SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito: 19.11.2003

Assinatura:

Ana Paula Campai Jr.

Simulação numérica de escoamentos com superfícies livres e obstáculos em movimento

Hévilla Nobre Cezar

Orientador: Prof. Dr. Antonio Castelo Filho

Dissertação apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências de Computação e Matemática Computacional.

USP – São Carlos
Novembro/2003

Hérila

A Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Antonio Castelo Filho

Prof. Dr. Norberto Mangiavacchi

Prof. Dr. Ernani Vitillo Volpe

“A última coisa que se decide ao fazer um trabalho é saber o que se deve colocar em primeiro lugar.”

Pascal

Agradecimentos

Em primeiro lugar agradeço a Deus pela oportunidade de crescimento.

À minha família, especialmente à minha mãe Tereza e à minha irmã Haline pelo apoio e incentivo em todos os momentos da minha vida.

Ao meu marido Laércio, pelo amor, pelas valiosas ajudas e pelo apoio e incentivo.

Ao meu orientador, professor Antonio Castelo Filho, pela dedicação, paciência e pelos ensinamentos transmitidos no decorrer desse trabalho.

À minha orientadora de iniciação científica, professora Janete Crema, que me apresentou o mundo das equações diferenciais parciais.

A todos os professores do ICMC, com os quais convivi durante minha graduação, pela ótima formação que me proporcionaram.

Aos professores do grupo de análise numérica pelas valiosas ajudas e sugestões, em especial aos professores Norberto, Fernando, Murilo e Valdemir.

Aos companheiros do Lcad, Luciane, Fabrício, Helton, Marcelo, Débora, Gerson, Kemelli, Dayene, Gil, Cassio, Igor e João Paulo, pela amizade, pelas dicas e principalmente pelos momentos de descontração.

Aos amigos Rogério, Fabrício, Nelson, Patrícia e Paula, pela amizade e companheirismo durante as épocas de escolhas e indecisões.

A todos os funcionários do ICMC, pois sem eles não seria possível manter toda a estrutura e organização do instituto.

À CAPES, pelo apoio financeiro no desenvolvimento desse trabalho.

Finalmente, agradeço a todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização desse trabalho.

Resumo

Um problema relevante na modelagem de escoamentos com movimento de corpo rígido consiste na consideração de forças externas bem como forças que o fluido exerce sobre o próprio corpo rígido. Um outro problema importante refere-se à descrição da trajetória dos corpos rígidos. Essas duas questões são o objeto de estudo deste trabalho. No sentido de solucioná-las, foram implementadas duas extensões ao modelador de movimentos do sistema Freeflow-3D. A primeira incorpora um tipo de movimento definido por forças externas e a segunda um tipo de movimento definido por interpolação linear por partes.

Palavras chave: Escoamentos com superfície livre; Equações de Navier-Stokes; Movimento de container; Forças Externas.

Abstract

A relevant problem in the modeling of the flow of fluids with rigid body movements consists in the consideration of external forces, as well as forces that the fluids apply in the rigid body. Another important problem in this domain refers to the description of the path of the rigid bodies. Studying these two issues was the goal of this work. Towards solving these problems, two extensions were implemented in the movement modeler of the Freeflow-3D system. The first one, adds to the modeler a new type of movement, defined by external forces. The second, adds another type of movement defined by piecewise linear interpolation.

Sumário

1	Equações Básicas	3
1.1	Noções Fundamentais	3
1.1.1	Escoamentos de fluidos	4
1.2	Equações de Navier-Stokes	5
1.2.1	Desenvolvimento das Equações	6
1.3	Condições de fronteira na superfície livre	8
1.4	Condições de fronteira no contorno rígido	10
2	Método Numérico	11
2.1	Algoritmo Computacional	11
3	Discretização	15
3.1	Classificação das Células	16
3.2	O Método das Diferenças Finitas	17
3.3	Discretização das equações de conservação da quantidade de movimento	18
3.4	Condições de contorno na superfície livre	20
3.5	Condições de contorno na fronteira rígida	23
3.6	Controle do Passo no Tempo	25
3.7	O Movimento das Partículas	26
4	O Freeflow-3D com modelador de movimentos	27
4.1	Estrutura de Dados	28
4.2	O módulo Modflow-3D com modelador de movimentos	29

4.3	O módulo Simflow-3D com modelador de movimentos	31
5	O movimento de corpos rígidos	33
5.0.1	Definição do centro de massa	34
5.1	Movimento definido por interpolação linear por partes	35
5.1.1	Definição da matriz de rotação	35
5.1.2	Movimento de translação do centro de massa	36
5.1.3	Cálculo dos ângulos de rotação	37
5.2	Movimento definido por forças	38
5.2.1	Definição da matriz de rotação	38
5.2.2	Modelagem do sistema de forças	39
5.2.3	Desenvolvimento das equações de força no sistema de coordenadas . .	40
5.2.4	Equações do movimento de translação	45
5.2.5	Equações do movimento de rotação	46
6	Resultados Numéricos	49
6.1	Exemplos numéricos	49
6.1.1	Simulação 1: “Transporte de contêiner”	49
6.1.2	Simulação 2: “Interação jato-bloco”	51
6.1.3	Simulação 3: “Movimento de translação e rotação com ação do fluido”	52
6.1.4	Simulação 4 : “Influência do fluido sobre a esfera”	54
6.1.5	Simulação 5: “Movimento de uma esfera devido a forças externas” . .	56
6.2	Análise Qualitativa	57
7	Conclusão	61
	Referências Bibliográficas	62

Lista de Figuras

3.1	Célula computacional	15
3.2	Classificação das células	16
3.3	Esquema de células	18
3.4	Célula (S) com uma única face adjacente à célula (V)	21
3.5	Célula (S) com duas faces adjacentes às células (V)	22
3.6	Célula (S) com três faces adjacentes às células (V)	23
3.7	Célula (F) com face $(i + 1/2)$ adjacente à célula (C) ou (S)	24
4.1	Interface Gráfica.	31
4.2	Interface Gráfica.	31
5.1	Movimento de rotação e translação (Trindade and Sampaio, 2001).	33
5.2	Vetores normais as faces da célula computacional	41
5.3	Esquema de células para o cálculo de F_{fx}	42
5.4	Esquema de células para o cálculo de F_{fy}	43
5.5	Esquema de células para o cálculo de F_{fz}	44
6.1	Movimento definido por interpolação linear por partes	50
6.2	Movimento de um bloco pela ação de um fluido	52
6.3	Corte frontal	52
6.4	Campo de velocidade do fluido	53
6.5	Vista tridimensional	54
6.6	Movimento com velocidade angular inicial igual a $-1m/s$	54
6.7	Movimento com velocidade angular inicial igual a $-2m/s$	54

6.8	Viscosidade do fluido = 1	55
6.9	Viscosidade do fluido = 100.	55
6.10	Movimento de uma esfera pela ação de forças externas	57
6.11	Vista fronta	57
6.12	Vista tridimensional	57
6.13	Comparação dos resultados	58
6.14	<i>Splashes</i> obtidos em função da variação da altura de queda da esfera	59

Introdução

A solução numérica de diversos problemas em mecânica dos fluidos tornou-se recentemente possível graças ao desenvolvimento de novas técnicas numéricas e do significativo avanço dos recursos computacionais. Entre as muitas classes de problemas em dinâmica dos fluidos que se beneficiaram desse avanço, destaca-se aquela dos problemas com superfícies livres.

Um dos motivos do grande interesse no desenvolvimento de técnicas de soluções para a classe dos problemas com superfícies livres é a aplicabilidade industrial. Distribuição de petróleo e gás natural, preenchimento de cavidades e injeção em moldes nas industriais alimentícias, siderúrgicas e de plásticos estão entre as principais atividades beneficiadas pelo uso de tais técnicas.

Em função desse avanço tecnológico e científico, as simulações numéricas tornam-se mais próximas da solução real e, assim, podem ser utilizadas para simular modelos estudados por métodos experimentais, diminuindo o grande custo de desenvolver equipamentos específicos para cada experimento.

Motivado pelo crescente interesse tanto científico quanto industrial, o grupo de Matemática Computacional do Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC-USP), desenvolveu um simulador de escoamentos de fluidos com superfícies livres em três dimensões denominado Freeflow-3D (Castelo et al., 2000). Ao longo do tempo o sistema Freeflow-3D vem sendo estendido com novas funcionalidades. Tais extensões visam solucionar problemas específicos, dentre os quais, a simulação de escoamentos multifásicos (Sousa, 2002), escoamentos com variação de temperatura (Sabatini, 2002), escoamentos com movimento de corpos rígidos (Paiva, 2000), escoamentos de fluidos não newtonianos (Siquieri, 2002), simulação de escoamentos axissimétricos (Oliveira, 2002) e simulação de escoamentos viscoelásticos (Grossi, 2003).

Especificamente em relação aos escoamentos com movimento de corpos rígidos, um problema importante consiste na consideração de forças externas, bem como forças que o fluido exerce sobre o próprio corpo. No sentido de solucionar esse problema, este trabalho implementa uma nova extensão ao Freeflow-3D, incorporando ao seu modelador de movimentos um novo tipo de movimento, definido por forças externas.

Um aspecto importante no que se refere ao movimento de corpos rígidos está na descrição de sua trajetória. Paiva(2000) descreve o movimento de corpos rígidos utilizando interpolação por splines cúbicas. Observa-se, entretanto, que diversos movimentos de corpos rígidos podem ser descritos por trajetórias retilíneas, facilitando a modelagem das equações do movimento. Dessa forma, outra contribuição do trabalho foi o desenvolvimento de um novo tipo de movimento, definido por interpolação linear por partes.

Esta dissertação de mestrado está dividida da seguinte forma:

- Capítulo 1: apresenta alguns conceitos sobre a mecânica dos fluidos, bem como as equações básicas que modelam os escoamentos de fluidos com superfície livre;
- Capítulo 2: descreve o método numérico utilizado no sistema FreeFlow-3D;
- Capítulo 3: apresenta a técnica de discretização e a malha utilizada, assim como as equações na forma discretizada;
- Capítulo 4: descreve brevemente o sistema Freeflow-3D e apresenta as extensões realizadas para implementação dos movimentos;
- Capítulo 5: desenvolve o sistema de equações que modelam o movimento do corpo rígido;
- Capítulo 6: apresenta e discute os resultados numéricos obtidos;
- Finalizando, o Capítulo 7 apresenta as conclusões sobre o trabalho, discutindo as contribuições geradas e possíveis trabalhos futuros.

Capítulo 1

Equações Básicas

Este capítulo introduz as equações que modelam os escoamentos de fluidos com superfícies livres. Inicialmente são apresentados alguns conceitos básicos de mecânica dos fluidos (Fox and McDonald, 1995). Em seguida, são apresentadas as equações de Navier-Stokes e o seu desenvolvimento no sistema cartesiano tridimensional, assim como as equações de contorno na superfície livre e na fronteira rígida.

1.1 Noções Fundamentais

Alguns conceitos são de vital importância para a compreensão do estudo da mecânica dos fluidos. Tais conceitos são definidos a seguir:

Fluido: é uma substância que se deforma continuamente quando submetida a uma tensão de cisalhamento.

Força de cisalhamento: é a componente tangencial da força que age sobre a superfície.

Tensão de cisalhamento: é a força de cisalhamento dividida pela área da superfície.

Tensão de cisalhamento em um ponto: é o valor limite da relação entre a força de cisalhamento e a área quando esta área tende a zero.

Fluido Newtoniano: um fluido é dito newtoniano quando existe uma relação linear entre o valor da tensão de cisalhamento aplicada e a velocidade de deformação resultante. Caso contrário o fluido é denominado **Não-Newtoniano**.

Isaak Newton supôs que a constante de proporcionalidade entre a tensão de cisalhamento

e a taxa de deformação fosse uma propriedade do fluido, a qual ele denominou de viscosidade dinâmica (Fortuna, 2000). A razão da viscosidade dinâmica pela massa específica é denominada de viscosidade cinemática.

1.1.1 Escoamentos de fluidos

Podemos classificar os escoamentos de fluidos de diversas formas, de acordo com o comportamento de suas variáveis tais como: viscosidade, pressão, velocidade e temperatura. Algumas das classificações são apresentadas a seguir:

Escoamentos Transientes: caracterizam-se pela variação em relação ao tempo de pelo menos uma variável: velocidade, temperatura, densidade ou pressão. Caso tal variação não ocorra, o escoamento é denominado **permanente ou estacionário**.

