é bastante simples e eficiente, porém é limitada ao uso em máquinas de memória compartilhada (onde todos os processadores têm acesso à mesma memória RAM).

A aplicação dessa técnica consiste no uso de diretivas escritas dentro do código que serão interpretadas pelo compilador (que deve ter suporte à OpenMP) quais tarefas deverão ser distribuídas e como será feita esta distribuição. O interessante dessa técnica é que quando se executa o programa, ele automaticamente verifica a disponibilidade de processadores e distribui as tarefas de forma dinâmica, ajustando o particionamento ao número de processadores e a carga de cada processador.

No código desenvolvido, o laço que calcula as matrizes de elemento varre todos os elementos da malha, calcula as matrizes e soma o resultado no sistema global. Como as matrizes de elemento são independentes entre si e a montagem do sistema global só envolve soma de valores em posições específicas, essas operações (cálculo das matrizes de elemento) são independentes de ordem. A paralelização do laço de cálculo das matrizes de elemento divide o número de elementos entre os processadores disponíveis. Cada processador fica responsável pelo cálculo das matrizes de elemento de uma faixa dos elementos da malha, e o resultado de cada matriz de elemento é passado para o sistema global. Nota-se então que a paralelização implementada dessa forma não apresenta sobreposição de trabalho entre os processadores, melhorando a eficiência do método.

A Figura 5.2 mostra um exemplo de trecho do código com as diretivas de compilação para paralelização com OpenMP



```

Crimson Editor - [C:\UFRGS\Fortran\AgrMEF\Solucao.f90]
File Edit Search View Document Project Tools Macros Window Help
Solucao.f90
65      !
66      ! calculo dos termos permanentes e lineares (matrizes de massa, viscosa
67      ! volumetrica, de gradiente de pressao e divergente de velocidade)
68      ! laco nos elementos para chamada da sub-rotina de montagem dos
69      ! termos lineares
70      ! obs: linhas de paralelizacao do laco de calculo das matrizes de elemento
71      ! usando a tecnica OpenMP
72      ! inicio do trecho paralelo
73      !$OMP PARALLEL DO
74      laco3: DO i=1,nel
75          CALL NS_lin(i)
76      END DO laco3
77      ! fim do trecho paralelo
78      !$OMP END PARALLEL DO
79      !
Ready          Ln1, Ch1          1384  ASCII, DOS  READ REC COL OVR

```

Figura 5.2. Trecho do código mostrando as diretivas de compilação *in-line* para o uso de paralelização.

Como mostrado na figura, com apenas duas linhas adicionais de diretivas de compilação o processamento paralelo já estava implementado. Devido à sintaxe das linhas de diretiva de compilação o código pode ser compilado utilizando compiladores que não têm suporte à técnica OpenMP sem problema algum, já que as linhas referentes ao seu uso serão interpretadas como comentários.

Fora o acréscimo das diretivas no interior do código, na compilação devem ser utilizados argumentos para o compilador que ativam o suporte ao OpenMP e procuram no código as diretivas.

O processamento dos casos apresentados nesse trabalho foi feito em duas máquinas, uma máquina *Prism* da *SGI* e uma máquina *Altix* também da *SGI*. Ambas as estações possuíam 8 processadores com compartilhamento de memória. Não foi necessária qualquer alteração no código para a compilação nas diferentes máquinas com diferentes sistemas operacionais (*SuSe 9* no caso da *Prism* e *RedHat* no caso da *Altix*).

6. RESULTADOS

Dois casos de referência, com resultados disponíveis na literatura foram escolhidos para validação do código computacional elaborado. Os dois casos são: o caso do escoamento dentro de uma cavidade confinada e o escoamento sobre um degrau.

O problema da cavidade é um caso de referência utilizado na validação de muitos trabalhos publicados, como por exemplo, nos artigos recentes de Elias et al., 2004, Pereira e Campos Silva, 2005, e Costa et al., 2005. No presente trabalho o caso da cavidade foi simulado para as condições bidimensional laminar e tridimensional turbulenta.

6.1. Escoamento em uma cavidade bidimensional

O problema do escoamento no interior de uma cavidade consiste em um fluido confinado dentro de uma cavidade (quadrada no caso) que se movimenta devido a uma condição de velocidade constante forçada em uma das paredes.

Para o caso de uma cavidade quadrada de lado igual a 1m, resultados bastante confiáveis foram publicados por Ghia et al., 1982, obtidos através de uma solução de diferenças finitas utilizando métodos multi-grid. Esses resultados vêm sendo utilizados como referência e desde então são reproduzidos com sucesso em outros trabalhos, como Schreiber e Keller, 1983, e Petry, 2002. A Figura 6.1 mostra o domínio, as condições de contorno e condições iniciais utilizadas para o problema.

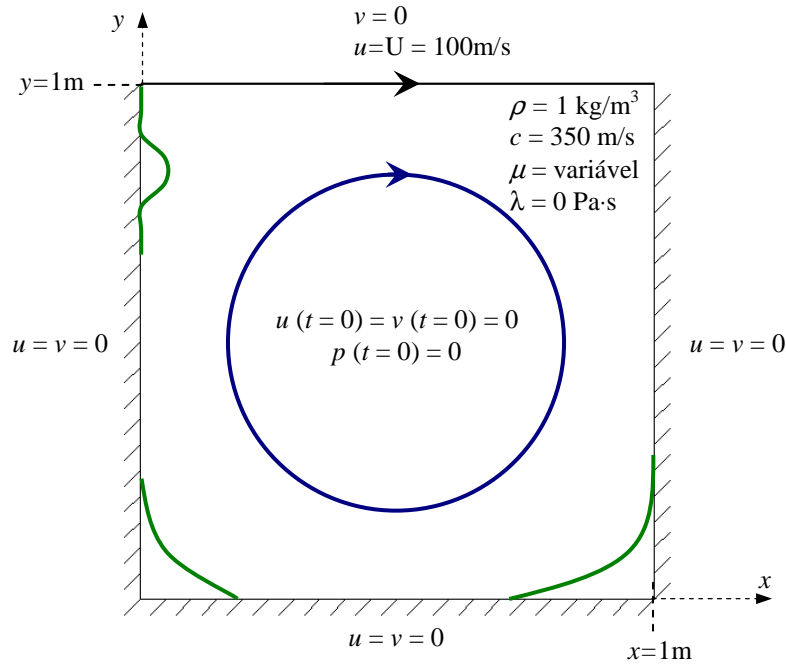


Figura 6.1. Esquema com descrição do problema da cavidade bidimensional, valores de condições de contorno, iniciais e propriedades do fluido.

Na figura u e v são as velocidades impostas nas paredes nas direções x e y , respectivamente, U é a velocidade de referência para o caso e os valores u , v e p definidos no tempo $t = 0\text{s}$ são as condições iniciais utilizadas para o problema. As propriedades do fluido massa específica (ρ), viscosidade volumétrica (λ) e velocidade do som (c) são definidas, a viscosidade absoluta (μ) é deixada como variável para que se possa variar o número de Reynolds através da mudança de seu valor. O número de Reynolds para este caso é mostrado na equação (6.1).

$$Re_{cavidade} = \frac{\rho UL}{\mu} \quad (6.1)$$

onde L é o comprimento característico da cavidade, no caso $L = 1\text{m}$.

O problema foi resolvido para valores de $Re_{cavidade}$ de 100, 400 e, 1000. Todos em regime laminar e com resultados publicados por Ghia et al., 1982, e outros citados. Os valores da velocidade horizontal (u) são comparados ao longo da linha vertical no centro da cavidade (posição $x = 0,5\text{m}$) e os valores da velocidade vertical (v) são comparados ao longo da linha horizontal no centro da cavidade (posição $y = 0,5\text{m}$). Para testar a sensibilidade do código ao refino de malha foram utilizadas quatro malhas diferentes para cada situação. O número de

elementos em cada direção para cada uma das malhas que foram adotadas são os seguintes: 25x25 para a mais grosseira, 50x50, 100x100 e 200x200 elementos para as malhas mais refinadas. Todas as malhas eram compostas por elementos quadriláteros (bidimensionais). Como o programa resolve os escoamentos de forma transiente, a solução apresentada aqui é aquela obtida com tempo de processamento suficiente para que se atingisse uma solução com o escoamento desenvolvido no tempo. O passo de tempo utilizado é dependente da malha e era calculado utilizando-se a seguinte expressão:

$$\Delta t = \frac{\Delta x_{min}}{U}, \quad (6.2)$$

onde Δx_{min} é o tamanho do menor elemento da malha. Para visualizar a diferença na resolução das malhas a Figura 6.2 mostra a malha mais grosseira e a malha mais refinada utilizadas no trabalho.

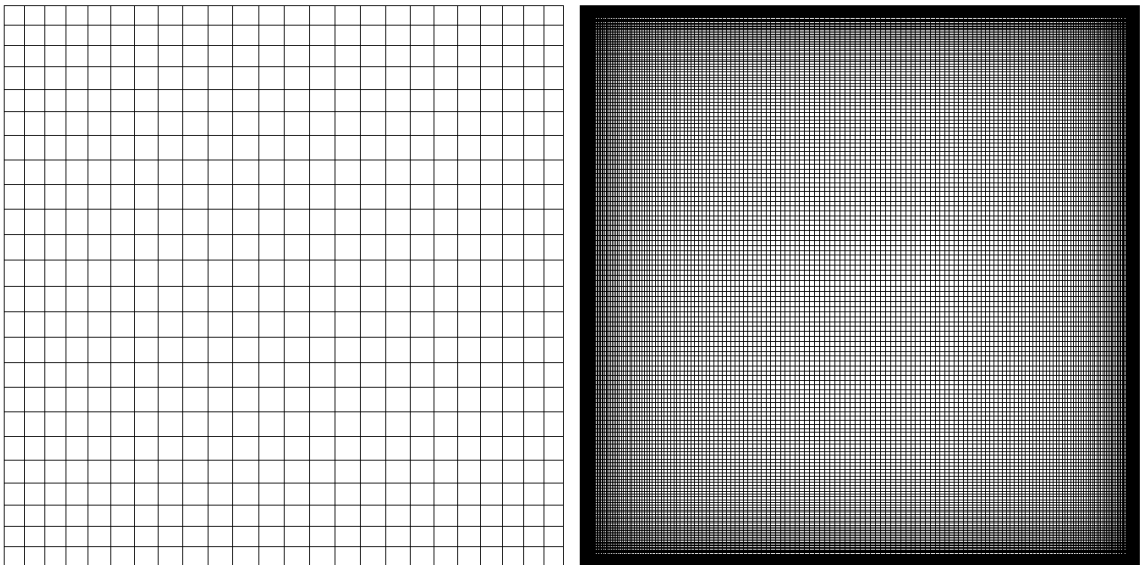


Figura 6.2. Malha mais grosseira (25x25 elementos) e malha mais refinada (200x200 elementos) utilizadas no caso da cavidade para comparação.

As simulações foram realizadas utilizando o sistema semi-implícito de avanço no tempo (com $\theta = 0,5$) e utilizando o método de Newton com diagonalização seletiva apenas nos termos de pressão das matrizes do problema (metodologia proposta) utilizando $e=0,7$.

