**Análise e Implementação de Esquemas de
Convecção e Modelos de Turbulência para
Simulação de Escoamentos Incompressíveis
Envolvendo Superfícies Livres
(Versão Revisada)**

Valdemir Garcia Ferreira

Orientador: Prof. Dr. José Alberto Cuminato

Co-orientador: Prof. Dr. Murilo Francisco Tomé

São Carlos - SP

Outubro - 2001

Resumo

Uma parte significativa dos escoamentos encontrados em aplicações tecnológicas é caracterizada por envolver altos números de Reynolds, principalmente aqueles em regime turbulento e com superfície livre. Obter soluções numéricas representativas para essa classe de problemas é extremamente difícil, devido à natureza não-linear das equações diferenciais parciais envolvidas nos modelos. Conseqüentemente, o tema tem sido uma das principais preocupações da comunidade científica moderna em dinâmica de fluidos computacional. Aproximações de primeira ordem para os termos convectivos são as mais adequadas para amortecer oscilações que estão associadas às aproximações de alta ordem não-limitadas. Todavia, elas introduzem dissipação artificial nas representações discretas comprometendo os resultados numéricos. Para minimizar esse efeito não-físico e, ao mesmo tempo, conseguir aproximações incondicionalmente estáveis, é indispensável adotar uma estratégia que combine aproximações de primeira ordem com as de ordem mais alta e que leve em conta a propagação de informações físicas. Os resultados dessa composição são os esquemas “upwind” limitados de alta ordem. Em geral, espera-se que esses esquemas sejam apropriados para a representação das derivadas convectivas nos modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$. No contexto de diferenças finitas, a presente tese dedica-se à solução numérica das equações de Navier-Stokes no regime de números de Reynolds elevados. Em particular, ela contém uma análise de algoritmos monotônicos e antidifusivos e modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ para a simulação de escoamentos incompressíveis envolvendo superfícies livres. Esquemas de convecção são implementados nos códigos GENSMAC para proporcionar um tratamento robusto dos termos convectivos nas equações de transporte. Duas versões do modelo $\kappa - \varepsilon$ de turbulência são implementadas nos códigos GENSMAC, para problemas bidimensionais e com simetria radial, para descrever os efeitos da turbulência sobre o escoamento médio. Resultados numéricos de escoamentos com simetria radial são comparados com resultados experimentais e analíticos. Simulações numéricas de problemas tridimensionais complexos são apresentadas para avaliar o desempenho de esquemas “upwind”. Finalmente, os modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ são utilizados para a simulação de escoamentos confinados e com superfícies livres.

Palavras-chave: esquema de convecção; modelo $\kappa - \varepsilon$ de turbulência; escoamento com superfície livre; equações de Navier-Stokes; dinâmica dos fluidos computacional

Abstract

A considerable part of fluid flows encountered in technological applications is characterised by involving high-Reynolds numbers, especially those in turbulent regime and with free-surface. It is extremely difficult to obtain representative numerical solutions for this class of problems, due to the non-linear nature of the partial differential equations involved in the models. Consequently, this subject has been one of main concerns in the modern computational fluid dynamics community. First-order approximation to the convective terms is one of the most appropriate to smooth out oscillations/instabilities which are associated with high-order unlimited approximation. However, it introduces numerical dissipation in the discrete representation jeopardizing the numerical results. In order to minimize this non-physical effect and, at the same time, to obtain unconditionally stable approximation, it is essential to adopt a strategy that combines first and high-order approximations and takes into account the propagation of physical information. The results of this composition are the high-order bounded upwind techniques. In general, it is expected that these algorithms are satisfactory for the representation of the convective derivatives in the $\kappa - \varepsilon$ turbulence model. In the context of finite-difference, the present thesis deals with the numerical solution of the Navier-Stokes equations at high-Reynolds number regimes. In particular, it contains an analysis of monotonic and anti-difusive convection schemes and $\kappa - \varepsilon$ turbulence models for the simulation of free-surface fluid flows. Upwinding methods are implemented into the GENSMAC codes to provide a robust treatment of the convective terms in the transport equations. Two versions of the $\kappa - \varepsilon$ turbulence model are implemented into the two-dimensional and axisymmetric GENSMAC codes, in order to describe the turbulent effects on the average flow. Numerical results of axisymmetric flows are compared with experimental and analytical results. Numerical simulations of complex three-dimensional problems are presented to assess the performance of high-order bounded upwind schemes. Finally, the $\kappa - \varepsilon$ turbulence models are employed in the simulation of confined and free-surface flows.

Keywords: convection scheme; $\kappa - \varepsilon$ turbulence model; free-surface fluid flow; Navier-Stokes equations; computational fluid dynamics

Dedico esta tese:

À minha esposa Shirley e
ao meu filho Henriko Gabriel

Agradecimentos

A Deus por tudo e por todas as coisas.

A todos que, de alguma maneira, contribuíram para a realização do presente trabalho.

Em especial:

- Aos professores José Alberto Cuminato, Murilo Francisco Tomé, Norberto Magiavacchi, Antonio Castelo Filho, Armando de Oliveira Fortuna e Luis Gustavo Nonato pela convivência, confiança, paciência, boa vontade e pelas discussões sempre válidas;
- Aos colegas do LCAD (ICMC-USP);
- Aos professores do DEMAC (IGCE-UNESP). Particularmente os colegas José Silvio Golvone, José Manoel Balthazar e Tadashi Yokoyama pelo apoio e incentivo desde o início;
- Aos colegas Sonia Maria Moreto Trindade, Franz Anguello Carrillo e Luis Carlos Dotta, da Seção Técnica de Informática (ICMC-USP), pela paciência e colaboração durante todos esses anos.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Preliminares	1
1.2	Organização do Trabalho	9
1.3	Equipamentos Utilizados	9
2	Modelagem Matemática do Problema	10
2.1	Introdução	10
2.2	Descrições Lagrangeana e Euleriana	12
2.3	Equações da Mecânica do Contínuo	14
2.4	Fluidos Newtonianos	15
2.5	Adimensionalização do Modelo	18
2.6	Condições Iniciais e de Contorno	19
2.7	Modelagem da Turbulência	21
2.8	Equações de Navier-Stokes com Média de Reynolds e Aproximação de Bous- sinesq	23
2.9	Modelo $\kappa - \varepsilon$ para Números de Reynolds Elevados	27
2.10	Modelo $\kappa - \varepsilon$ de Yang & Shih para Números de Reynolds Pequenos	31
2.11	Leis de Conservação em Coordenadas Cilíndricas	34
3	Método Computacional, Condições Iniciais e de Contorno e Discretização das Equações de Conservação	36
3.1	Introdução	36
3.2	Procedimento Computacional	38
3.3	Procedimento de Solução	40
3.4	Restrições no Valor do Passo Temporal	42

3.5	Condições Iniciais	43
3.6	Condições de Contorno	44
3.7	Discretização das Equações de Conservação	56
4	Estimativas “Upwind” e Discretização dos Termos Convectivos	66
4.1	Introdução	66
4.2	Aproximações para os Termos Convectivos	68
4.3	Variáveis Normalizadas e o Critério CBC	70
4.4	Discretização dos Termos Convectivos	76
5	Aplicação de Esquemas Convectivos em Problemas com Simetria Radial	89
5.1	Introdução	89
5.2	Estruturas do Ressalto Hidráulico Circular	91
5.3	Comparação com a Solução Analítica Aproximada de Watson	96
5.4	Comparação com os Experimentos de Taylor	103
6	Aplicação de Esquemas Convectivos em Problemas Tridimensionais	108
6.1	Introdução	108
6.2	Jatos Cilíndricos e Planares	109
6.3	Jatos Oscilantes	116
6.4	Simulação do Ressalto Hidráulico Circular	120
6.5	Comparação entre Soluções Numéricas Tridimensionais e Bidimensionais com Simetria Radial	122
6.6	Comparação com o Experimento de Storr/Behnia	127
7	Aplicação dos Modelos de Turbulência $\kappa - \varepsilon$ em Problemas Bidimensionais e com Simetria Radial	129
7.1	Introdução	129
7.2	Comparação com Estimativas Teóricas do Coeficiente de Tensão de Cisalha- mento em Superfícies Bidimensionais Planas	130
7.3	Comparação com a Solução Analítica Aproximada de Watson	135
7.4	Simulações Numéricas de Escoamentos em Regime Turbulento	141

8	Conclusões e Trabalhos Futuros	151
8.1	Síntese da Pesquisa	151
8.2	Conclusões e Sugestões	153
8.3	Contribuição	155
8.4	Trabalhos Futuros	156
	Referências Bibliográficas	158

Capítulo 1

Introdução

1.1 Preliminares

Uma vasta variedade de fenômenos físicos pode ser representada por meio de Equações Diferenciais a Derivadas Parciais (EDPs). Exemplos típicos são as equações de Maxwell, Schrödinger, Einstein e Navier-Stokes. Quando tais equações envolvem não-linearidades em suas formulações, raras são as vezes em que soluções analíticas podem ser encontradas. Os métodos numéricos oferecem, portanto, uma ferramenta indispensável na determinação de soluções aproximadas. De interesse especial no presente estudo são as equações de Navier-Stokes, que estão associadas à hipótese do contínuo e às leis fundamentais de conservação e que descrevem o movimento dos fluidos (líquidos e gases). Em conjunto com a equação da conservação de massa e condições iniciais e de contorno fisicamente apropriadas, as equações de Navier-Stokes permitem, em princípio, obter informações do caráter fundamental da dinâmica dos fluidos. Muitas das soluções analíticas encontradas na literatura envolvem simplificações e descartam as não-linearidades inerentes ao modelo. Entretanto, para escoamentos viscosos e arbitrários, a natureza não-linear promove um amplo intervalo de escalas no movimento, exclui soluções analíticas e favorece a utilização de técnicas numéricas de solução. Do ponto de vista numérico, as equações de conservação e as condições iniciais e de contorno associadas são geralmente substituídas por sistemas de equações algébricas, utilizando-se técnicas de discretização. Com o auxílio de algoritmos computacio-

nais eficientes, o sistema resultante da discretização é, então, processado numericamente em um computador para se obter precisão e estabilidade nas soluções.

Fluidos em movimento podem ser observados facilmente no cotidiano. Por exemplo, o fluxo de sangue através das veias e artérias, o ar respirado para dentro dos pulmões, a água dos rios e canais escoando em direção ao mar, as esteiras dos automóveis nos dias chuvosos, as nuvens cruzando o céu ou, ainda, a fumaça saindo pelas chaminés. Do ponto de vista microscópico, um fluido escoando é constituído de moléculas, que estão individualmente em um estado de movimento ao acaso e possuem a habilidade de transmitir cisalhamento. Essa propriedade introduz o conceito de viscosidade dinâmica, de maneira que, para uma variedade de fluidos, a tensão cisalhante é diretamente proporcional ao gradiente de velocidade, sendo o coeficiente de viscosidade a constante de proporcionalidade. Tais fluidos são denominados newtonianos ([White (1991)]). Em muitas situações os escoamentos podem ser classificados em categorias diferentes, segundo duas propriedades importantes: a massa específica e o coeficiente de viscosidade. No caso de líquidos em movimento, em que interações moleculares são relevantes (regime incompressível), assume-se normalmente que as velocidades envolvidas são muito menores que a velocidade do som, isto é, o número de Mach $\leq 0,3$ ([White (1979)]), ou massa específica constante. Por outro lado, no regime compressível, as variações na pressão, de ponto para ponto, são tão intensas que as variações da massa específica do fluido devem ser consideradas durante o movimento, quando o número de Mach $> 0,3$.

Muitos dos escoamentos encontrados na natureza e na indústria são turbulentos, o que é uma regra e não uma exceção em dinâmica de fluidos. Uma sólida compreensão da turbulência pode, por exemplo, ajudar engenheiros a reduzir o arrasto aerodinâmico em automóveis e aviões, aprimorar a eficiência de máquinas e auxiliar médicos a compreender o sangue fluindo no coração. Entretanto, o que é exatamente turbulência tem sido debatido pelos cientistas desde os tempos de Osborn Reynolds e Lord Rayleigh e, até o presente momento, o assunto desperta o interesse de muitos pesquisadores. Alguns hábitos corriqueiros do dia-a-dia são úteis para se compreender os fundamentos do fenômeno turbulência. Por exemplo, ao se abrir uma torneira suavemente, a água escoar de maneira ordenada e bem comportada. Esse tipo de movimento é denominado escoamento laminar. Permitindo a torneira ter mais vazão, o escoamento sofre transição para um regime desordenado e caótico. O mesmo fenômeno ocorre na fumaça de um cigarro: imediatamente acima da ponta incandescente o escoamento é laminar, porém mais acima o movimento torna-se ondulado, difusivo

e irreproduzível em detalhes.

A turbulência é composta de estruturas turbilhonares movimentando-se aleatoriamente na direção global do movimento. O estado turbilhonar aparece quando a velocidade do escoamento excede um valor específico. Por outro lado, forças de amortecimento atenuam o comportamento irregular e o escoamento apresenta o fenômeno “relaminarização” ([Jones & Launder (1972)]). A turbulência, entretanto, não é um fenômeno indesejável, e muitos engenheiros dedicam uma vida de trabalho tentando aumentá-la. Em câmaras de combustão por exemplo, ela melhora a mistura entre o combustível e o oxigênio produzindo mais eficiência no processo. Somente a turbulência pode dispersar os resíduos tóxicos lançados diariamente na atmosfera. Talvez a maneira mais simples de se tentar “definir” turbulência é utilizar o número de Reynolds, porque ela sempre está associada a altos valores do número de Reynolds. Uma maneira mais rigorosa é enfatizar, em um escoamento irregular, determinados sintomas que são intrínsecos a todos os escoamentos turbulentos. A eficiência na mistura e no transporte de propriedades físicas e a presença de vorticidade distribuída por todo o campo de escoamento são exemplos característicos ([Tennekes & Lumley (1972)], [Panton (1984)]). No famoso experimento de Reynolds, o escoamento torna-se instável quando o número de Reynolds atinge um determinado valor crítico. Além desse limite de estabilidade, a turbulência se desenvolve muito rapidamente.

A solução numérica de escoamentos turbulentos transientes, a partir das equações de Navier-Stokes e da conservação de massa, requer uma malha excessivamente fina sobre o domínio de solução e um tamanho de passo no tempo bastante reduzido para se resolver todas as escalas envolvidas no movimento; particularmente nas adjacências de fronteiras rígidas onde as escalas de comprimento são muito menores comparadas às da região completamente turbulenta. A quantidade de pontos na malha computacional pode ser estimada utilizando-se o número de Reynolds elevado à potência $9/4$ ([Frisch (1995)]). Por exemplo, para se obter os detalhes do escoamento tridimensional num duto a números de Reynolds da ordem de 10^7 , seriam necessárias, aproximadamente, 10^{22} operações aritméticas e, se essas operações fossem feitas num computador com velocidade de 1ns por operação, necessitaria de, aproximadamente, 320000 anos para resolver o escoamento. Desta forma, a simulação numérica a partir das equações instantâneas de Navier-Stokes e continuidade pode ser uma estratégia inviável mesmo nos casos que envolvem números de Reynolds moderados. Felizmente, na maioria dos problemas em engenharia é suficiente computar estruturas associadas

às grandes escalas, uma vez que elas contenham bastante energia cinética e controlam a difusão turbulenta. Para isso, as equações instantâneas de Navier-Stokes e continuidade são, freqüentemente, transformadas em equações filtradas com respeito às escalas das flutuações turbulentas. Em outras palavras, o movimento das estruturas turbilhonares relacionadas às grandes escalas é calculado, e os efeitos das de pequenas escalas são modelados. Essa prática permite reduzir o volume de cálculo e, assim, simular o comportamento filtrado das variáveis de campo. Em contrapartida, o processo de obtenção das equações filtradas introduz correlações estatísticas indeterminadas que necessitam de modelagem adicional, tendo como base argumentos empíricos ([McComb (1990)]). Por sua vez, essas grandezas estatísticas requerem hipóteses adicionais e ajustamento de parâmetros. Este é o problema de “fechamento da turbulência”.

Via de regra, obter soluções numéricas das equações de conservação em circunstâncias adversas é uma tarefa muito difícil em virtude da natureza não-linear dos termos de inércia, principalmente quando esses termos representam os mecanismos predominantes no transporte de propriedades físicas. Recentemente, a maneira mais adequada de se tratar essas não-linearidades é um dos principais assuntos no campo de CFD (“Computational Fluid Dynamics”). Os métodos numéricos convencionais podem resolver “facilmente” os problemas difusivos mas não os convectivos. Complicações adicionais aparecem nos casos em que o escoamento envolve número de Reynolds elevado, especialmente em regime turbulento. Assim, é de fundamental importância que os termos convectivos presentes nas equações de transporte sejam tratados de maneira apropriada, levando-se em conta as não-linearidades associadas.

Em se tratando de simulações numéricas de escoamentos viscosos, nas últimas décadas muitos esforços têm sido dirigidos na obtenção de soluções não-transientes, sobretudo devido aos limitados recursos computacionais. No entanto, muitos problemas em aplicações práticas são essencialmente transientes e tridimensionais, ocasionando dificuldades em se obter precisão e estabilidade das soluções numéricas. No regime incompressível há mais um agravante: nenhuma equação descrevendo as variações da pressão com o tempo é acessível, e somente as condições de contorno para a velocidade são suficientes na determinação dos campos de velocidade e pressão. Dificuldades adicionais aparecem se os escoamentos incompressíveis envolvem superfícies livres, porque a presença desses contornos contribui com dificuldades únicas na simulação, dentre as quais podem-se citar: a) a solução numérica obtida via

métodos explícitos requer, usualmente, um número elevado de ciclos computacionais e, como resultado, pode consumir grande quantidade de memória, tempo de processamento elevado e bastante espaço de armazenamento; b) a própria configuração da superfície livre deve ser determinada a cada passo no tempo; e c) o movimento da superfície livre é geralmente influenciado por fenômenos interfaciais, tais como tensão superficial e transferência de massa. Como consequência desses inconvenientes, é difícil conseguir resultados numéricos confiáveis sem a utilização de um algoritmo adequado e uma estrutura de dados efetiva. É importante, portanto, dispor de um código computacional eficiente e robusto, e computadores com boa capacidade de armazenamento e velocidade de processamento

Entre os vários métodos disponíveis na literatura especializada para se resolver a classe dos problemas incompressíveis com superfícies livres estão os códigos GENSMAC (Generalized-Simplified-Marker-and-Cell) ([Tomé & McKee (1994)] e [Tomé et al. (2000a)]), para problemas bidimensionais e com simetria radial, e GENSMAC3D ([Tomé et al. (2000c)]), para problemas tridimensionais. Nos últimos anos, tais códigos vêm sendo considerados relevantes na simulação de escoamentos laminares que envolvem números de Reynolds pequenos. Entretanto, até o presente momento, nenhuma tentativa foi feita com esses códigos no sentido de se resolver os problemas em condições severas de convecção, sobretudo o do regime turbulento. As limitações dos códigos GENSMAC em simular somente problemas a baixos Reynolds e a necessidade de se resolver problemas em condições severas de convecção estabeleceram a motivação para o presente trabalho.

No caso específico da simulação numérica por métodos explícitos, como é o caso dos códigos GENSMAC, de escoamentos incompressíveis envolvendo superfícies livres e a números de Reynolds elevados, se diferenças centradas forem utilizadas para aproximar todas as derivadas espaciais nas equações de conservação, o esquema numérico resultante pode ser incondicionalmente instável, particularmente quando o número de Reynolds local, conhecido como número de Péclet, exceder um valor crítico específico ([Gaskell & Lau (1988)]). Para reverter essa situação indesejável, vários métodos foram propostos na literatura, sendo que o mais simples contém termos difusivos adicionados artificialmente às equações discretas, cujos coeficientes são escolhidos apropriadamente para assegurar estabilidade na solução. Um procedimento mais adequado é incorporar informações físicas na aproximação dos termos convectivos para se obter um esquema numérico que tenha ordem de precisão elevada e garanta estabilidade numérica da solução. Desde que os es-

quemas tradicionais de ordem elevada CD (“Central Difference”) e QUICK (“Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics”) ([Leonard (1979)]) são condicionalmente estáveis e, portanto, não adequados para escoamentos envolvendo números de Reynolds elevados, é necessária uma análise cuidadosa dos termos convectivos tendo como propósito central a obtenção de esquemas numéricos de alta ordem de precisão, incondicionalmente estáveis, com introdução mínima de viscosidade artificial e de fácil implementação. Entre os diversos algoritmos encontrados na literatura, os esquemas SHARP (“A Simple High-Accuracy Resolution Program”) ([Leonard (1979)]), SMART (“Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport”) ([Gaskell & Lau (1988)]), HLP (“Hybrid Linear Parabolic Approximation”) ([Zhu (1992)]) e VONOS (“Variable-Order Non-Oscillatory Scheme”) ([Varonos & Bergeles (1998)]) introduzem pouca dissipação numérica, para o regime laminar confinado, e são capazes de resolver regiões do escoamento onde os gradientes desempenham papel de extrema importância.

O sucesso em se obter soluções numéricas aceitáveis de escoamentos turbulentos realísticos por modelagem da turbulência depende fundamentalmente de dois fatores: modelos de turbulência e algoritmos numéricos. Ambos os fatores refletem na qualidade dos resultados obtidos. O propósito da modelagem é descrever de maneira adequada a física do problema, enquanto que o objetivo do método numérico é resolver as equações modeladas com eficiência e precisão. Geralmente, a construção de modelos de turbulência segue alguns princípios básicos: a) a escolha de um conjunto de propriedades que seja suficiente para caracterizar o movimento turbulento; b) a derivação de um conjunto de equações algébricas ou diferenciais que supostamente governa a distribuição dessas grandezas por todo o campo de escoamento; e c) a dedução, a partir de dados experimentais, dos valores das constantes, ou funções, provenientes da modelagem matemática do problema. Em décadas passadas muitos códigos em CFD incorporavam modelos de turbulência simples para demonstrar as suas capacidades em resolver escoamentos turbulentos. Alguns deles consideravam erroneamente um coeficiente de viscosidade aumentado constante. Outros incluíam expressões algébricas envolvendo um coeficiente de viscosidade turbulento, com o propósito de descrever as características da turbulência. Com o aprimoramento tecnológico dos computadores e os avanços dos algoritmos numéricos, tornou-se possível modelar os processos turbulentos por meio de equações de transporte. Desde que, em geral, as equações resultantes dessa modelagem contêm mais incógnitas do que equações, o problema de fechamento da turbulência

pode ser abordado utilizando-se diferentes níveis de sofisticação. Uma classe de modelos bastante popular é a de duas equações, em que duas EDPs são acopladas às equações filtradas do movimento para descrever as evoluções das escalas de velocidade e de comprimento, representativas da turbulência.

Entre os diversos modelos de duas equações encontrados na literatura está o modelo $\kappa - \varepsilon$ clássico ([Launder & Spalding (1974)]), que constitui uma ferramenta poderosa na previsão de escoamentos turbulentos altamente complexos e com substanciais reduções no volume de dados armazenado e tempo de computação. Uma aplicação simples do modelo permite resolver as grandes escalas da turbulência e evita o problema de modelar a influência direta da viscosidade molecular quando próximo às fronteiras rígidas. Infelizmente, a validade dessa técnica está restrita às situações em que o número de Reynolds é suficientemente elevado para garantir que os efeitos do contorno rígido sejam desprezíveis. Por outro lado, para baixos valores do número Reynolds, o modelo $\kappa - \varepsilon$ deve incorporar relações empíricas bem estabelecidas (chamadas funções de parede) ou termos de amortecimento. Nesse último caso, as equações de conservação para as variáveis turbulentas devem ser modificadas, no sentido de se levar em consideração o amortecimento da velocidade flutuante normal à parede rígida e os efeitos devidos à viscosidade molecular. Os modelos resultantes dessas modificações constituem a classe dos modelos $\kappa - \varepsilon$ para números de Reynolds pequenos ([Patel et al. (1985)]).

Quanto à dificuldade de se simular escoamentos incompressíveis envolvendo superfícies livres, a potencialidade dos códigos GENSMAC ficou reconhecida pela comunidade científica em CFD ([Griebel et al. (1998)], [Dartzi et al. (1998)]), desde a primeira publicação de Tomé e McKee ([Tomé & McKee (1994)]) sobre a simulação do regime laminar em geometrias bidimensionais. Entretanto, até pouco tempo atrás tais códigos simulavam apenas problemas envolvendo números de Reynolds pequenos ($Re \approx O(50)$). De fato, escoamentos a altos valores do número de Reynolds ofereciam sérias complicações para os códigos porque as estimativas, por diferenças centrais, dos termos não-lineares das equações do movimento ocasionavam constantemente instabilidade numérica. Soluções estáveis poderiam ser obtidas utilizando-se passos temporais menores e malhas mais finas. Contudo, o refinamento na malha para alcançar números de Péclet de ordem 2, e o decréscimo em δt eram inviáveis por razões de eficiência e economia.