Escoamentos Incompressíveis: são aqueles nos quais a densidade não se altera ao longo do escoamento ou a alteração pode ser desprezada. Ocorrendo alterações consideráveis no valor da densidade o escoamento é denominado **compressível**.

Em relação à natureza do escoamento, podemos classificá-lo de duas formas: laminar e turbulento.

Escoamentos laminares: o fluido escoar sem haver mistura significativa entre as partículas vizinhas do fluido. Pode-se dizer que camadas muito finas de fluido parecem deslizar umas sobre as outras.

Escoamentos turbulentos: consistem em um movimento caótico ou desordenado de modo que as partículas do fluido apresentam uma variação aleatória nas coordenadas temporais e espaciais, de forma contrária ao que ocorre no escoamento laminar.

É possível analisar a natureza de um escoamento e a sua posição relativa numa escala de turbulência através do número de **Reynolds**, Re , que é uma grandeza adimensional muito importante, a qual expressa a razão entre as forças inerciais (devido à velocidade e à densidade) e as forças viscosas em um escoamento:

$$Re = \frac{UL}{\nu},$$

onde L é um comprimento, U a velocidade e ν a viscosidade cinemática.

Nos escoamentos em que a gravidade tem efeito importante como, por exemplo, nos escoamentos

mentos com superfícies livres, temos o número de **Froude**, Fr , que é a razão entre forças inerciais e gravitacionais:

$$Fr = \frac{U}{\sqrt{Lg}},$$

onde g é a gravidade.

1.2 Equações de Navier-Stokes

As equações que modelam os problemas de mecânica dos fluidos são obtidas pela aplicação dos seguintes princípios:

- conservação da quantidade de movimento;
- conservação de massa;
- conservação de energia;
- equações de estado.

No caso particular de escoamentos transientes, laminares e incompressíveis temos as seguintes equações, denominadas equações de Navier-Stokes (Fortuna, 2000):

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \sigma + \rho \mathbf{g} \quad (1.1)$$

equação da quantidade de movimento

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.2)$$

equação da continuidade

onde ρ representa a densidade, $\mathbf{u}$ o vetor velocidade, t o tempo, σ o tensor de tensões e $\mathbf{g}$ a aceleração gravitacional.

As equações constitutivas para escoamentos de fluidos newtonianos são as seguintes:

$$\sigma = -p\mathbf{I} + \tau \quad (1.3)$$

$$\tau = 2\mu d \quad (1.4)$$

$$d = \frac{1}{2} [(\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T], \quad (1.5)$$

onde p , $\mathbf{I}$, τ e d denotam a pressão, o tensor identidade, o tensor extra tensão e o tensor razão de deformação de um fluido, respectivamente.

Substituindo as equações constitutivas na equação da quantidade de movimento (1.1), temos a equação da quantidade de movimento na forma conservativa:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \quad (1.6)$$

As equações apresentadas nesta seção estão na forma vetorial. Porém, para discretizá-las é necessário escolher um sistema de coordenadas adequado. A Seção 1.2.1 apresenta o sistema de coordenadas e o desenvolvimento das equações em tal sistema.

1.2.1 Desenvolvimento das Equações

O sistema de coordenadas utilizado no Freeflow-3D é o sistema cartesiano tridimensional. Dessa forma, obtemos uma equação para cada direção coordenada. Para o desenvolvimento das equações no sistema cartesiano, tem-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= (x, y, z)^T \\ \mathbf{u} &= (u, v, w)^T \\ \mathbf{g} &= (g_x, g_y, g_z)^T \end{aligned}$$

A equação da continuidade (1.2) no sistema de coordenadas tridimensional cartesiano, fica da seguinte forma:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (1.7)$$

Para facilitar o desenvolvendo da equação da quantidade de movimento (1.6), desenvolve-se separadamente cada um de seus termos.

Para o divergente temos:

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = \nabla \cdot \begin{bmatrix} u^2 & uv & uw \\ uv & v^2 & vw \\ uw & vw & w^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} + \frac{\partial uw}{\partial z} \\ \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} + \frac{\partial vw}{\partial z} \\ \frac{\partial uw}{\partial x} + \frac{\partial vw}{\partial y} + \frac{\partial w^2}{\partial z} \end{bmatrix}$$

Para o termo $\nabla^2 \mathbf{u}$, temos:

$$\nabla^2 \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \\ \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \\ \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \end{bmatrix}$$

Assim, obtemos as equações de conservação da quantidade de movimento nas direções x, y e z, respectivamente:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial u^2}{\partial x} - \frac{\partial uv}{\partial y} - \frac{\partial uw}{\partial z} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + g_x \quad (1.8)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial uv}{\partial x} - \frac{\partial v^2}{\partial y} - \frac{\partial vw}{\partial z} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + g_y \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{\partial xw}{\partial x} - \frac{\partial vw}{\partial y} - \frac{\partial w^2}{\partial z} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + g_z \quad (1.10)$$

onde $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ é a viscosidade cinemática.

Para garantir que os erros das aproximações numéricas não dependam do sistema métrico usado, as equações são implementadas na forma adimensional. Considerando que o escoamento caracteriza-se por uma dimensão característica L, uma velocidade característica U e uma viscosidade cinemática ν , as variáveis adimensionais são dadas pelas seguintes transformações:

$$u = U\bar{u}; \quad \mathbf{x} = L\bar{\mathbf{x}}; \quad \nu = \nu_0\bar{\nu}; \quad t = \frac{L}{U}\bar{t}; \quad p = \rho U^2 \bar{p}; \quad \mathbf{g} = g\bar{\mathbf{g}},$$

onde $g = |\mathbf{g}|$.

Substituindo as variáveis adimensionais nas equações (1.8), (1.9) e (1.10) e substituindo o número de Reynolds, $Re = \frac{UL}{\nu}$, e o número de Froude, $Fr = \frac{U}{\sqrt{Lg}}$, obtemos as equações na forma adimensional:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{t}} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{x}} - \frac{\partial \bar{u}^2}{\partial \bar{x}} - \frac{\partial \bar{u}\bar{v}}{\partial \bar{y}} - \frac{\partial \bar{u}\bar{w}}{\partial \bar{z}} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{z}^2} \right) + \frac{g_x}{Fr^2} \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{t}} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{y}} - \frac{\partial \bar{v}\bar{u}}{\partial \bar{x}} - \frac{\partial \bar{v}^2}{\partial \bar{y}} - \frac{\partial \bar{v}\bar{w}}{\partial \bar{z}} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{z}^2} \right) + \frac{\bar{g}_y}{Fr^2} \quad (1.12)$$

$$\frac{\partial \bar{w}}{\partial \bar{t}} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{z}} - \frac{\partial \bar{w}\bar{u}}{\partial \bar{x}} - \frac{\partial \bar{w}\bar{v}}{\partial \bar{y}} - \frac{\partial \bar{w}^2}{\partial \bar{z}} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial \bar{z}^2} \right) + \frac{\bar{g}_z}{Fr^2} \quad (1.13)$$

Para não carregar a notação eliminamos as barras das variáveis, dessa forma temos:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial u^2}{\partial x} - \frac{\partial uv}{\partial y} - \frac{\partial uw}{\partial z} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \frac{g_x}{Fr^2} \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial y} - \frac{\partial vu}{\partial x} - \frac{\partial v^2}{\partial y} - \frac{\partial vw}{\partial z} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \frac{g_y}{Fr^2} \quad (1.15)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\partial wu}{\partial x} - \frac{\partial wv}{\partial y} - \frac{\partial w^2}{\partial z} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + \frac{g_z}{Fr^2} \quad (1.16)$$

1.3 Condições de fronteira na superfície livre

As condições de fronteira na superfície livre, exigem que as tensões normais e tangenciais se anulem. Para isso, é preciso impor condições sobre a velocidade e a pressão.

Considerando um vetor unitário $n = (n_x, n_y, n_z)$ externo a superfície e $m_1 = (m_{1x}, m_{1y}, m_{1z})$, $m_2 = (m_{2x}, m_{2y}, m_{2z})$ vetores tangentes a superfície livre, as condições de fronteira impõem que:

$$n \cdot \sigma \cdot n = 0 \quad (1.17)$$

$$m_1 \cdot \sigma \cdot n = 0 \quad (1.18)$$

$$m_2 \cdot \sigma \cdot n = 0 \quad (1.19)$$

onde $\sigma = -pI + \tau$ tensor de tensões e $\tau = \mu[(\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T]$.

No sistema cartesiano tridimensional temos:

$$\begin{aligned} \sigma &= \begin{bmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{bmatrix} + \mu \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} & 2\frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} & 2\frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -p + 2\mu\frac{\partial u}{\partial x} & \mu(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}) & \mu(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}) \\ \mu(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) & -p + 2\mu\frac{\partial v}{\partial y} & \mu(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}) \\ \mu(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}) & \mu(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}) & -p + 2\mu\frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Portanto a equação (1.17) no sistema cartesiano tridimensional é escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
n \cdot \sigma \cdot n = & (-p + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x})n_x^2 + 2\mu(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x})n_x n_y + 2\mu(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x})n_x n_z + \\
& (-p + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y})n_y^2 + 2\mu(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y})n_y n_z + (-p + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z})n_z^2 \\
= & -p(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) + 2\mu[\frac{\partial u}{\partial x}n_x^2 + \frac{\partial v}{\partial y}n_y^2 + \frac{\partial w}{\partial z}n_z^2 + \\
& (\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x})n_x n_y + (\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x})n_x n_z + (\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y})n_y n_z]
\end{aligned} \tag{1.20}$$

como n é unitário temos que $(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = 1$, portanto:

$$\begin{aligned}
p = & 2\mu[\frac{\partial u}{\partial x}n_x^2 + \frac{\partial v}{\partial y}n_y^2 + \frac{\partial w}{\partial z}n_z^2 + \\
& (\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x})n_x n_y + (\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x})n_x n_z + (\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y})n_y n_z]
\end{aligned} \tag{1.21}$$

De forma análoga, para a equação (1.18), temos:

$$\begin{aligned}
m_1 \cdot \sigma \cdot n = & -p(n_x m_{1x} + n_y m_{1y} + n_z m_{1z}) + 2\mu[\frac{\partial u}{\partial x}n_x m_{1x} + \frac{\partial v}{\partial y}n_y m_{1y} + \\
& \frac{\partial w}{\partial z}n_z m_{1z}] + \mu(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x})(n_x m_{1y} + n_y m_{1x}) + \\
& \mu(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x})(n_x m_{1z} + n_z m_{1x}) + \mu(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y})(n_y m_{1z} + n_z m_{1y})
\end{aligned} \tag{1.22}$$

como n e m_1 são ortogonais, então $n \cdot m_1 = 0$, portanto:

$$\begin{aligned}
2[\frac{\partial u}{\partial x}n_x m_{1x} + \frac{\partial v}{\partial y}n_y m_{1y} + \frac{\partial w}{\partial z}n_z m_{1z}] + (\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x})(n_x m_{1y} + n_y m_{1x}) + \\
(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x})(n_x m_{1z} + n_z m_{1x}) + (\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y})(n_y m_{1z} + n_z m_{1y}) = 0
\end{aligned} \tag{1.23}$$

Analogamente, para a equação (1.19) temos:

$$\begin{aligned}
2[\frac{\partial u}{\partial x}n_x m_{2x} + \frac{\partial v}{\partial y}n_y m_{2y} + \frac{\partial w}{\partial z}n_z m_{2z}] + (\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x})(n_x m_{2y} + n_y m_{2x}) + \\
(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x})(n_x m_{2z} + n_z m_{2x}) + (\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y})(n_y m_{2z} + n_z m_{2y}) = 0
\end{aligned} \tag{1.24}$$

1.4 Condições de fronteira no contorno rígido

Esta seção apresenta dois tipos de condições para calcular as velocidades no contorno rígido.

Sem escorregamento: quando o fluido imediatamente adjacente a parede permanece em repouso em relação a mesma. Neste caso, define-se as componentes da velocidade da seguinte forma:

$$- u_n = v_{bn}$$

$$- u_t = v_{bt}$$

onde u_n é a componente normal da velocidade, u_t a componente tangencial, v_{bn} a velocidade normal na fronteira do corpo rígido e v_{bt} a velocidade tangencial na fronteira do corpo rígido.