Os gráficos com as comparações dos resultados para $Re_{cavidade} = 100$ são mostrados nas Figuras 6.3 a 6.4. Os valores de posição e velocidade mostrados nesses gráficos, assim como em todos os outros para o caso, são adimensionais. A adimensionalização é feita utilizando-se o

comprimento de referência da cavidade ($L = 1\text{m}$) e a velocidade de referência ($U = 100\text{m/s}$) segundo as expressões abaixo:

$$\begin{aligned} x^* &= \frac{x}{L}; \quad y^* = \frac{y}{L} \\ u^* &= \frac{u}{U}; \quad v^* = \frac{v}{U} \end{aligned} \quad (6.3)$$

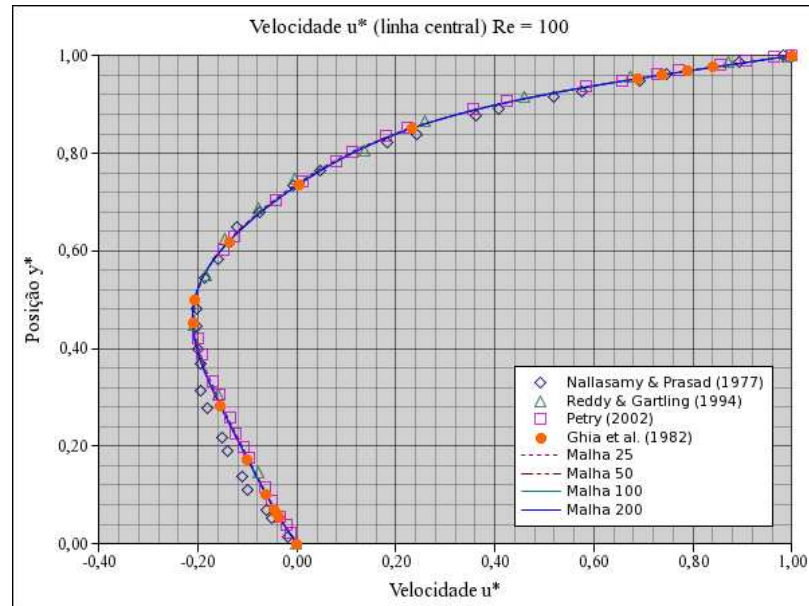


Figura 6.3. Perfil de velocidade u^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $x = 0.5\text{m}$); comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 100$.

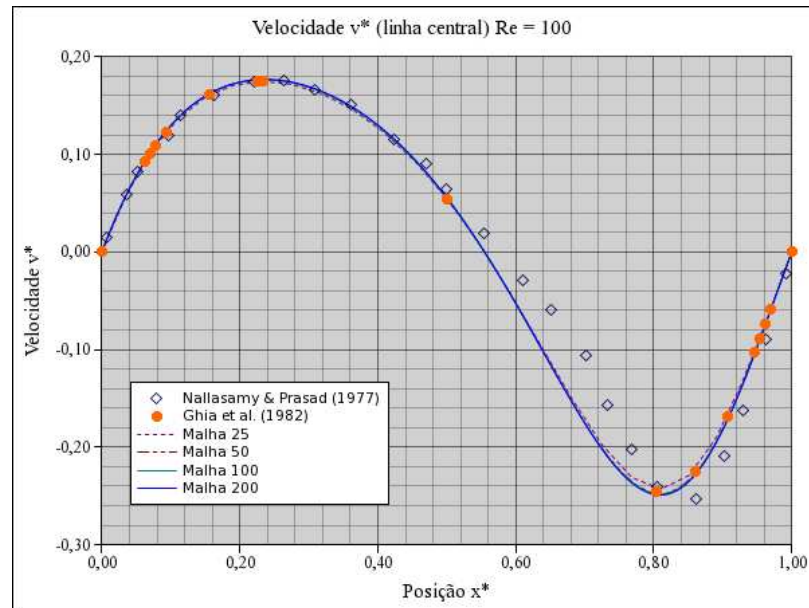


Figura 6.4. Perfil de velocidade v^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $y = 0.5\text{m}$); comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 100$.

Nestes primeiros resultados exibidos percebe-se a excelente concordância dos perfis obtidos com aqueles publicados por Ghia et al., 1982. No perfil de velocidade v^* se percebe um pequeno desvio em relação aos valores de referência para a malha mais grosseira, o que não se repete nas outras.

Exceto para a malha de 25×25 elementos, os resultados de todos os casos rodados com o código desenvolvido foram coincidentes. Isso mostra que para esse caso ($Re_{cavidade} = 100$) a malha de 50×50 elementos já fornece um resultado independente de malha.

Nas Figuras 6.5 a 6.8 são mostrados os resultados obtidos para os valores de $Re_{cavidade}$ de 400 e 1000.

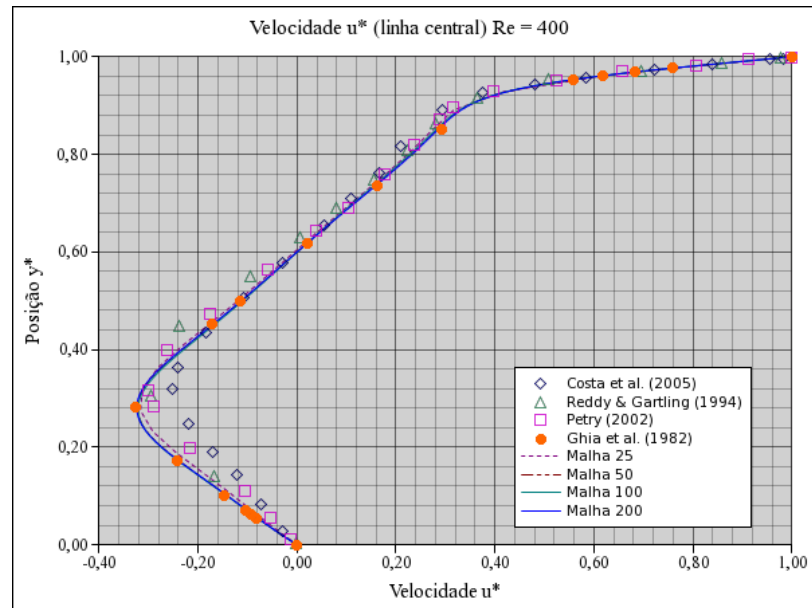


Figura 6.5. Perfil de velocidade u^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $x = 0.5m$); comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 400$.

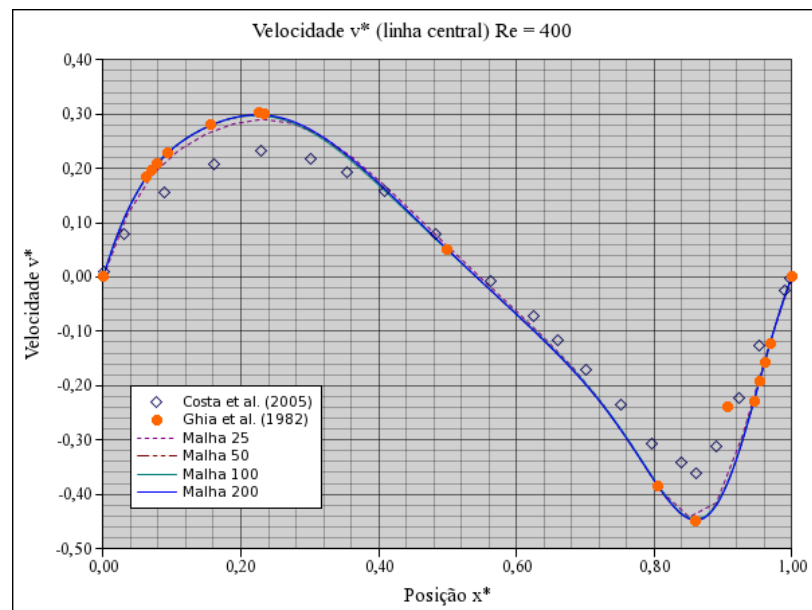


Figura 6.6. Perfil de velocidade v^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $y = 0.5m$); comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 400$.

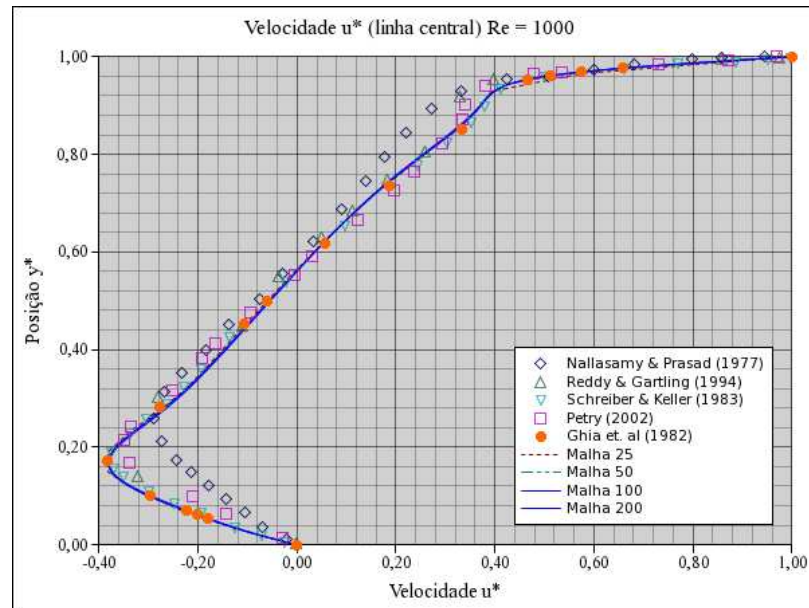


Figura 6.7. Perfil de velocidade u^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $x = 0.5m$); comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 1000$.

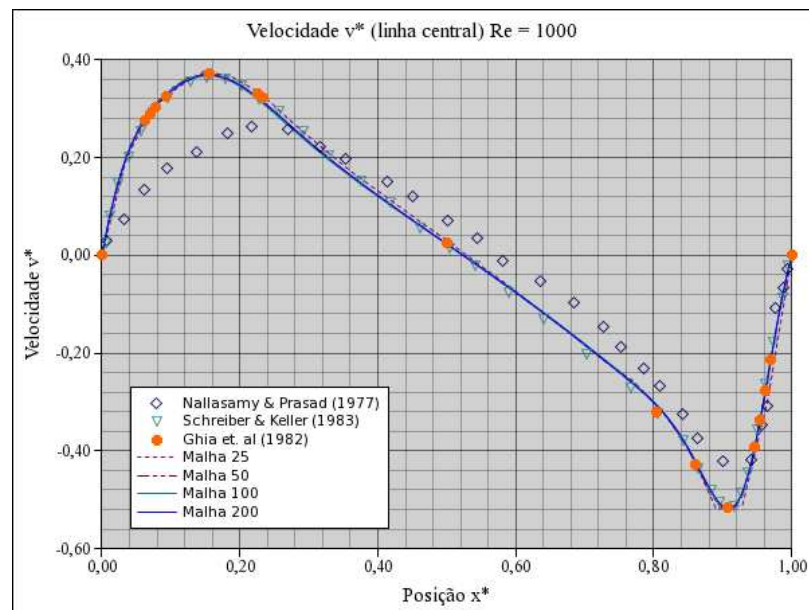


Figura 6.8. Perfil de velocidade v^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $y = 0.5m$); comparação com outros resultados publicados. $Re_{cavidade} = 1000$.

Esses resultados apresentam uma boa concordância com os resultados de referência. Os valores obtidos para as malhas de 50×50 , 100×100 e 200×200 elementos coincidiram com os resultados de referência. A concordância dos resultados obtidos com aqueles de Ghia et al., 1982, foi semelhante àquela de Schreiber & Keller, 1983, que utilizou técnicas numéricas de alta

ordem (com um método tipo Newton adaptativo para o sistema não-linear e um procedimento de continuação para varrer uma ampla faixa de números de Reynolds) e melhor do que a apresentada por Costa et al., 2005, que utilizou uma técnica estabilizada de elementos finitos (com esquema SUPG) para obtenção dos resultados.

As Figuras 6.9 e 6.10 mostram os campos de velocidade (módulo) e de pressão obtidos na solução a $Re_{cavidade} = 1000$.