Reconhecendo o interesse considerável de soluções numéricas representativas para escoamentos incompressíveis com superfície livre a números de Reynolds práticos, este trabalho tem como objetivos principais analisar e implementar esquemas de convecção e modelos $\kappa - \varepsilon$ de turbulência, para a simulação dessa classe de problemas. Em busca de tais objetivos, os algoritmos “upwind” SMART, HPLA e VONOS, baseados na formulação de variáveis normalizadas de Leonard ([Leonard (1988)]) e no critério CBC de Gaskell/Lau ([Gaskell & Lau (1988)]), e os modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$, devidos a Launder/Spalding ([Launder & Spalding (1974)]) e Yang/Shih ([Yang & Shih (1993)]), foram analisados e implementados nos códigos GENSMAC. Como consequência, este trabalho apresenta uma série de resultados numéricos de escoamentos de fluidos incompressíveis, mostrando a capacidade atual dos códigos GENSMAC de abordar uma gama bem mais ampla de problemas envolvendo superfícies livres ([Ferreira et al. (2000e)], [Ferreira et al. (2000f)], [Ferreira et al. (2001c)]).

O presente trabalho apresenta as seguintes contribuições específicas no campo de CFD, a saber:

- **i)** A adaptação de algoritmos de convecção limitados e antidifusivos nos códigos GENSMAC, GENSMAC com simetria radial e GENSMAC3D; e
- **ii)** A incorporação de dois modelos de turbulência do tipo $\kappa - \varepsilon$, o convencional e um para números de Reynolds pequenos, nos códigos GENSMAC e GENSMAC com simetria radial.

Ambas as contribuições têm por objetivo a simulação de escoamentos viscosos incompressíveis, em regimes transientes, a números de Reynolds elevados e com superfícies livres. Os esquemas de convecção limitados e de alta ordem SMART, HPLA e VONOS foram considerados para superar os problemas da dissipação numérica excessiva, associada aos esquemas clássicos de primeira ordem, e evitar instabilidades/oscilações numéricas, relacionadas aos esquemas condicionalmente estáveis CD e QUICK. Os modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ foram adotados por, segundo a literatura especializada, poderem simular escoamentos altamente complexos muito melhor do que os modelos algébricos e de uma equação, e por serem muito mais simples do que os modelos de fechamento mais sofisticados.

1.2 Organização do Trabalho

O presente trabalho está organizado da seguinte maneira:

- O capítulo 2 é reservado para uma discussão geral sobre a modelagem matemática do problema de escoamento de fluidos incompressíveis. Os procedimentos computacional e de solução, as condições iniciais e de contorno, as restrições no valor do passo temporal e a discretização das equações de conservação são discutidos no capítulo 3. No capítulo 4, vários esquemas de convecção para o tratamento dos termos não-lineares nas equações de transporte gerais são analisados, bem como as suas respectivas discretizações. Resultados de experimentos numéricos, utilizando-se os vários algoritmos de convecção analisados no capítulo 4, são apresentados nos capítulos 5 e 6. Simulações utilizando-se os modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$, discutidos no capítulo 2, são apresentadas no capítulo 7. E, finalmente, o último capítulo contém uma síntese da presente tese, algumas conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

1.3 Equipamentos Utilizados

Todas as simulações numéricas apresentadas neste trabalho foram realizadas nas seguintes máquinas do Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC) da Universidade de São Paulo (USP):

- Uma estação de trabalho “Ultra Enterprise” 3000, 2.0 Gb de memória RAM, 4 processadores de 250 MHZ, 90 Gb de disco rígido e sistema operacional Solaris 2.7, encontrada na Seção Técnica de Informatica (STI); e

- Um microcomputador Pentium III Dual, 1.0 Gb de memória RAM, 2 processadores de 500 MHZ, 9 Gb de disco rígido e sistema operacional Linux 2.2.15, encontrado no Laboratório de Computação de Alto Desempenho (LCAD).

Capítulo 2

Modelagem Matemática do Problema

2.1 Introdução

A modelagem matemática dos mais variados problemas em física e engenharia constitui uma atividade de pesquisa que tem auxiliado, de maneira decisiva, no desenvolvimento de novas tecnologias e de novos processos industriais. A razão principal para esse sucesso deve-se, principalmente, ao fato de que a modelagem matemática permite uma representação precisa dos conceitos e processos envolvidos, propiciando o entendimento de aspectos do problema que não se revelam facilmente. Uma alternativa à modelagem matemática, utilizada com frequência pelos profissionais de engenharia, é a construção de modelos em escala reduzida, que também cumpre o propósito de revelar propriedades não óbvias do problema em estudo. Infelizmente, modelos de escala reduzida são, na maioria das vezes, caros e não flexíveis o suficiente para permitir o estudo do problema em vários regimes de parâmetros e dados. Exemplos clássicos de modelagem matemática incluem o projeto de um avião de grande porte (civil ou militar), a previsão do tempo e o problema de escoamento de fluidos. O resultado da modelagem matemática do problema é, invariavelmente, um conjunto de equações que, após uma análise de suas características teóricas, deve ser resolvido em um computador para produzir uma solução numérica representativa do problema em questão. A essa solução numérica denomina-se simulação. As vantagens da simulação sobre a construção de modelos reduzidos estão na sua generalidade; é praticamente impossível construir

um modelo reduzido do meio ambiente para prever o comportamento do clima, na versatili-dade que a simulação oferece em modificar parâmetros; vários regimes e geometrias podem ser simulados com uma simples modificação dos dados de entrada do modelo; e, finalmente, seu custo. A desvantagem principal reside na falta de conhecimentos teóricos robustos para validação do modelo, sobretudo quando as equações matemáticas envolvem não-linearidades e dependência temporal.

No caso particular de interesse no presente trabalho, os escoamentos de fluidos in-compressíveis, a modelagem matemática das leis de conservação é bem estabelecida pelas equações de conservação de massa e de Navier-Stokes. Entretanto, sendo essas últimas equações não-lineares, muitas dúvidas persistem ainda sobre existência, unicidade e pro-priedades das soluções, especialmente no caso tridimensional que é o de maior importância prática. Apesar dessa dificuldade conceitual, a simulação de escoamentos incompressíveis tem sido utilizada largamente na prática e com muito sucesso. Esse sucesso é devido ao grande avanço, em capacidade de processamento e de armazenamento, experimentado recentemen-te pelos computadores e, principalmente, pelo tremendo salto na qualidade das técnicas numéricas de resolução das equações. Entre as muitas classes de problemas em mecânica dos fluidos que se beneficiaram desse avanço, destaca-se aquela de problemas com superfícies livres em movimento.

Muitos problemas com relevância tecnológica podem ser modelados como um pro-blema possuindo superfície livre, a saber: injeção em moldes, problemas de camada fina no processo de condensação, segurança de centrais nucleares, entre muitos outros. Exis-te, portanto, grande interesse no desenvolvimento de técnicas de solução para essa classe de problemas. Na verdade, um número considerável de pesquisadores tem atentado para o problema, produzindo as mais variadas técnicas de solução, tais como métodos tipo ele-mentos finitos, métodos integrais, métodos lagrangeanos e de coordenadas ortogonais. Essas técnicas, entretanto, não conseguem tratar, de maneira satisfatória, superfícies com dobras e aquelas que se fundem em uma única. Mesmo a aplicação a casos em que a superfície apresenta grande deformação não está totalmente esclarecida. Os problemas práticos que apresentam superfícies livres destacam-se por envolver o movimento transiente de fluidos em domínios complexos. Por exemplo, na indústria alimentícia muitos problemas envolvem o enchimento/esvaziamento de frascos com geometrias complicadas. Além disso, é de grande interesse industrial o desenvolvimento de ferramentas que possibilitem o desenvolvimento e

modelagem de injetores com geometrias irregulares. A construção de um ambiente capaz de simular esses tipos de problemas envolve três etapas distintas, a saber: um modelador, para que dados do problema sejam facilmente descritos para o computador; um simulador que resolva numericamente as equações de conservação e suas condições iniciais e de contorno associadas; e um visualizador para a interpretação dos resultados do simulador. Cada uma dessas etapas exige conhecimentos de várias áreas em ciências exatas, tais como modelagem geométrica, matemática aplicada, mecânica dos fluidos, dinâmica dos fluidos computacional e computação.

Este capítulo é destinado à apresentação da modelagem matemática do problema de escoamento de fluidos, com ênfase na classe de problemas incompressíveis com superfícies livres e a altos valores do número de Reynolds.

2.2 Descrições Lagrangeana e Euleriana

A técnica numérica apresentada neste trabalho trata de problemas em mecânica do contínuo, cujas escalas características de comprimento e tempo são consideravelmente maiores que as escalas das estruturas discretas da matéria. Assim, é possível descrever as propriedades físicas e mecânicas da matéria por meio de funções contínuas definidas no conjunto das coordenadas macroscópicas tempo e espaço.

Inicia-se este estudo descrevendo a cinemática do movimento de um fluido. Como está bem discutido em [Aris (1962)], o movimento de um fluido pode ser descrito por meio de uma transformação. Formalmente, supõe-se que, em um dado instante de tempo, uma determinada partícula esteja em uma posição $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$, e, num tempo posterior, a mesma partícula se encontre na posição $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$. Sem perda de generalidade, considera-se o primeiro instante como sendo o tempo $t = 0$. Se o tempo posterior for t , admite-se que $\mathbf{x}$ é uma função de t e da posição inicial ξ , isto é

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\xi, t). \quad (2.1)$$

As coordenadas iniciais ξ são as coordenadas materiais (ou lagrangeanas) e as coordenadas $\mathbf{x}$ são as coordenadas espaciais (ou eulerianas). Assume-se também que o movimento do fluido é uma função contínua, de maneira que (2.1) pode ser invertida para recuperar as

coordenadas materiais da partícula

$$\xi = \xi(\mathbf{x}, t). \quad (2.2)$$

Fisicamente, o movimento contínuo do fluido significa que as partículas que estão nas vizinhanças de uma dada partícula permanecem em suas vizinhanças no transcorrer do movimento. A equação (2.1) pode ser vista como uma equação paramétrica de uma curva no espaço tendo t como parâmetro, e é denominada caminho da partícula material. Qualquer propriedade física local ϕ do fluido pode ser acompanhada ao longo do caminho da partícula. A massa específica (massa por unidade de volume de uma substância), por exemplo, é uma função $\rho = \rho(\xi, t)$, e seria esta massa específica que um observador veria se estivesse “sentado” na partícula material. A descrição lagrangeana da variação de uma propriedade física $\phi(\xi, t)$ pode ser vista na descrição euleriana $\phi(\mathbf{x}, t)$ segundo a equação

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \phi(\xi(\mathbf{x}, t), t). \quad (2.3)$$

Associadas às descrições lagrangeana e euleriana, existem duas derivadas a considerar: a derivada com respeito ao tempo mantendo $\mathbf{x}$ constante; e a derivada com respeito ao tempo mantendo ξ constante (a derivada total). A segunda derivada é freqüentemente utilizada em dinâmica de fluidos e é conhecida como derivada material, substancial, ou derivada de Stokes. Em particular, se $\phi = x_i$, $i = 1, 2, 3$, é a posição da partícula, tem-se

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} x_i(\xi, t) = v_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.4)$$

As Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs) (2.4) são a representação lagrangeana do movimento e permitem estabelecer a conexão entre as derivadas anteriores. No caso de uma propriedade ϕ qualquer, (2.4) pode ser representada também na notação de Einstein (ou indicial) como

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + v_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i}, \quad (2.5)$$

ou, ainda, em notação de Gibbs como

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \phi, \quad (2.6)$$

em que $\mathbf{v}$ é o campo de velocidades euleriano. O primeiro termo do lado direito de (2.6) corresponde à variação local em ϕ . O segundo representa a aceleração convectiva, que relaciona os efeitos do gradiente de velocidade transportado pelo escoamento. Do ponto

de vista matemático, a variação convectiva em ϕ é a não-linearidade do modelo. Fazendo $\phi = \mathbf{v}$, a equação (2.6) define a taxa de variação (ou aceleração) das partículas de fluido e representa uma das dificuldades principais do ponto de vista numérico. A partir da descrição lagrangeana do movimento, surge naturalmente um campo de vetores definido pelas EDOs (2.4). O escoamento é chamado estacionário (ou não-transiente) se as componentes do campo de velocidades independem do tempo. As trajetórias do campo representam as linhas de corrente e são soluções dessas equações diferenciais ordinárias. A descrição lagrangeana do movimento é, usualmente, difícil e é raramente empregada em mecânica do contínuo. Entretanto, ao se empregar a velocidade como variável dependente, em vez da posição, pode-se, em geral, determinar o escoamento do fluido. A representação euleriana é muito mais útil, pois as leis físicas escritas nesta forma não contêm o vetor posição, e a velocidade aparece naturalmente como a principal variável dependente no modelo.

2.3 Equações da Mecânica do Contínuo

Da mesma forma como é comentado por Jasak ([Jasak (1996)]) e bem discutido em [Aris (1962)], [White (1979)] e [Panton (1984)], as equações da mecânica do contínuo podem ser derivadas do teorema de transporte de Reynolds ([Aris (1962)], [Acheson (1990)]). Para tanto, assume-se no teorema que o volume material móvel é arbitrário e que a propriedade contínua ϕ é adequadamente escolhida. Desta forma, as leis gerais de conservação em forma diferencial e conservativa (ou divergente) são como segue:

- Conservação de massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (2.7)$$

- Conservação de quantidade de movimento

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \sigma, \quad (2.8)$$

- Conservação de momento angular

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x} \times \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho(\mathbf{x} \times \mathbf{v}) \mathbf{v}] = \rho(\mathbf{x} \times \mathbf{g}) + \mathbf{x} \times (\nabla \cdot \sigma), \quad (2.9)$$

- Conservação de energia

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{v}) = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (\sigma \cdot \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho Q, \quad (2.10)$$

- Desigualdade entrópica

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho s \mathbf{v}) \geq \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) + \frac{\rho Q}{T}, \quad (2.11)$$

em que ρ é a massa específica do fluido, $\mathbf{x}$ é o vetor posição, $\mathbf{v}$ é o vetor velocidade, $\mathbf{g}$ é o vetor forças externas, σ é o tensor de tensões, e é a energia específica total, Q é um termo-fonte representando a geração de calor, T é a temperatura e $\mathbf{q}$ é o vetor “fluxo de calor”. As leis físicas de conservação (2.7)-(2.11) são válidas para qualquer contínuo. O número de incógnitas no sistema é maior que o número de equações, tornando-o não fechado. Para o fechamento, é preciso fornecer informações adicionais ou constitutivas.

2.4 Fluidos Newtonianos

Para o fechamento do sistema de equações (2.7)-(2.11), é necessário incorporar relações adicionais que dependem das propriedades do meio contínuo em questão. Para o caso de fluidos newtonianos, as relações constitutivas apresentadas a seguir são freqüentemente utilizadas ([Panton (1984)]):

- A equação da energia interna, definida em função da pressão e temperatura

$$e_i = e_i(p, T),$$

- A energia total, definida como a soma da energia cinética e_c e energia interna

$$e = e_c + e_i(p, T) = \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + e_i(p, T),$$

- A equação de estado, representada por

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

- A lei de Fourier para condução de calor

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T,$$

- A lei de viscosidade de Newton

$$\sigma = -(p + \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} + \mu (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T).$$

Em conjunto com essas relações constitutivas, as equações matemáticas que modelam um contínuo criam o seguinte sistema fechado de EDPs para fluidos newtonianos:

- Equação da continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0,$$

- Equações de Navier-Stokes

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla(p + \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \mathbf{v}) + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right) \right] + \rho \mathbf{g},$$

- Conservação de energia

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{v}) &= -\nabla \cdot (p \mathbf{v}) - \nabla \cdot \left(\frac{2}{3}\mu (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{v} \right) \\ &+ \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right) \cdot \mathbf{v} \right] + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \rho Q + \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v}, \end{aligned}$$

- Desigualdade entrópica

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho s \mathbf{v}) \geq \nabla \cdot \left(\frac{-\lambda \nabla T}{T} \right) + \frac{\rho Q}{T},$$

em que os coeficientes de transporte λ e μ são funções das variáveis do estado termodinâmico

$$\lambda = \lambda(p, T), \quad \mu = \mu(p, T).$$

As equações de transporte para as energias interna e cinética podem ser derivadas e têm as seguintes formas ([Panton (1984)]):

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho e_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_i \mathbf{v}) &= \nabla \mathbf{v} : \left[\mu \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right) - \left(\frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \mathbf{I} \right] \\ &\quad - p \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \rho Q, \\ \frac{\partial(\rho e_c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_c \mathbf{v}) &= -\nabla \cdot (p \mathbf{v}) + p \nabla \cdot \mathbf{v} - \nabla \cdot \left(\frac{2}{3}\mu (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{v} \right) \\ &+ \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right) \cdot \mathbf{v} \right] - \nabla \mathbf{v} : \left[\mu \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right) - \left(\frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \mathbf{I} \right] + \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v}. \end{aligned}$$

No caso em que o fluido é, praticamente, considerado um meio homogêneo incompressível, a massa específica $\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_0$ das partículas não varia durante o seu movimento e as propriedades de transporte são constantes, as equações matemáticas das leis físicas de conservação podem ser simplificadas para se obter

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{v}) = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g}, \quad (2.12)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2.13)$$

em que $\nu = \mu/\rho_0 > 0$ é o coeficiente de viscosidade cinemática molecular (constante) do fluido e p a pressão cinemática (pressão dividida pela massa específica), e todas as outras equações no sistema ficam desacopladas. As equações (2.12) e (2.13) são, respectivamente, conhecidas como equações de Navier-Stokes e equação da continuidade. Elas constituem um sistema fechado de EDPs não-lineares e descrevem qualquer escoamento viscoso, incompressível e isotérmico ([White (1991)]). É importante observar que a validade da equação (2.12) está restrita às situações em que as forças externas atuando sobre o fluido sejam conservativas e o referencial inercial. As equações sob um referencial arbitrário podem ser encontradas, por exemplo, em [Speziale (1987a)]. No presente estudo, assume-se que a única força externa agindo sobre as partículas de fluido é a força gravitacional conservativa.

Uma vez que a escolha das variáveis dependentes está fortemente sujeita ao domínio e às condições de contorno do problema, a discussão sobre a formulação matemática mais adequada para a simulação de escoamentos em geometrias arbitrárias está ainda em aberto. Para escoamentos bidimensionais existem, basicamente, três formulações, i) função de corrente-vorticidade ([Mallison & Davis (1977)]); ii) variáveis primitivas, velocidade-pressão ([Goda (1979)]); e iii) velocidade-vorticidade ([Dennis et al. (1979)]). Nos problemas tridimensionais, embora haja uma analogia da função de corrente, chamada vetor potencial, o desenvolvimento da implementação numérica dessa formulação está, ainda, na sua infância. Em contraste, as outras duas formulações podem ser generalizadas naturalmente para situações tridimensionais. Ao lado da formulação em variáveis primitivas, amplamente utilizada na literatura, atualmente bastante atenção é voltada à formulação vorticidade-velocidade, cuja dificuldade maior é garantir divergências nulas dos campos de velocidade e vorticidade, segundo a precisão da máquina. Uma ótima discussão sobre as três formulações pode ser encontrada, por exemplo, em [Gresho (1991)], [Ern & Smooke (1993)] ou [Guj & Stella (1993)].

No presente trabalho, o conjunto de EPDs (2.12)-(2.13) é tratado numericamente utilizando-se a formulação em variáveis primitivas $(\mathbf{v}, p)$.

2.5 Adimensionalização do Modelo

Em CFD é freqüentemente desejável empregar formas adimensionais das equações de conservação, com o objetivo de mostrar os efeitos físicos contidos nas equações, formular o modelo independente do sistema de unidades, limitar os valores de variáveis e parâmetros e, principalmente, fornecer condições para se obter situações geometricamente similares. Para esses fins, em geral, considera-se uma mudança de variáveis. Se o fluido é definido por um coeficiente de viscosidade cinemática ν e o escoamento caracterizado por uma escala de comprimento L e uma escala de velocidade U_0 , definem-se variáveis adimensionais segundo transformações lineares. Neste trabalho, as transformações utilizadas para adimensionalização das equações (2.12)-(2.13) são aquelas adotadas por Tomé e McKee ([Tomé & McKee (1994)]), isto é,

$$v_i = v_i^* U_0, \quad x_i = x_i^* L, \quad t = t^* L/U_0, \quad p = p^* U_0^2, \quad g_i = g_i^* |\mathbf{g}|. \quad (2.14)$$

Utilizando-se as tranformações (2.14) e desprezando-se o símbolo “*” para simplificar, o modelo (2.12)-(2.13) pode ser representado em forma adimensional e conservativa como

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{v}) = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{1}{F_r^2} \mathbf{g}, \quad (2.15)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2.16)$$

em que

$$Re = \frac{LU_0}{\nu}$$

é o número de Reynolds e

$$F_r = \frac{U_0}{\sqrt{L|\mathbf{g}|}}$$

é o número de Froude. Esses dois números adimensionais são os parâmetros fundamentais em escoamentos incompressíveis envolvendo superfícies livres. O significado físico do número

de Reynolds é que ele pode ser interpretado como a razão das forças de inércia, que são responsáveis pelo movimento do fluido, e as forças viscosas, que são responsáveis pela dissipação devido ao coeficiente de viscosidade molecular, e, em muitas circunstâncias, ele serve para caracterizar o regime do escoamento. O número de Froude relaciona as forças de inércia e a força gravitacional na superfície da terra, e não deve ser desprezado em escoamentos com superfícies livres.

As equações (2.15) e (2.16) podem ser representadas também em notação de Einstein como

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial(v_i v_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{R_e} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{F_r^2} g_i, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.18)$$

em que x_i , v_i e g_i , $i = 1, 2, 3$, são, respectivamente, as coordenadas cartesianas, as componentes do campo de velocidade $\mathbf{v}$ e as componentes do campo gravitacional $\mathbf{g}$. Em conjunto com condições iniciais e de contorno fisicamente corretas, a solução numérica das EDPs não-lineares (2.17) e (2.18), no contexto de diferenças finitas e no regime de números de Reynolds elevados, é o tema do presente trabalho.

2.6 Condições Iniciais e de Contorno

As equações de conservação discutidas anteriormente requerem condições subsidiárias e fisicamente apropriadas para representar problemas específicos. Essas condições, modeladas e implementadas corretamente, são fundamentais para se obter uma solução numérica representativa da problema físico. Para as condições iniciais do escoamento deve-se conhecer, em $t = 0$, a distribuição espacial das variáveis dependentes. Para as condições de contorno é preciso ter alguma informação física, para todo tempo t , das variáveis dependentes na fronteira da região limitando o escoamento. Mais precisamente, as equações (2.17) e (2.18), suplementadas adequadamente com um campo de velocidade inicial em um domínio e uma condição sobre a fronteira do domínio, constituem um Problema de Valor Inicial e

de Fronteira (PVIF) bem posto, no sentido de Hadamard ([Courant & Hilbert (1962)]). A pressão nesse caso fica determinada unicamente (a menos de uma constante aditiva, se o escoamento for incompressível) em função de $\mathbf{v}$ ([Gresho & Sani (1987)], [Gresho (1991)]). É muito importante que o campo inicial respeite a restrição de incompressibilidade (2.18), pois, caso contrário, o problema contínuo pode não possuir solução clássica ([Heywood & Rannacher (1986)]). Formalmente, se Ω é um domínio limitado no $\mathbb{R}^n$, $n=2,3$, $\partial\Omega$ é a fronteira limitando Ω , $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$ são, respectivamente, funções conhecidas sobre Ω e $\partial\Omega$, e $T \in \mathbb{R}^+$ é suficientemente grande, as condições iniciais e de contorno típicas para (2.17) e (2.18) têm as seguintes formas ([Koh (2000)]):

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{a}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.19)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{b}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad t \in (0, T], \quad (2.20)$$

com $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$ satisfazendo $\nabla \cdot \mathbf{a} = 0$, $\mathbf{a}(\mathbf{x}) = \mathbf{b}(\mathbf{x}, 0)$ em Ω , $\int_{\partial\Omega} (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n}) dA = 0$ em $\partial\Omega$, sendo $\mathbf{n}$ o vetor normal exterior à $\partial\Omega$. Na prática, existem basicamente quatro tipos de condições de contorno bem aceitas em escoamentos viscosos, incompressíveis e envolvendo superfícies livres, a saber: a) condição sobre uma superfície sólida impermeável e sem deslizamento de fluido; b) condição sobre uma superfície impermeável e com deslizamento; c) condição sobre uma superfície livre; e d) condições de entrada e saída de fluido do domínio de solução. A condição do tipo a) significa que o fluido deve ser “colado” à superfície ($\mathbf{v} = \mathbf{a}$, $\mathbf{a}$ velocidade da superfície), a qual é freqüentemente conhecida como condição de não-deslizamento (“no-slip”); a condição b) permite o fluido deslizar livremente sobre a superfície e, muitas vezes, é interpretada como superfície de simetria (“free-slip”); a condição c) representa uma interface (“free-surface”) entre o fluido e uma atmosfera ($\sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t}$, $\mathbf{t}$ tensão na superfície); e a condição d) requer o conhecimento do escoamento nos contornos de entrada (“inflow”) e saída (“outflow”) da região de interesse.

Em se tratando da existência e unicidade de solução do PVIF (2.17)-(2.20), é interessante lembrar que para o caso bidimensional a teoria matemática está bem estabelecida. Porém, no caso tridimensional ela ainda se encontra incompleta. Uma discussão resumida dos resultados principais de existência e unicidade de solução pode ser encontrada, por exemplo, em [Dubois et al. (1999)]. No presente trabalho, assume-se que o PVIF (2.17)-(2.20) tem solução única.