Condição de simetria ou com escorregamento: utilizada quando existe uma fronteira de simetria, ou quando a condição anterior não é satisfeita. Neste caso, defini-se as componentes da velocidade por:

$$- u_n = 0$$

$$- \frac{\partial u_t}{\partial n} = 0$$

onde u_n é a componente normal da velocidade, u_t a componente tangencial e n a direção normal à fronteira rígida.

Este capítulo apresentou as equações e as condições de contorno que modelam os escoamentos de fluidos com superfícies livres. O capítulo 2, apresenta o método numérico utilizado para resolução dessas equações.

Capítulo 2

Método Numérico

O método MAC (Marker-And-Cell) (Amsden and Harlow, 1970) constituiu a primeira tentativa de simular escoamentos viscosos, transientes e incompressíveis com superfícies livres. A característica principal desse método é a utilização de partículas marcadoras para a construção da superfície livre. Essa técnica foi mais tarde melhorada graças às alterações no cálculo da pressão na superfície livre e também ao desenvolvimento de métodos mais precisos para a construção da referida superfície.

Variantes melhoradas do método MAC incluem os métodos: SMAC, SUMMAC, GENSMAC, entre outros. O sistema Freeflow-3D utiliza o método GENSMAC (Generalized-Simplified-Marker-and-Cell) (Tomé and McKee, 1994) (Tomé et al., 2001), cujas principais características são o uso de partículas marcadoras cujas trajetórias seguem o movimento do fluido e o ciclo de cálculo dividido em duas partes, uma para o cálculo do campo de velocidade e outra para o cálculo do campo de pressão.

2.1 Algoritmo Computacional

O procedimento descrito a seguir é baseado no método GENSMAC e calcula o campo de velocidade e o campo de pressão.

Considere um campo de velocidade $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0)$ em um instante t_0 e as condições de fronteira para a velocidade e pressão. O campo de velocidades atualizado $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, onde $t = t_0 + \delta t$, é calculado seguindo os passos descritos a seguir:

Passo 1 - Considera-se $\tilde{p}(\mathbf{x}, t_0)$ um campo de pressão que satisfaça a condição de tensão normal correta na superfície livre em $t = t_0$.

Passo 2 Calcula-se a velocidade em todas as células do contorno rígido.

Passo 3 - Calcula-se um campo de velocidade intermediário, $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$, por:

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} = -\nabla \tilde{p} + N(\mathbf{u}) \quad (2.1)$$

onde

$$N(\mathbf{u}) = -\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) + \frac{1}{Re}[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}$$

considerando $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_0) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0)$ e utilizando a condição de fronteira para $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0)$.

A equação (2.1) é resolvida através do método de Euler explícito.

Subtraindo a equação 2.1 de

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla p + N(\mathbf{u})$$

tem-se:

$$\frac{\partial (\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}})}{\partial t} = -\nabla (p - \tilde{p}). \quad (2.2)$$

Aplicando o produto vetorial $\nabla \times$ a ambos os lados da equação (2.2), é possível escrever da seguinte forma:

$$\nabla \times \left[\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}) \right] = 0.$$

Reescrevendo a equação temos que:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\nabla \times (\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}})] = 0,$$

implicando em

$$\nabla \times (\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}) = f(\mathbf{x})$$

para alguma $f(\mathbf{x})$ com $t \in [t_0, t_0 + \delta t]$.

Sendo $\mathbf{u} = \tilde{\mathbf{u}}$ em $t = t_0$, então

$$\nabla \times \mathbf{u} = \nabla \times \tilde{\mathbf{u}} \quad \text{em} \quad t = t_0 \Rightarrow f(\mathbf{x}) = 0.$$

Com isso, segue que

$$\nabla \times (\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}) = 0,$$

para $\forall t \in [t_0, t_0 + \delta t]$. Assim, as “vorticidades” associadas com $\mathbf{u}$ e $\tilde{\mathbf{u}}$ são iguais. Entretanto, $\tilde{\mathbf{u}}$ não satisfaz $\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = 0$. Logo, existe uma função escalar $\psi(\mathbf{x}, t)$ tal que

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = -\nabla\psi(\mathbf{x}, t), \quad (2.3)$$

Aplicando o divergente em ambos os lados, tem-se

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)) = \nabla \cdot (-\nabla\psi(\mathbf{x}, t))$$

e aplicando a equação de continuidade obtém-se a equação de Poisson para a função ψ :

$$\nabla^2\psi(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t). \quad (2.4)$$

Passo 4 - As condições de fronteira para ψ são:

- Condição homogênea de Newmann

$$\frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{n}} = 0, \quad \text{sobre a fronteira rígida;}$$

- Condição homogênea de Dirichlet

$$\psi = 0, \quad \text{sobre a superfície livre}$$

onde $\mathbf{n}$ é a direção normal ao contorno rígido. A equação de Poisson discretizada gera um sistema linear simétrico e esparsa que é resolvido pelo método dos gradientes conjugados, para obter o potencial de velocidade ψ .

De (2.3) obtém-se o campo de velocidade atualizado:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) - \nabla\psi(\mathbf{x}, t).$$

Passo 5 - Cálculo da pressão.

Substituindo (2.3) em (2.2), obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t}(-\nabla\psi(\mathbf{x}, t)) = -\nabla(p - \tilde{p}),$$

comutando os operadores

$$-\nabla \left(\frac{\partial\psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \right) = -\nabla(p - \tilde{p}),$$

e assim

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t) = p - \tilde{p} + C.$$

Devido as condições de fronteira para ψ , descritas no passo 4, temos que a constante $C = 0$.

Dessa forma, a equação pode ser aproximada por,

$$\frac{\psi(\mathbf{x}, t) - \psi(\mathbf{x}, t_0)}{\delta t} \cong p - \tilde{p}. \quad (2.5)$$

Mas para $t = t_0 \Rightarrow \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0) = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_0)$, donde obtém-se:

$$\nabla\psi(\mathbf{x}, t_0) = 0.$$

Portanto, $\psi(\mathbf{x}, t_0)$ é constante.

Logo,

$$p \cong \tilde{p} + \frac{\psi(x, t) - \psi(x, t_0)}{\delta t}, \quad (2.6)$$

onde δt é o passo no tempo. Assim, o método resolve de forma explícita as equações de quantidade de movimento.

Passo 6 - Atualização da posição e da velocidade no contorno rígido, simulando o movimento do corpo rígido.

Passo 7 - Atualização das posições das partículas.

O último passo trata o movimento das partículas marcadoras para sua nova posição.

Para a representação do fluido, essas partículas são criadas nos injetores e injetadas em todo o domínio, permitindo assim, uma visualização do escoamento e a obtenção da orientação da superfície livre.

As coordenadas das partículas virtuais são armazenadas a cada ciclo de cálculo e então atualizadas, resolvendo-se

$$\frac{dx}{dt} = u, \quad \frac{dy}{dt} = v \quad \text{e} \quad \frac{dz}{dt} = w \quad (2.7)$$

pelo método de Euler. Dessa forma, obtém-se as novas coordenadas da partícula, que determinam se uma partícula se move para dentro de uma nova célula ou deixa a região de domínio do fluido através de um ejetor. Para utilizar o método numérico descrito nesta seção é necessário discretizar as equações e o domínio. O capítulo 3 apresenta o método de discretização das equações e a malha utilizada para discretizar o domínio.

Capítulo 3

Discretização

No sistema FreeFlow-3D o método de diferenças finitas é utilizado para a discretização das equações envolvidas. Dessa forma, o domínio é discretizado em uma malha tridimensional estruturada, permitindo a localização de cada termo por uma sequência de índices ordenados.

Quanto a localização das variáveis, utiliza-se uma malha diferenciada, ou deslocada, na qual a pressão, a densidade e a função potencial localizam-se no centro da célula, e as velocidades são calculadas no centro das faces, conforme ilustra a Figura 3.1.

Figura 3.1: Célula computacional

A malha diferenciada impede o aparecimento de oscilações no cálculo da velocidade e pressão.

Além disso, permite também a simplificação das condições de contorno, pois torna desnecessária a condição de fronteira para a pressão.

3.1 Classificação das Células

Para uma melhor identificação do domínio e da região que contém fluido, é necessário adotar um sistema de classificação das células da malha. Para tanto, classifica-se todas as células da malha da seguinte forma:

- **I (células de injeção)**: simulam a entrada do fluido na região do domínio;
- **F (células de fronteira)**: definem o contorno rígido;
- **V (células vazias)**: não contém fluido;
- **S (células de superfície)**: contém fluido, mas possuem pelo menos uma face em contato com células vazias;
- **C (células cheias)**: contém fluido e não têm contato com célula vazias ;
- **E (células de ejeção)**: simulam a saída do fluido da região de domínio.

A classificação das células é baseada nas suas características funcionais, conforme ilustra a Figura 3.2.

Figura 3.2: Classificação das células

3.2 O Método das Diferenças Finitas

Este método é usado para transformar equações diferenciais em equações algébricas, aproximando as derivadas de uma função por diferenças entre os valores conhecidos da função. Uma forma de se obter tais aproximações é expandindo a função em série de Taylor em torno dos pontos envolvidos na aproximação, e isolando-se a derivada que se deseja aproximar.

Apresentaremos a seguir apenas as derivadas que serão utilizadas para aproximar as equações envolvidas na modelagem do problema de simulação de escoamentos com superfícies livres e obstáculos em movimento.

Seja f uma função escalar definida na reta R , e o domínio discretizado por meio de malha com espaçamento Δx . Utiliza-se três formas de aproximação para $\frac{df}{dx}$:

- Diferença progressiva:

$$\frac{df}{dx} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

- Diferença regressiva:

$$\frac{df}{dx} = \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

- Diferença central:

$$\frac{df}{dx} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

Utiliza-se apenas a diferença central para as derivadas de segunda ordem:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{f(x - \Delta x) + 2f(x) + f(x + \Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

onde, $O(\Delta x)$ é o erro de truncamento da série de Taylor de primeira ordem e $O(\Delta x^2)$ é o erro de truncamento de segunda ordem.

3.3 Discretização das equações de conservação da quantidade de movimento

Esta seção apresenta a discretização da equação da quantidade de movimento apenas na direção x . Para as demais direções o procedimento é análogo. De modo a facilitar o procedimento, consideremos a equação da quantidade de movimento adimensional na direção x , escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x} - C(\mathbf{u}) - \frac{1}{Re}V(\mathbf{u}) + \frac{g_x}{Fr^2} \quad (3.1)$$

onde $C(\mathbf{u})$ corresponde aos termos convectivos:

$$C(\mathbf{u}) = \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} + \frac{\partial uw}{\partial z} \quad (3.2)$$

e $V(\mathbf{u})$ aos termos viscosos:

$$V(\mathbf{u}) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \quad (3.3)$$

Dessa forma, a discretização da equação (3.1) será feita termo a termo, conforme a técnica de diferenças finitas descrita na Seção 3.2, no ponto $(i + \frac{1}{2}, j, k)$, sendo desprezados os erros de truncamento. A Figura 3.3, mostra o esquema de células e a posição das variáveis utilizadas nas aproximações das derivas no ponto $(i + \frac{1}{2}, j, k)$.

Figura 3.3: Esquema de células

Utiliza-se diferença progressiva de primeira ordem para discretizar a derivada temporal:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} - u_{i+\frac{1}{2},j,k}^n}{\Delta t}$$

Para todos os outros termos da equação a discretização será feita no tempo n , caracterizando uma discretização explícita. Com a finalidade de simplificar a notação o índice n será omitido das equações.

O gradiente da pressão é discretizado por diferença central:

$$\frac{\partial p}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{p_{i+1,j,k} - p_{i,j,k}}{\Delta x}$$

A escolha inadequada da distretização dos termos convectivos pode causar instabilidade numérica e soluções oscilatórias, dependendo dos parâmetros do escoamento. Dessa forma, várias técnicas vem sendo estudadas para se obter uma melhor estabilidade do método numérico, tais como *First Order Upwind*(FOU), *Hybrid Linear Parabolic Aproximation*(HLP), *Variable Order Non-Oscilatory Schema*(VONOS), entre outras. Um estudo detalhado sobre a estabilidade e robustez desses métodos pode ser visto em (Ferreira, 2001) (Sousa, 2002). Para aplicar as técnicas mencionadas, as derivadas dos termos convectivos (3.2) são aproximadas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u^2}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} &= \frac{\hat{u}_{i+1,j,k} u_{i+1,j,k} - \hat{u}_{i,j,k} u_{i,j,k}}{\Delta x} \\ \frac{\partial vu}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} &= \frac{\hat{v}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} - \hat{v}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k} u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y} \\ \frac{\partial wu}{\partial z} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} &= \frac{\hat{w}_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} - \hat{w}_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z} \end{aligned}$$

onde as velocidades $\hat{u}$, $\hat{v}$ e $\hat{w}$ são calculadas pelas médias das velocidades nas células vizinhas.