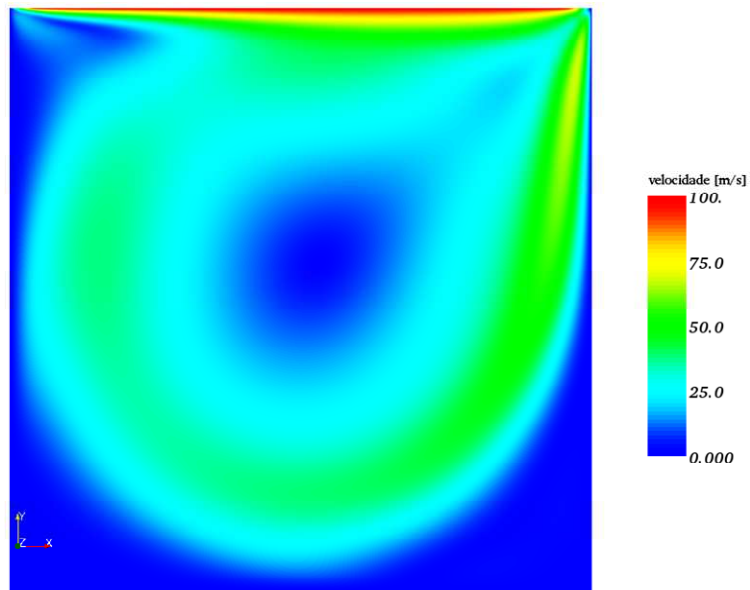


Figura 6.9. Campo de velocidade (módulo) para $Re_{cavidade} = 1000$.

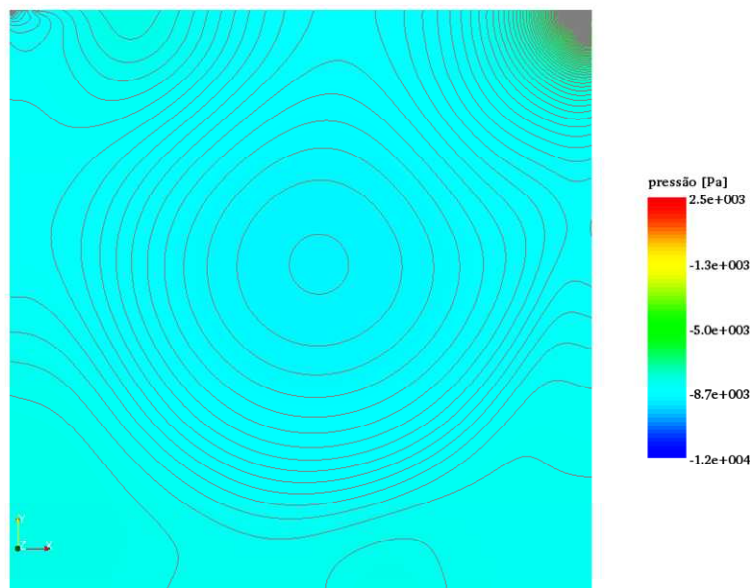


Figura 6.10. Isolinhas de pressão para $Re_{cavidade} = 1000$.

No gráfico de isolinhas de pressão observam-se os picos de pressão negativa e positiva nos dois cantos da cavidade. Pelo formato das linhas observa-se também que o cálculo da pressão está implementado de forma bastante estável.

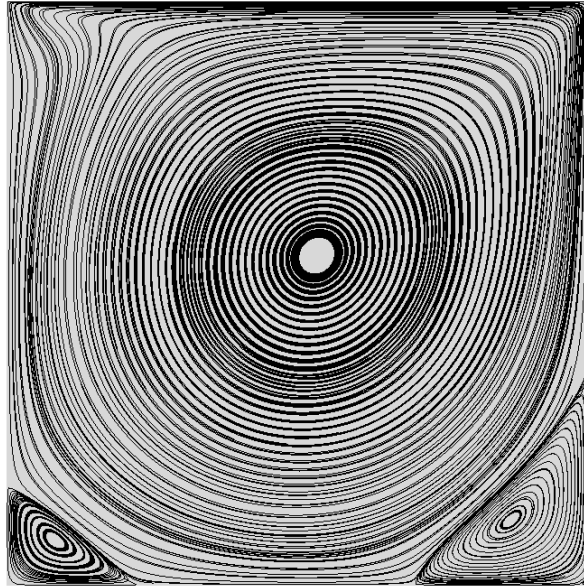


Figura 6.11. Linhas de corrente obtidas sobre o campo resolvido para $Re_{cavidade} = 1000$.

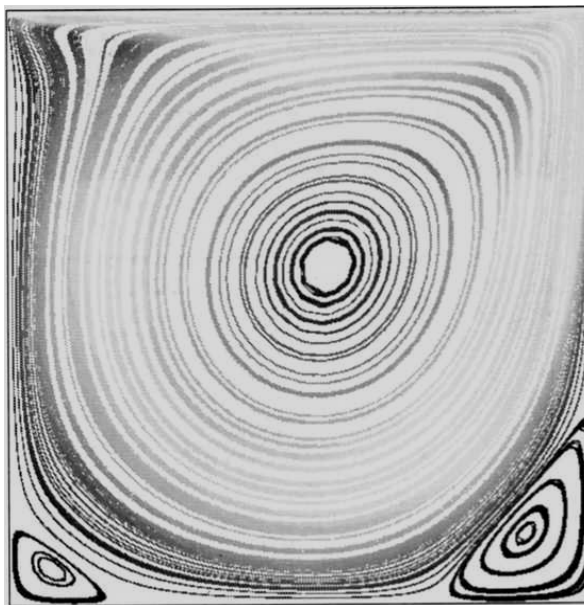


Figura 6.12. Linhas de corrente publicadas por Elias et al., 2004, para $Re_{cavidade} = 1000$.

Pela comparação das Figuras 6.11 e 6.12 percebe-se que as linhas de corrente publicadas em ambos os trabalhos são coerentes. No trabalho de Elias et al., 2004, foi utilizado um esquema de Newton inexato associado a uma formulação de elementos finitos estabilizados SUPG/PSPG

para a resolução das equações. A malha utilizada era composta por 3200 elementos triangulares (totalizando 1681 nós).

A seguir são apresentados resultados da análise tridimensional e turbulenta do problema da cavidade.

6.2. Escoamento turbulento em uma cavidade tridimensional

O problema da cavidade tridimensional foi estudado experimentalmente por Prasad et al., 1989, onde perfis de velocidade e valores médios de flutuações foram medidos através de anemometria por LASER-Doppler. Todas as medições foram realizadas sobre o escoamento em cavidades de seção quadrada de lado 1m e com três profundidades diferentes (0,25m, 0,5m e 1m). Os valores do número de Reynolds utilizado foram entre 3200 e 10000, sendo que o número de Reynolds para este caso dói definido da mesma forma que para a cavidade bidimensional, pela equação (6.1).

Mais tarde em um novo trabalho, publicado por Zang et al., 1993, o grupo apresentou um conjunto de resultados de simulações, utilizando simulação de grandes escalas com modelo sub-malha dinâmico, com o intuito de reproduzir os dados experimentais.

Dos casos apresentados dois foram escolhidos para validar o uso do código desenvolvido em uma simulação tridimensional turbulenta. Os dois casos foram o caso a $Re_{cavidade} = 3200$ com razão de aspecto (lado/altura/profundidade) da cavidade igual a 1:1:1 e o caso a $Re_{cavidade} = 10000$ com razão de aspecto igual a 1:1:0,5.

6.2.1. Escoamento em uma cavidade tridimensional a $Re_{cavidade} = 3200$

A Figura 6.13 mostra um esquema do domínio do problema, assim como condições de contorno e propriedades do fluido utilizadas.

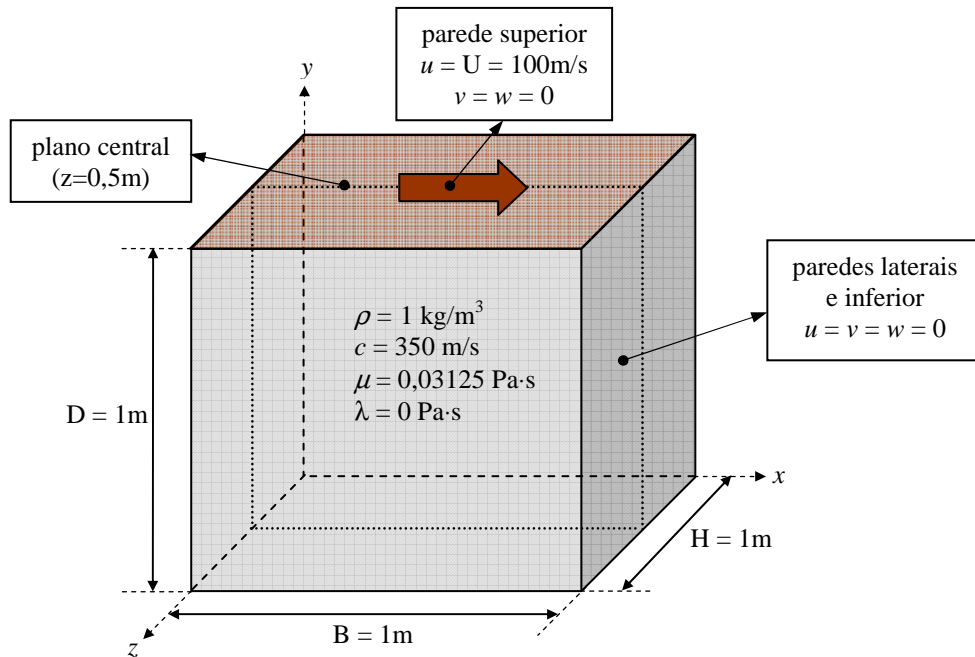


Figura 6.13. Descrição do problema da cavidade 3D com domínio, condições de contorno e propriedades do fluido.

Como se pode observar o problema é semelhante ao caso da cavidade bidimensional, exceto pelo acréscimo da componente w da velocidade (para a terceira dimensão). Nas paredes laterais e na inferior condições de velocidade nula são impostas. Na parede superior é utilizada uma condição de impermeabilidade e não-deslizamento, ou seja, o fluido acompanha a velocidade da parede. Um valor constante é atribuído para a viscosidade absoluta de forma a obter um valor fixo de $Re_{cavidade}$ de 3200. Como condição inicial para o problema, foi rodado um caso bidimensional com o mesmo número de Reynolds e com a mesma malha (no plano x - y), esse resultado (para um plano) foi copiado para todos os planos da discretização na terceira dimensão e este campo foi utilizado como condição inicial do problema. Este procedimento tem duas vantagens: primeiro acelera o desenvolvimento do escoamento (por não partir de um campo nulo, mas sim um campo já com as principais características do escoamento); e segundo mostra que o código desenvolvido consegue mostrar as características tridimensionais dos escoamentos mesmo partindo de condições “bidimensionais”.

Todas as comparações de resultados com os valores publicados são feitos a partir de medições no plano central da cavidade ilustrado na Figura 6.13.

A malha utilizada para resolução do problema foi semelhante àquela utilizada por Zang et al., 1993. Era composta por $32 \times 32 \times 32$ elementos hexaédricos, não-uniformes, com os menores

elementos junto à parede com uma razão de tamanho $\Delta x_{min}/B$ (ou $\Delta y_{min}/B$) igual a $1,0 \cdot 10^{-2}$. A Figura 6.14 mostra a malha utilizada.

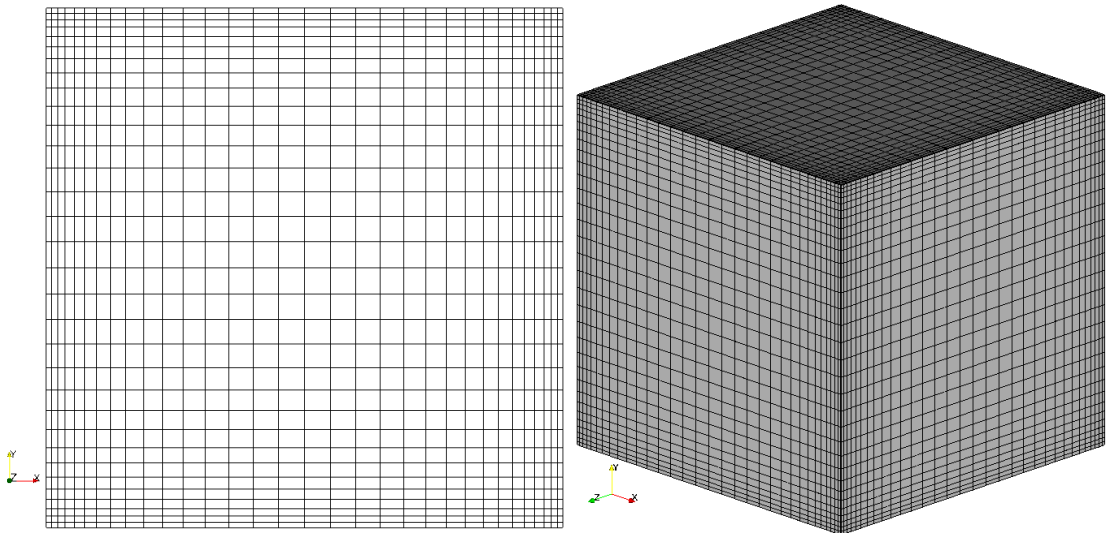


Figura 6.14. Vista frontal e tridimensional da malha para o caso da cavidade 3D,

$$Re_{cavidade} = 3200$$

Novamente as simulações foram realizadas utilizando o sistema semi-implícito de avanço no tempo (com $\theta = 0,5$) e utilizando o método de Newton com diagonalização seletiva apenas nos termos de pressão das matrizes do problema (metodologia proposta). O passo de tempo para o caso foi também calculado pela equação (6.2), seu valor foi de $1,0 \cdot 10^{-4}$ s.