Na formulação incompressível e no contexto de variáveis primitivas, uma das dificuldades principais em se resolver numericamente o PVIF (2.17)-(2.20) é a maneira de se tratar a pressão. Diferentemente da variável velocidade, não há uma equação de evolução para o campo de pressão; p deve ser determinada por meio da equação da continuidade (2.18). Tradicionalmente, existem duas técnicas utilizadas frequentemente para se contornar essa questão, a saber: i) utilizar o método da compressibilidade artificial de Chorin ([Chorin (1967)]); e ii) formular uma equação de Poisson ([Harlow & Welch (1965)]). No caso i), a equação da continuidade é perturbada para se obter uma equação de evolução para p . Essa nova equação mais as equações do movimento podem, então, ser resolvidas utilizando-se métodos numéricos para escoamentos compressíveis. No segundo caso, aplica-se a divergência em ambos os lados de (2.17) para se obter a equação de Poisson para p . A solução dessa equação elíptica e o campo de velocidade são, então, atualizados até a massa ser conservada, segundo uma precisão preestabelecida. No presente estudo, em analogia ao que está implementado nos códigos GENSMAC, utiliza-se a formulação da equação de Poisson de Harlow e Welch para a pressão, em que as condições homogêneas de Neumann e/ou Dirichlet sobre a fronteira $\partial\Omega$ são impostas para se obter um Problema de Valor de Fronteira (PVF) bem posto.

2.7 Modelagem da Turbulência

Muitos escoamentos encontrados na natureza e indústria, tais como jatos, esteiras, escoamentos em dutos, camada-limite sobre superfícies sólidas e escoamentos tridimensionais complexos, tornam-se instáveis para o número de Reynolds maior que um valor crítico determinado ([Ames (1965)]). Abaixo desse valor, os escoamentos são bem comportados, e acima do valor crítico eles tornam-se desordenados e irreproduzíveis em detalhes. Nesse último caso, se os escoamentos realizam eficiente mistura e transporte de propriedades físicas e têm vorticidade distribuída irregularmente em todas as direções, eles são “definidos” como escoamentos turbulentos ([The NCFMF of Film Notes (1974)]). Os escoamentos turbulentos são sempre transientes e tridimensionais, mesmo nos casos em que as condições de contorno não variam com o tempo. O intervalo de escalas em tais regimes é muito extenso contendo desde as estruturas turbilhonares menores, com dimensões da ordem das microescalas

dissipativas de Kolmogorov ([Tennekes & Lumley (1972)]), até as estruturas turbilhonares maiores (coerentes), caracterizadas pela geometria do problema. Um estudo abrangente sobre turbulência nos fluidos pode ser encontrado, por exemplo, nas publicações [Tennekes & Lumley (1972)], [Hinze (1975)], [Bradshaw (1976)], [Frisch (1995)] ou [Silveira Neto (1998a)].

Existem poucas maneiras de se simular numericamente escoamentos incompressíveis no regime turbulento ([Mellor & Herring (1973)], [Lakshminarayana (1986)], [Ferziger (1987)], [Wilcox (1993)], [ETT (2000)]) e, dentre elas, destacam-se três metodologias principais, a saber: a) a DNS (“Direct Numerical Simulation”); b) a LES (“Large-Eddy Simulation”); e a RANS (“Reynolds-Averaged Navier-Stokes”). Na DNS, todas as escalas da turbulência são computadas numericamente, a partir das equações de Navier-Stokes e continuidade, sem levar em consideração o fato de que as pequenas e as grandes escalas da turbulência possuem características físicas diferentes. A necessidade de uma malha computacional excessivamente fina e de um tamanho de passo no tempo bastante reduzido exige demanda elevada de recursos computacionais, sendo limitada para baixos valores do número de Reynolds e geometrias simples. Aplicações dessa metodologia podem ser encontradas, por exemplo, em [Orszag & Patterson (1972)], [Rogers & Moin (1987)] e [Na & Moin (1998)]. A LES, a qual é formulada com base num processo de filtragem das equações de conservação, permite-se, da mesma maneira como na DNS, computar as escalas maiores (“grid-scale”) da turbulência, e os efeitos das estruturas de pequenas escalas (“subgrid-scale”) são modelados. Os praticantes dessa metodologia argumentam que as escalas pequenas da turbulência são mais homogêneas e isotrópicas e, portanto, fáceis de modelar. Entretanto, quando a malha computacional é muito fina, o número de escalas que requer modelagem torna-se muito pequeno e, conseqüentemente, a metodologia LES aproxima-se da DNS. Exemplos e aplicações dessa técnica podem ser encontrados em [Smagorinsky (1963)], [Deardorff (1970)], [Moin & Kim (1982)], [Silveira Neto (1998)] e [Meneveau & Katz (2000)]. A RANS é semelhante à LES, em que a média temporal de Reynolds, um caso particular de filtro, é utilizada para simplificar a modelagem “submalha”, ou seja, informações sobre flutuações turbulentas são obtidas do tensor de tensões de Reynolds. Uma aplicação bastante interessante dessa metodologia pode ser encontrada em [Li et al. (1994)].

Neste trabalho, emprega-se a metodologia RANS na simulação de escoamentos incompressíveis turbulentos. Em particular, adota-se aquela família de modelos baseados no conceito de viscosidade turbulenta introduzido por Boussinesq ([Boussinesq (1877)]).

2.8 Equações de Navier-Stokes com Média de Reynolds e Aproximação de Boussinesq

Nos escoamentos incompressíveis em regime turbulento, as variáveis de campo $v_i, i = 1, 2, 3$, e p são funções aleatórias do tempo e espaço, e até o presente momento não se conhecem tais funções que satisfaçam às equações (2.17) e (2.18). Essa dificuldade levou Osborne Reynolds ([Reynolds (1895)]) a reformular o modelo em termos de variáveis médias em um intervalo de tempo. Para o caso de escoamentos turbulentos transientes, Reynolds postulou que o campo médio deveria variar lentamente no tempo, comparado com o tempo das flutuações turbulentas. Ele propôs, então, a existência de uma escala de tempo característica T , sobre a qual a média temporal deveria ser tomada.

A expectativa para a simulação dos efeitos da turbulência sobre o comportamento do escoamento é que os códigos GENSMAC, para problemas bidimensionais e com simetria radial, capturem satisfatoriamente as variações no tempo que são menores do que aquelas na escala de tempo T proposta por Reynolds. Para tanto, considera-se o intervalo de tempo T suficientemente grande com respeito à escala de tempo T_0 das flutuações turbulentas, porém pequeno em relação à escala de tempo T_1 dos outros efeitos com respeito ao valor médio. Se $\bar{\phi}(\mathbf{x}, t)$ é a média no tempo T da variável instantânea $\phi(\mathbf{x}, t)$ definida por

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \phi(\mathbf{x}, \tau) d\tau, \quad T_0 \ll T \ll T_1,$$

e $\phi'(\mathbf{x}, t)$ é o desvio de média zero em $\phi(\mathbf{x}, t)$, a decomposição de escalas de Reynolds é definida por

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \bar{\phi}(\mathbf{x}, t) + \phi'(\mathbf{x}, t),$$

satisfazendo propriedades específicas que estão bem explicadas em [Wilcox (1993)], [Silva & Cruz (1998)] e [Dubois et al. (1999)]. A figura 2.1, mostrada adiante, ilustra esquematicamente a relação entre $\phi(\mathbf{x}, t)$, $\phi'(\mathbf{x}, t)$ e $\bar{\phi}(\mathbf{x}, t)$, e as escalas de tempo T_0 e T_1 , para o caso de um escoamento turbulento transiente.

Com a separação de escalas de Reynolds, as equações de conservação de massa e de quantidade de movimento (equações médias de Reynolds) para o escoamento médio podem ser escritas como

Figura 2.1: Representação esquemática da média temporal clássica para escoamentos turbulentos transientes.

$$\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{v}_i \bar{v}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} - \overline{v'_i v'_j} \right) + g_i, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.22)$$

em que $\overline{v'_i v'_j}$, chamado tensor de tensões de Reynolds ou tensões turbulentas, resulta das não-linearidades presentes nas equações do movimento e representa os efeitos da turbulência sobre o escoamento médio. É importante ter em mente que o modelo (2.21)-(2.22) não constitui um sistema fechado. Para o seu fechamento é necessário empregar modelagem adicional determinística. Existem duas técnicas bem populares de se fechar o sistema (2.21) e (2.22), a saber: a) formular equações de transporte para todas as componentes do tensor de Reynolds (“Reynolds stress model”). Exemplos dessa metodologia podem ser encontrados em [Hanjalić & Launder (1972)], [Launder et al. (1975)] e [Launder (1989)]; b) prescrever uma relação entre o tensor de Reynolds e o gradiente médio de velocidade. Nesse caso, embora existam modelos prescrevendo relações não-lineares ([Speziale (1987)]), o mais popular utiliza a aproximação de Boussinesq, que relaciona, empiricamente, o tensor de Reynolds com o campo médio de velocidade.

É interessante perceber que a turbulência produz dois efeitos muito importantes sobre o escoamento médio: absorve energia cinética e converte-a em energia térmica; aumenta

o transporte de massa, quantidade de movimento e energia normais às linhas de corrente. Sendo ambos efeitos governados pelo coeficiente de viscosidade molecular do fluido, é natural postular, em analogia com a lei de viscosidade de Newton, que o efeito da turbulência sobre o escoamento médio seja representado por uma viscosidade “aumentada”. Em outras palavras, o tensor de tensões de Reynolds é proporcional ao tensor de médio deformações mais a contribuição média da energia cinética devida ao movimento turbulento, em que a constante de proporcionalidade é conhecida como viscosidade turbulenta (“eddy-viscosity”). Ainda mais, tal relação constitutiva deve ser consistente com leis físicas bem estabelecidas. Foi isso o que Boussinesq propôs em 1877. Comparando-se as equações médias e instantâneas do movimento, o tensor de tensões de Reynolds pode ser interpretado como tensões sobre as partículas materiais em adição às tensões determinadas pela pressão e tensões viscosas. Assim, o tensor médio de tensões em um escoamento turbulento pode ser aproximado por

$$\bar{\sigma}_{ij} \approx -\bar{p}\delta_{ij} + \nu\bar{D}_{ij} - \overline{v'_i v'_j}, \quad (2.23)$$

em que $\bar{D}_{ij}$ é o tensor médio de deformações definido por

$$\bar{D}_{ij} = \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i}. \quad (2.24)$$

Boussinesq assumiu que o tensor médio de tensões num escoamento incompressível e em regime turbulento pode ser representado da seguinte forma

$$\bar{\sigma}_{ij} = \left(-\bar{p}\delta_{ij} + \nu\bar{D}_{ij} \right) + \left(-\bar{p}_t\delta_{ij} + \nu_t\bar{D}_{ij} \right), \quad (2.25)$$

em que $\bar{p}_t$ é a pressão turbulenta e ν_t , a viscosidade turbulenta.

Vale a pena salientar neste ponto que alguma objeção deve ser feita se a viscosidade turbulenta for utilizada da mesma forma que a viscosidade molecular: a viscosidade molecular é uma propriedade do fluido, presente também quando ele está em repouso; em contrapartida, a viscosidade turbulenta pode ser somente efetiva se o fluido estiver em movimento. Ainda mais, a viscosidade turbulenta não se origina da viscosidade molecular, mas sim das estruturas turbilhonares produzidas pela turbulência, e depende das características do campo de escoamento. Comparando-se (2.23) e (2.25), identifica-se a aproximação de Boussinesq, isto é,

$$-\overline{v'_i v'_j} = \nu_t\bar{D}_{ij} - \frac{2}{3}\bar{\kappa}\delta_{ij}, \quad (2.26)$$

em que κ é uma grandeza instantânea, relacionada às flutuações turbulentas e que mede a intensidade das flutuações de velocidade. A função escalar κ foi introduzida por Boussinesq em analogia com a pressão produzida por flutuações moleculares, e seu significado físico pode ser obtido pela contração de (2.26). De fato, desde que $\bar{D}_{ii} = 0$ obtém-se $\kappa = \frac{1}{2} v'_i v'_i$.

Utilizando-se as transformações (2.14) em conjunto com a viscosidade turbulenta adimensionalizada como

$$\nu_t = \nu_t^* \nu, \quad (2.27)$$

e substituindo-se a aproximação de Boussinesq (2.26) em (2.21), obtém-se as equações adimensionais de Navier-Stokes com média de Reynolds (“RANS equations”), ou, simplesmente, equações médias de Navier-Stokes, a saber:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial(v_i v_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p_e}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{Fr^2} g_i + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu_t D_{ij} \right), \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.29)$$

em que p_e é a pressão efetiva média, definida por

$$p_e = p + p_t = p + \frac{2}{3} \frac{1}{Re} \kappa. \quad (2.30)$$

É importante observar que as equações médias (2.28) e (2.29) constituem um sistema de EDP que contém quatro equações e cinco incógnitas e, portanto, necessitam de mais uma hipótese adicional para o fechamento. Assim, no contexto da hipótese de Boussinesq, o problema de fechamento da dinâmica média é encontrar uma equação para ν_t em função da posição e do tempo. Por razões dimensionais, a viscosidade turbulenta pode ser calculada utilizando-se a seguinte aproximação

$$\nu_t \approx u_t l_t, \quad (2.31)$$

em que u_t e l_t são, respectivamente, as escalas de velocidade e de comprimento da turbulência. Nos modelos de turbulência em que se assume a existência de uma viscosidade adicional, ν_t é prescrita algebricamente em função de outras grandezas derivadas de equações diferenciais. Dependendo do número e do tipo das equações empregadas, os modelos são classificados como algébricos, de uma, duas, ou mais equações. Nos modelos algébricos, ou modelos de zero equação (comprimento de mistura), uma expressão algébrica é acoplada às equações médias

de Navier-Stokes para representar a viscosidade turbulenta em função de quantidades médias. O exemplo clássico é o comprimento de mistura de Prandtl ([Cebeci & Smith (1974)]). Nos modelos de uma equação, uma EDP de transporte para a energia cinética é adicionada às equações médias para descrever a produção, convecção e dissipação dessa grandeza. Um exemplo bem interessante é o modelo de Bradshaw ([Bradshaw et al.(1967)]). Nos modelos de duas equações, duas EDPs de transporte são adicionadas às equações médias para fechar o sistema. Exemplos típicos são os modelos $\kappa - \varepsilon$ ([Harlow & Nakayama (1967)], [Launder & Spalding (1974)]) e os modelos $\kappa - \omega$ ([Wilcox (1988)]). No presente trabalho adota-se a família dos modelos $\kappa - \varepsilon$, porque, segundo a literatura especializada, eles simulam escoamentos complexos muito melhor que os modelos algébricos e de uma equação, e são significativamente mais simples do que os modelos de alta ordem. Entretanto, a grande dificuldade na sua implementação é o tratamento das regiões próximas aos contornos rígidos, onde a viscosidade molecular exerce influência decisiva na estrutura do movimento. Uma grande variedade de modelos de turbulência tipo $\kappa - \varepsilon$ estão disponíveis na literatura, e os mais populares em aplicações práticas são os modelos de Launder e Spalding ([Launder & Spalding (1974)]) e os modelos de Yakhot e Orszag ([Yakhot & Orszag (1986)], [Yakhot et al. (1992)]).

No presente estudo dois modelos $\kappa - \varepsilon$ de turbulência particulares foram estudados, a saber: i) o modelo $\kappa - \varepsilon$ clássico de Launder e Spalding, e ii) o modelo $\kappa - \varepsilon$ para números Reynolds baixos devido a Yang e Shih ([Yang & Shih (1993)]).

2.9 Modelo $\kappa - \varepsilon$ para Números de Reynolds Elevados

A idéia central para a derivação do modelo $\kappa - \varepsilon$ tradicional é acoplar às equações médias de Navier-Stokes duas EDPs de transporte, para descrever a evolução da viscosidade adicional. Uma dessas equações governa a distribuição de κ , a energia cinética média local do movimento flutuante, por todo o campo de escoamento; a outra governa uma característica turbulenta de dimensão diferente $\varepsilon = \nu(\overline{\partial v'_i / \partial x_j})^2$, a taxa média de dissipação (ou de destruição) da energia cinética. Ambas as EDPs que governam essas duas variáveis turbulentas podem ser obtidas, levando-se em conta argumentos empíricos ([McComb (1990)]), a partir das equações transientes de Navier-Stokes ([Harlow & Nakayama (1967)], [Tennekes &

Lumley (1972)]). O conhecimento das variáveis κ e ε permite a avaliação da viscosidade turbulenta local ν_t , a partir da qual as tensões turbulentas são estimadas.

No modelo $\kappa - \varepsilon$ clássico, as escalas características de comprimento e de velocidade da turbulência são, respectivamente, estimadas em função das grandezas médias κ e ε como

$$l_t \approx \kappa^{3/2}/\varepsilon, \quad u_t \approx \kappa^{1/2}. \quad (2.32)$$

A escala de tempo do movimento turbulento é, então, aproximada por

$$T_t = \frac{l_t}{u_t} = \kappa/\varepsilon. \quad (2.33)$$

A viscosidade turbulenta dada em (2.31), requerida para fechar as equações (2.28) e (2.29), é, portanto, obtida de (2.32) segundo a proposta de Prandtl-Komolgorov

$$\nu_t \approx l_t u_t = C_\mu \kappa T_t, \quad (2.34)$$

em que C_μ é uma constante empírica. Definindo-se as variáveis turbulentas adimensionais pela transformação

$$\kappa = \kappa^* \nu U_0 / L, \quad \varepsilon = \varepsilon^* \nu U_0^2 / L^2, \quad (2.35)$$

e desprezando-se o símbolo “*” para simplificar, o modelo $\kappa - \varepsilon$ clássico na forma adimensional conservativa é modelado pelas equações ([Launder & Spalding (1974)])

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial(v_i v_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p_e}{\partial x_i} + \frac{1}{R_e} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{F_r^2} g_i + \frac{1}{R_e} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu_t D_{ij} \right), \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} + \frac{\partial(\kappa v_j)}{\partial x_j} = \frac{1}{R_e} \frac{\partial}{\partial x_j} \left((1 + \nu_t/\sigma_\kappa) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right) + \nu_t D_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \varepsilon, \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial(\varepsilon v_j)}{\partial x_j} = \frac{1}{R_e} \frac{\partial}{\partial x_j} \left((1 + \nu_t/\sigma_\varepsilon) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + (C_{1\varepsilon} \nu_t D_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - C_{2\varepsilon} \varepsilon) / T_t, \quad (2.39)$$

$$T_t = \kappa/\varepsilon, \quad (2.40)$$

$$\nu_t = C_\mu \kappa T_t, \quad (2.41)$$

em que σ_κ e σ_ε , que aparecem em (2.38) e (2.39), são coeficientes de difusão turbulentos, e $C_{1\varepsilon}$ e $C_{2\varepsilon}$ em (2.39) são constantes empíricas. Essas constantes foram obtidas por otimização numérica ([Jones & Launder (1972)], [Launder & Spalding (1972)]).

O modelo $\kappa - \varepsilon$ clássico, em forma adimensional e conservativa, pode ser também escrito em notação de Gibbs como

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{v}) = -\nabla p_e + \frac{1}{R_e} \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{1}{F_r^2} \mathbf{g} + \frac{1}{R_e} \nabla \cdot (\nu_t \mathbf{D}), \quad (2.42)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} + \nabla \cdot (\kappa \mathbf{v}) = \frac{1}{R_e} \nabla \cdot \left((1 + \nu_t / \sigma_\kappa) \nabla \kappa \right) + \mathbf{P} - \varepsilon, \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{v}) = \frac{1}{R_e} \nabla \cdot \left((1 + \nu_t / \sigma_\varepsilon) \nabla \varepsilon \right) + (C_{1\varepsilon} \mathbf{P} - C_{2\varepsilon} \varepsilon) / T_t, \quad (2.45)$$

$$T_t = \kappa / \varepsilon, \quad (2.46)$$

$$\nu_t = C_\mu \kappa T_t, \quad (2.47)$$

em que

- $R_e = LU_0 / \nu$ é o número de Reynolds,
- $F_r = U_0 / (L|\mathbf{g}|)^{1/2}$ é o número de Froude,
- $C_\mu = 0,09$, $C_{1\varepsilon} = 1,44$, $C_{2\varepsilon} = 1,92$, $\sigma_\kappa = 1,0$ e $\sigma_\varepsilon = 1,3$,
- $\mathbf{v} = (u, v, w)$ é o vetor velocidade médio,
- $p_e = p + \frac{2}{3} \frac{1}{R_e} \kappa$ é a pressão efetiva média,
- $\mathbf{D} = \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T$ é o tensor de deformações médio,
- $\mathbf{P} = \nu_t (\mathbf{D} : \nabla \mathbf{v})$ é a produção de energia cinética turbulenta média.

No caso tridimensional, a forma expandida das equações do modelo $\kappa - \varepsilon$ clássico, utilizando-se coordenadas cartesianas, torna-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} = & CONV(u) - \frac{\partial p_e}{\partial x} + \frac{1}{R_e} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{F_r^2} g_x \\ & + \frac{1}{R_e} \left[2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu_t \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu_t \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_t \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right) \right], \end{aligned} \quad (2.48)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} = & CONV(v) - \frac{\partial p_e}{\partial y} + \frac{1}{R_e} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{F_r^2} g_y \\ & + \frac{1}{R_e} \left[2 \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu_t \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu_t \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_t \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right) \right], \end{aligned} \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} = & CONV(w) - \frac{\partial p_e}{\partial z} + \frac{1}{R_e} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{F_r^2} g_z \\ & + \frac{1}{R_e} \left[2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_t \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu_t \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu_t \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right) \right], \end{aligned} \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (2.51)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \kappa}{\partial t} = & CONV(\kappa) + \frac{1}{R_e} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left((1 + \nu_t/\sigma_\kappa) \frac{\partial \kappa}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((1 + \nu_t/\sigma_\kappa) \frac{\partial \kappa}{\partial y} \right) \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left((1 + \nu_t/\sigma_\kappa) \frac{\partial \kappa}{\partial z} \right) \right] + P - \varepsilon, \end{aligned} \quad (2.52)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = & CONV(\varepsilon) + \frac{1}{R_e} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left((1 + \nu_t/\sigma_\varepsilon) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((1 + \nu_t/\sigma_\varepsilon) \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} \right) \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left((1 + \nu_t/\sigma_\varepsilon) \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) \right] + (C_{1\varepsilon}P - C_{2\varepsilon}\varepsilon)/T_t, \end{aligned} \quad (2.53)$$

$$T_t = \frac{\kappa}{\varepsilon}, \quad (2.54)$$

$$\nu_t = C_\mu \kappa T_t, \quad (2.55)$$

$$\begin{aligned} P = & \nu_t \left[2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \right. \\ & \left. + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 \right], \end{aligned} \quad (2.56)$$

em que os termos convectivos $CONV(\phi)$, ($\phi = u, v, w, \kappa$ ou ε), definidos em (2.48)-(2.50) e (2.52)-(2.53) são, respectivamente, representados neste trabalho como

$$CONV(u) = -\left(\frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} + \frac{\partial(uw)}{\partial z}\right),$$

$$CONV(v) = -\left(\frac{\partial(vv)}{\partial y} + \frac{\partial(vu)}{\partial x} + \frac{\partial(vw)}{\partial z}\right),$$

$$CONV(w) = -\left(\frac{\partial(ww)}{\partial z} + \frac{\partial(wu)}{\partial x} + \frac{\partial(wv)}{\partial y}\right),$$

$$CONV(\kappa) = -\left(\frac{\partial(\kappa u)}{\partial x} + \frac{\partial(\kappa v)}{\partial y} + \frac{\partial(\kappa w)}{\partial z}\right),$$

$$CONV(\varepsilon) = -\left(\frac{\partial(\varepsilon u)}{\partial x} + \frac{\partial(\varepsilon v)}{\partial y} + \frac{\partial(\varepsilon w)}{\partial z}\right).$$

As equações para as variáveis transportadas por convecção e difusão (2.48)-(2.50) e (2.52)-(2.53) podem ser, convenientemente, representadas na seguinte forma geral

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = CONV(\phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z}) + S_\phi, \quad (2.57)$$

$$CONV(\phi) = -\left(\frac{\partial(\phi u)}{\partial x} + \frac{\partial(\phi v)}{\partial y} + \frac{\partial(\phi w)}{\partial z}\right), \quad (2.58)$$

em que ϕ é uma das variáveis transportadas u, v, w, κ ou ε . O coeficiente de difusividade γ_ϕ e o termo-fonte S_ϕ assumem significados diferentes de acordo com a variável dependente representada por ϕ .

2.10 Modelo $\kappa - \varepsilon$ de Yang & Shih para Números de Reynolds Pequenos

Uma singularidade pode aparecer se o modelo $\kappa - \varepsilon$ convencional for aplicado, sem cautela, muito próximo a um contorno rígido. Esse fato pode ser visto a partir das equações (2.45) e (2.46), porque, ao se aproximar de um contorno rígido, a variável turbulenta κ tende

a zero ([Nagano & Tagawa (1990)]). Portanto, a escala de tempo T_t dada em (2.46) não pode representar a escala de tempo do movimento turbulento muito próximo às superfícies rígidas, especialmente quando há pontos de estagnação. Para contornar essa deficiência do modelo, estratégias diferentes são propostas na literatura. Em [Patel et al. (1985)] há uma discussão muito interessante sobre alguns modelos populares. Em particular, Yang e Shih ([Yang & Shih (1993)]) propuseram uma nova escala de tempo, de maneira que o modelo resultante recupere o modelo $\kappa - \varepsilon$ clássico longe dos contornos rígidos e remova as singularidades nesses contornos. Assim, a escala de tempo proposta por Yang e Shih, para o movimento turbulento, é dada por

$$T_t = \frac{\kappa}{\varepsilon} + C_k \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2}, \quad (2.59)$$

em que o primeiro termo do lado direito de (2.59) é a escala de tempo longe dos contornos rígidos. A segunda parte corresponde à escala de tempo de Kolmogorov, sendo C_k uma constante variando de 0,50 a 3,00 que depende do problema em estudo. Neste trabalho, $C_k = 1,0$ é utilizada nas implementações.