Utiliza-se diferença central de segunda ordem para os termos viscosos $V(\mathbf{u})$, assim temos:

$$\begin{aligned} V(\mathbf{u}) \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} &= \frac{u_{i-\frac{1}{2},j,k} - 2u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i+\frac{3}{2},j,k}}{\Delta x^2} + \\ &\quad \frac{u_{i+\frac{1}{2},j-1,k} - 2u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i+\frac{1}{2},j+1,k}}{\Delta y^2} + \\ &\quad \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k-1} - 2u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i+\frac{1}{2},j,k+1}}{\Delta z^2} \end{aligned}$$

3.4 Condições de contorno na superfície livre

Considere as equações de contorno na superfície livre (1.21), (1.23) e (1.24) desenvolvidas na Seção 1.3, na forma adimensional:

$$p = \frac{2\mu}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial x} n_x^2 + \frac{\partial v}{\partial y} n_y^2 + \frac{\partial w}{\partial z} n_z^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_x n_y + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) n_x n_z + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) n_y n_z \right) \quad (3.4)$$

$$2 \left[\frac{\partial u}{\partial x} n_x m_{1x} + \frac{\partial v}{\partial y} n_y m_{1y} + \frac{\partial w}{\partial z} n_z m_{1z} \right] + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (n_x m_{1y} + n_y m_{1x}) + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) (n_x m_{1z} + n_z m_{1x}) + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) (n_y m_{1z} + n_z m_{1y}) = 0 \quad (3.5)$$

$$2 \left[\frac{\partial u}{\partial x} n_x m_{2x} + \frac{\partial v}{\partial y} n_y m_{2y} + \frac{\partial w}{\partial z} n_z m_{2z} \right] + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (n_x m_{2y} + n_y m_{2x}) + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) (n_x m_{2z} + n_z m_{2x}) + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) (n_y m_{2z} + n_z m_{2y}) = 0 \quad (3.6)$$

Para discretizar as equações de contorno na superfície livre deve-se considerar uma malha uniforme e supor um espaçamento suficientemente pequeno, de modo que localmente a superfície livre seja aproximada por um plano. Esse plano pode assumir três posições: paralelo aos eixos coordenados, formando um ângulo de 45° com dois eixos, ou formando um ângulo de 60° com os três eixos coordenados. Esses casos podem ser identificados por células de superfície (S) contendo uma, duas ou três faces adjacentes a uma célula vazia (V).

Cada um desses casos possuem algumas variações referentes as direções que os vetores podem assumir, isto é, para cada caso a face adjacente à célula vazia pode estar em posições diferentes. No primeiro caso, podemos considerar uma célula de superfície com somente a face $(i + \frac{1}{2}, j, k)$ adjacente a uma célula vazia, conforme ilustra a Figura 3.4. Dessa forma, o vetor normal e os vetores tangentes assumem as seguintes direções:

$$\mathbf{n} = (1, 0, 0), \quad \mathbf{m}_1 = (0, 1, 0) \quad e \quad \mathbf{m}_2 = (0, 0, 1)$$

Deste modo, as equações (3.4)-(3.6) ficam da seguinte forma:

$$p = \frac{2\mu}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (3.7)$$

Figura 3.4: Célula (S) com uma única face adjacente à célula (V)

$$\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} = 0 \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \quad (3.9)$$

Considerando agora uma célula de superfície em contato com duas células vazias, a superfície pode ser aproximada por um plano que faz um ângulo de 45° com os eixos das faces adjacentes, como ilustra a Figura 3.5. Assim, os vetores normal e tangenciais podem assumir as seguintes direções:

$$\mathbf{n} = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, 0, \frac{\sqrt{2}}{2} \right), \quad \mathbf{m}_1 = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, 0, -\frac{\sqrt{2}}{2} \right) \quad e \quad \mathbf{m}_2 = (0, 1, 0)$$

Neste caso, as equações ficam:

$$p = \frac{\mu}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (3.11)$$

Figura 3.5: Célula (S) com duas faces adjacentes às células (V)

Outras configurações de célula de superfície (S) tendo duas faces adjacentes a células vazias (V) são tratadas analogamente.

Um exemplo de célula de superfície com três faces adjacentes às células vazias, ilustrado na Figura 3.6, é dado pelos seguintes vetores:

$$\mathbf{n} = \left(\frac{\sqrt{3}}{3}, -\frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3} \right), \quad \mathbf{m}_1 = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, 0, -\frac{\sqrt{2}}{2} \right) \quad e \quad \mathbf{m}_2 = \left(\frac{\sqrt{6}}{6}, -\frac{2\sqrt{6}}{6}, \frac{\sqrt{6}}{6} \right)$$

Assim, as equações de contorno ficam da seguinte forma:

$$p = \frac{2\mu}{Re} \left[- \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) - \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] \quad (3.12)$$

$$2 \frac{\partial u}{\partial x} - 2 \frac{\partial w}{\partial z} - \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) = 0 \quad (3.13)$$

$$2 \frac{\partial u}{\partial x} - 4 \frac{\partial v}{\partial y} + 2 \frac{\partial w}{\partial z} + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + 2 \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0 \quad (3.14)$$

Figura 3.6: Célula (S) com três faces adjacentes às células (V)

Podem ocorrer alguns casos chamados degenerados, onde duas faces opostas da célula (S) são adjacentes às células (V). Uma descrição detalhada de cada caso pode ser encontrada em (Tomé et al., 1996).

3.5 Condições de contorno na fronteira rígida

O método utilizado para o cálculo das velocidades u , v e w nas faces das células de fronteira é a interpolação linear. Essas células podem ter um, dois ou três lados adjacentes às células de superfície ou células cheias. Uma descrição detalhada de todas as combinações de células de fronteira com células de superfície ou cheias para o cálculo das condições de contorno na forma tridimensional encontra-se disponível em (Tomé et al., 1996).

Um caso particular é desenvolvido, para exemplificar a aplicação do método de interpolação linear no cálculo das condições de contorno. Considere uma célula de fronteira (F) com a face $(i + \frac{1}{2})$ em contato com uma célula cheia (C) ou de superfície (S), conforme ilustra a Figura 3.7.

Figura 3.7: Célula (F) com face $(i + 1/2)$ adjacente à célula (C) ou (S)

Para calcular a velocidade u na face $(i + \frac{1}{2})$ utiliza-se a velocidade da fronteira u_b na direção x e a velocidade na face $(i + \frac{3}{2})$ que são conhecidas. Dessa forma, considera-se os pontos $P_0 = (x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_k)$, $P_1 = (x_{i+\frac{3}{2}}, y_j, z_k)$ e $P_b = (x_{ub}, y_j, z_k)$, onde x_{ub} é dado pela interseção da reta definida por P_0 e P_1 e a superfície da fronteira.

Utilizando a fórmula de interpolação linear entre os pontos P_0 e P_1 , temos:

$$u(x) = \frac{x - x_{i+\frac{3}{2}}}{x_{ub} - x_{i+\frac{3}{2}}} u_b + \frac{x - x_{ub}}{x_{i+\frac{3}{2}} - x_{ub}} u_{i+\frac{3}{2},j,k} \quad (3.15)$$

Assim $u_{i+\frac{1}{2},j,k}$ pode ser calculado da seguinte forma:

$$u_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{ub}}{x_{i+\frac{3}{2}} - x_{ub}} u_{i+\frac{3}{2},j,k} - \frac{\delta x}{x_{ub} - x_{i+\frac{3}{2}}} u_b \quad (3.16)$$

Analogamente, para as velocidades v e w temos:

$$v_{i,j+\frac{1}{2},k} = \frac{x_i - x_{ub}}{x_{i+1} - x_{ub}} v_{i+1,j+\frac{1}{2},k} - \frac{\delta x}{x_{ub} - x_{i+1}} v_b \quad (3.17)$$

$$w_{i,j,k+\frac{1}{2}} = \frac{x_i - x_{wb}}{x_{i+1} - x_{wb}} w_{i+1,j,k+\frac{1}{2}} - \frac{\delta x}{x_{wb} - x_{i+1}} w_b \quad (3.18)$$

onde x_{vb} e x_{wb} são dados pela interseção dos planos $y = y_{j+\frac{1}{2}}$, $z = z_k$ com a fronteira local e $y = y_j$, $z = z_{k+\frac{1}{2}}$ com a fronteira local respectivamente e v_b e w_b são as velocidades nas fronteiras nas direções y e z respectivamente.

Essa técnica é utilizada em toda a fronteira rígida. Porém, esse trabalho apresenta um

diferencial, que é o movimento de corpos rígidos representado pelo movimento da fronteira rígida. Dessa forma, a posição da fronteira e as velocidades u_b , v_b e w_b na fronteira nas direções x, y e z respectivamente, são atualizadas a cada passo de tempo pelas equações do movimento (5.1) e (5.2) descritas no Capítulo 5.

3.6 Controle do Passo no Tempo

Como foi utilizada a discretização explícita nas equações governantes, é necessário impor algumas restrições sobre o passo de tempo Δt , para que o método numérico seja estável.

A primeira restrição refere-se ao movimento das partículas, sendo assim dado um intervalo de tempo, nenhuma partícula poderá atravessar mais de uma célula, isto é,

$$|u|\Delta t < \Delta x \quad , \quad |v|\Delta t < \Delta y, \quad \text{e} \quad |w|\Delta t < \Delta z.$$

onde Δx , Δy e Δz são os espaçamentos da malha e Δt é o passo dado no tempo.

Condição suficiente para satisfazer a restrição anterior:

$$\max|u|\Delta t < \Delta x \quad , \quad \max|v|\Delta t < \Delta y, \quad \text{e} \quad \max|w|\Delta t < \Delta z$$

A segunda restrição de estabilidade envolve a viscosidade e o número de Reynolds (Tomé et al., 1996):

$$2\nu\Delta t < Re \frac{\Delta x^2 \Delta y^2 \Delta z^2}{\Delta x^2 \Delta y^2 + \Delta x^2 \Delta z^2 + \Delta y^2 \Delta z^2}.$$

Condição suficiente para que a restrição acima seja satisfeita:

$$2\max|\nu|\Delta t < Re \frac{\Delta x^2 \Delta y^2 \Delta z^2}{\Delta x^2 \Delta y^2 + \Delta x^2 \Delta z^2 + \Delta y^2 \Delta z^2}.$$

onde $\max|u|$, $\max|v|$ e $\max|w|$ é a maior velocidade calculada durante a simulação, isto é, a máxima velocidade em módulo entre a velocidade do fluido e do corpo rígido.

3.7 O Movimento das Partículas

O fluido é representado por partículas virtuais, as quais indicam a posição das interfaces e da superfície livre. A cada passo de tempo, as partículas são atualizadas gerando, assim, a dinâmica do movimento do fluido. Para isso, integra-se as equações dadas por:

$$\frac{dx}{dt} = u \quad , \quad \frac{dy}{dt} = v \quad \text{e} \quad \frac{dz}{dt} = w$$

Utilizando o Método de Euler obtém-se:

$$x_p^{n+1} = x_p^n + u_p \Delta t^{n+1}$$

$$y_p^{n+1} = y_p^n + v_p \Delta t^{n+1}$$

$$z_p^{n+1} = z_p^n + w_p \Delta t^{n+1}$$

onde (x_p^n, y_p^n, z_p^n) representa a posição atual da partícula, Δt^{n+1} é o passo de tempo corrente e $(x_p^{n+1}, y_p^{n+1}, z_p^{n+1})$ é a posição atualizada. As velocidades u_p , v_p e w_p são calculadas utilizando interpolações lineares, envolvendo as velocidades u , v e w mais próximas.