Um tempo de simulação suficiente para que se atingisse um escoamento médio permanente foi utilizado. Quando atingido esse comportamento, as médias foram tomadas por um tempo igual a três tempos característicos do problema, sendo o tempo característico considerado calculado conforme a equação (6.4). O valor obtido foi de $t_c = 0.01$ s.

$$t_c = \frac{L}{U} \quad (6.4)$$

onde L é o comprimento de referência da cavidade sendo que, para o caso, $L=B=D=1$ m.

Os primeiros resultados comparados foram as velocidades médias nas direções x e y (componentes u e v) nas linhas médias do plano central da cavidade, de forma semelhante ao caso bidimensional. Os resultados de velocidade média são mostrados nas Figuras 6.15 e 6.16.

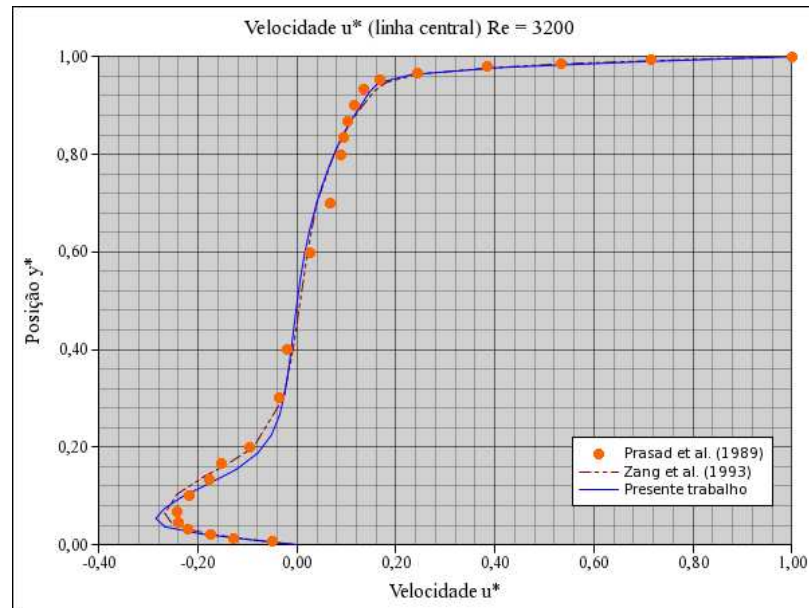


Figura 6.15. Perfil de velocidade u^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $x = 0,5$) no plano central; comparação com outros resultados publicados.

$$Re_{cavidade} = 3200.$$

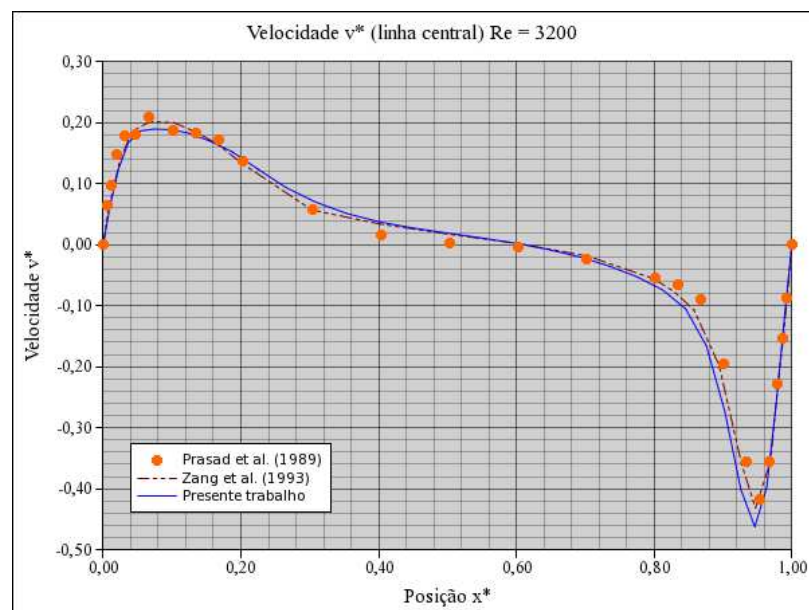


Figura 6.16. Perfil de velocidade v^* (adimensional) ao longo da linha horizontal central da cavidade (em $y = 0,5$) no plano central; comparação com outros resultados publicados.

$$Re_{cavidade} = 3200.$$

Analisando os resultados mostrados nas Figuras 6.15 e 6.16 observa-se uma boa concordância dos resultados obtidos com o código desenvolvido com os resultados publicados.

Nos gráficos pode-se perceber a falta de resolução da malha (caracterizada por “pontas” nas linhas dos perfis de velocidades). Essa falta de resolução é ainda mais evidente quando se faz a comparação dos perfis de flutuação RMS, mostrados nas Figuras 6.17 e 6.18. As flutuações RMS são definidas conforme mostrado nas equações (6.5) e (6.6).

$$u'_{\text{RMS}} = \frac{10\sqrt{u'^2}}{U} \quad (6.5)$$

$$v'_{\text{RMS}} = \frac{10\sqrt{v'^2}}{U} \quad (6.6)$$

onde u' e v' são os valores das flutuações definidas na equação (3.6).

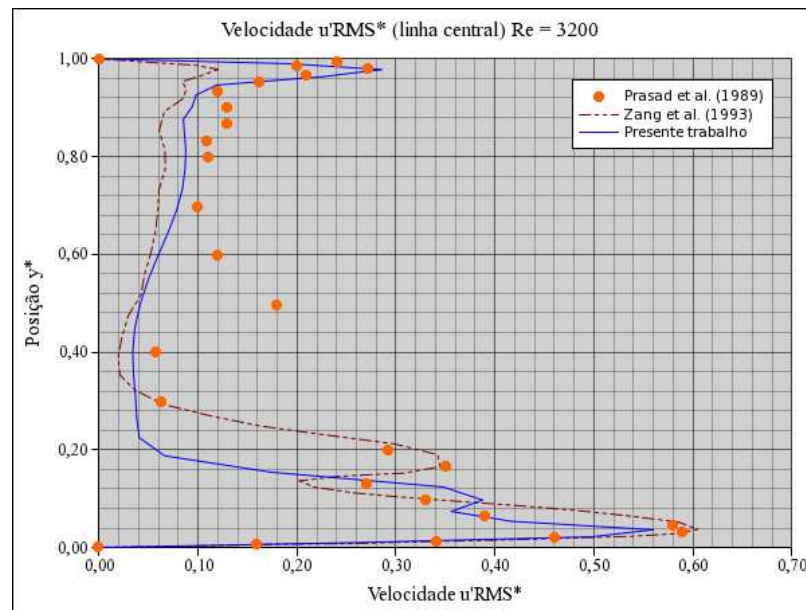


Figura 6.17. Perfil de velocidade $u'_{\text{RMS}}*$ (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $x = 0,5$) no plano central; comparação com outros resultados publicados.

$$Re_{\text{cavidade}} = 3200.$$

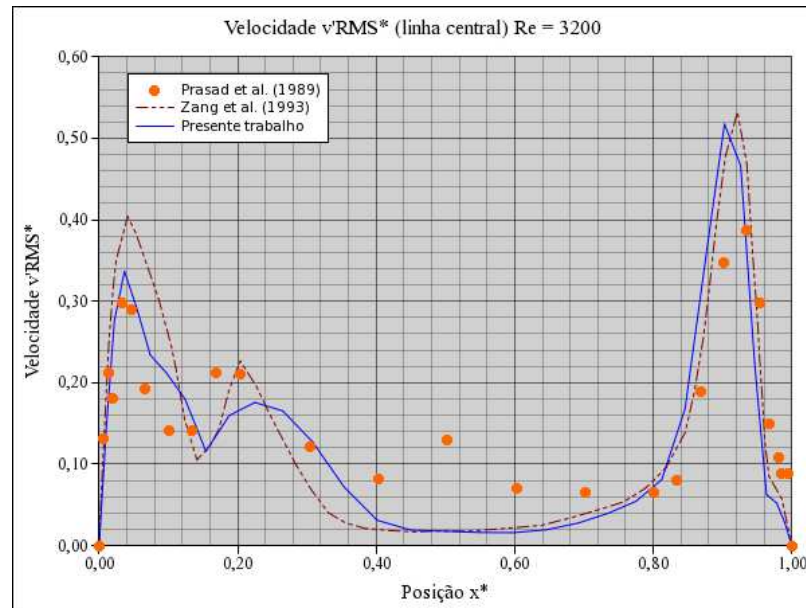


Figura 6.18. Perfil de velocidade $v'RMS^*$ (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $y = 0,5$) no plano central; comparação com outros resultados publicados.

$$Re_{cavidade} = 3200.$$

Como foi dito anteriormente, na análise das flutuações médias (RMS) fica mais evidente a falta de resolução de malha para obter-se uma solução adequada do problema. Essa falta de resolução de malha também é evidente nos resultados publicados por Zang et al., 1993. Esta falta de resolução, associada a diferença entre os modelos sub-malha utilizados no trabalho atual e no publicado por Zang et al., 1993, são os motivos das discrepâncias entre os dois resultados. Mesmo assim os gráficos mostram uma excelente concordância qualitativa, e uma boa concordância quantitativa quando comparados aos resultados experimentais.

A Figura 6.19 mostra o campo de velocidade média (magnitude do vetor de velocidade) no plano central da cavidade. A Figura 6.20 mostra isolinhas de pressão média também no mesmo plano central e a Figura 6.21 mostra algumas linhas de corrente exibindo a característica de tridimensionalidade do escoamento.

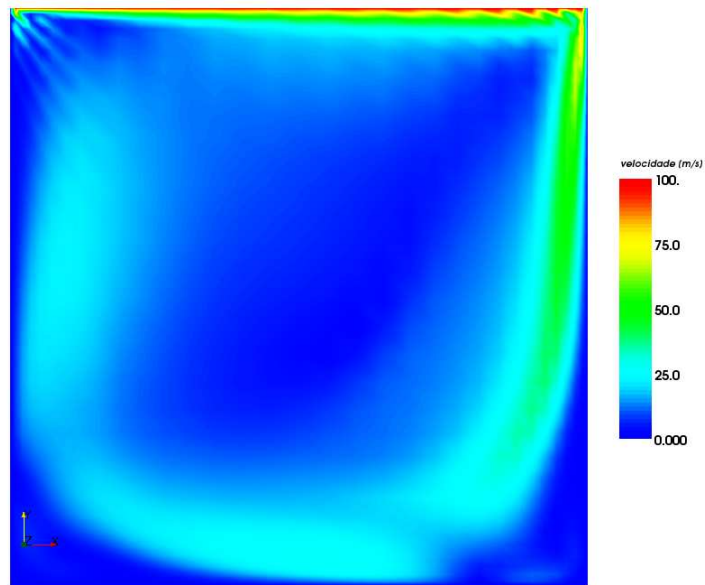


Figura 6.19. Campo de velocidade média (magnitude do vetor) no plano central da cavidade ($z = 0,5\text{m}$). $Re_{cavidade} = 3200$.