Ao se utilizar a escala de velocidade, que aparece em (2.32), e a escala de tempo T_t dada por (2.59), obtêm-se as outras grandezas características do movimento turbulento. Então, a viscosidade turbulenta dada em (2.47) pode ser substituída por

$$\nu_t = C_\mu f_\mu \kappa T_t, \quad (2.60)$$

em que f_μ é uma função de amortecimento, que inclui diretamente o efeito da viscosidade molecular em regiões adjacentes aos contornos rígidos ([van Driest (1956)]). A expressão para f_μ , que aparece em (2.60), foi escolhida por Yang e Shih como

$$f_\mu = \left(1 - \exp(-a_1 Re_y - a_3 Re_y^3 - a_5 Re_y^5) \right)^{1/2}, \quad (2.61)$$

em que Re_y é o número de Reynolds local definido por

$$Re_y = \frac{y \kappa^{1/2}}{\nu}, \quad (2.62)$$

sendo y a distância normal até a fronteira rígida, e a_1, a_3 e a_5 constantes, cujos valores, obtidos pela comparação do desempenho do modelo com dados da DNS para escoamentos turbulentos em canais, são dados por

$$a_1 = 1,5 \times 10^{-4}, a_3 = 5,0 \times 10^{-7}, a_5 = 1,0 \times 10^{-10}. \quad (2.63)$$

Em síntese, o modelo $\kappa - \varepsilon$ para números de Reynolds pequenos proposto por Yang e Shih pode, então, ser apresentado pela forma adimensional conservativa:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial(v_i v_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p_e}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{F_r^2} g_i + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu_t D_{ij} \right), \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.64)$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.65)$$

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} + \frac{\partial(\kappa v_j)}{\partial x_j} = \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left((1 + \nu_t/\sigma_\kappa) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right) + \nu_t D_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \varepsilon, \quad (2.66)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial(\varepsilon v_j)}{\partial x_j} = \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left((1 + \nu_t/\sigma_\varepsilon) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + (C_{1\varepsilon} \nu_t D_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - C_{2\varepsilon} \varepsilon)/T_t + E, \quad (2.67)$$

$$T_t = \frac{\kappa}{\varepsilon} + C_k \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2}, \quad (2.68)$$

$$\nu_t = C_\mu f_\mu \kappa T_t. \quad (2.69)$$

Na equação (2.67), E é um termo-fonte, cujo efeito está relacionado à presença de contornos rígidos. Geralmente ele leva em conta os efeitos da difusão viscosa de κ e ε e a não-isotropia dessas grandezas próximo a esses contornos. Segundo as transformações (2.14) para adimensionalização, a sua forma completa é, freqüentemente, definida como

$$E = \frac{\nu_t}{Re} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right), \quad i, j, k = 1, 2, 3. \quad (2.70)$$

Para o caso dos problemas bidimensionais tratados neste trabalho, a seguinte forma simplificada de E é utilizada na implementação:

$$E = 2 \frac{\nu_t}{Re} \left[\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)^2 \right]. \quad (2.71)$$

As constantes empíricas $C_{1\varepsilon}$ e $C_{2\varepsilon}$, e os coeficientes de difusão turbulentos σ_κ e σ_ε nas equações (2.66) e (2.67) são, respectivamente, prescritos neste trabalho segundo a forma revisada do modelo de Jones e Launder ([Jones & Launder (1972)]) proposta por Hoffman ([Hoffman (1975)]):

$$\bullet \quad C_{1\varepsilon} = 1,81, \quad C_{2\varepsilon} = 2,00, \quad \sigma_\kappa = 2,00 \quad \text{e} \quad \sigma_\varepsilon = 3,00.$$

2.11 Leis de Conservação em Coordenadas Cilíndricas

Em forma dimensional, as equações para a conservação de quantidade de movimento, massa e quantidades turbulentas κ e ε podem ser escritas na forma da equação geral (2.57), utilizando-se o sistema de coordenadas cilíndricas (r, θ, z) , cujas componentes de velocidade são (v_r, v_θ, v_z) . A equação geral nesse novo sistema de coordenadas é, então, dada por ([Amano & Brandt (1984)])

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = CONV(\phi) + \frac{\partial}{\partial z} \left[\gamma_z \frac{\partial \phi}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\gamma_r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right] + S_\phi, \quad (2.72)$$

$$CONV(\phi) = - \left(\frac{\partial}{\partial z} (v_z \phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r \phi) \right), \quad (2.73)$$

em que a variável ϕ representa as variáveis transportadas v_r , v_θ , v_z , κ ou ε . A equação da continuidade, por exemplo, é obtida de (2.72) fazendo-se $\phi = 1$ e $S_\phi = 0$. As outras equações de transporte podem ser obtidas também da equação (2.72), escolhendo-se, convenientemente, a propriedade transportada ϕ , os coeficientes de transporte γ_r e γ_z , e os termos-fonte S_ϕ .

A tabela I lista as informações necessárias para se obter as leis de conservação no sistema de coordenadas cilíndricas.

Equação	ϕ	γ_r	γ_z	S_ϕ
Quant. Movimento em r	v_r	$2\nu_e - \nu$	ν_e	$-\frac{\partial p_e}{\partial r} - (2\nu_e - \nu) \frac{v_r}{r^2} + \frac{v_\theta^2}{r} + \frac{\partial}{\partial z} (\nu_t \frac{\partial v_z}{\partial r})$
Quant. Movimento em θ	v_θ	ν_e	ν_e	$-\frac{v_r v_\theta}{r} - \nu_e \frac{v_\theta}{r^2} - \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial \nu_t}{\partial r}$
Quant. Movimento em z	v_z	$2\nu_e$	$\nu_e - \nu$	$-\frac{\partial p_e}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \nu_t \frac{\partial v_r}{\partial z})$
Energia cinética	κ	$\nu + \nu_t / \sigma_\kappa$	$\nu + \nu_t / \sigma_\kappa$	$P - \varepsilon$
Dissipação de energia	ε	$\nu + \nu_t / \sigma_\varepsilon$	$\nu + \nu_t / \sigma_\varepsilon$	$(C_{1\varepsilon} P - C_{2\varepsilon} \varepsilon) / T_t + E$

Tabela I: Informações para se obter as leis de conservação no sistema de coordenadas cilíndricas, mostrando a variável transportada genérica ϕ , os coeficientes de difusividade γ_r e γ_z , e os termos-fonte S_ϕ .

Nesta tabela, a escala de tempo T_t , a viscosidade efetiva ν_e , a produção de energia cinética turbulenta P e o termo-fonte E são, respectivamente, dados pelas expressões

$$T_t = \frac{\kappa}{\varepsilon} + C_k \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2}, \quad (2.74)$$

$$\nu_e = \nu + \nu_t = \nu + C_\mu f_\mu \kappa T_t, \quad (2.75)$$

$$P = \nu_t \left[2 \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{v_r}{r} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right)^2 + \left(r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\theta}{r} \right) \right)^2 \right], \quad (2.76)$$

$$E = 2\nu\nu_t \left[\left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial r^2} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right)^2 \right]. \quad (2.77)$$

Os modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$, o convencional e o de Yang e Shih, são obtidos de (2.72)–(2.77) e da tabela I. No modelo clássico assume-se que $C_k = 0$, $E = 0$ e $f_\mu = 1$.

Capítulo 3

Método Computacional, Condições Iniciais e de Contorno e Discretização das Equações de Conservação

3.1 Introdução

A maior dificuldade em se simular escoamentos incompressíveis com superfícies livres é que a própria posição da superfície, desconhecida a priori, precisa ser determinada como parte do algoritmo de solução. Os métodos numéricos para resolver essa classe de problemas podem ser classificados, principalmente, em três categorias: os eulerianos, os lagrangeanos e os lagrangeano-eulerianos arbitrários (LEA). Os métodos eulerianos são caracterizados por um sistema de coordenadas estacionário ou móvel, com velocidade prescrita do domínio de solução. A grande vantagem nessa metodologia é que o fluido pode sofrer fortes distorções sem que o algoritmo perca precisão. A desvantagem é a dificuldade em se determinar a posição da superfície livre. Os métodos lagrangeanos são caracterizados por um sistema de coordenadas que se move continuamente com o fluido e permitem que a superfície livre seja calculada precisamente. A desvantagem é que eles são imprecisos quando o fluido sofre deformações acentuadas. A forma mista LEA pode tornar-se superior às anteriores, se ela combinar as vantagens e superar as desvantagens associadas aos métodos eulerianos e lagrangeanos. Os métodos “Marker and Cell” (MAC) ([Harlow & Welch (1965)], [Welch

et al. (1966)] e “Volume of Fluid” (VOF) ([Hirt & Nichols (1981)]) são métodos eulerianos típicos. O método de Hirt, Cook e Butler ([Hirt et al. (1970)]) e o método de Ramaswamy e Kawahara ([Ramaswamy & Kawahara (1987)]) representam bem os métodos lagrangeanos, e os métodos particulares de Hirt, Amsden e Cook ([Hirt et al. (1974)]) e Chan ([Chan (1975)]) são bons exemplos de métodos tipo LEA.

O método MAC foi uma das primeiras tentativas bem sucedidas a ser utilizada em escoamentos incompressíveis com superfícies livres. Ele emprega uma malha fixa de volumes de controle, em que a posição do fluido em movimento é determinada por um conjunto de partículas marcadoras sem massa, sem volume ou quaisquer outras propriedades. As posições dessas partículas são obtidas de acordo com o campo de velocidade computado. No método VOF, a posição da superfície livre é determinada por uma função escalar $F(x, y, z, t)$, representando a fração de fluido contida em uma célula computacional. Acredita-se que a difusão numérica é um dos principais problemas do VOF, porque F deve ser determinada por uma equação de convecção pura. No método lagrangeano particular de Ramaswamy e Kawahara, a superfície livre é determinada por um sistema de coordenadas movimentando-se com as partículas do fluido. Embora o método forneça uma forma precisa da superfície, as trajetórias das partículas podem cruzar-se umas com as outras nos casos em que o fluido é exposto a deformações críticas. No método de Hirt, Amsden e Cook a fronteira livre é determinada pelo método lagrangeano, ao passo que os pontos da malha no interior do domínio são redistribuídos para evitar cruzamentos. Neste trabalho, para simular numericamente o movimento geral de escoamentos incompressíveis com superfícies livres adota-se a filosofia de malhas fixas, em particular, a metodologia MAC.

Vários outros pesquisadores apresentaram modificações, extensões ou variações da metodologia MAC, e dentre eles podem-se citar os trabalhos excelentes de Hirt e Shannon ([Hirt & Shannon (1968)]) e Nichols e Hirt ([Nichols & Hirt (1973)]) que aplicaram as condições de contorno fisicamente corretas na fronteira livre do fluido. Amsden e Harlow ([Amsden & Harlow (1970)]) introduziram o método “Simplified Marker and Cell” (SMAC) para eliminar as dificuldades associadas com a aplicação das condições de fronteira do MAC. Pracht ([Pracht (1971)]) desenvolveu uma extensão do MAC (MACRL) para tratar os problemas em que o número de Reynolds é muito pequeno (“creeping flows”). Hirt e Cook ([Hirt & Cook (1972)]) desenvolveram uma variante do MAC para descrever escoamentos transientes tridimensionais sobre obstáculos e geometrias irregulares. Utilizando as mesmas

condições de contorno empregadas por Hirt e Shannon, Tomé e McKee ([Tomé & McKee (1994)]) desenvolveram o método GENSMAC, caracterizado como uma generalização do método SMAC para o tratamento de domínios bidimensionais arbitrários. Mais tarde, Castelo et al. ([Castelo et al. (1999)]) incorporaram tensão superficial no código GENSMAC para estudar uma gota apoiada e/ou pendente e preencher recipientes curvos. Em seguida, Tomé et al. ([Tomé et al. (2000a)]) propuseram uma extensão do código GENSMAC para resolver escoamentos em geometrias com simetria radial. E, mais recentemente, Tomé et al. ([Tomé et al. (2000c)]) estenderam o código GENSMAC para problemas tridimensionais (GENSMAC3D).

Neste capítulo, é apresentada uma adaptação do procedimento computacional contido nos códigos GENSMAC, GENSMAC com simetria radial e GENSMAC3D para a simulação do transporte turbulento na presença de superfícies livres/rígidas. Discutem-se também as limitações no passo temporal, as condições iniciais e de contorno e as discretizações por diferenças finitas dos modelos particulares analisados.

3.2 Procedimento Computacional

As equações de conservação discutidas no capítulo 2 são resolvidas explicitamente e de maneira análoga àsquelas dos códigos GENSMAC. A técnica de discretização para resolver o conjunto de EDPs (2.48)–(2.53) ou (2.64)–(2.67) é o método de diferenças finitas sobre malhas diferenciadas (“staggered grids”). Nessas malhas, a pressão efetiva e as variáveis turbulentas κ , ε e ν_t são avaliadas no centro das células computacionais e as velocidades nos centros das faces. A disposição das variáveis dependentes em uma célula computacional típica é ilustrada na figura 3.1. O procedimento de solução empregado é uma variante do método da projeção de Chorin ([Chorin (1968)]), proposto originalmente por Harlow e Welch ([Harlow & Welch (1965)]) e bem discutido por Peyret e Taylor ([Peyret & Taylor (1983)]). No método particular de cálculo de Harlow e Welch, a solução numérica das equações é avançada no tempo em dois estágios: no primeiro, um campo de velocidades tentativo é obtido a partir das equações do movimento. Uma vez que esse campo, em geral, não satisfaz a equação da continuidade, um passo corretor é necessário; no segundo estágio, o campo de velocidades, obtido no estágio anterior, mais o campo de pressão são corrigidos, de maneira

que a restrição de incompressibilidade (2.43) seja satisfeita. Este segundo estágio dá origem a uma equação de Poisson para um campo projetor ψ , com condições de contorno do tipo Neumann ([Gresho & Sani (1987)]). O método de solução proposto neste trabalho para a simulação do regime turbulento é inteiramente análogo ao de Harlow e Welch e, formalmente, ele é apresentado na sequência.

Figura 3.1: Célula computacional típica que mostra onde as variáveis são discretizadas. A variável genérica ϕ representa p_e , κ , ε ou ν_t .

Considera-se $\tilde{p}_e$ uma pseudo-pressão arbitrária satisfazendo a condição correta para a pressão na superfície livre. Essa pressão é construída empregando-se a condição de tensões normais nulas nas células contendo a superfície livre, e é escolhida arbitrariamente, por exemplo $\tilde{p}_e = 0$, nas células cheias de fluido. Seja $\tilde{\mathbf{v}}$ um campo de velocidades aproximado, que não satisfaz, necessariamente, a restrição de incompressibilidade. Define-se a partir de (2.42) e num tempo $t = t_0$ a relação

$$\left. \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}}{\partial t} \right|_{t=t_0} = \left\{ -\nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{v}) - \nabla \tilde{p}_e + \frac{1}{R_e} \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{1}{F_r^2} \mathbf{g} + \nabla \cdot (\nu_t \mathbf{D}) \right\} \Big|_{t=t_0}. \quad (3.1)$$

Desde que no tempo $t = t_0$, $\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ e $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ e $p_e(\mathbf{x}, t)$ também satisfaçam as equações médias de Navier-Stokes, tem-se, nesse tempo, após subtrair (3.1) de (2.42)

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{v} - \tilde{\mathbf{v}}) \right|_{t=t_0} = -\nabla (p_e - \tilde{p}_e) \Big|_{t=t_0}. \quad (3.2)$$

A aplicação do rotacional em ambos os lados de (3.2) resulta em

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \times (\mathbf{v} - \tilde{\mathbf{v}}) \right) \right|_{t=t_0} = 0. \quad (3.3)$$

Aproximando-se a derivada anterior por diferenças avançadas e lembrando-se de que em $t = t_0$ $\mathbf{v} = \tilde{\mathbf{v}}$, tem-se num tempo posterior $t = t_0 + \delta t$

$$\nabla \times (\mathbf{v} - \tilde{\mathbf{v}}) \Big|_{t=t_0+\delta t} \approx 0. \quad (3.4)$$

O significado físico de (3.4) é que as vorticidades associadas à $\mathbf{v}$ e $\tilde{\mathbf{v}}$, no tempo t , são quase idênticas. Ainda mais, o escoamento com respeito ao campo $(\mathbf{v} - \tilde{\mathbf{v}})$ é praticamente irrotacional. Isso leva a admitir a existência de uma função escalar ψ , chamada potencial de velocidades ([Ames (1972)]), de maneira que no tempo t tem-se

$$\mathbf{v} = \tilde{\mathbf{v}} - \nabla \psi. \quad (3.5)$$

Aplicando-se a divergência em ambos os lados de (3.5) e impondo-se conservação de massa, obtém-se a equação de Poisson no tempo t para o potencial auxiliar ψ

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t). \quad (3.6)$$

Ocorre que para resolver (3.6) no tempo atual t , não se conhece a configuração do fluido no domínio. O que se faz, então, é resolver a equação de Poisson no tempo $t = t_0$, argumentando que o passo δt é pequeno e, portanto, as configurações em t_0 e t diferem muito pouco.

Para os problemas que envolvem coordenadas cilíndricas, o procedimento computacional descrito em (3.1)–(3.6) é completamente análogo. Os detalhes para o caso laminar estão bem explicados em [Tomé et al. (2000a)].

3.3 Procedimento de Solução

Para a simulação dos efeitos da turbulência (tensões de Reynolds), admite-se que, num dado instante de tempo, digamos t_0 , as variáveis dependentes são conhecidas e as condições de fronteira associadas estão completamente especificadas. As equações médias de Navier-Stokes e as equações que descrevem as características da turbulência são resolvidas de uma maneira segregada: as equações médias do movimento e continuidade são resolvidas primeiro, mantendo-se todas as grandezas turbulentas congeladas; a seguir, as equações que governam as variáveis turbulentas são resolvidas. Mais precisamente, um ciclo computacional consiste em atualizar as variáveis discretas, a partir do tempo inicial t_0 , no tempo $t = t_0 + \delta t$, utilizando-se uma série de passos interrelacionados. A sequência é descrita como segue:

- **PASSO 1:** Com a viscosidade turbulenta conhecida no tempo inicial, ou num ciclo prévio, computar um campo de velocidade tentativo $\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t)$ em $t_0 + \delta t$, com

$$\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t_0) = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t_0), \text{ utilizando-se (3.1);}$$

- **PASSO 2:** Resolver a equação de Poisson para o potencial auxiliar ψ a partir de (3.6), com condições homogêneas tipo Neumann na fronteira rígida e condições homogêneas tipo Dirichlet na superfície livre;

- **PASSO 3:** Corrigir o campo de velocidade a partir de (3.5);

- **PASSO 4:** Atualizar a pressão efetiva da seguinte maneira (para detalhes ver [Tomé et al. (1996)]): aproximando-se a derivada temporal em (3.2) por diferenças avançadas, lembrando-se de que em $t = t_0$ $\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{v}$ e utilizando-se (3.5) obtém-se

$$p_e(\mathbf{x}, t) \approx \tilde{p}_e(\mathbf{x}, t) + \frac{\psi(\mathbf{x}, t)}{\delta t};$$

- **PASSO 5:** Computar a energia cinética turbulenta κ a partir de (2.44);
- **PASSO 6:** Computar a dissipação de energia ε a partir de (2.45) ou (2.67), segundo o modelo escolhido;
- **PASSO 7:** Atualizar a viscosidade turbulenta ν_t a partir de (2.47) ou (2.69), segundo o modelo escolhido;
- **PASSO 8:** Determinar as novas posições das partículas marcadoras virtuais pela representação lagrangeana do movimento (2.4). Essas EDOs são resolvidas pelo método Euler;
- **PASSO 9:** Atualizar as condições de fronteira necessárias para o próximo ciclo.

3.4 Restrições no Valor do Passo Temporal

Freqüentemente, do ponto de vista numérico, obter soluções estáveis das equações transientes da dinâmica dos fluidos requer restrições no valor do passo no tempo (“time-step”). Em geral, para equações diferenciais parciais lineares, uma dessas restrições, denominada Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) ([Courant et al. (1967)]), relaciona o valor do passo temporal com o espaçamento da malha e com uma velocidade de referência. Entretanto, para equações não-lineares, como é o caso das equações de transporte gerais (2.57), faz-se necessário extrapolar as análises feitas nos casos lineares para os não-lineares, e empregar argumentos físicos para justificar as limitações sobre o valor de δt . As conseqüências da escolha do passo temporal são cruciais para a simulação do regime turbulento, e o seu valor deve ser estimado de maneira que os erros de arredondamento tenham um crescimento controlado. Por exemplo, utilizando um método completamente implícito, Choi e Moin ([Choi & Moin (1994)]) realizaram um estudo sobre o efeito do passo temporal na simulação de um escoamento turbulento através de um canal. Eles concluíram, para esse escoamento particular, que as flutuações turbulentas podem ser sustentadas, somente se δt é apreciavelmente menor que a escala de tempo de Kolmogorov ([Tennekes & Lumley (1972)]). Para os métodos explícitos, como aqueles implementados nos códigos GENSMAC, o tamanho do passo δt sofre restrições mais severas.

No presente estudo, durante a execução do ciclo computacional, para qualquer regime de escoamento, as limitações no passo δt são aquelas discutidas em [Tomé et al. (2000c)], sem quaisquer modificações. Mais especificamente, no caso tridimensional, a condição necessária é, automaticamente, calibrada no código como

$$\delta t^{n+1} = A_0 \cdot \min \left\{ \delta t_{visc}^n, \delta t_u^n, \delta t_v^n, \delta t_w^n \right\}, \quad (3.7)$$

em que

$$\delta t_{visc}^n = \frac{Re}{4} \cdot \frac{\delta x^2 \delta y^2 \delta z^2}{\delta x^2 \delta y^2 + \delta x^2 \delta z^2 + \delta y^2 \delta z^2}, \quad (3.8)$$

$$\delta t_u^n = A_1 \cdot \frac{\delta x}{2U_{max}}, \quad \delta t_v^n = A_2 \cdot \frac{\delta y}{2V_{max}}, \quad \delta t_w^n = A_3 \cdot \frac{\delta z}{2W_{max}}. \quad (3.9)$$

Na equação (3.9), U_{max} , V_{max} e W_{max} são, respectivamente, os valores máximos, em valor absoluto, de $\tilde{u}$, $\tilde{v}$ e $\tilde{w}$ em cada início do ciclo computacional, e as constantes $A_i \in (0, 1]$, $i = 0, 1, 2, 3$, que aparecem em (3.7) e (3.9), são introduzidas para manter os cálculos dentro de regiões estáveis. E são essas constantes, ajustadas a qualquer momento durante o processo de simulação, que permitem obter soluções numéricas estáveis de problemas em regime turbulento. Nos casos bidimensional e com simetria radial, as restrições sobre δt são análogas às de (3.7), (3.8) e (3.9) ([Tomé & McKee (1994)], [Tomé et al. (2000a)]).

É interessante observar que a restrição (3.8) é similar àquela que ocorre em equações de difusão, e tem importância quando os efeitos viscosos são dominantes no escoamento. As restrições em (3.9) estão relacionadas à condição CFL, que impede as partículas do fluido percorrerem distâncias maiores do que o incremento espacial num dado passo δt .

3.5 Condições Iniciais

Retomando-se a discussão geral que foi feita no capítulo 2, é preciso especificar condições iniciais e de contorno para as variáveis dependentes nos modelos $\kappa - \varepsilon$, com o objetivo de se obter um PVIF bem posto. Para as variáveis médias velocidades e pressão, as condições iniciais são as mesmas que as utilizadas para o caso laminar, ou seja, essas variáveis são prescritas no início dos cálculos ([Tomé & McKee (1994)]). É muito difícil especificar as condições iniciais para as variáveis turbulentas κ e ε , uma vez que elas devem estar em concordância com a física do problema. Porém, esse tipo de informação nem sempre está disponível nos problemas envolvendo superfícies livres. Entretanto, como neste trabalho são considerados escoamentos uniformes nas entradas dos domínios de soluções, uma alternativa consistente é prescrever os valores iniciais de κ e ε , e portanto ν_t , em função da corrente de entrada no domínio, da mesma forma como está feito em diversos trabalhos na literatura. Por exemplo, nos estudos realizados por Manouzi e Fortin ([Manouzi & Fortin (1991)]), Lemos ([Lemos (1992)]), Robinson e Hassan ([Robinson & Hassan (1994)]), entre muitos outros.