Capítulo 4

O Freeflow-3D com modelador de movimentos

O sistema Freeflow-3D consiste de um ambiente integrado de modelagem, simulação e visualização de escoamentos tridimensionais com superfícies livres (Castelo et al., 2000). Este ambiente é composto pelos seguintes módulos:

Modflow-3D(Modelador): é responsável por prover uma interface gráfica amigável que facilita a entrada de dados relacionados ao escoamento como, por exemplo, características do fluido, características dos objetos rígidos, presença de injetores, parâmetros da simulação, entre outros.

Simflow-3D(Simulador): consiste de um conjunto de programas cuja finalidade é resolver as equações que modelam o escoamento juntamente com as condições de contorno apropriadas.

Visflow-3D (Visualizador): é responsável pela visualização gráfica dos resultados gerados pelo modelador e simulador.

Resimflow-3D (Reiniciador): permite reinicializar simulações numéricas que eventualmente tenham sido interrompidas. Permite também a alteração de parâmetros relacionados à simulação como, por exemplo, o tempo final de simulação, intervalo de tempo para a impressão de figuras para o visualizador, entre outros.

A comunicação entre os módulos é realizada por meio de arquivos, que são estruturados da seguinte forma:

- o modelador gera oito arquivos de saída, estruturados para que o simulador possa ler;
- o simulador recebe do modelador ou do reiniciador oito arquivos, os quais apresentam a mesma estrutura dos arquivos do modelador, gerando arquivos para três finalidades: arquivos com o final da simulação, para que possa ser possível continuar a simulação a partir desses dados; arquivos que são salvos de tempos em tempos para recuperação de resultados e, por fim, arquivos para visualização dos resultados;
- o visualizador recebe os arquivos gerados no simulador para visualização dos resultados;
- o reiniciador recebe um dos arquivos gerados pelo simulador e gera arquivos para reiniciar a simulação.

4.1 Estrutura de Dados

A estrutura de dados utilizada no Freeflow-3D oferece acesso fácil às informações e possui independência dos dados de forma a simplificar a manutenção e extensão do código.

Os dados no Freeflow-3D podem ser classificados de duas formas: diretos e indiretos.

O conjunto dos dados diretos contém dados referentes ao domínio, velocidade, pressão, células, parâmetros usados pelo simulador e a representação dos objetos geométricos do modelo. Esse conjunto é subdividido em dados estáticos e dinâmicos.

– Os dados **estáticos** não são modificados durante a simulação e compreendem a definição do domínio, a discretização, parâmetros de adimensionalização e algumas propriedades do escoamento e do fluido, tais como a viscosidade e o campo de gravidade, entre outros.

– Os dados **dinâmicos** são os que se modificam durante a simulação e englobam a velocidade e a pressão, a configuração do conjunto de células e a representação dos objetos geométricos.

A estrutura de dados empregada para representar a classe de dados indiretos foi constituída com base em três aspectos principais: a representação dos objetos geométricos por suas fronteiras, o desempenho dos algoritmos envolvidos no simulador e a minimização da interdependência dos dados.

Os dados indiretos consistem de três estruturas (Oliveira, 1999):

– Containers: representam os contêineres e são compostas por tipos de condições de contorno, informações armazenadas em árvore sobre as células que definem esse contêiner e atributos

específicos do contêiner representado;

- Inflows: representam os injetores, características do injetor, informações sobre os contêineres e o fluido relacionado a esse injetor, uma árvore que armazena informações sobre as células que o definem e atributos específicos;

- Outflows: representam os ejetores, tipos de condições de contorno, informações sobre o contêiner que o contém, uma árvore que armazena informações sobre as células que definem esse ejetor e atributos específicos.

Todas as células são representadas por matrizes e cada grupo de células I, F, S, C e E é representado por uma estrutura de dados do tipo árvore, contendo informações e configurações sobre essas células.

Os dados, como velocidade e pressão, são representados por matrizes. A representação por matrizes é eficiente para acessar as vizinhanças de uma célula, enquanto a representação por árvore é eficiente para acessar qualquer célula de um determinado tipo. O tipo de estrutura de dados escolhida para representação dos objetos geométricos foi B-Rep (*Boundary Representation*), que representa faces, arestas, vértices e suas relações topológicas. A estrutura de dados escolhida é denominada “*half-edge*”.

A inserção e a eliminação de dados na estrutura “*half-edge*” são feitas através de operadores de Euler, os quais garantem a consistência topológica do objeto representado. Entre outros tipos de representação de sólidos, a representação B-Rep foi escolhida devido a sua eficiência para representar e modificar localmente a fronteira dos objetos.

Para o desenvolvimento desse trabalho, foram realizadas extensões nos módulos Simflow-3D e Modflow-3D. Tais extensões estão descritas nas Seções 4.2 e 4.3.

4.2 O módulo Modflow-3D com modelador de movimentos

O módulo Modflow-3D com modelador de movimentos, possibilita a modelagem de problemas envolvendo escoamentos de fluidos com corpos rígidos em movimento, como por exemplo um contêiner com fluido em uma esteira em movimento, contêiner com fluido em rotação,

entre outros.

Trabalho precursor, desenvolvido por Paiva (2000), envolveu a implementação de um ambiente de modelagem, simulação e visualização para os movimentos de rotação, harmônico simples e interpolação por splines cúbicas de corpos rígidos. A interface gráfica amigável permite a escolha do corpo rígido e suas características como posição inicial, dimensões, tipo de movimento, variáveis referentes ao movimento, entre outras.

Os movimentos desenvolvidos inicialmente são movimentos pré-definidos, isto é, o usuário define a posição inicial, o tempo de simulação, a trajetória, o ângulo de rotação, especificando assim o tipo de movimento que o corpo deverá descrever durante a simulação.

Com o objetivo de expandir a aplicabilidade do sistema Freeflow-3D, este trabalho implementa dois novos tipos de movimento. Sendo assim, foram desenvolvidas extensões na interface gráfica do Modflow-3D, para entrada de dados referentes aos novos movimentos implementados. Conforme ilustram as Figuras 4.1 e 4.2, os novos movimentos são: movimento definido por interpolação linear por partes representado pelo botão “LINEAR” e movimento definido por forças representado pelo botão “FORCE DEFINED”.

O movimento definido por interpolação linear por partes é um movimento pré-definido pelo usuário, isto é, o usuário determina os pontos da trajetória e os ângulos de rotação que o objeto deverá descrever durante a simulação. Dessa forma, selecionando a opção “LINEAR”, uma nova janela é aberta para que o usuário entre com os dados referentes ao seu modelo, conforme ilustra a Figura 4.1.

No movimento definido por forças, o objeto poderá descrever um movimento de translação ou de rotação de acordo com as condições de força, isto é, o movimento será definido em função da força da gravidade, da intensidade e da direção que aplica-se a aceleração inicial, e também em função das condições do fluido. Assim, ao selecionar a opção “FORCE DEFINED”, uma nova janela é aberta para entrada dos dados utilizados nesse movimento, conforme ilustra a Figura 4.2. Tais dados são: massa, aceleração inicial, os ângulos que definem a direção de atuação da aceleração e o tempo de simulação.

Figura 4.1: Interface Gráfica.

Figura 4.2: Interface Gráfica.

4.3 O módulo Simflow-3D com modelador de movimentos

O Simflow-3D é um módulo de grande importância para o sistema FreeFlow-3D, pois é o responsável pela resolução das equações de Navier-Stokes, juntamente com as condições de

contorno apropriadas.

As condições de contorno são fundamentais no cálculo das equações diferenciais parciais, pois o comportamento físico da solução depende de tais condições. Dessa forma, o comportamento do corpo rígido é transmitido para o fluido.

Com a finalidade de estender a aplicabilidade do sistema Freeflow-3D tornando-o capaz de simular problemas mais próximos ao modelos experimentais, foram implementados dois novos tipos de movimentos, no movimento definido por interpolação linear por partes a posição e a velocidade no contorno rígido são atualizadas pelas equações descritas na Seção 5.1.2 para que o comportamento físico do movimento seja transmitido para o fluido.

No movimento definido por forças a posição e a velocidade do corpo rígido são atualizadas para que o comportamento físico do corpo rígido seja transmitido para o fluido. Além disso, as condições do fluido são consideradas na modelagem das equações que descrevem o movimento do corpo rígido. Dessa forma, fica estabelecida a interação entre corpo rígido e fluido.

A Seção 5.2 apresenta as equações implementadas no Simflow-3D para o movimento definido por forças, assim como a modelagem do sistema de forças.

Capítulo 5

O movimento de corpos rígidos

O movimento de um corpo no espaço pode ser descrito através dos movimentos simultâneos de translação e rotação. Para o desenvolvimento das equações considera-se um ponto P no corpo rígido, e o centro de massa, O . A translação do corpo é descrita pelo movimento de translação do centro de massa e a rotação é descrita em torno do centro de massa, conforme ilustra a Figura 5.1.

Figura 5.1: Movimento de rotação e translação (Trindade and Sampaio, 2001).

Dessa forma, a equação que descreve o movimento de translação juntamente com o movi-

mento de rotação é dada por:

$$x_p(t) = x_0(t) + A(t)X \quad (5.1)$$

onde x_0 é a translação do centro de massa, $A(t)$ é a matriz de rotação e X é o vetor que indica a posição do ponto P.

Para facilitar a modelagem das equações, considera-se o sistema de coordenadas fixo e centrado no centro de massa do corpo rígido. Considera-se também o ponto P como sendo um dos vértices do objeto. Dessa forma, definida a equação do movimento, basta derivar com relação ao tempo para obter a equação da velocidade. Assim temos:

$$\dot{x}_p(t) = \dot{x}_0(t) + \dot{A}(t)X \quad (5.2)$$

O cálculo da translação do centro de massa e o cálculo dos ângulos de rotação serão calculados separadamente. Sendo que a Seção 5.1 apresenta as equações para o movimento de translação do corpo rígido e o cálculo dos ângulos de rotação para o movimento definido por interpolação linear por partes, e a Seção 5.2 para o movimento definido por forças.

Dois conceitos importantes utilizados na modelagem das equações são: o centro de massa e matriz de rotação. O centro de massa será definido na Seção 5.0.1 e a matriz de rotação será definida na Seção 5.1.1 para o movimento linear por partes e na Seção 5.2.1 para o movimento definido por forças.

5.0.1 Definição do centro de massa

Segundo (Sousa, 2002) o centro de massa do corpo rígido, $\mathbf{x} = (x, y, z)$, pode ser calculado utilizando a seguinte fórmula:

$$\mathbf{x}_c = \frac{1}{V} \int \mathbf{x} dv \quad (5.3)$$

e utilizando a seguinte identidade,

$$\nabla(\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}) = 2(\mathbf{x} \cdot \nabla \mathbf{x}) = 2\mathbf{x}$$

podemos escrever a equação (5.3), da seguinte forma:

$$\mathbf{x}_c = \frac{1}{2V} \int \nabla(\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}) dv \quad (5.4)$$

assim, podemos aplicar o teorema da divergência, para obter a integral de superfície:

$$\mathbf{x}_c = \frac{1}{2V} \oint_S (\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{n} ds \quad (5.5)$$

onde V é o volume do corpo rígido, calculado por:

$$V = \int_V dv = \frac{1}{3} \int_V \nabla \cdot \mathbf{x} dv = \frac{1}{3} \oint_S \mathbf{x} \mathbf{n} ds. \quad (5.6)$$

sendo $\mathbf{n}$ o vetor normal a superfície.

5.1 Movimento definido por interpolação linear por partes

Esta seção apresenta as equações para o movimento definido por interpolação linear por partes.

5.1.1 Definição da matriz de rotação

Os ângulos que definem a orientação dos objetos no espaço são θ_1, θ_2 e φ chamados de *ângulos de Euler* em R^3 . Esses ângulos definem o subespaço tridimensional o qual é ortogonal a direção de observação.