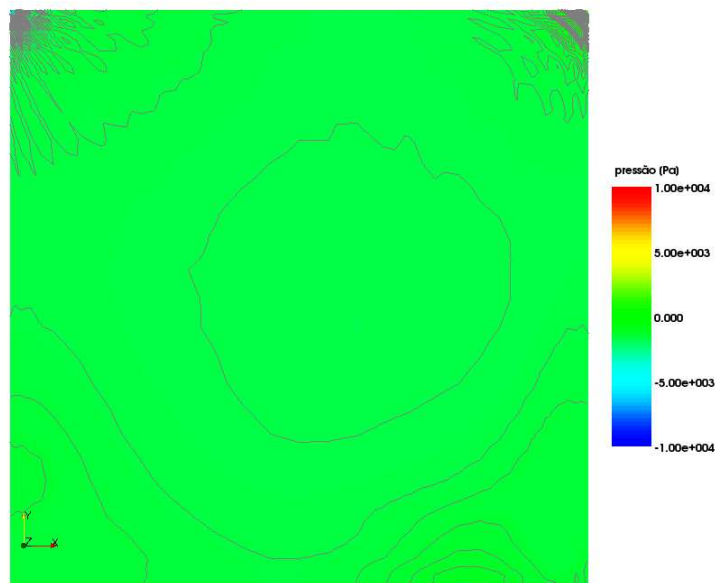


Figura 6.20. Isolinhas de pressão estática média no plano central da cavidade, com escala de valores reduzida entre $-1,0 \cdot 10^{-4}\text{Pa}$ e $1,0 \cdot 10^{-4}\text{Pa}$. $Re_{cavidade} = 3200$.

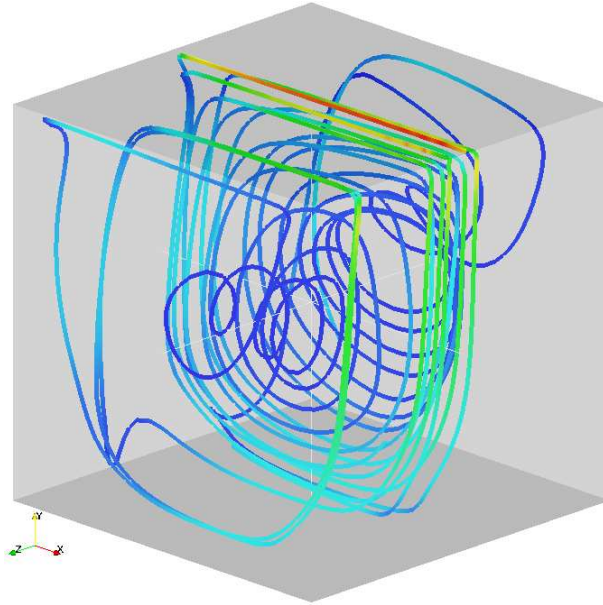


Figura 6.21. Linha de corrente partindo do ponto central da cavidade colorida pelo módulo da velocidade média (local). $Re_{cavidade} = 3200$.

As Figuras 6.19 e 6.20 mostram claramente que uma instabilidade numérica apareceu nos cantos superiores da cavidade. Esta instabilidade numérica tem algumas origens bem definidas, conforme discutido no trabalho e na literatura. Uma das fontes dessa instabilidade é a condição de contorno imposta no problema. Esse fenômeno é bem conhecido e tende a aparecer quando se usa uma condição de cavidade totalmente fechada. Nessa condição, nos cantos superiores da cavidade, a velocidade imposta pelas condições de contorno varia de zero ao valor imposto na parede superior em um único elemento, situação bastante difícil de estabilizar. Outra fonte da instabilidade é a baixa resolução utilizada nessa malha. Pode-se também pensar numa instabilidade no esquema de avanço no tempo implementado, porém são necessários mais alguns testes e comparações para chegar-se a uma conclusão.

Ainda com o intuito de exibir a tridimensionalidade do escoamento no interior da cavidade a Figura 6.22 mostra isosuperfícies de pressão, nas quais percebe-se tanto a tridimensionalidade do escoamento quanto as instabilidades no campo de pressão.

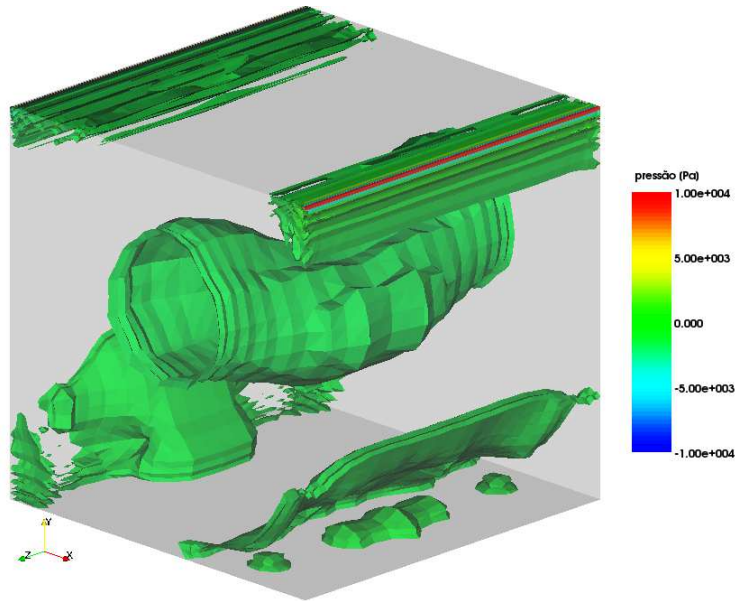


Figura 6.22. Isosuperfícies de pressão dentro da cavidade. Pressão estática com escala reduzida entre $-1,0 \cdot 10^{-4}$ Pa e $1,0 \cdot 10^{-4}$ Pa. $Re_{cavidade} = 3200$.

6.2.2. Escoamento em uma cavidade tridimensional a $Re_{cavidade} = 10000$

Para o caso do escoamento da cavidade bidimensional, foram feitas três alterações no esquema apresentado na seção anterior. Primeiro o domínio mostrado na Figura 6.13 é reduzido à metade na direção z , ou seja, a razão de aspecto lado/altura/profundidade passa a ser de 1:1:0,5. Os valores de B , D e H conforme definidos na Figura 6.13 passam a ser 1m, 1m e 0,5m respectivamente. O plano central da cavidade, que no caso anterior estava localizado em $z = 0,5$ m, passa para a cota $z = 0,25$ m.

A segunda alteração é no valor da viscosidade absoluta do fluido. Esse valor é alterado de forma a obter um número de Reynolds, conforme definido na equação (6.1) igual a 10000. O valor da viscosidade absoluta para tanto é então de $\mu = 0,01$ Pa·s.

A última alteração é na malha utilizada. Novamente foi utilizada uma malha semelhante àquela apresentada no artigo de Zang et al., 1993. A malha para este caso com $Re_{cavidade} = 10000$ é composta por $64 \times 64 \times 32$ elementos hexaédricos, não-uniformes, com os menores elementos junto à parede com uma razão de tamanho $\Delta x_{min}/B$ (ou $\Delta y_{min}/B$) igual a $5,0 \cdot 10^{-3}$. A Figura 6.23 mostra a malha utilizada.

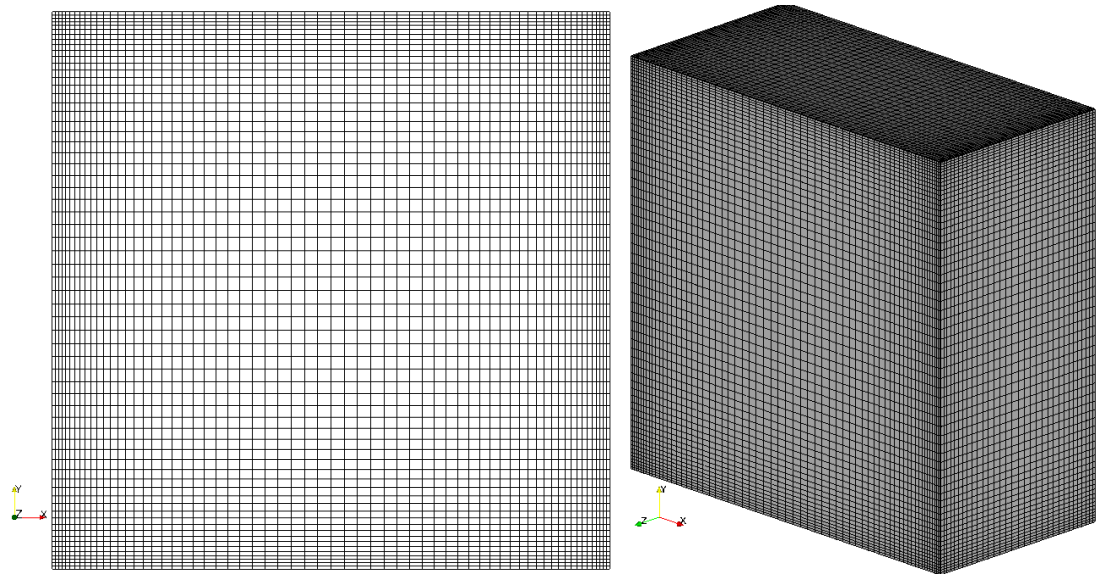


Figura 6.23. Isosuperfícies de pressão dentro da cavidade. Pressão estática com escala reduzida entre $-1,0 \cdot 10^{-4}$ Pa e $1,0 \cdot 10^{-4}$ Pa. $Re_{cavidade} = 10000$.

Assim como no caso a $Re_{cavidade} = 3200$ as simulações foram feitas com o sistema semi-implícito de avanço no tempo (com $\theta = 0,5$) e utilizando o método de Newton com diagonalização seletiva apenas nos termos de pressão das matrizes do problema. O passo de tempo utilizado foi de $5,0 \cdot 10^{-5}$ s, obtido pela equação (6.2). Aqui também foi simulado um tempo longo o suficiente para que se atingisse um comportamento médio permanente. Após atingir-se esse estágio as médias foram tomadas por um tempo igual a três tempos característicos do problema, com o tempo característico definido novamente pela (6.4) de valor $t_c = 0.01$ s.

Os resultados dos perfis médios de velocidade são mostrados nas Figuras 6.24 e 6.25.