Neste estudo, as condições iniciais para as variáveis turbulentas são prescritas em função de uma intensidade (ou nível) I de turbulência, e da velocidade característica U_0

associada às grandes escalas. Para a variável κ , assume-se

$$\kappa = \kappa(I, U_0) = IU_0^2. \quad (3.10)$$

A variável ε é, então, obtida de (2.32) como

$$\varepsilon = \varepsilon(\kappa, l_t) = \kappa^{3/2}/l_t, \quad (3.11)$$

em que a escala de comprimento l_t é, com frequência, definida por $l_t = \beta L$ ([Elkaim et al. (1992)], [Shuja & Yilbas (1998)]), sendo L uma escala de comprimento representativa das grandes escalas e β uma constante, usualmente, da ordem de 10^{-2} dependendo do problema em estudo. Neste trabalho, $\beta = 3,0 \times 10^{-2}$ é utilizada nas implementações. Utilizando-se as transformações (2.14) e (2.35), as condições iniciais adimensionais para as variáveis turbulentas são implementadas explicitamente nos códigos GENSMAC para problemas bi-dimensionais e com simetria radial como

$$\kappa = IRe, \quad \varepsilon = \frac{1}{\beta} \left(Re^{-1} \kappa^3 \right)^{1/2}. \quad (3.12)$$

A viscosidade turbulenta ν_t é, então, avaliada segundo o modelo escolhido. No modelo $\kappa - \varepsilon$ clássico, ν_t é dada pela representação de Prandtl-Konolgorov (2.34). No modelo de Yang e Shih, ela é determinada por (2.69). A intensidade de turbulência é fixada neste trabalho como $I = 0,080$.

3.6 Condições de Contorno

Inicia-se esta seção discutindo-se as condições impostas na fronteira livre para os modelos $\kappa - \varepsilon$ vistos anteriormente. O tratamento das condições de contorno associadas a essas interfaces tem impacto crucial na qualidade da simulação, e, para se obter as condições fisicamente apropriadas, utiliza-se o conceito de forças de superfície. Considerando-se um contorno imaginário e fechado no escoamento, pode-se pensar que ele divide o fluido em duas partes: o interno e o externo ao contorno. A ação direta do fluido externo sobre o fluido interno é representada por forças de superfície. Geralmente, supõe-se que uma força de superfície é uma função da posição e da orientação da superfície num dado ponto, e que é dada pelo vetor normal exterior unitário $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ naquele ponto. Assim, a força

de superfície, por unidade de área, é uma função $\mathbf{t} = \mathbf{t}(\mathbf{n}; \mathbf{x})$ e é possível mostrar ([Nickell et al. (1974)], [Ladau & Lifshitz (1980)]) que a dependência de $\mathbf{t}$ a $\mathbf{n}$ é dada pela relação $\sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t}$, sendo σ um tensor de ordem 2. Para os problemas abordados neste trabalho, o fluido está sempre em contato com uma atmosfera inerte. Portanto, desprezando-se forças superficiais, na superfície livre do fluido a continuidade das tensões é imposta, isto é, o vetor tensão é nulo na interface. Decompondo-se o vetor de tensões em componentes normais e tangenciais, obtêm-se, para o caso tridimensional, as seguintes condições na fronteira livre do fluido:

$$\mathbf{n}(\sigma \mathbf{n}) = 0, \quad (3.13)$$

$$\mathbf{m1}(\sigma \mathbf{n}) = 0, \quad (3.14)$$

$$\mathbf{m2}(\sigma \mathbf{n}) = 0, \quad (3.15)$$

em que $\mathbf{m1} = (m1_x, m1_y, m1_z)$ e $\mathbf{m2} = (m2_x, m2_y, m2_z)$ são os vetores tangentes locais à superfície. Substituindo-se o tensor de tensões, dado pela equação (2.25), nas equações (3.13)-(3.15) e utilizando-se as mudanças de variáveis (2.14) e (2.27), para adimensionalização, obtêm-se as equações para as condições na interface

$$p_e - \frac{2}{R_e}(1 + \nu_t) \left[\frac{\partial u}{\partial x} n_x^2 + \frac{\partial v}{\partial y} n_y^2 + \frac{\partial w}{\partial z} n_z^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_x n_y + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) n_x n_z + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) n_y n_z \right] = 0, \quad (3.16)$$

$$\frac{1}{R_e}(1 + \nu_t) \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} m1_x n_x + 2 \frac{\partial v}{\partial y} m1_y n_y + 2 \frac{\partial w}{\partial z} m1_z n_z + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (m1_x n_y + m1_y n_x) + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) (m1_x n_z + m1_z n_x) + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) (m1_y n_z + m1_z n_y) \right] = 0, \quad (3.17)$$

$$\frac{1}{R_e}(1 + \nu_t) \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} m2_x n_x + 2 \frac{\partial v}{\partial y} m2_y n_y + 2 \frac{\partial w}{\partial z} m2_z n_z + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (m2_x n_y + m2_y n_x) + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) (m2_x n_z + m2_z n_x) + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) (m2_y n_z + m2_z n_y) \right] = 0. \quad (3.18)$$

A partir da equação (3.16), determina-se a pressão efetiva na superfície livre. Desde que $\nu_t > 0$, (3.17) e (3.18) fornecem as velocidades na interface. Para as implementações, as

equações (3.16)-(3.18) são aproximadas localmente por diferenças finitas, considerando-se as diferentes orientações da superfície livre definidas em [Tomé & McKee (1994)], [Tomé et al. (2000a)] e [Tomé et al. (2000c)]. As versões discretas dessas equações são obtidas aproximando-se ambas equações em pontos específicos da superfície e exigindo-se conservação de massa. Para ilustrar a aplicação das condições (3.16)-(3.18) na fronteira livre, considera-se apenas o caso bidimensional e, em particular, a situação de uma célula (S) contendo a superfície livre do fluido e possuindo duas células vazias (V) adjacentes, como exemplificado na figura 3.2.

Figura 3.2: Configuração de uma célula computacional, mostrando uma célula que contém a superfície livre e que possui duas células vazias adjacentes.

Na configuração da figura 3.2, $\mathbf{n} = \frac{\sqrt{2}}{2}(1, 1)$, $\mathbf{m} = \frac{\sqrt{2}}{2}(1, -1)$ e, nesse caso, as condições (3.16)-(3.18) reduzem-se às equações

$$p_e - \frac{1}{Re}(1 + \nu_t) \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) = 0, \quad (3.19)$$

$$\frac{1}{Re}(1 + \nu_t) \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0. \quad (3.20)$$

Como se pode observar a partir da figura 3.2, os valores $u_{i+1/2,j}$ e $v_{i,j+1/2}$ devem ser determinados em função de valores conhecidos. Para tanto, aproximam-se a equação (3.20) e a equação da continuidade no centro da célula S . Isso resulta nas aproximações

$$u_{i+1/2,j} \approx u_{i-1/2,j}, \quad v_{i,j+1/2} \approx v_{i,j-1/2}. \quad (3.21)$$

Uma vez que as velocidades $u_{i+1/2,j}$ e $v_{i,j+1/2}$ estão disponíveis por (3.21) e a viscosidade turbulenta é especificada, a pseudo-pressão é avaliada pela expressão (3.19) como

$$\begin{aligned} \tilde{p}_{e,i,j} \approx \frac{1}{2Re}(1 + \nu_{t,i,j}) & \left(\frac{1}{\delta y} (u_{i+1/2,j} + u_{i-1/2,j} - u_{i+1/2,j-1} - u_{i-1/2,j-1}) \right. \\ & \left. + \frac{1}{\delta x} (v_{i,j+1/2} + v_{i,j-1/2} - v_{i-1,j+1/2} - v_{i-1,j-1/2}) \right). \end{aligned} \quad (3.22)$$

Para problemas envolvendo coordenadas cilíndricas, as equações (3.16)–(3.18) são reduzidas as equações

$$p_e - \frac{2}{Re}(1 + \nu_t) \left[\frac{\partial v_r}{\partial r} n_r^2 + \frac{\partial v_z}{\partial z} n_z^2 + \left(\frac{\partial v_r}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) n_r n_z \right] = 0, \quad (3.23)$$

$$\frac{1}{Re}(1 + \nu_t) \left[\left(\frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) n_r n_z + \left(\frac{\partial v_r}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) (n_z^2 - n_r^2) \right] = 0, \quad (3.24)$$

em que $m_r = n_z$ e $m_z = -n_z$, e as representações discretas dessas equações são análogas às (3.21) e (3.22).

As condições de contorno para as variáveis turbulentas κ e ε na superfície livre do fluido são as mais difíceis de serem especificadas devido à complexidade da dinâmica da turbulência próximo à interface, e até o presente momento esta questão permanece aberta. Não se sabe, por exemplo, como a turbulência interage com a tensão superficial e, por conseguinte, é difícil estimar a distribuição de κ sobre uma superfície irregular em movimento. Assim, como uma primeira aproximação, admite-se que a superfície livre é localmente planar e que o movimento ao acaso do fluido não causa descontinuidades na fronteira. Formalmente, se $\phi = \kappa$ ou ε , então

$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} = \nabla \phi \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (3.25)$$

Para a aplicação das condições (3.25), utilizam-se as orientações da superfície propostas em [Tomé & McKee (1994)], [Tomé et al. (2000a)] e [Tomé et al. (2000c)] e aproximam-se as derivadas direcionais por

$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} \approx \frac{\partial \phi}{\partial \alpha}, \quad (3.26)$$

com $\alpha = x, y$ ou z . As derivadas parciais em (3.26) são, então, aproximadas localmente por diferenças avançadas ou atrasadas de primeira ordem.

Em decorrência da condição de não-deslizamento, os escoamentos turbulentos são fortemente influenciados pela presença de contornos rígidos. Nesses contornos assume-se, normalmente, que ambas as velocidades média e flutuante são nulas. E resultados razoáveis podem ser obtidos se a viscosidade e a energia cinética turbulentas são nulas no contorno. Porém, a dissipação de energia cinética ε é finita e requer tratamento especial. A região próxima à parede é caracterizada por ser de baixa velocidade e, conseqüentemente, o comportamento do escoamento e a estrutura turbulenta são consideravelmente diferentes daquelas regiões onde a turbulência se desenvolve livremente. Considerando-se o número de Reynolds local $Re_y = U_0 y / \nu$, em que a escala de comprimento y é tomada normal à parede, não é difícil ver que, se o valor de y é da ordem de magnitude do comprimento característico associado às grandes escalas L , as forças inerciais são muito maiores do que as forças viscosas. Quando y tende a zero, Re_y também tende a zero e, antes de alcançar a parede, existirá um intervalo de y para o qual $Re_y = 1$. A essa distância, as forças viscosas são iguais, em ordem de magnitude, às forças inerciais. No caso $Re_y < 1$, o escoamento não mais depende dos parâmetros das grandes escalas, e a viscosidade molecular inicia a sua influência diretamente nos processos de produção, destruição e transporte de turbulência. Em suma, os escoamentos turbulentos na presença de superfícies sólidas não-porosas desenvolvem uma camada muito fina onde os efeitos devidos à viscosidade molecular dominam os da turbulência, e são essas interações viscosas que ocasionam o inconveniente de não se poder aplicar o modelo $\kappa - \varepsilon$ convencional muito próximo a essas superfícies. Foi esse fato que encorajou o autor a analisar um modelo $\kappa - \varepsilon$ de turbulência que seja válido em todo o campo do escoamento.

As condições de contorno numa fronteira rígida para o modelo $\kappa - \varepsilon$ clássico são estabelecidas utilizando-se relações empíricas bem conhecidas ([Tennekes & Lumley (1972)], [Bradshaw (1976)]). De fato, evidências experimentais comprovam que próximo a uma superfície sólida, aproximadamente 10% – 20% da espessura da camada-limite turbulenta, existe uma região, denominada camada interna (“inner layer”), onde a tensão efetiva (viscosa mais a de Reynolds) é quase constante e igual à tensão τ_w na superfície rígida. Nessa região, a escala de velocidade apropriada u^* , freqüentemente denominada “velocidade de atrito”, e a escala de comprimento adequado l^* são, respectivamente, dadas por

$$u^* = \left(\frac{\tau_w}{\rho} \right)^{1/2}, \quad l^* = \frac{\nu}{u^*}. \quad (3.27)$$

A viscosidade turbulenta em regiões diferentes da camada interna é estimada, considerando-se a importância de sua variação na direção transversal do escoamento ([Reynolds (1976)], [Lumley et al. (1999)]). Fora da região viscosa, em analogia à teoria cinética dos gases, a aproximação utilizada, freqüentemente, é dada por

$$\nu_t = Ku^*y, \quad (3.28)$$

em que K é a constante de von Kármán. Muito próximo ao contorno rígido, onde os efeitos viscosos são importantes, uma boa estimativa pode ser obtida incorporando-se em (3.28) a função de amortecimento de van Driest ([van Driest (1956)])

$$\nu_t = Ku^*y(1 - \exp(-y^+/A))^2, \quad y^+ = u^*y/\nu, \quad A \approx 26 \quad (3.29)$$

Do ponto de vista prático, é muito comum dividir a camada interna em três subcamadas bem definidas: a subcamada viscosa (“viscous sublayer”), onde os efeitos devidos à viscosidade molecular são dominantes; a subcamada de transição (“buffer layer”), onde as forças inerciais são iguais às forças viscosas; e a subcamada inercial ou logarítmica (“overlap log-law”), onde as forças inerciais são predominantes. Essas subcamadas da camada interna são mostradas adiante, na figura 3.3. Em geral, de forma bastante aproximada, o comportamento dos perfis médios de velocidade, e também da turbulência, nas subcamadas viscosa e inercial é determinado ([Bradshaw (1976)], [Wilcox (1988)], [White (1991)]), considerando-se que na camada interna a tensão de cisalhamento efetiva é aproximada por

$$\sigma_{xy} = \rho\nu \frac{\partial u}{\partial y} - \rho \overline{u'v'} \approx \tau_w, \quad (3.30)$$

ou, equivalentemente, utilizando-se (3.27)

$$\nu \frac{\partial u}{\partial y} - \overline{u'v'} \approx \frac{\tau_w}{\rho} = u^{*2}. \quad (3.31)$$

Onde o escoamento é considerado completamente viscoso, u' e v' são praticamente nulos. Assim, por integração de (3.31), obtém-se o perfil linear

$$u^+ = y^+, \quad (3.32)$$

em que $u^+ = u/u^*$. Em forma adimensional, (3.32) torna-se

$$u^+ = Re_y u^*. \quad (3.33)$$

Por outro lado, na subcamada inercial, as tensões de Reynolds é que são dominantes. Então, assumindo-se a hipótese de Boussinesq nessa camada, obtém-se a partir de (3.31)

$$\nu_t \frac{\partial u}{\partial y} = u^{*2}. \quad (3.34)$$

Portanto, na camada completamente turbulenta, obtém-se de (3.28) e (3.34)

$$Ky \frac{\partial u}{\partial y} = u^*. \quad (3.35)$$

Por integração de (3.35) obtém-se

$$u^+ = \frac{1}{K} \ln(y^+) + B, \quad (3.36)$$

em que B é uma constante de integração. Para escoamentos newtonianos sobre superfícies suaves, dados experimentais permitem concluir que B está entre 5,0-5,2 ([Bradshaw (1976)]).

Em forma adimensional, a equação (3.36) pode ser reescrita como

$$\ln(ER_e y u^*) - K \frac{u}{u^*} = 0, \quad (3.37)$$

em que $E = \exp(KB)$, u é a magnitude da velocidade tangencial resultante à distância y da parede, e as constantes B e K devem ser calibradas para cada tipo de problema.

Figura 3.3: Perfis de velocidade típicos na camada-limite turbulenta, mostrando: A subcamada viscosa (I); A subcamada de transição (II); A subcamada turbulenta (III).

Vale mencionar que as relações (3.33) e (3.37) são, freqüentemente, conhecidas na literatura como leis de parede clássicas, e é muito importante observar que essas leis são restritas a determinados valores do número de Reynolds local y^+ . Segundo Rodi ([Rodi (1984)]), MacComb ([McComb (1990)]) e muitos outros, (3.33) é válida até $y^+ \approx 5$, e (3.37) é aplicável somente na região onde $30 < y^+ < 300$. Convém observar também que essas leis são soluções exatas das equações médias de Reynolds, para um escoamento de camada-limite turbulenta sobre superfícies bidimensionais planas. Leis de parede mais bem elaboradas podem ser encontradas na discussão de Rodrigues ([Rodrigues (2000)]) sobre escoamentos turbulentos parietais.

No modelo $\kappa - \varepsilon$ para números de Reynolds elevados, as condições de contorno para as variáveis turbulentas κ e ε na subcamada turbulenta são determinadas admitindo-se que a produção e a dissipação de energia cinética turbulenta estão em balanço ([Mellor & Herring (1973)], [Anderson et al. (1984)], [Ferziger & Perić (1996)]), isto é, a convecção e a difusão de κ são desprezíveis nessa região. Assim, da equação de transporte de κ , simplificada para escoamentos de camada-limite, obtém-se

$$\nu_t \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 = \varepsilon. \quad (3.38)$$

Multiplicando-se ambos os lados de (3.38) por ν_t e utilizando-se (3.34) e (2.32), deduzem-se as equações explícitas para as variáveis κ e ε adjacentes ao contorno rígido

$$\kappa = \frac{u^{*2}}{C_\mu^{1/2}}, \quad \varepsilon = \frac{u^{*3}}{l^*}, \quad (3.39)$$

em que a escala de comprimento l^* pode ser aproximada pela representação clássica de Prandtl

$$l^* = Ky. \quad (3.40)$$

Em forma adimensional, as variáveis κ e ε na subcamada turbulenta são implementadas como

$$\kappa = Re \frac{u^{*2}}{C_\mu^{1/2}}, \quad \varepsilon = Re \frac{u^{*3}}{l^*}. \quad (3.41)$$

Na subcamada viscosa, a hipótese de que produção é igual à dissipação não é válida, e, portanto, outra técnica deve ser utilizada para definir as variáveis κ e ε nessa camada. Segundo Launder ([Launder (1984)]), próximo a um contorno rígido a energia cinética κ é proporcional ao quadrado da distância y da parede, isto é,

$$\kappa \propto y^2. \quad (3.42)$$

Lembrando-se de que na camada turbulenta o valor de κ é dado por (3.41) e na camada viscosa, devido à condição de não-deslizamento, ele tende a zero quando $y \rightarrow 0$, a variável κ , na subcamada viscosa, é implementada utilizando-se a correção de Sondak e Pletcher ([Sondak & Pletcher (1995)])

$$\kappa = Re \frac{u^{*2}}{C_\mu^{1/2}} \left(\frac{y^+}{y_c^+} \right)^2, \quad (3.43)$$

em que y_c^+ , o número de Reynolds local crítico, é a solução da equação não-linear definida pela intersecção de (3.33) e (3.37), isto é,

$$\ln(Ey_c^+) - Ky_c^+ = 0. \quad (3.44)$$

O valor de ε , dado por (3.11), na subcamada viscosa é, então, implementado impondo-se a escala de comprimento l^* proposta por Norris e Reynolds ([Norris & Reynolds (1975)])

$$l^* = \frac{KC_\mu^{-3/4}y}{1 + 5.3/Re_t}, \quad (3.45)$$

em que

$$Re_t = y\sqrt{Re\kappa}. \quad (3.46)$$

Assim, em forma adimensional, ε é calculado na subcamada viscosa pela expressão

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{1}{Re}} \frac{\kappa^{3/2}}{l^*}. \quad (3.47)$$

A viscosidade turbulenta ν_t , dada por (2.47), é implementada em todo o domínio do escoamento utilizando-se a estratégia desenvolvida por Durbin ([Durbin (1996)]) para escoamentos turbulentos que apresentam pontos de estagnação. De fato, na região de impacto a energia cinética turbulenta é produzida pelo cisalhamento médio normal à superfície e pela componente normal do tensor de Reynolds. Nas vizinhanças desses pontos, o modelo de turbulência $\kappa - \varepsilon$ clássico pode superestimar a energia cinética κ ([Strahle (1985)], [Launder & Kato (1993)]), pois a escala de tempo T_t dada por (2.46) é inadequada. Então, neste trabalho, essa escala de tempo é substituída por

$$T_t = \min \left\{ \frac{\kappa}{\varepsilon}, \frac{2}{3C_\mu} \sqrt{\frac{3}{8D_{ij}D_{ji}}} \right\}. \quad (3.48)$$

A implementação das propriedades físicas nas adjacências dos contornos rígidos, utilizando-se o modelo $\kappa - \varepsilon$ clássico, é discutida na sequência.

Em se tratando de problemas confinados ou externos, não há necessidade de se resolver as equações de conservação na região interna da camada-limite turbulenta; a equação da continuidade e as leis parede (3.33) e (3.37) fornecem as condições necessárias nos volumes de controle adjacentes ao contorno rígido ([Benim & Zinser (1985)], [Chen & Patel. (1985)], [Patel & Chen (1987)], [Chen & Patel (1988)], [Sondak & Pletcher (1995)]). Porém, em alguns escoamentos envolvendo superfícies livres, essa abordagem usual pode ser inadequada. Como exemplo, considera-se o caso de um jato em alta velocidade incidindo perpendicularmente sobre uma parede. Nessa circunstância, o fluido espalha-se na superfície em camadas muito finas, dificultando obter informações físicas longe da fronteira. Para contornar essa dificuldade, neste trabalho as propriedades físicas junto ao contorno rígido são obtidas de uma maneira específica. A idéia central do tratamento é fazer um balanço das forças envolvidas na camada interna; em outras palavras, determinar as tensões efetivas nessa camada exigindo-se conservação de massa e de quantidade de movimento, e admitindo-se a validade das leis de parede clássicas. Isso significa que as equações médias do movimento (2.28) são resolvidas adjacente às fronteiras sólidas, mas não as equações que descrevem as variáveis turbulentas. Os detalhes na implementação dessa abordagem são discutidos e exemplificados como segue. Uma vez conhecida a velocidade de atrito u^* por (3.33) ou (3.37), as variáveis κ e ε na camada inercial são implementadas por (3.41), cujo valor de l^* é dado pela relação (3.40). Na camada viscosa, κ e ε são prescritos por (3.43)-(3.47). A viscosidade turbulenta ν_t é implementada utilizando-se (2.47) com a escala de tempo dada por (3.48), e os seus valores fictícios são determinados utilizando-se a condição homogênea de Neumann. As velocidades fictícias são implementadas forçando-se nas equações médias do movimento a tensão cisalhante adimensional total calculada como

$$\frac{1}{Re}(1 + \nu_t) \left| \frac{\partial u}{\partial n} \right| \approx u^{*2} = \tau_w, \quad (3.49)$$

em que u e n são, respectivamente, a velocidade tangencial e a direção normal ao contorno rígido. O lado esquerdo da equação (3.49) é avaliado no contorno rígido, e os valores de u fora do domínio de solução são obtidos discretizando-se a derivada por diferenças centrais e levando-se em conta que a tensão efetiva tem sinal oposto ao da velocidade tangencial. Para exemplificar a aplicação das condições de contorno discutidas acima, considera-se a situação particular apresentada na figura 3.4. Nesta figura, a variável ϕ representa uma das variáveis turbulentas κ , ε ou ν_t .

Figura 3.4: Representação esquemática de células adjacentes ao contorno rígido, mostrando a camada interna adjacente à parede e as células fictícias.

As variáveis κ e ε , no ponto (i, j) , são calculadas pelas expressões

$$\kappa_{i,j} = Re \frac{\tau_w}{C_\mu^{1/2}}, \quad \varepsilon_{i,j} = Re \frac{\tau_w u^*}{Ky}, \quad (3.50)$$

na subcamada turbulenta, e na subcamada viscosa por

$$\kappa_{i,j} = Re \frac{\tau_w}{C_\mu^{1/2}} \left(\frac{y^+}{y_c^+} \right)^2, \quad \varepsilon_{i,j} = \sqrt{\frac{1}{Re}} \frac{\kappa_{i,j}^{3/2}}{l^*}, \quad (3.51)$$

em que l^* é dado por (3.45). A viscosidade turbulenta ν_t , no ponto (i, j) , é avaliada pela expressão

$$\nu_{ti,j} = C_\mu \kappa_{i,j} T_{ti,j} = C_\mu \kappa_{i,j} \cdot \min \left\{ \frac{\kappa_{i,j}}{\varepsilon_{i,j}}, \frac{2}{3C_\mu} \sqrt{\frac{3}{8D_{ij}D_{ji}}} \right\}. \quad (3.52)$$

A velocidade fora do domínio computacional $u_{i+1/2,j-1}$ é calculada aproximando-se (3.49) no ponto $(i + 1/2, j - 1/2)$ e utilizando-se diferença central, isto é,

$$u_{i+1/2,j-1} = u_{i+1/2,j} - \text{sinal}(u_{i+1/2,j}) \cdot \frac{Re \tau_w \delta y}{(1 + \nu_{ti+1/2,j-1/2})}, \quad (3.53)$$

em que $\text{sinal}(u_{i+1/2,j})$ representa o sinal da velocidade tangencial no ponto $(i + 1/2, j)$ e

$$\nu_{ti+1/2,j-1/2} = 0, 25(\nu_{ti,j} + \nu_{ti+1,j} + \nu_{ti+1,j-1} + \nu_{ti,j-1}). \quad (3.54)$$

A velocidade de atrito u^* , requerida em (3.50)-(3.53), é obtida a partir das relações (3.33) ou (3.37), dependendo do valor do número de Reynolds local y^+ . No caso de u^* ser obtida pela lei

(3.37), o método de Newton-Raphson é aplicado usando-se $u^* = 11,60$ como aproximação inicial, e a tolerância $1,0 \times 10^{-14}$ como critério de parada. Os cálculos são inicializados determinando-se o número de Reynolds crítico y_c^+ e admitindo-se que y^+ está na camada viscosa. Desprezando-se a subcamada de transição, a cada ciclo computacional, u^* é estimada da seguinte maneira: com a velocidade tangencial conhecida na primeira célula adjacente à parede, a velocidade de atrito u^* (e portanto τ_w) é atualizada, dependendo do valor de y^+ dado em (3.29). Se y^+ for menor do que y_c^+ , utiliza-se (3.33); caso contrário, emprega-se (3.37).