As matrizes de rotação para os *ângulos de Euler* são definidas por:

$$\mathbf{R}_{12}^3(\theta_1) = \begin{bmatrix} \cos(\theta_1) & -\sin(\theta_1) & 0 \\ \sin(\theta_1) & \cos(\theta_1) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.7)$$

$$\mathbf{R}_{23}^3(\theta_2) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta_2) & -\sin(\theta_2) \\ 0 & \sin(\theta_2) & \cos(\theta_2) \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

$$\mathbf{R}_{12}^2(\varphi) = \begin{bmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.9)$$

Logo, a matriz de rotação, $A(\theta_1, \theta_2, \varphi)$ é definida pelo produto das três matrizes de rotação dos ângulos de Euler $\mathbf{R}_{12}^3(\theta_1)\mathbf{R}_{23}^3(\theta_2)\mathbf{R}_{12}^2(\varphi)$

$$A(\theta_1, \theta_2, \varphi) = \begin{bmatrix} c(\theta_1)c(\varphi) - s(\theta_1)c(\theta_2)c(\varphi) & -c(\theta_1)s(\varphi) - s(\theta_1)c(\theta_2)c(\varphi) & s(\theta_1)s(\theta_2) \\ s(\theta_1)c(\varphi) + c(\theta_1)c(\theta_2)s(\varphi) & -s(\theta_1)s(\theta_2)s(\varphi) + c(\theta_1)c(\theta_2)s(\varphi) & -c(\theta_1)s(\varphi) \\ s(\theta_2)s(\varphi) & s(\theta_2)c(\varphi) & c(\theta_2) \end{bmatrix}$$

onde $c(\xi)$ e $s(\xi)$ representam o $\cos(\xi)$ e o $\sin(\xi)$, para ξ igual a θ_1 , θ_2 e φ .

5.1.2 Movimento de translação do centro de massa

O movimento de translação do centro de massa é definido por interpolação linear por partes. Para tanto, é definido um conjunto de pontos que descreve a trajetória do objeto, representando uma partição predeterminada do intervalo $[a, b]$, onde pretende-se trabalhar. Desse modo, pode-se representar a sequência de pontos da seguinte forma:

$$((t_0, f(t_0)), (t_1, f(t_1)), \dots, (t_n, f(t_n)))$$

tais que:

$$a = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t < t_n = b$$

onde t_i representa o tempo e $f(t_i)$ representa a coordenada da trajetória que se deseja aproximar. A idéia básica da interpolação linear por partes é a “colagem” de funções lineares em cada subintervalo da partição, definidas da seguinte forma:

$$L_i(t) = \frac{(t - t_i)}{(t_{i-1} - t_i)}f(t_{i-1}) + \frac{(t - t_{i-1})}{(t_i - t_{i-1})}f(t_i) \quad (5.10)$$

Portanto, a atualização do centro de massa $\mathbf{P}_t = (x_t, y_t, z_t)$, é feita pela atualização de cada coordenada pela função linear (5.10). Dessa forma, dados os conjuntos de pontos para cada coordenada, a atualização é realizada da seguinte forma:

$$x(t) = L_x = \frac{(t - t_i)}{(t_{i-1} - t_i)}x(t_{i-1}) + \frac{(t - t_{i-1})}{(t_i - t_{i-1})}x(t_i) \quad (5.11)$$

$$y(t) = L_y = \frac{(t - t_i)}{(t_{i-1} - t_i)} y(t_{i-1}) + \frac{(t - t_{i-1})}{(t_i - t_{i-1})} y(t_i) \quad (5.12)$$

$$z(t) = L_z = \frac{(t - t_i)}{(t_{i-1} - t_i)} z(t_{i-1}) + \frac{(t - t_{i-1})}{(t_i - t_{i-1})} z(t_i) \quad (5.13)$$

Assim, é realizado o movimento de translação do centro de massa, que será utilizado para atualizar a posição do corpo rígido conforme a equação (5.1).

5.1.3 Cálculo dos ângulos de rotação

O cálculo dos ângulos de rotação é feito de forma análoga ao cálculo da posição do centro de massa. Inicialmente é definido um conjunto de pontos $((t_0, \Theta(t_0)), (t_1, \Theta(t_1)), \dots, (t_n, \Theta(t_n)))$, onde t_i representa o tempo e $\Theta(t_i)$ representa o ângulo que o corpo deverá descrever no tempo correspondente.

Como foi definido na Seção 5.1.1, os ângulos de rotação são θ_1 , θ_2 e φ , assim dado o conjunto de ponto para cada ângulo, a atualização é realizada da seguinte forma:

$$\theta_{1n} = L_{\theta_1}(t_n) - L_{\theta_1}(t_{n-1}),$$

$$\theta_{2n} = L_{\theta_2}(t_n) - L_{\theta_2}(t_{n-1}),$$

$$\varphi_n = L_{\varphi}(t_n) - L_{\varphi}(t_{n-1}).$$

onde L é a função de interpolação linear:

$$L_{\Theta}(t) = \frac{(t - t_i)}{(t_{i-1} - t_i)} \Theta(t_{i-1}) + \frac{(t - t_{i-1})}{(t_i - t_{i-1})} \Theta(t_i) \quad (5.14)$$

Dessa forma, obtemos os ângulos de rotação que serão aplicados na matriz de rotação $A(\theta_1, \theta_2, \varphi)$, para atualização dos vértices do corpo rígido, segundo a equação (5.1).

De um modo geral, o movimento obedece as seguintes etapas:

- Dados os pontos para a aproximação de cada coordenada, estes são ordenados de forma crescente pelo método *Quicksort*;

- Durante a simulação calcula-se o polinômio (5.10), para cada coordenada da trajetória a ser aproximada;
- Calcula-se os ângulos de rotação;
- Calcula-se a posição atualizada do objeto de acordo com a equação (5.1);
- E por fim calcula-se a velocidade atualizada do objeto pela equação (5.2).

5.2 Movimento definido por forças

Para facilitar o desenvolvimento das equações do movimento definido por forças do corpo rígido, as equações referentes à translação são descritas na Seção 5.2.4 e as equações referentes à rotação na Seção 5.2.5.

5.2.1 Definição da matriz de rotação

Os ângulos que definem a orientação dos objetos no espaço são θ_{xy} , θ_{xz} e θ_{yz} . Estes ângulos definem a rotação em cada plano ortogonal do espaço tridimensional. Dessa forma, as matrizes de rotação para cada plano ortogonal são definidas da seguinte forma:

$$\mathbf{R}_{xy}(\theta_{xy}) = \begin{bmatrix} \cos(\theta_{xy}) & -\sin(\theta_{xy}) & 0 \\ \sin(\theta_{xy}) & \cos(\theta_{xy}) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

$$\mathbf{R}_{yz}(\theta_{yz}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta_{yz}) & -\sin(\theta_{yz}) \\ 0 & \sin(\theta_{yz}) & \cos(\theta_{yz}) \end{bmatrix} \quad (5.16)$$

$$\mathbf{R}_{xz}(\theta_{xz}) = \begin{bmatrix} \cos(\theta_{xz}) & 0 & -\sin(\theta_{xz}) \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin(\theta_{xz}) & 0 & \cos(\theta_{xz}) \end{bmatrix} \quad (5.17)$$

Logo a matriz de rotação, $\mathbf{A}(\theta_{xy}, \theta_{yz}, \theta_{xz})$ é definida pelo produto das três matrizes de rotação $\mathbf{R}_{xy}(\theta_{xy}) \mathbf{R}_{yz}(\theta_{yz}) \mathbf{R}_{xz}(\theta_{xz})$

$$\begin{bmatrix} c(\theta_{xz})c(\theta_{xy}) - s(\theta_{xz})s(\theta_{xy})s(\theta_{yz}) & -c(\theta_{xz})s(\theta_{xy}) - s(\theta_{xz})s(\theta_{yz})c(\theta_{xy}) & -s(\theta_{xz})c(\theta_{yz}) \\ c(\theta_{yz})s(\theta_{xy}) & c(\theta_{yz})c(\theta_{xy}) & -s(\theta_{yz}) \\ s(\theta_{xz})c(\theta_{xy}) + c(\theta_{xz})s(\theta_{yz})s(\theta_{xy}) & -s(\theta_{xz})s(\theta_{xy}) + c(\theta_{xz})s(\theta_{yz})c(\theta_{xy}) & c(\theta_{xz})c(\theta_{yz}) \end{bmatrix}$$

onde $c(\xi)$ e $s(\xi)$ representam o $\cos(\xi)$ e o $\sin(\xi)$, para ξ igual a θ_{xy} , θ_{yz} e θ_{xz} .

5.2.2 Modelagem do sistema de forças

As forças que compõem o sistema em questão são: força gravitacional (F_g), força externa inicial aplicada ao corpo (F_e) e as forças que o fluido exerce sobre o corpo (F_f), definidas pelas seguintes equações:

$$F_g = mg \quad (5.18)$$

$$F_e = ma \quad (5.19)$$

$$F_f = \oint_S \sigma n \, dA \quad (5.20)$$

onde m representa a massa do corpo, g a gravidade, a a aceleração inicial, $\sigma = -pI + \tau$ o tensor de tensões, n o vetor normal e dA elemento de área.

A força gravitacional e a força inicial são aplicadas no centro de massa, e provocam o movimento de translação do corpo rígido. As forças que o fluido exerce sobre o corpo são aplicadas na superfície, podendo assim provocar simultaneamente os movimentos de translação e rotação.

5.2.3 Desenvolvimento das equações de força no sistema de coordenadas

Força gravitacional no sistema de coordenadas cartesiano tridimensional:

$$F_{gx} = mg_x$$

$$F_{gy} = mg_y$$

$$F_{gz} = mg_z$$

Força inicial decomposta no sistema cartesiano tridimensional:

$$F_{ex} = ma \sin(\beta) \cos(\alpha)$$

$$F_{ey} = ma \sin(\beta) \sin(\alpha)$$

$$F_{ez} = ma \cos(\beta)$$

onde α e β são os ângulos definidos pelo usuário no modelador, que determinam a direção da força inicial.

A força (F_f) que o fluido exerce sobre um elemento de área (dA) é dada por $\sigma \mathbf{n} dA$ e a resultante de forças (RF_f) é obtida integrando-se ao longo da superfície do corpo em contato com o fluido (Pontes, 1999):

$$RF_f = \oint_S \sigma \mathbf{n} dA \quad (5.21)$$

onde σ é dado por:

$$\sigma = \begin{bmatrix} -p + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} & \mu(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}) & \mu(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}) \\ \mu(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}) & -p + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} & \mu(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}) \\ \mu(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}) & \mu(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}) & -p + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix}$$

Desenvolvendo o produto $\sigma \mathbf{n}$, podemos decompor a resultante das forças nas direções x, y e

z, assim temos:

$$RF_{fx} = \oint_S (\sigma_{11}n_1 + \sigma_{12}n_2 + \sigma_{13}n_3) dA \quad (5.22)$$

$$RF_{fy} = \oint_S (\sigma_{21}n_1 + \sigma_{22}n_2 + \sigma_{23}n_3) dA \quad (5.23)$$

$$RF_{fz} = \oint_S (\sigma_{31}n_1 + \sigma_{32}n_2 + \sigma_{33}n_3) dA \quad (5.24)$$

onde σ_{ij} corresponde ao elemento da matriz σ posicionado na linha i e coluna j e n_i são as coordenadas do vetor normal.

Para facilitar os cálculos, aproxima-se a superfície do corpo rígido pela superfície da célula computacional. Dessa forma, o elemento de área é dado pela área da face da célula, e os vetores normais são os vetores normais a face da célula. A Figura 5.2 ilustra os vetores normais no sentido positivo, porém eles também podem assumir o sentido negativo.

Figura 5.2: Vetores normais as faces da célula computacional

Desse modo, para obter a resultante das forças que o fluido exerce sobre o corpo rígido, é necessário percorrer as células do corpo rígido que definem a fronteira rígida (F) e verificar quantas faces dessa célula está em contato com células cheias (C) ou de superfície (S). Uma célula de fronteira pode ter um, dois ou três lados adjacentes a células (C) ou (S), podendo ocorrer vinte e seis casos diferentes.