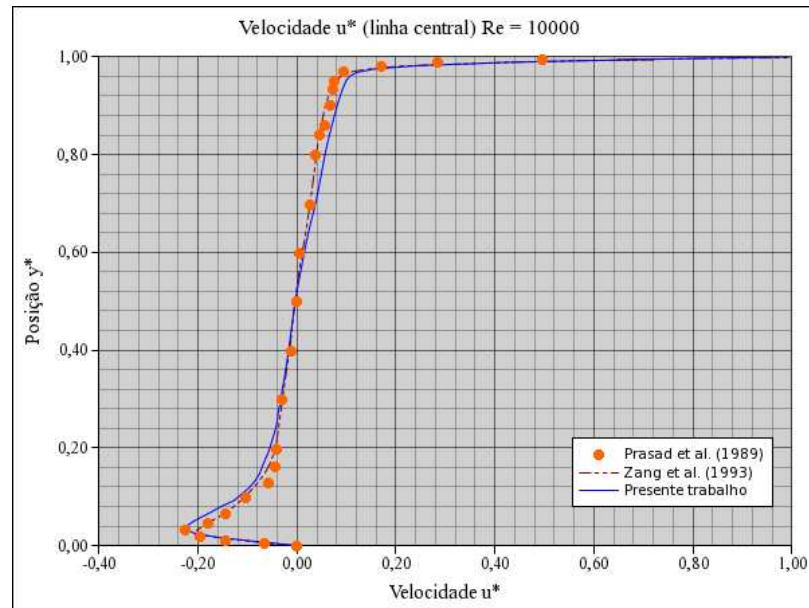


Figura 6.24. Perfil de velocidade u^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $x = 0,5$) no plano central; comparação com outros resultados publicados.

$$Re_{cavidade} = 10000.$$

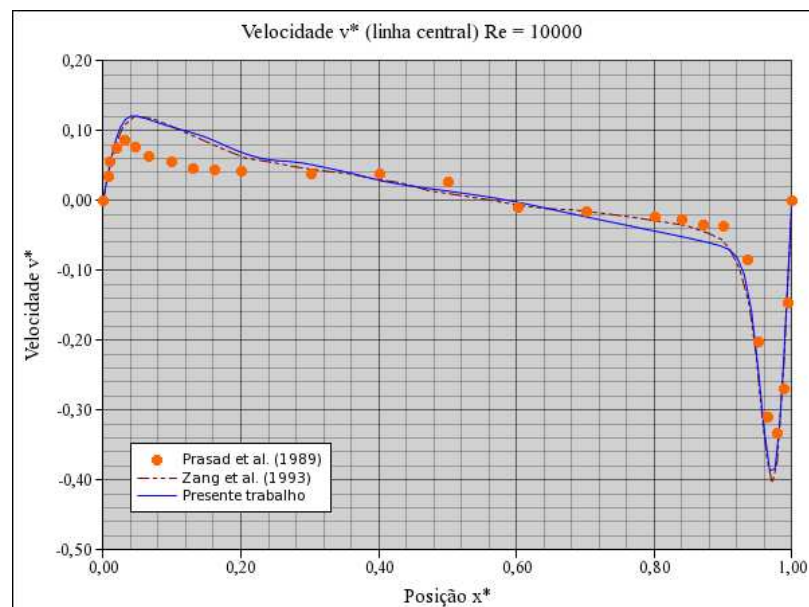


Figura 6.25. Perfil de velocidade v^* (adimensional) ao longo da linha horizontal central da cavidade (em $y = 0,5$) no plano central; comparação com outros resultados publicados.

$$Re_{cavidade} = 10000.$$

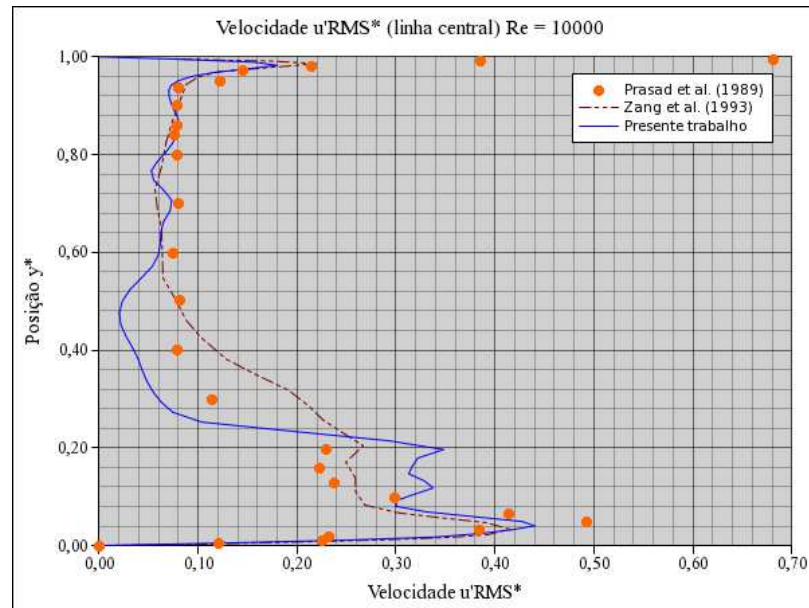


Figura 6.26. Perfil de velocidade u'_{RMS}^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $x = 0,5$) no plano central; comparação com outros resultados publicados.

$$Re_{cavidade} = 10000.$$

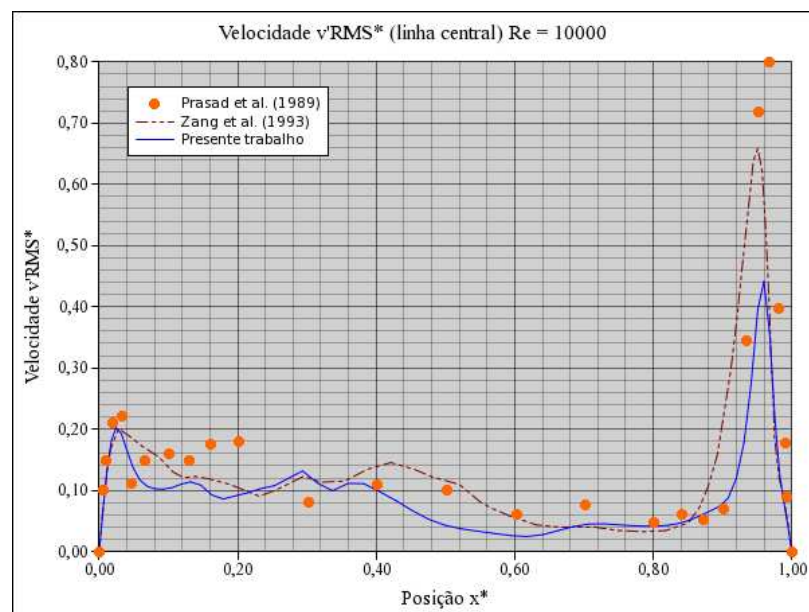


Figura 6.27. Perfil de velocidade v'_{RMS}^* (adimensional) ao longo da linha vertical central da cavidade (em $y = 0,5$) no plano central; comparação com outros resultados publicados.

$$Re_{cavidade} = 10000.$$

Para este caso um pequeno desvio entre os resultados obtidos com o código desenvolvido e os resultados de Zang et al., 1993, e de Prasad et al., 1989, é percebido nos perfis de velocidade

média. Qualitativamente os perfis ficaram bastante próximos dos resultados de simulação publicados.

Nos perfis de flutuações médias novamente percebe-se uma boa tendência qualitativa nos valores obtidos e uma concordância com os resultados experimentais, principalmente nas zonas onde a malha é mais refinada (junto às paredes). As discrepâncias apresentadas pelo resultado obtido no presente trabalho novamente podem ser justificadas pela baixa resolução da malha utilizada e pelo tipo do modelo sub-malha utilizado. Como explicado no texto, a principal característica do modelo dinâmico é adaptação local às características da turbulência no escoamento. Assim, para uma mesma malha, espera-se sempre que os resultados obtidos com esse modelo sub-malha sejam superiores àqueles obtidos com o modelo de Smagorinsky. A boa concordância, em termos qualitativos e de ordens de grandeza, é extremamente satisfatória dadas as condições o problema.

Ressalta-se novamente ainda a incerteza quanto à estabilidade no esquema de avanço no tempo implementado no código desenvolvido e a instabilidade causada pela condição de contorno do problema, ambos já discutidos e que podem ser motivo de futuros trabalhos.

As Figuras 6.28 a 6.31 mostram o campo de velocidade média (módulo) e linhas de pressão constante (ambos no plano central da cavidade), uma linha de corrente partindo do ponto central da cavidade (mostrando a tridimensionalidade do escoamento) e superfícies de pressão constante dentro da cavidade.

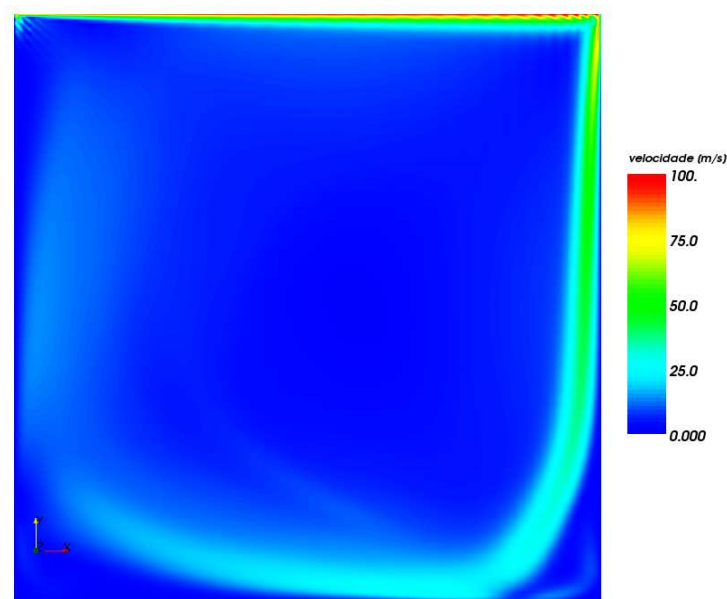


Figura 6.28. Campo de velocidade média (magnitude do vetor) no plano central da cavidade ($z = 0,5\text{m}$). $Re_{cavidade} = 10000$.

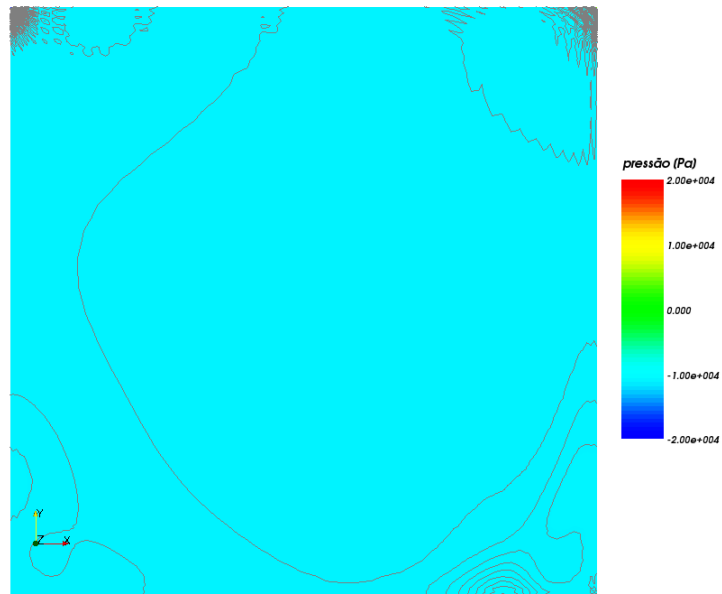


Figura 6.29. Isolinhas de pressão estática média no plano central da cavidade, com escala de valores reduzida entre $-2,0 \cdot 10^{-4}$ Pa e $2,0 \cdot 10^{-4}$ Pa. $Re_{cavidade} = 10000$.

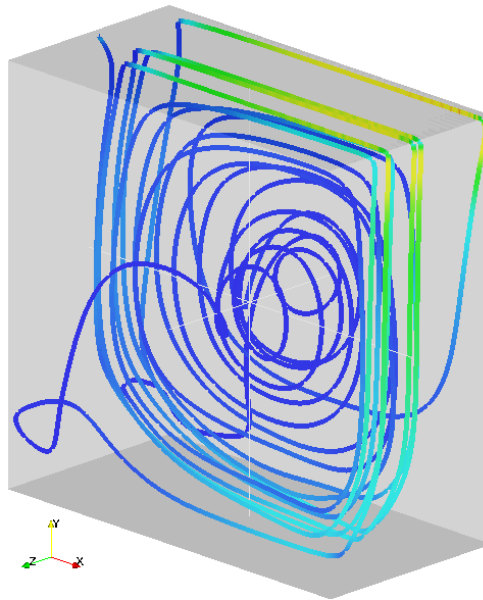


Figura 6.30. Linha de corrente partindo do ponto central da cavidade colorida pelo módulo da velocidade média (local). $Re_{cavidade} = 10000$.

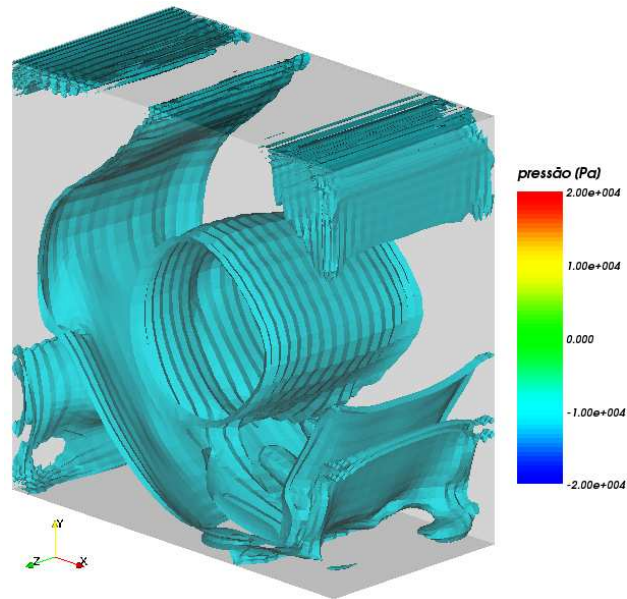


Figura 6.31. Isosuperfícies de pressão dentro da cavidade. Pressão estática com escala reduzida entre $-2,0 \cdot 10^{-4}$ Pa e $2,0 \cdot 10^{-4}$ Pa. $Re_{cavidade} = 10000$.