Diferentemente do modelo κ – ε clássico, no modelo de turbulência κ – ε de Yang e Shih todas as leis de conservação são integradas adjacientemente ao contorno rígido, sem levar em consideração quaisquer leis de parede. Mais especificamente, a condição de não-deslizamento é aplicada para as velocidades médias. As condições de contorno para as variáveis κ e ν_t são obtidas pela imposição de que

$$\kappa = \nu_t = 0 \quad (3.55)$$

nessas fronteiras ([Mansour et al. (1989)], [Goldberg (1996)]). A variável ε é, então, determinada a partir da equação de evolução da energia cinética κ (2.66) e o resultado, em forma adimensional, é dado por

$$\varepsilon = \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \kappa}{\partial y} \right). \quad (3.56)$$

Na prática acontece que a utilização de (3.56) pode acarretar instabilidade numérica, pois a segunda derivada não garante positividade de ε . Assim, a seguinte condição, matematicamente equivalente ([Chen & Patel (1988)], [Abe et al. (1994)]), é implementada nos códigos:

$$\varepsilon = \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial \kappa^{1/2}}{\partial y} \right)^2, \quad (3.57)$$

sendo que a derivada de $\kappa^{1/2}$ é aproximada por diferenças de primeira ordem. É muito importante salientar que a imposição da condição de não-deslizamento e das condições de contorno (3.55) e (3.57) exigem a integração das equações de conservação na subcamada viscosa ($y^+ < 5$) e, como consequência, muitas células computacionais devem ser postas nessa região. É óbvio, então, que um refinamento localizado é essencial para o bom desempenho do modelo de Yang e Shih.

Sobre as condições de contorno nas fronteiras de entrada e/ou saída de fluido da região de interesse, todas as variáveis dependentes são implementadas explicitamente utilizando-

se as condições de Dirichlet ou Neumann, em analogia ao caso laminar ([Tomé & McKee (1994)]). Em ambos os modelos de turbulência analisados neste trabalho, as velocidades médias são prescritas na entrada, e, na saída, suas derivadas normais são nulas. As variáveis κ e ε (e portanto ν_t) são impostas na entrada, consistentemente com as condições iniciais definidas em (3.12). Nos contornos de saída de fluido, todas as variáveis turbulentas são calculadas pela aplicação da condição homogênea de Neumann. Em superfícies de simetria, as velocidades são tratadas do mesmo modo como nos códigos GENSMAC, e as variáveis turbulentas são prescritas utilizando-se a condição homogênea de Neumann.

3.7 Discretização das Equações de Conservação

O propósito de qualquer técnica de discretização é transformar as equações diferenciais parciais (2.42)–(2.45) em um sistema de equações algébricas correspondente, representando o balanço local das forças envolvidas. Sob condições favoráveis com respeito à matriz dos coeficientes, a solução desse sistema produz um conjunto de valores que está associado à solução das equações originais em alguma região preestabelecida. Geralmente, o processo de discretização é dividido em duas etapas: discretização do domínio Ω e discretização das equações. A primeira etapa fornece uma descrição numérica da região de interesse, incluindo as posições dos pontos (malha computacional) onde se deseja avaliar a solução. O domínio é dividido em um número finito de regiões discretas, chamadas volumes de controle ou células computacionais. No caso de problemas transientes, o intervalo de tempo $(0, t_{max}]$ é particionado também em subintervalos de tamanho δt , caracterizando o valor do passo temporal. Na segunda etapa, a discretização das equações fornece equações de diferenças relacionando as variáveis dependentes nos pontos do domínio discretizado. Do mesmo modo que está feito em [Tomé & McKee (1994)], [Tomé et al. (2000a)] e [Tomé et al. (2000c)], os termos de difusão e os gradientes de pressão efetivos nas equações (3.1) são aproximados por diferenças centrais de segunda ordem de consistência, enquanto que as derivadas temporais são discretizadas por diferenças avançadas (Euler explícito). A equação de Poisson (3.6), para o potencial ψ , é aproximada pelo operador laplaciano de cinco pontos e o sistema correspondente de equações lineares resultante é resolvido pelo método de gradientes conjugados, porque a matriz dos coeficientes é simétrica e positiva definida. Os termos con-

vectivos nos modelos são discretizados por esquemas monotônicos e antidifusivos, os quais serão discutidos no próximo capítulo.

Uma forma alternativa das equações do movimento que evita problemas numéricos nas vizinhanças de descontinuidade, conhecida como completamente conservativa ([Deville (1974)]), pode ser obtida introduzindo-se o vetor vorticidade $\omega = \nabla \times \mathbf{v}$, de maneira que ([Acheson (1990)])

$$\nabla^2 \mathbf{v} = -\nabla \times \omega. \quad (3.58)$$

Assim, as equações de conservação (2.48)–(2.53), para problemas bidimensionais, reduzem-se às seguintes formas completamente conservativas:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = CONV(u) - \frac{\partial p_e}{\partial x} + \frac{1}{R_e} \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu_t \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu_t \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) \right] + \frac{g_x}{F_r^2}, \quad (3.59)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = CONV(v) - \frac{\partial p_e}{\partial y} - \frac{1}{R_e} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) - 2 \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu_t \frac{\partial v}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu_t \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) \right] + \frac{g_y}{F_r^2}, \quad (3.60)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (3.61)$$

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} = CONV(\kappa) + \frac{1}{R_e} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left((1 + \nu_t/\sigma_\kappa) \frac{\partial \kappa}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((1 + \nu_t/\sigma_\kappa) \frac{\partial \kappa}{\partial y} \right) \right] + P - \varepsilon, \quad (3.62)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = CONV(\varepsilon) + \frac{1}{R_e} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left((1 + \nu_t/\sigma_\varepsilon) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((1 + \nu_t/\sigma_\varepsilon) \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} \right) \right] + (C_{1\varepsilon}P - C_{2\varepsilon}\varepsilon)/T_t + \alpha E, \quad (3.63)$$

em que

$$CONV(u) = - \left(\frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} \right), \quad (3.64)$$

$$CONV(v) = - \left(\frac{\partial(vu)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} \right), \quad (3.65)$$

$$CONV(\kappa) = - \left(\frac{\partial(\kappa u)}{\partial x} + \frac{\partial(\kappa v)}{\partial y} \right), \quad (3.66)$$

$$CONV(\varepsilon) = - \left(\frac{\partial(\varepsilon u)}{\partial x} + \frac{\partial(\varepsilon v)}{\partial y} \right), \quad (3.67)$$

$$\nu_t = C_\mu f_\mu \kappa T_t, \quad (3.68)$$

$$P = \nu_t \left[2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \right], \quad (3.69)$$

$$T_t = \frac{\kappa}{\varepsilon} + C_k \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)^{1/2}, \quad (3.70)$$

$$E = 2 \frac{\nu_t}{Re} \left[\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)^2 \right]. \quad (3.71)$$

Nas equações (3.63), (3.68) e (3.70), $\alpha = C_k = 0$ e $f_\mu = 1$ no modelo $\kappa - \varepsilon$ clássico. No modelo para números de Reynolds pequenos considerado neste trabalho, $\alpha = C_k = 1$, e f_μ e E são, respectivamente, dados pelas expressões (2.61) e (2.71).

Para resolver numericamente as equações (3.59)–(3.63) num domínio Ω , o sistema de malhas diferenciadas de Harlow e Welch ([Harlow & Welch (1965)]) é adotado, como foi mostrado na figura 3.1. As leis físicas de conservação são, então, aproximadas localmente em cada célula computacional de comprimento δx e altura δy . Observa-se neste ponto que se pode também discretizar as equações de conservação sobre malhas não-diferenciadas. Nesse caso, ao se utilizar diferenças centrais para discretizar a equação da continuidade, a massa pode não ser conservada durante o movimento. Essa questão interessante é bem explorada em [Sotiropoulos & Abdallah (1991)]. As derivadas temporais em (3.59), (3.60), (3.62) e (3.63), num ponto P , são aproximadas por diferenças avançadas de primeira ordem de precisão (Euler explícito) como

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_P^n \approx (\phi_P^{n+1} - \phi_P^n) / \delta t, \quad (3.72)$$

em que $\phi = u, v, \kappa$ ou ε . Exceto as derivadas espaciais dos termos convectivos, as quais merecem atenção especial e são tratadas à parte (próximo capítulo), todas as outras derivadas em (3.59) e (3.60) são aproximadas por diferenças centrais de segunda ordem de consistência. Por exemplo, o gradiente de pressão efetivo em (3.59), no ponto $P = (i + 1/2, j)$, e o termo “viscoso laminar” em (3.60), no ponto $P = (i, j + 1/2)$, são, respectivamente, aproximados nesses pontos pelas expressões

$$\left. \frac{\partial p_e}{\partial x} \right|_{i+1/2,j}^n \approx (p_{e,i+1,j}^n - p_{e,i,j}^n) / \delta x, \quad (3.73)$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right|_{i,j+1/2}^n &\approx \frac{1}{\delta x} \left[\left. \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right|_{i+1/2,j+1/2}^n - \left. \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right|_{i-1/2,j+1/2}^n \right] \approx \\ &\frac{1}{\delta x} \left[\left((u_{i+1/2,j+1}^n - u_{i+1/2,j}^n) / \delta y - (v_{i+1,j+1/2}^n - v_{i,j+1/2}^n) / \delta x \right) \right. \\ &\left. - \left((u_{i-1/2,j+1}^n - u_{i-1/2,j}^n) / \delta y - (v_{i,j+1/2}^n - v_{i-1,j+1/2}^n) / \delta x \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Os termos viscosos em (3.59) e (3.60), que representam a contribuição turbulenta, são aproximados também por diferenças centradas. Como exemplo, considera-se o último termo “viscoso turbulento” em (3.59). Então, esse termo é aproximado no ponto $P = (i + 1/2, j)$ por

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu_t \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) \right|_{i+1/2, j}^n &\approx \frac{1}{\delta y} \left[\left(\nu_t \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) \right|_{i+1/2, j+1/2}^n - \left(\nu_t \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) \right|_{i+1/2, j-1/2}^n \right] \approx \\ &\frac{1}{\delta y} \left[\nu_{ti+1/2, j+1/2}^n \left(\frac{1}{\delta y} (u_{i+1/2, j+1}^n - u_{i+1/2, j}^n) + \frac{1}{\delta x} (v_{i+1, j+1/2}^n - v_{i, j+1/2}^n) \right) - \right. \\ &\left. \nu_{ti+1/2, j-1/2}^n \left(\frac{1}{\delta y} (u_{i+1/2, j}^n - u_{i+1/2, j-1}^n) + \frac{1}{\delta x} (v_{i+1, j-1/2}^n - v_{i, j-1/2}^n) \right) \right], \quad (3.75) \end{aligned}$$

em que

$$\begin{aligned} \nu_{i+1/2, j+1/2}^n &\approx 0, 25(\nu_{i, j}^n + \nu_{i, j+1}^n + \nu_{i+1, j+1}^n + \nu_{i+1, j}^n), \\ \nu_{i+1/2, j-1/2}^n &\approx 0, 25(\nu_{i, j}^n + \nu_{i+1, j}^n + \nu_{i+1, j-1}^n + \nu_{i, j-1}^n). \end{aligned}$$

As aproximações para os termos viscosos nas equações (3.62) e (3.63) são análogas às descritas acima. Para exemplificar, considera-se o primeiro termo viscoso em (3.62) aproximado no ponto $P = (i, j)$. Então, a aproximação para esse termo em P é

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial x} \left((1 + \nu_t / \sigma_\kappa) \frac{\partial \kappa}{\partial x} \right) \right|_{i, j}^n &\approx \frac{1}{\delta x} \left[(1 + \nu_t / \sigma_\kappa) \left(\frac{\partial \kappa}{\partial x} \right) \right|_{i+1/2, j}^n - (1 + \nu_t / \sigma_\kappa) \left(\frac{\partial \kappa}{\partial x} \right) \right|_{i-1/2, j}^n \right] \approx \\ &\frac{1}{\delta x} \left[(1 + \nu_{ti+1/2, j}^n / \sigma_\kappa) \left(\frac{1}{\delta x} (\kappa_{i+1, j}^n - \kappa_{i, j}^n) \right) - (1 + \nu_{ti-1/2, j}^n / \sigma_\kappa) \left(\frac{1}{\delta x} (\kappa_{i, j}^n - \kappa_{i-1, j}^n) \right) \right], \quad (3.76) \end{aligned}$$

em que

$$\begin{aligned} \nu_{ti+1/2, j}^n &\approx 0, 5(\nu_{ti+1, j}^n + \nu_{ti, j}^n), \\ \nu_{ti-1/2, j}^n &\approx 0, 5(\nu_{ti-1, j}^n + \nu_{ti, j}^n). \end{aligned}$$

Os termos de produção de energia cinética turbulenta dados em (3.69) são aproximados também por diferenças centrais. Por exemplo, o último termo naquela equação é aproximado no ponto $P = (i, j)$ pela expressão

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \bigg|_{i,j}^n \approx \left(\frac{1}{4\delta y} (u_{i+1/2,j+1}^n + u_{i-1/2,j+1}^n - u_{i+1/2,j-1}^n - u_{i-1/2,j-1}^n) + \right. \\ \left. \frac{1}{4\delta x} (v_{i+1,j+1/2}^n + v_{i+1,j-1/2}^n - v_{i-1,j+1/2}^n - v_{i-1,j-1/2}^n) \right)^2. \quad (3.77)$$

A viscosidade turbulenta ν_t e a escala de tempo T_t dados, respectivamente, por (3.68) e (3.70) são avaliados nos centros das células computacionais como

$$\nu_{t,i,j}^n = C_\mu f_\mu \frac{(\kappa_{i,j}^n)^2}{\varepsilon_{i,j}^n}, \quad (3.78)$$

$$T_{t,i,j}^n = \frac{\kappa_{i,j}^n}{\varepsilon_{i,j}^n} + C_k \left(\frac{1}{\varepsilon_{i,j}^n} \right)^{1/2}. \quad (3.79)$$

As derivadas de segunda ordem no termo-fonte E do modelo para números de Reynolds baixos de Yang e Shih são aproximadas utilizando-se as seguintes expressões

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \bigg|_{i,j}^n \approx \frac{1}{2\delta x^2} \left(v_{i+1,j+1/2}^n + v_{i+1,j-1/2}^n - 2v_{i,j+1/2}^n - 2v_{i,j-1/2}^n + v_{i-1,j+1/2}^n + v_{i-1,j-1/2}^n \right), \quad (3.80)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \bigg|_{i,j}^n \approx \frac{1}{2\delta y^2} \left(u_{i+1/2,j+1}^n + u_{i-1/2,j+1}^n - 2u_{i+1/2,j}^n - 2u_{i-1/2,j}^n + u_{i+1/2,j-1}^n + u_{i-1/2,j-1}^n \right). \quad (3.81)$$

Utilizando-se aproximações semelhantes às aquelas que foram feitas em (3.72)–(3.81), com exceção das derivadas convectivas, derivam-se as seguintes equações de diferenças finitas, associadas às equações (3.59)–(3.63), que estão implementadas no código GENSMAC para problemas bidimensionais:

• **Componente de velocidade $\tilde{u}$:**

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_{i+1/2,j}^{n+1} = & u_{i+1/2,j}^n + \delta t \left\{ CONV(u)|_{i+1/2,j} - (p_{ei+1,j} - p_{ei,j})/\delta x \right. \\
& + \frac{1}{R_e \delta y} \left[\left((u_{i+1/2,j+1} - u_{i+1/2,j})/\delta y - (v_{i+1,j+1/2} - v_{i,j+1/2})/\delta x \right) \right. \\
& \quad \left. - \left((u_{i+1/2,j} - u_{i+1/2,j-1})/\delta y - (v_{i+1,j-1/2} - v_{i,j-1/2})/\delta x \right) \right] \\
& + \frac{2}{R_e \delta x^2} \left(\nu_{ti+1,j} (u_{i+3/2,j} - u_{i+1/2,j}) - \nu_{ti,j} (u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j}) \right) \\
& + \frac{1}{R_e \delta y} \left[\nu_{ti+1/2,j+1/2} \left((u_{i+1/2,j+1} - u_{i+1/2,j})/\delta y + (v_{i+1,j+1/2} - v_{i,j+1/2})/\delta x \right) \right. \\
& \quad \left. - \nu_{ti+1/2,j-1/2} \left((u_{i+1/2,j} - u_{i+1/2,j-1})/\delta y + (v_{i+1,j-1/2} - v_{i,j-1/2})/\delta x \right) \right] \\
& \quad \left. + \frac{1}{F_r^2} g_x \right\}^n, \tag{3.82}
\end{aligned}$$

• **Componente de velocidade $\tilde{v}$:**

$$\begin{aligned}
\tilde{v}_{i,j+1/2}^{n+1} = & v_{i,j+1/2}^n + \delta t \left\{ CONV(v)|_{i,j+1/2} - (p_{ei,j+1} - p_{ei,j})/\delta y \right. \\
& - \frac{1}{R_e \delta x} \left[\left((u_{i+1/2,j+1} - u_{i+1/2,j})/\delta y - (v_{i+1,j+1/2} - v_{i,j+1/2})/\delta x \right) \right. \\
& \quad \left. - \left((u_{i-1/2,j+1} - u_{i-1/2,j})/\delta y - (v_{i,j+1/2} - v_{i-1,j+1/2})/\delta x \right) \right] \\
& + \frac{2}{R_e \delta y^2} \left(\nu_{ti,j+1} (v_{i,j+3/2} - v_{i,j+1/2}) - \nu_{ti,j} (v_{i,j+1/2} - v_{i,j-1/2}) \right) \\
& + \frac{1}{R_e \delta x} \left[\nu_{ti+1/2,j+1/2} \left((u_{i+1/2,j+1} - u_{i+1/2,j})/\delta y + (v_{i+1,j+1/2} - v_{i,j+1/2})/\delta x \right) \right. \\
& \quad \left. - \nu_{ti-1/2,j+1/2} \left((u_{i-1/2,j+1} - u_{i-1/2,j})/\delta y + (v_{i,j+1/2} - v_{i-1,j+1/2})/\delta x \right) \right] \\
& \quad \left. + \frac{1}{F_r^2} g_y \right\}^n, \tag{3.83}
\end{aligned}$$

• **Equação de Poisson para o potencial ψ :**

$$\begin{aligned}
& (\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j})/\delta x^2 + (\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1})/\delta y^2 \\
& = (\tilde{u}_{i+1/2,j} - \tilde{u}_{i-1/2,j})/\delta x + (\tilde{v}_{i,j+1/2} - \tilde{v}_{i,j-1/2})/\delta y, \tag{3.84}
\end{aligned}$$

• **Energia cinética κ :**

$$\begin{aligned} \kappa_{i,j}^{n+1} = \kappa_{i,j}^n + \delta t \left\{ CONV(\kappa)|_{i,j} + \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{\delta x^2} \left((1 + (\nu_{ti+1,j} + \nu_{ti,j})/2\sigma_\kappa)(\kappa_{i+1,j} - \kappa_{i,j}) \right. \right. \right. \\ \left. \left. - (1 + (\nu_{ti,j} + \nu_{ti-1,j})/2\sigma_\kappa)(\kappa_{i,j} - \kappa_{i-1,j}) \right) + \frac{1}{\delta y^2} \left((1 + (\nu_{ti,j+1} + \nu_{ti,j})/2\sigma_\kappa)(\kappa_{i,j+1} - \kappa_{i,j}) \right. \right. \\ \left. \left. - (1 + (\nu_{ti,j} + \nu_{ti,j-1})/2\sigma_\kappa)(\kappa_{i,j} - \kappa_{i,j-1}) \right) \right] + P_{i,j} - \epsilon_{i,j} \right\}^n, \end{aligned} \quad (3.85)$$

• **Dissipação de energia ε :**

$$\begin{aligned} \varepsilon_{i,j}^{n+1} = \varepsilon_{i,j}^n + \delta t \left\{ CONV(\varepsilon)|_{i,j} + \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{\delta x^2} \left((1 + (\nu_{ti+1,j} + \nu_{ti,j})/2\sigma_\varepsilon)(\varepsilon_{i+1,j} - \varepsilon_{i,j}) \right. \right. \right. \\ \left. \left. - (1 + (\nu_{ti,j} + \nu_{ti-1,j})/2\sigma_\varepsilon)(\varepsilon_{i,j} - \varepsilon_{i-1,j}) \right) + \frac{1}{\delta y^2} \left((1 + (\nu_{ti,j+1} + \nu_{ti,j})/2\sigma_\varepsilon)(\varepsilon_{i,j+1} - \varepsilon_{i,j}) \right. \right. \\ \left. \left. - (1 + (\nu_{ti,j} + \nu_{ti,j-1})/2\sigma_\varepsilon)(\varepsilon_{i,j} - \varepsilon_{i,j-1}) \right) \right] + (C_{1\varepsilon}P_{i,j} - C_{2\varepsilon}\varepsilon_{i,j})/T_{i,j} + \\ 2\alpha \frac{\nu_{ti,j}}{Re} \left[\frac{1}{4\delta x^4} \left(v_{i+1,j+1/2} + v_{i+1,j-1/2} - 2(v_{i,j+1/2} + v_{i,j-1/2}) + v_{i-1,j+1/2} + v_{i-1,j-1/2} \right)^2 \right. \\ \left. + \frac{1}{4\delta y^4} \left(u_{i+1/2,j+1} + u_{i-1/2,j+1} - 2(u_{i+1/2,j} + u_{i-1/2,j}) \right. \right. \\ \left. \left. + u_{i+1/2,j-1} + u_{i-1/2,j-1} \right)^2 \right] \right\}^n, \end{aligned} \quad (3.86)$$

• **Produção de turbulência P :**

$$\begin{aligned} P_{i,j}^n = \nu_{i,j}^n \left\{ \left[\frac{2}{\delta x^2} (u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j})^2 + \frac{2}{\delta y^2} (v_{i,j+1/2} - v_{i,j-1/2})^2 \right] \right. \\ \left. + \left[\frac{1}{4\delta y} \left(u_{i+1/2,j+1} + u_{i-1/2,j+1} - u_{i+1/2,j-1} - u_{i-1/2,j-1} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{4\delta x} \left(v_{i+1,j+1/2} + v_{i+1,j-1/2} - v_{i-1,j+1/2} - v_{i-1,j-1/2} \right) \right]^2 \right\}^n. \end{aligned} \quad (3.87)$$

Muitos problemas de importância em aplicações práticas se dão em domínios com simetria radial. Nessas geometrias, o movimento do fluido é completamente descrito em função de duas coordenadas: i) a coordenada ao longo do eixo z ; e ii) a distância radial r . Nesse novo sistema de coordenadas (r, z) , cujas componentes de velocidade são (v_r, v_z) , as equações de conservação gerais, em coordenadas cilíndricas (2.72), podem ser apresentadas também nas formas adimensionais e completamente conservativas como

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_r}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r v_r v_r)}{\partial r} + \frac{\partial(v_r v_z)}{\partial z} = -\frac{\partial p_e}{\partial r} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{Fr^2} g_r \\ + \frac{1}{Re} \left[2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \nu_t \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_t \left(\frac{\partial v_r}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) \right) - 2 \nu_t \frac{v_r}{r^2} \right], \end{aligned} \quad (3.88)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_z}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r v_z v_r)}{\partial r} + \frac{\partial(v_z v_z)}{\partial z} = -\frac{\partial p_e}{\partial z} - \frac{1}{Re} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) \right) + \frac{1}{Fr^2} g_z \\ + \frac{1}{Re} \left[2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_t \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \nu_t \left(\frac{\partial v_r}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) \right) \right], \end{aligned} \quad (3.89)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(r v_r)}{\partial r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0, \quad (3.90)$$

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r v_r \kappa)}{\partial r} + \frac{\partial(v_z \kappa)}{\partial z} = \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r (1 + \nu_t / \sigma_\kappa) \frac{\partial \kappa}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left((1 + \nu_t / \sigma_\kappa) \frac{\partial \kappa}{\partial z} \right) \right] + P - \varepsilon, \quad (3.91)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r v_r \varepsilon)}{\partial r} + \frac{\partial(v_z \varepsilon)}{\partial z} = \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r (1 + \nu_t / \sigma_\varepsilon) \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left((1 + \nu_t / \sigma_\varepsilon) \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) \right] + Q + \alpha E, \quad (3.92)$$

$$P = \nu_t \left(2 \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{v_r}{r} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)^2 \right), \quad (3.93)$$

$$Q = (C_{1\varepsilon} P - C_{2\varepsilon} \varepsilon) / T_t. \quad (3.94)$$

Nas equações (3.91)-(3.94), as constantes C_μ , σ_κ , σ_ε , $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, α e as grandezas ν_t , T_t assumem, respectivamente, os mesmos valores e expressões vistos anteriormente. No modelo para números de Reynolds pequenos de Yang e Shih, o termo-fonte E assume a seguinte forma simplificada e utilizada na implementação

$$E = \frac{2\nu_t}{Re} \left(\left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial r^2} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right)^2 \right). \quad (3.95)$$