Assim a integral de superfície é aproximada pelo somatório das forças aplicadas em cada célula computacional. Logo, podemos escrever as equações (5.22), (5.23) e (5.24) da seguinte forma:

$$RF_{fx} = \sum F_{fx} = (\sigma_{11}n_1 + \sigma_{12}n_2 + \sigma_{13}n_3)dA \quad (5.25)$$

$$RF_{fy} = \sum F_{fy} = (\sigma_{21}n_1 + \sigma_{22}n_2 + \sigma_{23}n_3)dA \quad (5.26)$$

$$RF_{fz} = \sum F_{fz} = (\sigma_{31}n_1 + \sigma_{32}n_2 + \sigma_{33}n_3)dA \quad (5.27)$$

onde dA é a área da face da célula computacional em contato com célula de fluido ou célula de superfície. O processo realizado computacionalmente pode ser exemplificado nos seguintes casos:

Considere a célula (i, j, k) de fronteira do corpo rígido e a célula $(i - 1, j, k)$ de fluido ou de superfície, conforme ilustra a Figura 5.3. Neste caso, a face $(i - \frac{1}{2}, j, k)$ representa o elemento

Figura 5.3: Esquema de células para o cálculo de F_{fx}

de superfície do corpo rígido, assim o vetor normal é $n_x = (1, 0, 0)$ e as forças que o fluido exercem nesta face são calculadas da seguinte forma:

$$F_{fx} = (\sigma_{11}1 + \sigma_{12}0 + \sigma_{13}0)dydz = \sigma_{11}dydz$$

$$F_{fy} = (\sigma_{21}1 + \sigma_{22}0 + \sigma_{23}0)dydz = \sigma_{21}dydz$$

$$F_{fz} = (\sigma_{31}1 + \sigma_{32}0 + \sigma_{33}0)dydz = \sigma_{31}dydz$$

assim, temos que:

$$F_{fx} = (-p + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x})dydz$$

$$F_{fy} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) dydz$$

$$F_{fz} = \mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) dydz$$

onde $dydz$ representa a área da face $(i - \frac{1}{2}, j, k)$.

A Figura 5.4, representa um caso onde a célula (i, j, k) é de fronteira do corpo rígido e a célula $(i, j - 1, k)$ pode ser de fluido ou de superfície.

Nessas condições o vetor normal é dado por $n_y = (0, 1, 0)$ e as forças atuando na face

Figura 5.4: Esquema de células para o cálculo de F_{fy}

$(i, j - \frac{1}{2}, k)$ são calculas da seguinte forma:

$$F_{fx} = (\sigma_{11}0 + \sigma_{12}1 + \sigma_{13}0)dx dz = \sigma_{12}dx dz$$

$$F_{fy} = (\sigma_{21}0 + \sigma_{22}1 + \sigma_{23}0)dx dz = \sigma_{22}dx dz$$

$$F_{fz} = (\sigma_{31}0 + \sigma_{32}1 + \sigma_{33}0)dx dz = \sigma_{32}dx dz$$

logo,

$$F_{fx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) dx dz$$

$$F_{fy} = (-p + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y}) dx dz$$

$$F_{fz} = \mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) dx dz$$

onde $dx dz$ é a área da face $(i, j - \frac{1}{2}, k)$.

Considere também o caso em que a célula (i, j, k) é de fronteira do corpo rígido e a célula $(i, j, k - 1)$ é de fluido ou de superfície, assim o vetor normal é dado por $n_z = (0, 0, 1)$. Conforme ilustra a Figura 5.5.

Dessa forma, as forças são calculadas por:

Figura 5.5: Esquema de células para o cálculo de F_{fz}

$$F_{fx} = (\sigma_{11}0 + \sigma_{12}0 + \sigma_{13}1)dx dy = \sigma_{13}dx dy$$

$$F_{fy} = (\sigma_{21}0 + \sigma_{22}0 + \sigma_{23}1)dx dy = \sigma_{23}dx dy$$

$$F_{fz} = (\sigma_{31}0 + \sigma_{32}0 + \sigma_{33}1)dx dy = \sigma_{33}dx dy$$

logo,

$$F_{fx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) dx dy$$

$$F_{fy} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) dx dy$$

$$F_{fz} = (-p + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z}) dx dy$$

onde $dx dy$ é a área da face $(i, j, k - \frac{1}{2})$.

Os demais casos são análogos, considerando que pode ocorrer casos onde a célula de fronteira (F) possui duas ou três faces adjacentes à células de fluido (C) ou de superfície (S).

5.2.4 Equações do movimento de translação

O movimento de translação de um corpo é definido em termos da aceleração do seu centro de massa. Assim aplica-se a segunda lei de Newton para calcular a aceleração. Dessa forma temos:

$$\sum \mathbf{F} = m\mathbf{a} \quad (5.28)$$

Sabendo que a aceleração é dada pela derivada temporal da velocidade ($\mathbf{a} = \dot{\mathbf{u}}$), podemos escrever a equação (5.28) da seguinte forma:

$$\sum \mathbf{F} = m\dot{\mathbf{u}} \quad (5.29)$$

Considerando também que a velocidade é dada pela derivada temporal da posição, temos que:

$$\mathbf{u} = \dot{\mathbf{r}} \quad (5.30)$$

Portanto, reescrevendo as equações (5.29) e (5.30) e aproximando as derivadas pelo método de Euler, obtemos o sistema que descreve o movimento de translação do corpo.

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{n+1} &= \mathbf{u}^n + dt \frac{1}{m} \sum F \\ \mathbf{r}^{n+1} &= \mathbf{r}^n + dt \mathbf{u}^n \end{aligned} \quad (5.31)$$

onde dt é o intervalo de tempo.

No sistema tridimensional temos que $\mathbf{u} = (u, v, w)$ e $\mathbf{r} = (x, y, z)$, assim podemos escrever o

sistema (5.31) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} u^{n+1} &= u^n + dt \frac{1}{m} \sum F_x \\ v^{n+1} &= v^n + dt \frac{1}{m} \sum F_y \\ w^{n+1} &= w^n + dt \frac{1}{m} \sum F_z \\ x^{n+1} &= x^n + dt u^n \\ y^{n+1} &= y^n + dt v^n \\ z^{n+1} &= z^n + dt w^n \end{aligned}$$

Resolvendo esse sistema teremos a posição e a velocidade atualizada do centro de massa do corpo em movimento.

5.2.5 Equações do movimento de rotação

As equações do movimento de rotação relacionam as componentes do movimento angular do corpo com as componentes do momento criado pelas forças externas em relação a um ponto localizado no corpo rígido (Merian, 1976), da seguinte forma:

$$\sum M = \dot{H} \quad (5.32)$$

onde M representa o momento criado pelas forças externas e H a quantidade de movimento angular do corpo.

Para simplificar a modelagem do movimento de rotação, consideramos o ponto fixo da rotação como sendo o centro de massa do corpo rígido, assim como o sistema de coordenadas fixo ao corpo rígido.

O momento M é definido pelo produto vetorial de $\mathbf{r}$ e $\mathbf{F}$, onde $\mathbf{r}$ é o vetor posição da célula em relação a origem e $\mathbf{F}$ representa as forças externas. Dessa forma, apenas as forças que o fluido exerce sobre o corpo geram momento, pois a força gravitacional e a força inicial são aplicadas na origem.

No caso particular em que o eixo de rotação é um eixo de simetria de um corpo, a quantidade de momento angular do corpo é dada por:

$$\mathbf{H} = I\omega \quad (5.33)$$

onde I representa o momento de inércia do corpo e ω a velocidade angular.

Substituindo (5.33) em (5.32), e considerando o fato de I ser constante em relação ao tempo, temos:

$$\sum M = I\dot{\omega} \quad (5.34)$$

Reescrevendo (5.34), temos a derivada da velocidade angular em função do momento de inércia e do momento gerado pelas forças externas:

$$\dot{\omega} = \frac{1}{I}M \quad (5.35)$$

Sabendo também que a velocidade angular é definida pela variação do ângulo de rotação, temos que:

$$\omega = \frac{d\Theta}{dt} \quad (5.36)$$

Aproximando as derivadas temporais das equações 5.35 e 5.36 pelo método de Euler, chega-se ao sistema de equações para o movimento de rotação do corpo rígido.

$$\begin{aligned} \omega^{n+1} &= \omega^n + dt \frac{1}{I} M^n \\ \Theta^{n+1} &= \Theta^n + dt \omega^n \end{aligned} \quad (5.37)$$

No sistema tridimensional temos que $\omega = (\omega_{xy}, \omega_{yz}, \omega_{xz})$ e $\Theta = (\theta_{xy}, \theta_{yz}, \theta_{xz})$, assim podemos escrever o sistema (5.37) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \omega_{xy}^{n+1} &= \omega_{xy}^n + dt \frac{1}{I_x} M_x^n \\ \omega_{yz}^{n+1} &= \omega_{yz}^n + dt \frac{1}{I_y} M_y^n \\ \omega_{xz}^{n+1} &= \omega_{xz}^n + dt \frac{1}{I_z} M_z^n \\ \theta_{xy}^{n+1} &= \theta_{xy}^n + dt \omega_{xy}^n \\ \theta_{yz}^{n+1} &= \theta_{yz}^n + dt \omega_{yz}^n \\ \theta_{xz}^{n+1} &= \theta_{xz}^n + dt \omega_{xz}^n \end{aligned}$$

onde dt é o intervalo de tempo.

Resolvendo esse sistema temos a variação dos ângulos de rotação e a velocidade angular do

corpo rígido. Essas variáveis juntamente com as variáveis do centro de massa, são substituídas nas equações (5.1) e (5.2) para atualizar a fronteira rígida que representa o corpo rígido em movimento.

Capítulo 6

Resultados Numéricos

Este capítulo apresenta os resultados numéricos obtidos pelo ambiente Freeflow-3D estendido com a implementação das equações desenvolvidas no Capítulo 5.

A Seção 6.1 apresenta um conjunto de simulações que demonstram a influência do fluido sobre o movimento de corpos rígidos e também a influência dos corpos rígidos no comportamento dos fluidos. A seguir, a Seção 6.2 analisa uns dos resultados obtidos, comparando-os com resultados experimentais.

6.1 Exemplos numéricos

Esta seção apresenta quatro exemplos de simulações de escoamentos com superfícies livres. Os exemplos escolhidos exploram uma variedade de movimentos, demonstrando, assim, a versatilidade do ambiente Freeflow-3D com modelador de movimentos. Os exemplos escolhidos encontram-se descritos a seguir.

6.1.1 Simulação 1: “Transporte de contêiner”

Esta simulação ilustra o movimento de um contêiner por uma trajetória pré-definida. Para tanto, o tipo de movimento utilizado é o definido por interpolação linear por partes.

Os resultados são mostrados na Figura 6.1. Este modelo de simulação utiliza um contêiner contendo um fluido, o qual descreve uma trajetória retilínea definida por interpolação linear

Figura 6.1: Movimento definido por interpolação linear por partes

por partes. É importante notar que esse tipo de movimento é frequentemente utilizado por contêineres nas indústrias alimentícias. A Figura 6.1 mostra a posição do contêiner ao longo da simulação.

Os dados utilizados nesta simulação são:

- escala de velocidade: $1m/s^2$;
- escala de comprimento: $1m$;
- viscosidade cinemática: $0,001m/s^2$;
- número de Reynolds: 1000;
- número de Frouden: 3,132

- dimensões do domínio: $2 \times 2 \times 2$;
- tamanho da malha: $40 \times 40 \times 40$.

6.1.2 Simulação 2: “Interação jato-bloco”

Este exemplo mostra o movimento de um corpo rígido em função da força que o fluido exerce sobre ele. Nesta simulação, um injetor injeta um fluido sobre um bloco inicialmente em repouso e livre de forças externas, conforme ilustra a figura 6.2.

O movimento de translação do bloco devido à ação das forças que o fluido exerce sobre sua parede pode ser visto na Figura 6.3, a qual mostra um corte frontal representando a posição do bloco ao longo do tempo. A figura 6.3-a mostra o início da simulação, neste instante não existe interação entre o jato de fluido e o bloco; a Figura 6.3-b mostra o início da interação entre o jato e o bloco; a Figura 6.3-c ilustra o deslocamento do bloco devido à ação do fluido e, finalizando, a Figura 6.3-d exibe a posição do bloco no final da simulação.

A Figura 6.4 mostra um corte frontal do campo de velocidades do fluido na direção z . Observando-se a figura é possível notar uma diminuição da velocidade do fluido na vizinhança da parede do bloco, ilustrando a resistência que este exerce sobre o fluido.

Os dados utilizados nesta simulação são:

- escala de velocidade: $1m/s^2$;
- escala de comprimento: $0,5m$;
- viscosidade cinemática: $0,001m/s^2$;
- número de Reynolds: 500;
- número de Frouden: 2,214723;
- dimensões do domínio: $1 \times 1 \times 2$;
- tamanho da malha: $20 \times 20 \times 40$.