Das Figuras 6.30 e 6.31 fica evidente o comportamento tridimensional do problema. Da figura 6.31 percebe-se também um comportamento simétrico (na direção z) deste campo médio de pressões.

Para ambos os casos tridimensionais da cavidade apresentados aqui, o tempo de processamento ainda era muito alto (apesar dos métodos implementados para melhorar o desempenho numérico). Cada simulação levava em torno de 15 a 20 dias na estação *Altix* disponibilizada para fornecer um resultado com tempo de simulação adequado.

Os principais motivos para esta demora foram o pequeno passo de tempo utilizado nas simulações e a forma com que o código calcula as matrizes de elemento e monta as matrizes globais (rotinas onde maior parte do tempo de processamento era consumido). O primeiro não pode ser alterado, por se trata de um parâmetro físico dos escoamentos em questão, o segundo pode ser resolvido alterando a forma com que essas matrizes são calculadas, melhorando o seu desempenho. Essa tarefa é simplificada pela estrutura do código, já discutida.

6.3. Escoamento em um degrau bidimensional

O escoamento sobre um degrau é também um caso de referência utilizado em inúmeros trabalhos. Este escoamento apresenta características bastante interessantes como descolamento e recolamento de camada limite, formação de uma camada de mistura e, quando em regime

turbulento, formação de estruturas já bastante conhecidas devido à diversas investigações (numéricas e experimentais) disponíveis na literatura.

Ainda para a validação do código desenvolvido neste trabalho, o caso do escoamento sobre o degrau, em regimes laminar e turbulento, foi simulado. As simulações foram todas realizadas sobre um mesmo domínio e uma mesma malha bidimensional. No momento a discussão sobre simulação bidimensional de grandes escalas é deixada de lado, já que isto já foi discutido anteriormente.

Um detalhado estudo do caso, para uma ampla faixa de números de Reynolds, foi publicado por Armaly et al., 1983. Nesse artigo diversas medições experimentais, utilizando a técnica de LASER-Doppler, são apresentados. Perfis de velocidade e características do escoamento como pontos de descolamento e recolamento de camada limite foram publicados. No mesmo trabalho um estudo numérico bidimensional utilizando o método de diferenças finitas também foi realizado.

A Figura 6.32 mostra esquematicamente o domínio, as condições de contorno e as propriedades do fluido utilizadas.

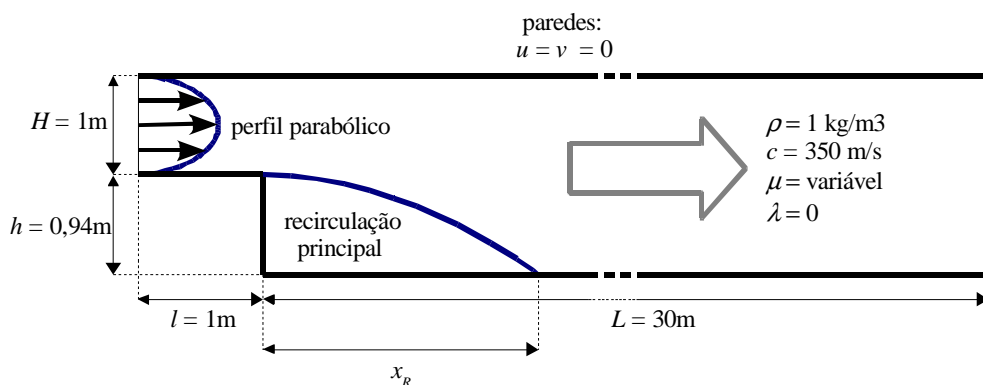


Figura 6.32. Diagrama esquemático do problema do degrau, com dimensões, condições de contorno e propriedades do fluido.

Na figura acima H é a altura do canal de entrada, h a altura do degrau, l o comprimento da seção de entrada, L o comprimento do canal após o degrau e x_R o a distância de recolamento da recirculação principal.

As condições de contorno são de não-deslizamento nas paredes, um perfil parabólico imposto na entrada do canal, com velocidade média de 100m/s (visando reproduzir a entrada da seção experimental do caso publicado) e tração nula na saída do canal.

Para o caso laminar foram simulados 8 casos com números de Reynolds entre 100 e 800 com passo de 100. O objetivo era de reproduzir a curva de ponto de recolamento da recirculação

principal publicado por Armaly et al., 1983. Para o primeiro caso foi utilizada uma condição inicial de velocidades e pressão nula. Para os casos subseqüentes foi utilizado o campo resultante da simulação com número de Reynolds mais baixo como condição inicial. O número de Reynolds para o caso do degrau é definido como mostrado na equação (6.7).

$$Re_{\text{degrau}} = \frac{\rho U 2H}{\mu} \quad (6.7)$$

onde U é a velocidade média do perfil parabólico na entrada, e H é a altura do canal de entrada. A malha utilizada em todos os casos foi a mesma e era composta por 10380 elementos quadriláteros com tamanho uniforme na região do degrau e um pouco mais grosseira mais próximo da saída do canal. A região próxima ao canal é mostrada na Figura 6.33.

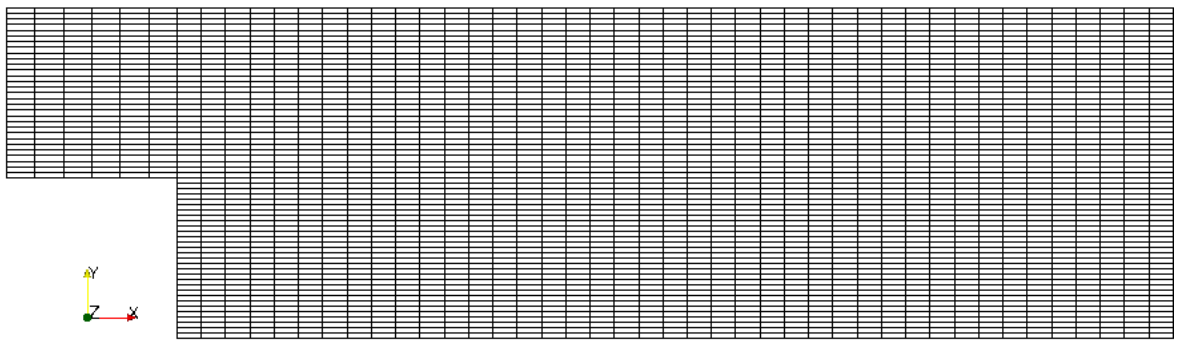


Figura 6.33. Malha utilizada no caso do degrau bidimensional, região próxima ao degrau.

As simulações foram conduzidas utilizando o sistema semi-implícito de avanço no tempo (com $\theta = 0,5$) e com o método de Newton com diagonalização seletiva apenas nos termos de pressão das matrizes do problema. O passo de tempo utilizado foi de $1,0 \cdot 10^{-4}$ s, um pouco abaixo do obtido pela equação (6.2), por motivo de garantir-se a estabilidade para automatização das rodadas (feita através de *scripts*). Aqui também foi simulado um tempo longo o suficiente para que se atingisse um comportamento médio permanente.

O ponto de recolamento da recirculação principal é definido aqui como o ponto em que a velocidade horizontal é nula a partir dos valores medidos na primeira linha de nós acima da parede inferior. A Figura 6.34 mostra um campo de velocidade (instantâneo) e a Figura 6.35 mostra o respectivo campo de pressão estática obtidos para o caso com $Re_{\text{degrau}} = 800$.

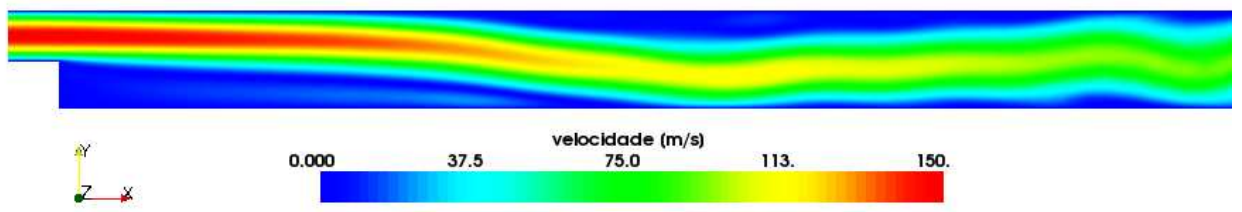


Figura 6.34. Campo de velocidades obtido para $Re_{degrau} = 800$.

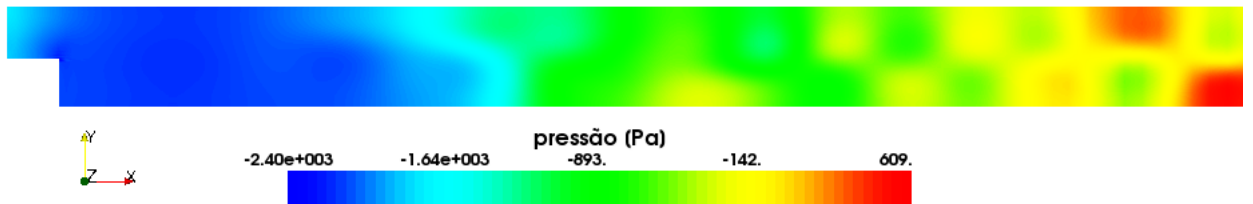


Figura 6.35. Campo de pressão estática obtido para $Re_{degrau} = 800$.

Com todos os resultados do ponto de recolamento foi montado o gráfico mostrado na Figura 6.36 com a comparação dos valores obtidos com os publicados por Armaly et al., 1983.

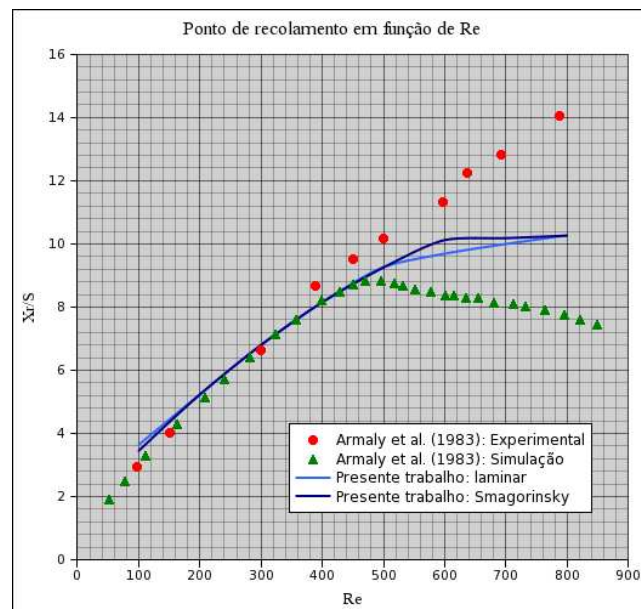


Figura 6.36. Comparação dos pontos de recolamento obtidos com valores publicados por Armaly et al., 1893.

Nas figuras dos campos de velocidades e pressão se percebe a característica oscilatória dos campos na região de saída do canal e também a recuperação de pressão estática devido à expansão.

No gráfico a posição do ponto de recolamento é expressa em termos de x_R/S , onde S é a razão entre a altura do canal de entrada (H) e a altura do degrau (h). Os valores obtidos apresentaram uma boa concordância com os valores experimentais e numéricos publicados. Conforme esperado, para valores de Re_{degrau} maiores que 400 os valores previstos pela simulação começam a se distanciar do valor experimental. Isto acontece porque já a partir desses valores, efeitos de tridimensionalidade do escoamento começam a ser consideráveis, efeitos estes não capturados por esta simulação.