Denotando-se r_i por $i\delta r$, obtêm-se as versões discretas das equações (3.88)–(3.93), as quais estão implementadas no código GENSMAC para problemas com simetria radial:

• **Componente de velocidade $\tilde{v}_r$:**

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{r,i+1/2,j}^{n+1} = & v_{r,i+1/2,j}^n + \delta t \{ CONV(v_r)|_{i+1/2,j} - (p_{e,i+1,j} - p_{e,i,j})/\delta r \\ & + \frac{1}{Re\delta z} \left[\left((v_{r,i+1/2,j+1} - v_{r,i+1/2,j})/\delta z - (v_{z,i+1,j+1/2} - v_{z,i,j+1/2})/\delta r \right) \right. \\ & \left. - \left((v_{r,i+1/2,j} - v_{r,i+1/2,j-1})/\delta z - (v_{z,i+1,j-1/2} - v_{z,i,j-1/2})/\delta r \right) \right] \\ & + \frac{2}{Re r_{i+1/2,j} \delta r^2} \left(r_{i+1,j} \nu_{t,i+1,j} (v_{r,i+3/2,j} - v_{r,i+1/2,j}) - r_{i,j} \nu_{t,i,j} (v_{r,i+1/2,j} - v_{r,i-1/2,j}) \right) \\ & + \frac{1}{Re\delta z} \left[\nu_{t,i+1/2,j+1/2} \left((v_{r,i+1/2,j+1} - v_{r,i+1/2,j})/\delta z + (v_{z,i+1,j+1/2} - v_{z,i,j+1/2})/\delta r \right) \right. \\ & \left. - \nu_{t,i+1/2,j-1/2} \left((v_{r,i+1/2,j} - v_{r,i+1/2,j-1})/\delta z + (v_{z,i+1,j-1/2} - v_{z,i,j-1/2})/\delta r \right) \right] \\ & \left. - \frac{1}{Re} \frac{2}{r_{i+1/2,j}^2} \nu_{t,i+1/2,j} v_{r,i+1/2,j} + \frac{1}{F_r^2} g_r \right\}^n, \end{aligned} \quad (3.96)$$

• **Componente de velocidade $\tilde{v}_z$:**

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{z,i,j+1/2}^{n+1} = & v_{z,i,j+1/2}^n + \delta t \{ CONV(v_z)|_{i,j+1/2} - (p_{e,i,j+1} - p_{e,i,j})/\delta z \\ & - \frac{1}{Re\delta r r_{i,j+1/2}} \left[r_{i+1/2,j+1/2} \left((v_{r,i+1/2,j+1} - v_{r,i+1/2,j})/\delta z - (v_{z,i+1,j+1/2} - v_{z,i,j+1/2})/\delta r \right) \right. \\ & \left. - r_{i-1/2,j+1/2} \left((v_{r,i-1/2,j+1} - v_{r,i-1/2,j})/\delta z - (v_{z,i,j+1/2} - v_{z,i-1,j+1/2})/\delta r \right) \right] \\ & + \frac{2}{Re\delta z^2} \left(\nu_{t,i,j+1} (v_{z,i,j+3/2} - v_{z,i,j+1/2}) - \nu_{t,i,j} (v_{z,i,j+1/2} - v_{z,i,j-1/2}) \right) \\ & + \frac{1}{Re\delta r r_{i,j+1/2}} \left[r_{i+1/2,j+1/2} \nu_{t,i+1/2,j+1/2} \left((v_{r,i+1/2,j+1} - v_{r,i+1/2,j})/\delta z + (v_{z,i+1,j+1/2} - v_{z,i,j+1/2})/\delta r \right) \right. \\ & \left. - r_{i-1/2,j+1/2} \nu_{t,i-1/2,j+1/2} \left((v_{r,i-1/2,j+1} - v_{r,i-1/2,j})/\delta z + (v_{z,i,j+1/2} - v_{z,i-1,j+1/2})/\delta r \right) \right] \\ & \left. + \frac{1}{F_z^2} g_z \right\}^n, \end{aligned} \quad (3.97)$$

• **Equação de Poisson para o potencial ψ :**

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r_{i,j}\delta r^2} \left(r_{i+1/2,j}(\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}) - r_{i-1/2,j}(\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}) \right) + (\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1})/\delta z^2 \\ &= \frac{1}{r_{i,j}\delta r} (r_{i+1/2,j}\tilde{v}_{r_{i+1/2,j}} - r_{i-1/2,j}\tilde{v}_{r_{i-1/2,j}}) + (\tilde{v}_{z_{i,j+1/2}} - \tilde{v}_{z_{i,j-1/2}})/\delta z, \end{aligned} \quad (3.98)$$

• **Energia cinética κ :**

$$\begin{aligned} \kappa_{i,j}^{n+1} = \kappa_{i,j}^n + \delta t \left\{ CONV(\kappa)|_{i,j} + \frac{1}{Re r_{i,j}\delta r^2} \left[r_{i+1/2,j}(1 + (\nu_{ti+1,j} + \nu_{ti,j})/2\sigma_\kappa)(\kappa_{i+1,j} - \kappa_{i,j}) \right. \right. \\ \left. \left. - r_{i-1/2,j}(1 + (\nu_{ti,j} + \nu_{ti-1,j})/2\sigma_\kappa)(\kappa_{i,j} - \kappa_{i-1,j}) \right] + \frac{1}{Re\delta y^2} \left[(1 + (\nu_{ti,j+1} + \nu_{ti,j})/2\sigma_\kappa)(\kappa_{i,j+1} - \kappa_{i,j}) \right. \right. \\ \left. \left. - (1 + (\nu_{ti,j} + \nu_{ti,j-1})/2\sigma_\kappa)(\kappa_{i,j} - \kappa_{i,j-1}) \right] + P_{i,j} - \epsilon_{i,j} \right\}^n, \end{aligned} \quad (3.99)$$

• **Dissipação de energia ε :**

$$\begin{aligned} \varepsilon_{i,j}^{n+1} = \varepsilon_{i,j}^n + \delta t \left\{ CONV(\varepsilon)|_{i,j} + \frac{1}{Re r_{i,j}\delta r^2} \left[r_{i+1/2,j}(1 + (\nu_{ti+1,j} + \nu_{ti,j})/2\sigma_\varepsilon)(\varepsilon_{i+1,j} - \varepsilon_{i,j}) \right. \right. \\ \left. \left. - r_{i-1/2,j}(1 + (\nu_{ti,j} + \nu_{ti-1,j})/2\sigma_\varepsilon)(\varepsilon_{i,j} - \varepsilon_{i-1,j}) \right] + \frac{1}{Re\delta y^2} \left[(1 + (\nu_{ti,j+1} + \nu_{ti,j})/2\sigma_\varepsilon)(\varepsilon_{i,j+1} - \varepsilon_{i,j}) \right. \right. \\ \left. \left. - (1 + (\nu_{ti,j} + \nu_{ti,j-1})/2\sigma_\varepsilon)(\varepsilon_{i,j} - \varepsilon_{i,j-1}) \right] + (C_{1\varepsilon}P_{i,j} - C_{2\varepsilon}\varepsilon_{i,j})/T_{i,j} + \right. \\ \left. \alpha 2 \frac{\nu_{ti,j}}{Re} \left[\frac{1}{4\delta x^4} \left(v_{zi+1,j+1/2} + v_{zi+1,j-1/2} - 2(v_{zi,j+1/2} + v_{zi,j-1/2}) + v_{zi-1,j+1/2} + v_{zi-1,j-1/2} \right)^2 \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{4\delta y^4} \left(v_{ri+1/2,j+1} + v_{ri-1/2,j+1} - 2(v_{ri+1/2,j} + v_{ri-1/2,j}) \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + v_{ri+1/2,j-1} + v_{ri-1/2,j-1} \right)^2 \right] \right\}^n, \end{aligned} \quad (3.100)$$

• **Produção de turbulência P :**

$$\begin{aligned} P_{i,j}^n = \nu_{i,j}^n \left\{ 2 \left[\frac{1}{\delta r^2} (v_{ri+1/2,j} - v_{ri-1/2,j})^2 + \frac{1}{\delta z^2} (v_{zi,j+1/2} - v_{zi,j-1/2})^2 + \left(\frac{v_{ri+1/2,j} + v_{ri-1/2,j}}{2r_{i,j}} \right)^2 \right] \right. \\ \left. + \left[\frac{1}{4\delta z} \left(v_{ri+1/2,j+1} + v_{ri-1/2,j+1} - v_{ri+1/2,j-1} - v_{ri-1/2,j-1} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{4\delta r} \left(v_{zi+1,j+1/2} + v_{zi+1,j-1/2} - v_{zi-1,j+1/2} - v_{zi-1,j-1/2} \right) \right]^2 \right\}^n. \end{aligned} \quad (3.101)$$

Capítulo 4

Estimativas “Upwind” e Discretização dos Termos Convectivos

4.1 Introdução

Em dinâmica dos fluidos computacional, a maneira pela qual as derivadas convectivas nas equações de conservação (2.48)–(2.53), (3.59)–(3.63) e (3.88)–(3.92) são aproximadas requer atenção especial, porque esses termos são os responsáveis por muitos fenômenos complexos nos escoamentos e os principais causadores de dificuldades numéricas nas simulações. Por essas razões, nas últimas décadas, o estado da arte na modelagem numérica dessas não-linearidades, utilizando-se a metodologia de diferenças finitas ou volumes finitos, tem sido dominado principalmente pelas aproximações “upwind” de primeira ordem, tais como FOU (“First Order Upwind”) ([Courant et al. (1952)]), HYBRID ([Spalding (1972)]) e PLDS (“Power-Law Differencing Scheme”) ([Patankar (1980)]). Muito embora os esquemas “upwind” de primeira ordem imitem o método das características ([Ferziger (2000)]) e assegurem a estabilidade do esquema numérico, vários pesquisadores tais como Raithby ([Raithby (1976)]), deVahl e Mallison ([deVahl & Mallison (1976)]), entre muitos outros, alertam para o fato da introdução de viscosidade numérica, intrínseca a esses esquemas.

Via de regra, a viscosidade artificial adicional introduzida pelo processo de discretização é muito maior do que o coeficiente de viscosidade molecular do fluido, e, como consequência, o resultado numérico obtido pode estar associado à solução de um problema com

características completamente diferentes do problema físico. Os esquemas FOU, HYBRID e PLDS têm suas origens no comportamento do fluido em que convecção é o mecanismo predominante no transporte de propriedades físicas. Atualmente eles continuam, ainda, sendo utilizados para superar os problemas das oscilações não-físicas e/ou instabilidades numéricas associados aos métodos clássicos CD e SOU (“Second Order Upwind”) ([Price et al. (1966)], [Fromm (1968)]).

Com o objetivo de minimizar a introdução excessiva de viscosidade numérica e, ao mesmo tempo, derivar técnicas de alta ordem de consistência, diversos esquemas “upwind” surgiram na década de setenta. Dentre os mais populares, podem-se destacar os algoritmos SUDS (“Skew-Upwind Differencing Schemes”) ([Raithby (1976)]) e QUICK ([Leonard (1979)]). Entretanto, o mesmo que acontece com os esquemas CD e SOU, nas vizinhanças de regiões onde gradientes elevados aparecem, a natureza dispersiva desses esquemas pode induzir oscilações espúrias (“wiggles”) na solução, as quais são suficientes para causar instabilidade numérica e, em decorrência, deteriorar completamente a precisão do método numérico. As dificuldades em superar oscilações/instabilidades na solução numérica levaram ao desenvolvimento de esquemas localmente limitados, e muitas tentativas foram feitas para encontrar um compromisso aceitável entre precisão, estabilidade e simplicidade de implementação. Hoje em dia, uma das metodologias mais bem aceitas em escoamentos incompressíveis proporciona a alta ordem do esquema QUICK e as boas propriedades de estabilidade do esquema FOU, resultando em esquemas incondicionalmente estáveis e de ordem de consistência razoável.

Em resumo, quando precisão de ordem elevada, estabilidade numérica e simplicidade do algoritmo são objetivos simultâneos a serem alcançados, a simulação de problemas de escoamentos incompressíveis em condições severas de convecção permanece ainda um problema difícil de se resolver, particularmente em problemas de escoamentos transientes envolvendo fronteiras móveis.

Neste capítulo discutem-se as propriedades físicas dos termos convectivos e apresentam-se alguns algoritmos para a simulação de escoamentos incompressíveis dominados por convecção. Utilizando-se variáveis normalizadas de Leonard ([Leonard (1988)]) e o critério de estabilidade de Gaskell e Lau ([Gaskell & Lau (1988)]), discutem-se também os esquemas convectivos principais que são considerados neste trabalho os apropriados para a classe de problemas de escoamentos de fluidos com superfícies livres.

4.2 Aproximações para os Termos Convectivos

Com o objetivo de completar a discretização das equações de conservação iniciada no capítulo 3, nesta e nas próximas seções discutem-se as aproximações para as derivadas convectivas, que estão implementadas nos códigos GENSMAC para problemas bidimensionais, com simetria radial e tridimensionais.

Suponha-se que se deseja aproximar a equação de transporte geral (2.57), contendo os termos convectivos, em um ponto particular P do volume de controle, como está indicado na figura 4.1.

Figura 4.1: Representação esquemática para se obter aproximações dos termos convectivos, mostrando: O ponto P de discretização e seus vizinhos, as faces envolvidas f e g para a aproximação e a direção da velocidade $\mathbf{V}_f$ de convecção na face f .

No ponto P tem-se para os termos convectivos de (2.57)

$$CONV(\phi)|_P = -\left(\frac{\partial(\phi u)}{\partial x}|_P + \frac{\partial(\phi v)}{\partial y}|_P + \frac{\partial(\phi w)}{\partial z}|_P\right). \quad (4.1)$$

Por simplicidade, considera-se apenas o segundo termo em (4.1), sem levar em conta o sinal. Então, esse termo é aproximado em P (ver figura 4.1) pela diferença

$$\frac{\partial(v\phi)}{\partial y}|_P \approx \left((v\phi)|_f - (v\phi)|_g\right)/\delta = \left(v_f\phi_f - v_g\phi_g\right)/\delta, \quad (4.2)$$

em que v_f e v_g são estimados usando-se a média aritmética dos valores vizinhos $\mathbf{U}$ (“Upstream”) e $\mathbf{D}$ (“Downstream”) para f , e $\mathbf{U}$ e $\mathbf{R}$ (“Remote-upstream”) para g , quando não se dispõe dos seus valores nas faces f e g . A maneira de se aproximar os valores de ϕ_f e ϕ_g em (4.2) é de importância fundamental para a precisão e estabilidade das soluções numéricas. A técnica de diferenças centrais, por exemplo, aproxima ϕ_f pela semi-soma de ϕ_U e ϕ_D obtendo segunda ordem de precisão. Nesse caso, o fenômeno de dispersão associado a essa aproximação pode proporcionar oscilações na solução e instabilidade numérica, ocasionando solução não-limitada ([Patankar (1980)], [Hirsch (1988)]). Para se obter soluções limitadas, é necessário embutir informações físicas do problema nas aproximações numéricas. O tratamento “upwind”, por exemplo, determina ϕ_f utilizando a direção de propagação de informações físicas (velocidade de convecção $\mathbf{V}_f$) na face f . Nesse caso, soluções limitadas são garantidas pelo critério de estabilidade para sistemas de equações lineares ([Patankar (1980)]). Mas, se a aproximação “upwind” envolve esquemas de primeira ordem, a introdução implícita de viscosidade numérica pode violar a ordem de precisão global da discretização e distorcer severamente a solução numérica.

Como foi discutido anteriormente, nenhum dos esquemas tradicionais de alta ordem, tais como CD e QUICK, produz soluções numéricas limitadas e, ao mesmo tempo, precisas de escoamentos incompressíveis dominados por convecção. Esse problema tem sido o assunto de intensas pesquisas nos últimos anos e, atualmente, existem abordagens diferentes. Dentre as mais aceitas incluem-se os esquemas FLS (“Flux-Limited Schemes”) de Boris e Book ([Boris & Book (1973)]), o tratamento de Raithby ([Raithby (1976)]), que leva em conta as linhas de corrente na formulação, a separação de Roe ([Roe (1981)]), a técnica FVS (“Flux Vector Splitting”) de van Leer ([van Leer (1982)]), os esquemas baseados na noção TVD (“Total Variation Diminishing”) de Harten ([Harten (1983)]), ou a adição de derivadas de ordem par de Pulliam ([Pulliam (1986)]). Essas metodologias são bem desenvolvidas para problemas compressíveis dominados por convecção e não-transientes, sem levar em consideração o coeficiente de viscosidade molecular na análise. Por outro lado, tais tratamentos podem não ser efetivos nos escoamentos viscosos, incompressíveis e em regime transiente, sobretudo nos casos tridimensionais em que o tratamento “upwind” de primeira ordem é muito mais dissipativo. Assim, faz-se necessário, para configurações multidimensionais, aplicar um tratamento alternativo. No presente estudo adotam-se os algoritmos de alta ordem, derivados da associação de variáveis normalizadas de Leonard, e o seu critério de monotonicidade

([Leonard (1988)]), com o critério CBC (“Convection Boundedness Criterium”) de Gaskel e Lau ([Gaskell & Lau (1988)]).

4.3 Variáveis Normalizadas e o Critério CBC

Antes de derivar aproximações para as propriedades nas faces f e g , como foi discutido na secção 4.2, é importante compreender as suas propriedades físicas. Independentemente da distribuição do campo de velocidade no domínio de solução, as não-linearidades nas equações de transporte não devem violar os valores-limite da propriedade transportada ϕ , dados a partir de uma distribuição conhecida. Se, por exemplo, a variável ϕ varia inicialmente entre α_1 e α_2 , os efeitos devidos aos termos de inércia nunca deverão produzir valores de ϕ além desses limites. Considerando-se a importância de soluções limitadas no transporte de propriedades físicas, é, então, essencial preservar essa propriedade na forma discretizada dos termos convectivos. Essencialmente, uma solução é limitada se o seu valor em um ponto computacional é limitado pelos valores da solução nos pontos vizinhos. Em problemas dominados por convecção, por exemplo, o esquema CD pode levar a soluções localmente não-limitadas, tipicamente de carácter oscilatório. Nesses casos, soluções limitadas são obtidas pela aplicação da discretização “upwind”, ou pelo processo de filtragem, normalmente na forma de uma derivada de ordem par. Neste trabalho, o interesse é o tratamento “upwind”.

Para obter esquemas capazes de resolver gradientes elevados e, ao mesmo tempo, manter estabilidade nas soluções numéricas, Leonard ([Leonard (1988)]) e Gaskell e Lau ([Gaskell & Lau (1988)]) propuseram o conceito de variáveis normalizadas e o critério CBC, os quais, diferentemente do tratamento TVD, não garantem convergência, mas tratam o problema de estabilidade de uma maneira mais adequada. Novamente, considera-se o ponto $\mathbf{U}$ e a variação local da variável escalar ϕ em suas vizinhanças, como está mostrado na figura 4.1. Sem perda de generalidade, admite-se que o fluxo na face f esteja na direção e sentido do eixo coordenado y isto é, $\mathbf{V}_f > \mathbf{0}$ (velocidade normal à face f). A variável normalizada de Leonard é, então, definida por

$$\hat{\phi} = \frac{\phi - \phi_R}{\phi_D - \phi_R}, \quad (4.3)$$

em que ϕ_D e ϕ_R são, respectivamente, os valores não-normalizados da propriedade ϕ nos pontos $\mathbf{D}$ e $\mathbf{R}$. A figura 4.2 ilustra, no caso unidimensional, a variação da variável transpor-

tada ϕ nas vizinhanças da face f . É importante notar, a partir dessa figura e da definição (4.3), que $\hat{\phi}_R = 0$ e $\hat{\phi}_D = 1$. Também, se $\hat{\phi}_U = 0$, $\phi_U = \phi_R$ e se $\hat{\phi}_U = 1$, $\phi_U = \phi_D$.

Figura 4.2: Representação esquemática do comportamento monotônico local da variável genérica ϕ nas vizinhanças da face f .

Para evitar oscilações na solução numérica exige-se que ϕ_U e, conseqüentemente, ϕ_f sejam localmente limitados entre ϕ_D e ϕ_R , significando que $\phi_R \leq \phi_U \leq \phi_D$, ou que $\phi_R \geq \phi_U \geq \phi_D$. Se esse critério está satisfeito para todo ponto no domínio de solução, a solução global estará ausente de oscilações não-físicas. Esta é a essência do tratamento dos termos convectivos em variáveis normalizadas. O critério CBC para ϕ_U é, então, dado por ([Gaskell & Lau (1988)])

$$0 \leq \hat{\phi}_U \leq 1. \quad (4.4)$$

A partir da definição (4.3), qualquer esquema de convecção que utilize somente os valores de ϕ nos pontos **D**, **U** e **R** para avaliar ϕ_f pode ser representado na forma funcional

$$\hat{\phi}_f = F(\hat{\phi}_U), \quad (4.5)$$

em que

$$\hat{\phi}_f = \frac{\phi_f - \phi_R}{\phi_D - \phi_R}, \quad \hat{\phi}_U = \frac{\phi_U - \phi_R}{\phi_D - \phi_R}. \quad (4.6)$$

Exemplos representativos de esquemas em função de variáveis normalizadas de Leonard são os esquemas clássicos CD, FOU, SOU e QUICK dados, respectivamente, por:

• **CD:**

$$\hat{\phi}_f = 0,5(1 + \hat{\phi}_U), \quad (4.7)$$

• **FOU:**

$$\hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U, \quad (4.8)$$

• **SOU:**

$$\hat{\phi}_f = 1,5\hat{\phi}_U, \quad (4.9)$$

• **QUICK:**

$$\hat{\phi}_f = 0,375(1 + 2\hat{\phi}_U). \quad (4.10)$$

É possível verificar por experimentos numéricos que nenhum dos esquemas (4.7)–(4.10), com exceção do esquema FOU, representado por (4.5) com F linear, pode fornecer uma boa aproximação para a propriedade ϕ em f ; é preciso assumir a existência de uma função F não-linear, ou linear por partes, crescente e contínua, de maneira que o esquema resultante introduza o mínimo de viscosidade artificial, mantenha a solução dentro de regiões estáveis e tenha ordem de precisão razoável. Esses objetivos podem ser alcançados respeitando-se o critério CBC, que garante uma condição necessária e suficiente de se obter soluções limitadas. Formalmente, o critério CBC afirma que se F em (4.5) é crescente e contínua (ou crescente e contínua por partes), então uma aproximação por diferenças finitas para $\hat{\phi}_f$ é limitada se, e somente se, satisfaz as seguintes condições ([Gaskell & Lau (1988)]):

- $F(\hat{\phi}_U) \leq 1, \quad F(\hat{\phi}_U) \geq \hat{\phi}_U, \quad F(0) = 0 \quad \text{e} \quad F(1) = 1, \quad \text{se} \quad \hat{\phi}_U \in [0, 1],$
- $F(\hat{\phi}_U) = \hat{\phi}_U, \quad \text{se} \quad \hat{\phi}_U \notin [0, 1].$

O esquema QUICK não satisfaz o critério CBC incondicionalmente. Entretanto, ele é formalmente de terceira ordem de precisão e bem conhecido por introduzir pouca viscosidade artificial em problemas confinados e a números de Reynolds moderados. Obviamente, uma boa escolha para F é compor os esquemas QUICK e FOU, de maneira que o esquema resultante satisfaça o critério CBC e mantenha as boas propriedades do esquema QUICK. Tais considerações levaram um grupo de pesquisadores a propor esquemas de alta ordem satisfazendo o critério CBC. Dentre os vários esquemas encontrados na literatura, os mais populares incluem o esquema SMART ([Gaskell & Lau (1988)]), o esquema HLPa ([Zhu (1992)]) e o esquema VONOS ([Varonos & Bergeles (1998)]). Em variáveis normalizadas, esses esquemas são, respectivamente, representados por:

• **SMART:**

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \hat{\phi}_U & \text{se } \hat{\phi}_U \notin [0, 1], \\ 10\hat{\phi}_U & \text{se } 0 \leq \hat{\phi}_U < 3/74, \\ \frac{3}{8}(1 + 2\hat{\phi}_U) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\phi}_U < 5/6, \\ 1 & \text{se } 5/6 \leq \hat{\phi}_U \leq 1. \end{cases} \quad (4.11)$$

• **HLPa:**

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \hat{\phi}_U & \text{se } \hat{\phi}_U \notin [0, 1], \\ (2 - \hat{\phi}_U)\hat{\phi}_U & \text{se } \hat{\phi}_U \in [0, 1]. \end{cases} \quad (4.12)$$

• **VONOS:**

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \hat{\phi}_U & \text{se } \hat{\phi}_U \notin [0, 1], \\ 10\hat{\phi}_U & \text{se } 0 \leq \hat{\phi}_U < 3/74, \\ \frac{3}{8}(1 + 2\hat{\phi}_U) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\phi}_U < 1/2, \\ 1, 5\hat{\phi}_U & \text{se } 1/2 \leq \hat{\phi}_U < 2/3, \\ 1 & \text{se } 2/3 \leq \hat{\phi}_U \leq 1. \end{cases} \quad (4.13)$$

O desenvolvimento em série de Taylor em torno da face f fornece as expressões dos erros de truncamento locais associados aos algoritmos de convecção analisados. Para os esquemas FOU, CD, QUICK, SOU e a parte não-linear do HLP, os resultados do desenvolvimento são apresentados a seguir, mostrando suas respectivas ordens ([Gaskell & Lau (1988)], [Zhu (1992)]):

- **FOU:** $\phi_f = \phi_U + \frac{1}{2}\delta y \phi'_U + O(\delta y^2),$
- **CD:** $\phi_f = 0,5(\phi_D + \phi_U) + \frac{1}{4}\delta y^2 \phi''_U + O(\delta y^3),$
- **QUICK:** $\phi_f = \frac{1}{8}(3\phi_D + 6\phi_U - \phi_R) + \frac{1}{16}\delta y^3 \phi'''_U + O(\delta y^4),$
- **SOU:** $\phi_f = 0,5(3\phi_U - \phi_R) + \frac{3}{8}\delta y^2 \phi''_U + O(\delta y^3),$
- **HLP:** $\phi_f = \phi_U + (\phi_D - \phi_U) \frac{\phi_U - \phi_R}{\phi_D - \phi_R} + \frac{1}{8}\delta y^2 \phi''_U + O(\delta y^3),$

em que a notação $O(\delta y^p)$, $p \geq 0$ e inteiro, representa termos contendo $\delta y^{(p+q)}$, sendo também $q \geq 0$ e inteiro. Do ponto de vista matemático, uma função real $y = f(x)$ é $O(x^p)$ (isto é, $f(x) = O(x^p)$), para significar que, quando $x \rightarrow 0$, existe uma constante real k positiva tal que, para x nas vizinhanças do zero, $|f(x)| \leq kx^p$. Como discutido por Leonard & Drummond ([Leonard & Drummond (1995)]) e Varonos & Bergeles ([Varonos & Bergeles (1998)]), os esquemas SMART e VONOS possuem ordem de precisão variável: a precisão do SMART varia de segunda ordem ($\hat{\phi}_U < 3/74$) até terceira ordem ($\hat{\phi}_U \geq 3/74$, QUICK); e a precisão do VONOS varia de terceira ordem ($\hat{\phi}_U < 1/2$, QUICK) até segunda ordem ($\hat{\phi}_U \geq 1/2$, SOU).