Figura 6.2: Movimento de um bloco pela ação de um fluido

a) $t = 0.25s$

b) $t = 0.5s$

c) $t = 0.75s$

d) $t = 1.0s$

Figura 6.3: Corte frontal

6.1.3 Simulação 3: “Movimento de translação e rotação com ação do fluido”

Este exemplo mostra a influência do fluido sobre o movimento de um corpo rígido. Para tanto, considera-se um bloco sobre a ação da gravidade e com velocidade angular inicial, de modo que o objeto descreve um movimento de rotação e translação simultaneamente em direção à um tanque contendo fluido, conforme ilustra a Figura 6.5.

Figura 6.4: Campo de velocidade do fluido

Para este exemplo, duas simulações foram feitas. Na primeira considerou-se a velocidade angular inicial do bloco no plano xz igual a $-1m/s$. Na segunda, considerou-se a velocidade igual a $-2m/s$. Os resultados referentes às duas simulações são mostrados nas Figuras 6.6 e 6.7.

Os dados utilizados nesta simulação são:

- escala de velocidade: $1m/s^2$;
- escala de comprimento: $0,6m$;
- viscosidade cinemática: $0,003m/s^2$;
- número de Reynolds: 200;
- número de Frouden: 2,426;
- dimensões do domínio: $2 \times 2 \times 3$;
- tamanho da malha: $40 \times 40 \times 60$.
- massa do bloco: $0.8kg$

Figura 6.5: Vista tridimensional

a) $t = 0.15s$ b) $t = 0.35s$ c) $t = 0.45s$ d) $t = 0.55s$ e) $t = 0.70s$

Figura 6.6: Movimento com velocidade angular inicial igual a $-1m/s$

a) $t = 0.15s$ b) $t = 0.35s$ c) $t = 0.45s$ d) $t = 0.55s$ e) $t = 0.70s$

Figura 6.7: Movimento com velocidade angular inicial igual a $-2m/s$

6.1.4 Simulação 4 : “Influência do fluido sobre a esfera”

Para representar a influência que o fluido exerce sobre o movimento do corpo rígido, simulamos dois modelos com as mesmas condições para o corpo rígido e fluidos com viscosidades diferentes.

Figura 6.8: Viscosidade do fluido = 1

Figura 6.9: Viscosidade do fluido = 100.

A Figura 6.8, representa o movimento de translação de uma esfera ao longo do tempo liberada do repouso, somente com a ação da força gravitacional, sobre um container contendo fluido de viscosidade igual a 1. Na Figura 6.9, verifica-se uma resistência maior ao movimento de translação da esfera, devido ao fato da viscosidade neste caso ser igual a 100.

6.1.5 Simulação 5: “Movimento de uma esfera devido a forças externas”

Esta simulação mostra o movimento de uma esfera devido a ação de forças externas. Além das forças que o fluido exerce sobre os corpos rígidos e a força gravitacional que atua sobre todo o sistema, uma outra força externa pode ser aplicada ao corpo rígido.

Nesta simulação aplica-se à esfera uma força na direção do eixo coordenado x , provocando o deslocamento ilustrado nas Figuras 6.11 e 6.12.

Os dados utilizados na simulação são:

- escala de velocidade: $1m/s^2$;
- escala de comprimento: $0,6m$;
- viscosidade cinemática: $0,001m/s^2$;
- número de Reynolds: 600;
- número de Frouden: 2,4261;
- dimensões do domínio: $2 \times 2 \times 3$;
- tamanho da malha: $40 \times 40 \times 60$.
- diametro da esfera: 0,6;
- massa da esfera: $1Kg$;
- aceleração da esfera: $10m/s^2$;

Figura 6.10: Movimento de uma esfera pela ação de forças externas

a) $t = 0.30s$

b) $t = 0.35s$

c) $t = 0.40s$

Figura 6.11: Vista fronta

a) $t = 0.30s$

b) $t = 0.35s$

c) $t = 0.40s$

Figura 6.12: Vista tridimensional

6.2 Análise Qualitativa

Alguns modelos envolvendo sólidos e fluidos são descritos na literatura com o objetivo de investigar as diferenças de comportamento entre fluidos newtonianos e não-newtonianos.

(Cheny and Walters, 1999) apresenta um estudo do impacto de uma esfera sólida em uma superfície de fluido, para diferentes tipos de fluidos.

A fim de comparar os resultados gerados pelo simulador, utilizou-se um dos experimentos realizados por (Cheny and Walters, 1999). Tal experimento consiste na medição do *splash* obtido a partir do impacto de uma esfera na superfície de um fluido. No experimento em questão, diversos *splashes* são obtidos em função da variação da altura de queda da esfera.

Os dados do experimento fornecidos pelo artigo, foram utilizados em diversas simulações, visando comparar os resultados numéricos com os resultados experimentais. A análise qualitativa de tal comparação demonstrou que o ambiente de simulação é capaz de simular modelos com comportamento similar ao comportamento dos modelos experimentais que utilizam fluidos newtonianos. Entretanto, em termos quantitativos, observou-se uma diferença entre os resultados numéricos e experimentais, devido a falta de informação sobre o valor da densidade do fluido e de parâmetros de adimensionalização, como a velocidade característica.

A Figura 6.13, mostra a altura do *splash*, h_w , em função da altura de queda da esfera, H .

Figura 6.13: Comparação dos resultados

É importante frisar que as diferenças obtidas na análise quantitativa decorrem, sobretudo, da dificuldade na adequação dos dados experimentais ao ambiente de simulação. Os dados

utilizados no modelo experimental são os seguintes:

- Comprimento, largura e altura do container: $10cm \times 10cm \times 10cm$
- Viscosidade dinâmica: $0.51Pass$
- Diâmetro da esfera: $1.55cm$
- Massa da esfera: $4.84g$

Os dados utilizados nas simulações foram os mesmos utilizados no pelo método experimental, e ajustamos um número de Reynolds igual a 2.941. A Figura 6.14, mostra os *splashes* obtidos pelas simulações.

Figura 6.14: *Splashes* obtidos em função da variação da altura de queda da esfera

Capítulo 7

Conclusão

A grande aplicabilidade industrial e o interesse científico no desenvolvimento de métodos para solucionar problemas de escoamentos com superfícies livres motivou o desenvolvimento de um ambiente de simulação para tais escoamentos, denominado Freeflow-3D.

Este trabalho apresenta uma extensão ao ambiente Freeflow-3D que incorpora a seu modelador de movimentos dois novos tipos de movimento. O primeiro permite a consideração de forças externas nas simulações, assim como forças que o fluido exerce sobre o próprio corpo. O segundo, permite a descrição de movimentos retilíneos dos corpos, os quais são definidos por interpolação linear por partes.

A extensão implementada permite a modelagem de simulações que demonstram a influência do fluido sobre o movimento de corpos rígidos e também a influência dos corpos rígidos no comportamento dos fluidos.

A análise qualitativa apresentada na Seção 6.2 ilustra algumas das dificuldades encontradas na implementação deste trabalho. Tais dificuldades estão associadas, sobretudo, à pouca disponibilidade de trabalhos relacionados, quer sejam experimentais ou numéricos. Apesar dos problemas encontrados, os resultados numéricos obtidos demonstram a versatilidade do ambiente Freeflow-3D estendido.

Como principal contribuição desse trabalho, destaca-se a modelagem e a implementação das equações que descrevem os movimentos dos corpos rígidos em função de forças externas, o que permite simular de maneira mais precisa a interação entre fluidos e corpos rígidos.

Como proposta para trabalhos futuros, podem ser citados as seguintes extensões:

- a extensão do modelador de movimentos de forma a simulação movimentos de corpos rígidos com interação de fluidos não newtonianos;
- a extensão do cálculo das forças, considerando a interação entre estruturas;
- a consideração de outras propriedades dos corpos rígidos como por exemplo sua capacidade de deformação.

Referências Bibliográficas

- Amsden, A. and Harlow, F. H. (1970). The SMAC Method: A Numerical Technique for Calculating Incompressible Fluid Flows. *Los Alamos Scientific Lab. Report LA-4370*.
- Castelo, A., Cuminato, J. A., Oliveira, M. C., Santi, R. D., Tomé, M. F., and César, C. N. L. (1997). FreeFlow-3D: Um Sistema Integrado para Simulação de Escoamentos Incompressíveis com Superfícies Livres. Relatório Técnico, ICMC/USP.
- Castelo, A., Tomé, M. F., César, C. N. L., McKee, S., and Cuminato, J. A. (2000). FreeFlow: An Integrated Simulation System for Three-Dimensional Free Surface Flows. *Journal of Computing and Visualization in Science*, 2:199–210.
- Chen, J. M. and Walters, K. (1999). Rheological influence on the splashing experiment. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 86:185–210.
- Ferreira, V. G. (2001). Análise e implementação de esquemas de convecção e modelos de turbulência para simulação de escoamentos incompressíveis envolvendo superfícies livres. Dissertação de doutorado, ICMC/USP.
- Ferreira, V. G., Mello, O. D., Oliveira, J. N., and Fortuna, A. O. (1999). Tópicos Teóricos e Computacionais em Escoamentos de Fluidos. Notas do ICMC/USP.
- Ferreira, V. G., Tomé, M. F., Mangiavacchi, N., Castelo, A., Cuminato, J. A., Fortuna, A. O., and McKee, S. (2002). High Order Upwinding and the Hydraulic Jump. *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, 39:549–583.
- Fletcher, C. A. J. (1991). *Computational Techniques for Fluid Dynamics: Vol. I and Vol. II*. Springer Verlag.

- Fortuna, A. O. (2000). *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*. Edusp.
- Fox, R. W. and McDonald, A. T. (1995). *Introdução à Dinâmica dos Fluidos*. Livros Técnicos e Científicos.
- Grossi, L. (2003). Desenvolvimento de métodos numéricos para simulação de escoamentos não-newtonianos e viscoelásticos com superfícies livres. Dissertação de doutorado, ICMC/USP.
- Merian, J. L. (1976). *Dinâmica, Livros Técnicos e Científicos*. editora S.A.
- Oliveira, J. (1999). Desenvolvimento de um Sistema de Simulação de Escoamentos de Fluidos com Superfícies Livres Bidimensionais. Dissertação de mestrado, ICMC/USP.
- Oliveira, M. L. B. (2002). FREFLOW-AXI: Um ambiente de simulação de escoamentos axissimétricos com superfícies livres. Dissertação de mestrado, ICMC/USP.
- Paiva, L. S. (2000). Desenvolvimento de um Modelador de Movimentos para o Sistema FreeFlow-3D. Dissertação de mestrado, ICMC/USP.
- Pontes, J. (1999). Fenômenos de Transferência. Technical Report, COPPE/UFRJ.
- Sabatini, M. H. (2002). Expansão do sistema Freeflow-3D para escoamentos com influência da temperatura. Dissertação de mestrado, ICMC/USP.
- Siquieri, R. (2002). Análise e implementação de modelos não newtonianos no modelo no Sistema FreeFlow-2D. Dissertação de mestrado, ICMC/USP.
- Sousa, F. S. (2002). Simulação Numérica de Escoamentos Multifásicos usando o Sistema FreeFlow-3D. Dissertação de mestrado, ICMC/USP.
- Tomé, M. F., Duffy, B., and McKee, S. (1996). A Numerical Method for Solving Unsteady Non-Newtonian Free Surface Flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 62:9–34.

- Tomé, M. F. and McKee, S. (1994). GENSMAC: A Computational Marker-and-Cell Method for Free Surface Flows in General Domains. *Journal of Computational Physics*, 110(1):171-189.
- Tomé, M. F., Castelo, A., Cuminato, J. A., Mangiavacchi, N., and McKee, S. (2001). GENSMAC3D: A Numerical Method for Solving Unsteady Three-Dimensional Free Surface Flows. *International Journal For Numerical Methods in Fluids*, 37:747-796.
- Tomé, M. F., Castelo Filho, A., Cuminato, J. A., and McKee, S. (1996). GENSMAC-3D: Implementation of the Navier-Stokes Equation for 3D Free Surface Flows. Notas do ICMSC/USP.
- Tomé, M. F., Mangiavacchi, N. A., Cuminato, J. A., and Castelo, A. (2002). A Numerical Technique for Solving Unsteady Viscoelastic Free Surface Flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 106:61-106.
- Trindade, M. A. and Sampaio, R. (2001). On the Numerical Integration of Rigid Body Nonlinear Dynamics in Presence of Parameters Singularities. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences*, 23:1-16.