Os resultados obtidos com o código desenvolvido foram um pouco melhores do que os publicados por Armaly et al., 1983, para a região de maiores valores de Reynolds. Isto se deve ao método de resolução utilizado, mais robusto e preciso do que o método simples de diferenças finitas utilizado pelo autor.

7. CONCLUSÃO

A principal conclusão do trabalho é que o código de dinâmica dos fluidos computacional, para simulação de grandes escalas de escoamentos bi- e tridimensionais, transientes, incompressíveis, isotérmicos e turbulentos, que servirá como base de futuros trabalhos do grupo, foi desenvolvido com sucesso. Os resultados das simulações rodadas com o novo código foram bastante satisfatórios e validaram a metodologia implementada.

Apesar disso algumas dificuldades se evidenciaram no uso deste código. A principal delas foi o alto tempo de processamento necessário para casos tridimensionais. Como dito isto é devido à forma com que são calculadas as matrizes de elemento e montadas as matrizes globais do problema, o que pode ser melhorado em trabalhos futuros. As instabilidades que surgiram no caso das simulações a altos valores do número de Reynolds também foram preocupantes, e parecem estar relacionadas ao esquema de avanço no tempo escolhido, o que pode também ser estudado adiante.

Mesmo com essas questões de desempenho das rotinas utilizadas, os métodos implementados para melhorar o desempenho do programa foram bastante eficientes. A redução de memória necessária utilizando o método de armazenagem compacta de matrizes indexadas por linhas viabilizou o uso de esquemas semi-implícitos de avanço no tempo e se mostrou muito mais eficiente do que os outros métodos de armazenagem compacta. Além disso esta armazenagem tem um desempenho excelente com os métodos de solução de sistemas lineares implementados.

O processamento em paralelo utilizando a técnica OpenMP também se mostrou bastante eficaz. Nas estações disponibilizadas pela SGI a distribuição dinâmica de processamento, de acordo com a disponibilidade de cada processador foi acompanhada e sempre manteve o máximo número de processos paralelos possíveis. Apesar da técnica ser limitada a máquinas de memória compartilhada, ela pode ser estendida para uso com máquinas de memória distribuída através de ferramentas de criação de uma “máquina paralela de memória compartilhada virtual” ou pode ainda ser utilizada em conjunto com técnicas de processamento entre máquinas de memória distribuída.

Os seguintes temas são dados como sugestões de próximos trabalhos: melhorias na estrutura de cálculo das matrizes de elemento e montagem das matrizes globais; estudo e implementação de outros esquemas de avanço no tempo para aumentar a precisão e a estabilidade do método; implementação do modelo dinâmico e validação e ampliação da

biblioteca de elementos para de forma a permitir que o programa utilize, por exemplo, elementos triangulares e tetraédricos facilitando a geração de malha em geometrias mais complexas.

Outros modelos de turbulência para as escalas sub-malha da simulação de grandes escalas também podem ser implementados no código.

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Armaly, B.F., Durst, F., Pereira, J.C.F., Schönung, B., 1983. “Experimental and Theoretical Investigation of Backward-Facing Step Flow”, **Journal of Fluid Mechanics**, v. 127, pp. 473-496.

Costa, G.K., Lyra, P.R.M. e Oliveira Lira, C.A.B., 2005. “Numerical simulation of two dimensional compressible and incompressible flows”, **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. XXVII (4), pp. 372-380.

Elias, R.N., Coutinho, A.L.G.A. e Martins, M.A.D., 2004. “Inexact Newton-type methods for non-linear problems arising from the SUPG/PSPG solution of steady incompressible Navier Stokes Equations”, **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. XXVI (3), pp. 330-339.

Ferziger, J., 1993. “Simulation of Complex Turbulent Flows: Recent Advances and Prospects in Wind Engineering”, **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, vol. 46 & 47, pp. 195-212.

Ferziger, J.H. e Perić, M., 2002. “**Computational methods for fluid dynamics**”, 3ª edição, Springer.

Findikakis, A.N. e Street, R.L., 1982. “Mathematical Description of Turbulent Flows”, **Journal of Hydraulics Division**, vol. 108, no. HY8, 17265, pp. 887-903.

Findikakis, A.N. e Street, R.L., 1982. “Finite Element Simulation of Stratified Turbulent Flows”, **Journal of Hydraulics Division**, vol. 108, no. HY8, 17266, pp. 904-920.

Fox, R.W. e McDonald, A.T., 2001. “**Introdução à Mecânica dos Fluidos**”, LTC Editora, Rio de Janeiro.

Germano, M. Piomelli, U., Moin, P. Cabot, W.H., 1991. “A dynamic sub-grid-scale eddy viscosity model”, **Physics of Fluids**, A3 (7), 1760-1765.

Ghia, U., Ghia, K. N., Shin, C. T., 1982. “High-*Re* Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multi-Grid”. **Journal of Computational Physics**, v. 48, pp. 387-411.

Gresho, P.M. e Sani, R.L., 1987. “On pressure boundary conditions for the incompressible Navier-Stokes equations”, *Finite Elements in Fluids*, v. 7, pp. 123 – 157.

Gresho, P.M. and Sani, R.L., 1999. “Incompressible **Flow and the Finite Element Method**”, v. 1&2, John Wiley and Sons, Ltd.

Hinze, J.O., 1975. “**Turbulence**”, McGraw-Hill, New York.

Hughes, T. J. R., 1987. “**The Finite Element Method**”, Prentice-Hall, New Jersey.

Hussain, A.K.M.F., 1983. “Coherent Structures: Reality and Myth”, **Physics of Fluids**, vol. 26(10), pp. 2816-2850.

Kawahara, M. e Hirano, H., 1983. “A Finite Element Method for High Reynolds Number Viscous Fluid Flow Using Two Step Explicit Scheme”, **International Journal For Numerical Methods in Fluids**, vol. 3, pp. 137-163.

Lange, C.F., 1992. “Simulação de escoamentos incompressíveis não-isotérmicos pelo método de elementos finitos com função de penalidade”, **Dissertação de Mestrado**, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto Alegre.

Lee, R.L., Gresho, P.M. e Sani, R.L., 1979. “Smoothing techniques for certain primitive variable solutions of the Navier-Stokes equations”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 14, pp. 1785-1804.

Leonard, A., 1974. “Energy Cascade in Large-Eddy Simulations of Tubulent Fluid Flows”, **Advances in Geophysics**, vol. 18A, pp. 237-248.

Lesieur, M., Comte, P. e Métais, O., 1995. “Numerical Simulations of Coherent Vortices in Turbulence”, **Applied Mechanics Reviews**, vol. 48(3), pp. 121-149.

Lilly, D.K., 1992. “A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method”, **Physics of Fluids**, A4 (3), 633-635.

Nallasamy, M. e Prasad, K.K., 1977. “On cavity flow at high Reynolds numbers”, **Journal of Fluid Mechanics**, v. 79 (2), pp. 391-414.

Pereira, V.D. e Campos Silva, J. B., 2005. “Simulations of incompressible fluid flows by a least squares finite element method”, **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. XXVII (3), pp. 274-282.

Petry, A.P. e Awruch, A., 1997. “Simulação de Escoamentos Turbulentos Pelo Método de Elementos Finitos Através da Simulação Direta de Grandes Vórtices”, **ENIEF**.

Petry, A.P., 2002. “Análise Numérica de Escoamentos Turbulentos Tridimensionais Empregando o Método de Elementos Finitos e Simulação de Grandes Escalas”, **Tese de Doutorado**, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto Alegre.

Petry, A.P. e Awruch, A.M., 2004. “Large eddy simulation of three-dimensional turbulent flows by the finite element method”, **IV Escola de Primavera de Transição e Turbulência**, Porto Alegre.

Piomelli, U., Moin, P. e Ferziger, J.H., 1988. “Model Consistency in Large Eddy Simulation of Turbulent Channel Flows”, **Physics of Fluids**, vol. 31(7), pp. 1884-1891.

Piomelli, U., Ferziger, J., Moin, P. e Kim, J., 1989. “New Approximate Boundary Conditions for Large Eddy Simulations of Wall-Bounded Flows”, **Physics of Fluids A**, vol. 1(6), pp. 1061-1068.

Piomelli, U., Cabot, W.H., Moin, P. e Lee, S., 1991. “Subgrid-scale Backscatter in Turbulent and Transitional flows”, **Physics of Fluids A**, vol. 3(7), pp. 1766-1771.

Piomelli, U., 1993. “High Reynolds number calculations using the dynamic subgrid-scale stress model”, **Physics of Fluids A**, vol. 5(6), pp. 1484-1490.

Piomelli, U., 1999. “Large-Eddy Simulation: Achievements and Challenges”, **Progress in Aerospace Sciences**, vol. 35, pp. 335-362.

Pope, S.B., 2003. “Ten Questions Concerning the Large-Eddy Simulation of Turbulent Flows”, **New Journal of Physics**, November.

Popiolek, T. L., Awruch, A.M. e Teixeira, P.R.F., 2006. “Finite element analysis of laminar and turbulent flows using LES and sub-grid scale models”, **Applied Mathematical Modelling**, v. 30, pp 177-199.

Prasad. A. K., Koseff, J. R., 1989. “Reynolds Number and End-wall Effects on a Liddriven Cavity Flow”. **Physics of Fluids**, A, v. 1, n. 2, pp 208-218.

Press, S.A., Vetterling, W.T. e Flannery, B.P., 1992. “**Numerical Recipes in Fortran 77: the Art of Scientific Computing**”, Cambridge, Cambridge.

Reddy, J.N., 1985. “**An introduction to the finite element method**”, McGraw-Hill, New York.

Reddy, J.N. e Gartling, D.K., 1994. “**The Finite Element Method in Heat Transfer and Fluid Dynamics**”, CRC Press, Boca Raton.

Rogallo, R.S. e Moin P., 1984. “Numerical Simulation of Turbulent Flows”, **Annual Reviews on Fluid Mechanics**, vol. 16, pp. 99-137.

Schlichting, H., 1979. “**Boundary-layer Theory**”, McGraw-Hill, New York.

Schreiber, R. e Keller, H.B., 1983. “Driven cavity flows by efficient numerical techniques”, **Journal of Computational Physics**, v. 49, pp. 310-333.

Selvam, R.P., 1997. "Finite element modeling of flow around a circular cylinder using LES", *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, v. 67&68, pp. 129-139.

Silva Freire, A.P., Menut, P.P.M e Su, J., 2002. "**Turbulência**", Associação Brasileira de Ciências Mecânicas (ABCM), Rio de Janeiro.

Silveira Neto, A., Grand, D., Métais, O. e Lesieur, M., 1993. "A Numerical Investigation of the Coherent Vortices in Turbulence Behind a Backward-Facing Step", *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 256, pp. 1-25.

Smagorinsky, J., 1963. "General circulation experiments with the primitive equations. I. The basic experiment", *Monthly Weather Reviews*, v. 91, pp. 99-164.

Sonntag, R.E., Borgnakke, C. e Van Wylen, G.J., 1998. "**Fundamentos da Termodinâmica**", Edgard Blücher Ltda., São Paulo.

Tennekes, H. e Lumley, J.L., 1994. "**A First Course in Turbulence**", MIT Press, Londres.

White, F.M., 1999. "**Mecânica dos Fluidos**", McGraw-Hill, Rio de Janeiro.

Wilcox, D.C., 1994. "**Turbulence Modeling for CFD**", DCW Industries Inc. La Cañada, Califórnia.

Zang, Y., Street, R. L., Koseff, J. R., 1993. "A Dynamic Mixed Subgrid-Scale Model and its Application to Turbulent Recirculating Flows". *Physics of Fluids*, A, v. 5, n. 12, pp. 3186-3196.

Zienkiewicz, O.C. e Taylor, R.L., 2000. "**The Finite Element Method - Volume 3: Fluid Dynamics**", Butterworth-Heinemann, Oxford.