O critério CBC de Gaskell & Lau pode ser ilustrado claramente no plano $\hat{\phi}_U - \hat{\phi}_f$, como mostram as figuras 4.3 e 4.4. Na figura 4.3, a reta $\hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U$ unida à área hachurada é a região na qual este critério é válido. É interessante observar, a partir dessas figuras, que, em variáveis normalizadas de Leonard, os valores de $\hat{\phi}$ em f utilizados pelos esquemas CD, FOU, SOU e QUICK (equações (4.7)–(4.10)) são funções lineares do valor vizinho $\hat{\phi}_U$ (“upstream”), ao passo que os esquemas SMART e VONOS (equações (4.11) e (4.13)), incondicionalmente, satisfazem o critério CBC somente no intervalo $0 \leq \hat{\phi}_U \leq 1$ por meio de funções lineares contínuas por partes. Já o esquema HLP satisfaz o CBC incondicionalmente por meio de uma função não-linear.

Figura 4.3: Representação do diagrama CBC em variáveis normalizadas, mostrando a região ilimitada CBC e os esquemas FOU, QUICK e HLPa.

Figura 4.4: Representação dos esquemas FOU, SMART e VONOS no diagrama CBC.

4.4 Discretização dos Termos Convectivos

Na seção 4.3 discutiu-se como a maneira de aproximar as propriedades físicas ϕ em f e g tem forte influência nas soluções numéricas. Na presente seção, utilizando-se os vários esquemas de convecção estudados, retorna-se ao processo de discretização das leis físicas de conservação e apresentam-se as aproximações não-normalizadas para ϕ_f e ϕ_g , que estão implementadas nos códigos GENSMAC.

Utilizando-se as definições (4.6), os esquemas CD, FOU, HYBRID, QUICK, SMART, HLPa e VONOS em variáveis não-normalizadas podem ser, respectivamente, representados como:

- **CD:** $\phi_f = 0,5(\phi_D + \phi_U)$
- **FOU:** $\phi_f = \phi_U$
- **HYBRID:** $\phi_f = (1 - s)\phi_f^{\text{CD}} + s\phi_f^{\text{FOU}}$
- **QUICK:** $\phi_f = \frac{1}{8}(3\phi_D + 6\phi_U - \phi_R)$
- **SMART:**

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_U & \text{se } \hat{\phi}_U \notin [0, 1], \\ 10\phi_U - 9\phi_R & \text{se } 0 \leq \hat{\phi}_U < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3\phi_D + 6\phi_U - \phi_R) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\phi}_U < 5/6, \\ \phi_D & \text{se } 5/6 \leq \hat{\phi}_U \leq 1. \end{cases} \quad (4.14)$$

- **HLPa:**

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_U & \text{se } \hat{\phi}_U \notin [0, 1], \\ \phi_U + (\phi_D - \phi_U)\hat{\phi}_U & \text{se } \hat{\phi}_U \in [0, 1]. \end{cases} \quad (4.15)$$

• VONOS:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_U & \text{se } \hat{\phi}_U \notin [0, 1], \\ 10\phi_U - 9\phi_R & \text{se } 0 \leq \hat{\phi}_U < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3\phi_D + 6\phi_U - \phi_R) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\phi}_U < 1/2, \\ 1,5\phi_U - 0,5\phi_R & \text{se } 1/2 \leq \hat{\phi}_U < 2/3, \\ \phi_D & \text{se } 2/3 \leq \hat{\phi}_U \leq 1. \end{cases} \quad (4.16)$$

O parâmetro s que aparece no esquema HYBRID é definido como 0 se $|Pe| < 2$, ou 1 caso contrário. A partir de agora, as propriedades em f e g são avaliadas utilizando-se os vários esquemas de convecção analisados. Por simplicidade e sem perda de generalidade considera-se a variável $\phi = u$, na aproximação (4.2), transportada com velocidade v na direção y . Nesse caso $P = (i + 1/2, j, k)$, $f = j + 1/2$, $g = j - 1/2$, e aquela derivada é aproximada como

$$\frac{\partial(vu)}{\partial y}|_{i+1/2,j,k} \approx (\bar{v}_1 u_{i+1/2,j+1/2,k} - \bar{v}_2 u_{i+1/2,j-1/2,k})/\delta y, \quad (4.17)$$

em que os valores $\bar{v}_1$ e $\bar{v}_2$ são aproximados utilizando-se médias

$$\bar{v}_1 = v_{i+1/2,j+1/2,k} \approx 0,5(v_{i+1,j+1/2,k} + v_{i,j+1/2,k}),$$

$$\bar{v}_2 = v_{i+1/2,j-1/2,k} \approx 0,5(v_{i+1,j-1/2,k} + v_{i,j-1/2,k}).$$

Na representação (4.17) os pontos $(i + 1/2, j + 1/2, k)$ e $(i + 1/2, j - 1/2, k)$ não são, em princípio, definidos na malha e, portanto, os valores da propriedade u nesses pontos não estão disponíveis. Para completar a aproximação, empregam-se aproximações “upwind”. Para tanto, os valores da propriedade transportada u em $(i + 1/2, j + 1/2, k)$ e $(i + 1/2, j - 1/2, k)$ são aproximados utilizando-se os pontos vizinhos **D**, **U** e **R**, os quais são definidos de acordo com a direção do escoamento (sinais de $\bar{v}_1$ e $\bar{v}_2$), como é mostrado na seqüência para esse caso particular:

- Para $u_{i+1/2,j+1/2,k}$, com $\bar{v}_1 > 0$:

$$\mathbf{D} = (i + 1/2, j + 1, k), \quad \mathbf{U} = (i + 1/2, j, k), \quad \mathbf{R} = (i + 1/2, j - 1, k);$$

- Para $u_{i+1/2,j+1/2,k}$, com $\bar{v}_1 < 0$:

$$\mathbf{D} = (i + 1/2, j, k), \quad \mathbf{U} = (i + 1/2, j + 1, k), \quad \mathbf{R} = (i + 1/2, j + 2, k);$$

- Para $u_{i+1/2,j-1/2,k}$, com $\bar{v}_2 > 0$:

$$\mathbf{D} = (i + 1/2, j, k), \quad \mathbf{U} = (i + 1/2, j - 1, k), \quad \mathbf{R} = (i + 1/2, j - 2, k);$$

- Para $u_{i+1/2,j-1/2,k}$, com $\bar{v}_2 < 0$:

$$\mathbf{D} = (i + 1/2, j - 1, k), \quad \mathbf{U} = (i + 1/2, j, k), \quad \mathbf{R} = (i + 1/2, j + 1, k);$$

Uma vez conhecidas as direções das velocidades de convecção em f e g , os pontos vizinhos correspondentes $\mathbf{D}$, $\mathbf{U}$ e $\mathbf{R}$ ficam automaticamente especificados. Então, lembrando-se das definições em (4.6), as aproximações para $u_{i+1/2,j+1/2,k}$ e $u_{i+1/2,j-1/2,k}$, utilizando-se os esquemas de convecção, são implementadas como segue:

- Aproximações para $u_{i+1/2,j+1/2,k}$, quando $\bar{v}_1 > 0$:

- **CD:** $u_{i+1/2,j+1/2,k} = 0,5(u_{i+1/2,j+1,k} + u_{i+1/2,j,k})$

- **FOU:** $u_{i+1/2,j+1/2,k} = u_{i+1/2,j,k}$

- **QUICK:** $u_{i+1/2,j+1/2,k} = \frac{1}{8}(3u_{i+1/2,j+1,k} + 6u_{i+1/2,j,k} - u_{i+1/2,j-1,k})$

- **HLP:**

$$u_{i+1/2,j+1/2,k} = \begin{cases} u_{i+1/2,j,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j,k} \notin [0, 1], \\ u_{i+1/2,j,k} + (u_{i+1/2,j+1,k} - u_{i+1/2,j,k})\hat{u}_{i+1/2,j,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j,k} \in [0, 1]. \end{cases}$$

- **SMART:**

$$u_{i+1/2,j+1/2,k} = \begin{cases} u_{i+1/2,j,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j,k} \notin [0, 1], \\ 10u_{i+1/2,j,k} - 9u_{i+1/2,j-1,k} & \text{se } 0 \leq \hat{u}_{i+1/2,j,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3u_{i+1/2,j+1,k} + 6u_{i+1/2,j,k} - u_{i+1/2,j-1,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{u}_{i+1/2,j,k} < 5/6, \\ u_{i+1/2,j+1,k} & \text{se } 5/6 \leq \hat{u}_{i+1/2,j,k} \leq 1. \end{cases}$$

- **VONOS:**

$$u_{i+1/2,j+1/2,k} = \begin{cases} u_{i+1/2,j,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j,k} \notin [0, 1], \\ 10u_{i+1/2,j,k} - 9u_{i+1/2,j-1,k} & \text{se } 0 \leq \hat{u}_{i+1/2,j,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3u_{i+1/2,j+1,k} + 6u_{i+1/2,j,k} - u_{i+1/2,j-1,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{u}_{i+1/2,j,k} < 1/2, \\ 1, 5u_{i+1/2,j,k} - 0.5u_{i+1/2,j-1,k} & \text{se } 1/2 \leq \hat{u}_{i+1/2,j,k} < 2/3, \\ u_{i+1/2,j+1,k} & \text{se } 2/3 \leq \hat{u}_{i+1/2,j,k} \leq 1. \end{cases}$$

em que $\hat{u}_{i+1/2,j,k} = (u_{i+1/2,j,k} - u_{i+1/2,j-1,k}) / (u_{i+1/2,j+1,k} - u_{i+1/2,j-1,k})$.

- Aproximações para $u_{i+1/2,j+1/2,k}$, quando $\bar{v}_1 < 0$:

- **CD:** $u_{i+1/2,j+1/2,k} = 0, 5(u_{i+1/2,j,k} + u_{i+1/2,j+1,k})$

- **FOU:** $u_{i+1/2,j+1/2,k} = u_{i+1/2,j+1,k}$

- **QUICK:** $u_{i+1/2,j+1/2,k} = \frac{1}{8}(3u_{i+1/2,j,k} + 6u_{i+1/2,j+1,k} - u_{i+1/2,j+2,k})$

- **HLPA:**

$$u_{i+1/2,j+1/2,k} = \begin{cases} u_{i+1/2,j+1,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j+1,k} \notin [0, 1], \\ u_{i+1/2,j+1,k} + (u_{i+1/2,j,k} - u_{i+1/2,j+1,k})\hat{u}_{i+1/2,j+1,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j+1,k} \in [0, 1]. \end{cases}$$

• **SMART:**

$$u_{i+1/2,j+1/2,k} = \begin{cases} u_{i+1/2,j+1,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j+1,k} \notin [0, 1], \\ 10u_{i+1/2,j+1,k} - 9u_{i+1/2,j+2,k} & \text{se } 0 \leq \hat{u}_{i+1/2,j+1,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3u_{i+1/2,j,k} + 6u_{i+1/2,j+1,k} - u_{i+1/2,j+2,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{u}_{i+1/2,j+1,k} < 5/6, \\ u_{i+1/2,j,k} & \text{se } 5/6 \leq \hat{u}_{i+1/2,j+1,k} \leq 1. \end{cases}$$

• **VONOS:**

$$u_{i+1/2,j+1/2,k} = \begin{cases} u_{i+1/2,j+1,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j+1,k} \notin [0, 1], \\ 10u_{i+1/2,j+1,k} - 9u_{i+1/2,j+2,k} & \text{se } 0 \leq \hat{u}_{i+1/2,j+1,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3u_{i+1/2,j,k} + 6u_{i+1/2,j+1,k} - u_{i+1/2,j+2,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{u}_{i+1/2,j+1,k} < 1/2, \\ 1, 5u_{i+1/2,j+1,k} - 0.5u_{i+1/2,j+2,k} & \text{se } 1/2 \leq \hat{u}_{i+1/2,j+1,k} < 2/3, \\ u_{i+1/2,j,k} & \text{se } 2/3 \leq \hat{u}_{i+1/2,j+1,k} \leq 1. \end{cases}$$

em que

$$\hat{u}_{i+1/2,j+1,k} = (u_{i+1/2,j+1,k} - u_{i+1/2,j+2,k}) / (u_{i+1/2,j,k} - u_{i+1/2,j+2,k}).$$

• Aproximações para $u_{i+1/2,j-1/2,k}$, quando $\bar{v}_2 > 0$:

• **CD:** $u_{i+1/2,j-1/2,k} = 0, 5(u_{i+1/2,j,k} + u_{i+1/2,j-1,k})$

• **FOU:** $u_{i+1/2,j-1/2,k} = u_{i+1/2,j-1,k}$

• **QUICK:** $u_{i+1/2,j-1/2,k} = \frac{1}{8}(3u_{i+1/2,j,k} + 6u_{i+1/2,j-1,k} - u_{i+1/2,j-2,k})$

• **HLP:**

$$u_{i+1/2,j-1/2,k} = \begin{cases} u_{i+1/2,j-1,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j-1,k} \notin [0, 1], \\ u_{i+1/2,j-1,k} + (u_{i+1/2,j,k} - u_{i+1/2,j-1,k})\hat{u}_{i+1/2,j-1,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j-1,k} \in [0, 1]. \end{cases}$$

- **SMART:**

$$u_{i+1/2,j-1/2,k} = \begin{cases} u_{i+1/2,j-1,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j-1,k} \notin [0, 1], \\ 10u_{i+1/2,j-1,k} - 9u_{i+1/2,j-2,k} & \text{se } 0 \leq \hat{u}_{i+1/2,j-1,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3u_{i+1/2,j,k} + 6u_{i+1/2,j-1,k} - u_{i+1/2,j-2,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{u}_{i+1/2,j-1,k} < 5/6, \\ u_{i+1/2,j,k} & \text{se } 5/6 \leq \hat{u}_{i+1/2,j-1,k} \leq 1. \end{cases}$$

- **VONOS:**

$$u_{i+1/2,j-1/2,k} = \begin{cases} u_{i+1/2,j-1,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j-1,k} \notin [0, 1], \\ 10u_{i+1/2,j-1,k} - 9u_{i+1/2,j-2,k} & \text{se } 0 \leq \hat{u}_{i+1/2,j-1,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3u_{i+1/2,j,k} + 6u_{i+1/2,j-1,k} - u_{i+1/2,j-2,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{u}_{i+1/2,j-1,k} < 1/2, \\ 1, 5u_{i+1/2,j-1,k} - 0.5u_{i+1/2,j-2,k} & \text{se } 1/2 \leq \hat{u}_{i+1/2,j-1,k} < 2/3, \\ u_{i+1/2,j,k} & \text{se } 2/3 \leq \hat{u}_{i+1/2,j-1,k} \leq 1. \end{cases}$$

em que

$$\hat{u}_{i+1/2,j-1,k} = (u_{i+1/2,j-1,k} - u_{i+1/2,j-2,k}) / (u_{i+1/2,j,k} - u_{i+1/2,j-2,k}).$$

- Aproximações para $u_{i+1/2,j-1/2,k}$, quando $\bar{v}_2 < 0$:

- **CD:** $u_{i+1/2,j-1/2,k} = 0, 5(u_{i+1/2,j-1,k} + u_{i+1/2,j,k})$

- **FOU:** $u_{i+1/2,j-1/2,k} = u_{i+1/2,j,k}$

- **QUICK:** $u_{i+1/2,j-1/2,k} = \frac{1}{8}(3u_{i+1/2,j-1,k} + 6u_{i+1/2,j,k} - u_{i+1/2,j+1,k})$

- **HLP:**

$$u_{i+1/2,j-1/2,k} = \begin{cases} u_{i+1/2,j,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j,k} \notin [0, 1], \\ u_{i+1/2,j,k} + (u_{i+1/2,j-1,k} - u_{i+1/2,j,k})\hat{u}_{i+1/2,j,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j,k} \in [0, 1]. \end{cases}$$

• SMART:

$$u_{i+1/2,j-1/2,k} = \begin{cases} u_{i+1/2,j,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j,k} \notin [0, 1], \\ 10u_{i+1/2,j,k} - 9u_{i+1/2,j+1,k} & \text{se } 0 \leq \hat{u}_{i+1/2,j,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3u_{i+1/2,j-1,k} + 6u_{i+1/2,j,k} - u_{i+1/2,j+1,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{u}_{i+1/2,j,k} < 5/6, \\ u_{i+1/2,j-1,k} & \text{se } 5/6 \leq \hat{u}_{i+1/2,j,k} \leq 1. \end{cases}$$

• VONOS:

$$u_{i+1/2,j-1/2,k} = \begin{cases} u_{i+1/2,j,k} & \text{se } \hat{u}_{i+1/2,j,k} \notin [0, 1], \\ 10u_{i+1/2,j,k} - 9u_{i+1/2,j+1,k} & \text{se } 0 \leq \hat{u}_{i+1/2,j,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3u_{i+1/2,j-1,k} + 6u_{i+1/2,j,k} - u_{i+1/2,j+1,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{u}_{i+1/2,j,k} < 1/2, \\ 1, 5u_{i+1/2,j,k} - 0.5u_{i+1/2,j+1,k} & \text{se } 1/2 \leq \hat{u}_{i+1/2,j,k} < 2/3, \\ u_{i+1/2,j-1,k} & \text{se } 2/3 \leq \hat{u}_{i+1/2,j,k} \leq 1. \end{cases}$$

em que

$$\hat{u}_{i+1/2,j,k} = (u_{i+1/2,j,k} - u_{i+1/2,j+1,k}) / (u_{i+1/2,j-1,k} - u_{i+1/2,j+1,k}).$$

Quando a variável transportada com velocidade u , na direção x , for, por exemplo, a variável turbulenta κ , a aproximação para a derivada convectiva correspondente é dada por

$$\frac{\partial(\kappa u)}{\partial x}|_P \approx \left((u\kappa)|_f - (u\kappa)|_g \right) / \delta x, \quad (4.18)$$

em que $P = (i, j, k)$, $f = i + 1/2$ e $g = i - 1/2$. Aproximações para (4.18) utilizando-se os vários esquemas de convecção são apresentadas a seguir.

$$\frac{\partial(\kappa u)}{\partial x}|_{(i,j,k)} \approx (\bar{u}_1 \kappa_{i+1/2,j,k} - \bar{u}_2 \kappa_{i-1/2,j,k}) / \delta x, \quad (4.19)$$

em que os valores $\bar{u}_1$ e $\bar{u}_2$ são dados por:

$$\bar{u}_1 = u_{i+1/2,j,k}, \quad \bar{u}_2 = u_{i-1/2,j,k}.$$

Os pontos vizinhos $\mathbf{D}$, $\mathbf{U}$ e $\mathbf{R}$, para aproximar $\kappa_{i+1/2,j,k}$ e $\kappa_{i-1/2,j,k}$ em (4.19), são definidos como:

- Para $\kappa_{i+1/2,j,k}$, com $\bar{u}_1 > 0$:

$$\mathbf{D} = (i+1, j, k), \quad \mathbf{U} = (i, j, k), \quad \mathbf{R} = (i-1, j, k);$$

- Para $\kappa_{i+1/2,j,k}$, com $\bar{u}_1 < 0$:

$$\mathbf{D} = (i, j, k), \quad \mathbf{U} = (i+1, j, k), \quad \mathbf{R} = (i+2, j, k);$$

- Para $\kappa_{i-1/2,j,k}$, com $\bar{u}_2 > 0$:

$$\mathbf{D} = (i, j, k), \quad \mathbf{U} = (i-1, j, k), \quad \mathbf{R} = (i-2, j, k);$$

- Para $\kappa_{i-1/2,j,k}$, com $\bar{u}_2 < 0$:

$$\mathbf{D} = (i-1, j, k), \quad \mathbf{U} = (i, j, k), \quad \mathbf{R} = (i+1, j, k).$$

Aproximações para as propriedades $\kappa_{i+1/2,j,k}$ e $\kappa_{i-1/2,j,k}$ dadas em (4.19) são implementadas como segue:

- Aproximações para $\kappa_{i+1/2,j,k}$, quando $\bar{u}_1 > 0$:

- **CD:** $\kappa_{i+1/2,j,k} = 0,5(\kappa_{i+1,j,k} + \kappa_{i,j,k})$

- **FOU:** $\kappa_{i+1/2,j,k} = \kappa_{i,j,k}$

- **QUICK:** $\kappa_{i+1/2,j,k} = \frac{1}{8}(3\kappa_{i+1,j,k} + 6\kappa_{i,j,k} - \kappa_{i-1,j,k})$

- **HLPA:**

$$\kappa_{i+1/2,j,k} = \begin{cases} \kappa_{i,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i,j,k} \notin [0, 1], \\ \kappa_{i,j,k} + (\kappa_{i+1,j,k} - \kappa_{i,j,k})\hat{\kappa}_{i,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i,j,k} \in [0, 1]. \end{cases}$$

- **SMART:**

$$\kappa_{i+1/2,j,k} = \begin{cases} \kappa_{i,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i,j,k} \notin [0, 1], \\ 10\kappa_{i,j,k} - 9\kappa_{i-1,j,k} & \text{se } 0 \leq \hat{\kappa}_{i,j,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3\kappa_{i+1,j,k} + 6\kappa_{i,j,k} - \kappa_{i-1,j,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\kappa}_{i,j,k} < 5/6, \\ \kappa_{i+1,j,k} & \text{se } 5/6 \leq \hat{\kappa}_{i,j,k} \leq 1. \end{cases}$$

- **VONOS:**

$$\kappa_{i+1/2,j,k} = \begin{cases} \kappa_{i,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i,j,k} \notin [0, 1], \\ 10\kappa_{i,j,k} - 9\kappa_{i-1,j,k} & \text{se } 0 \leq \hat{\kappa}_{i,j,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3\kappa_{i+1,j,k} + 6\kappa_{i,j,k} - \kappa_{i-1,j,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\kappa}_{i,j,k} < 1/2, \\ 1, 5\kappa_{i,j,k} - 0.5\kappa_{i-1,j,k} & \text{se } 1/2 \leq \hat{\kappa}_{i,j,k} < 2/3, \\ \kappa_{i+1,j,k} & \text{se } 2/3 \leq \hat{\kappa}_{i,j,k} \leq 1. \end{cases}$$

em que

$$\hat{\kappa}_{i,j,k} = (\kappa_{i,j,k} - \kappa_{i-1,j,k}) / (\kappa_{i+1,j,k} - \kappa_{i-1,j,k}).$$

- Aproximações para $\kappa_{i+1/2,j,k}$, quando $\bar{u}_1 < 0$:

- **CD:** $\kappa_{i+1/2,j,k} = 0, 5(\kappa_{i+1,j,k} + \kappa_{i,j,k})$

- **FOU:** $\kappa_{i+1/2,j,k} = \kappa_{i+1,j,k}$

- **QUICK:** $\kappa_{i+1/2,j,k} = \frac{1}{8}(3\kappa_{i,j,k} + 6\kappa_{i+1,j,k} - \kappa_{i+2,j,k})$

- **HLPA:**

$$\kappa_{i+1/2,j,k} = \begin{cases} \kappa_{i+1,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i+1,j,k} \notin [0, 1], \\ \kappa_{i+1,j,k} + (\kappa_{i,j,k} - \kappa_{i+1,j,k})\hat{\kappa}_{i+1,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i+1,j,k} \in [0, 1]. \end{cases}$$

- **SMART:**

$$\kappa_{i+1/2,j,k} = \begin{cases} \kappa_{i+1,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i+1,j,k} \notin [0, 1], \\ 10\kappa_{i+1,j,k} - 9\kappa_{i+2,j,k} & \text{se } 0 \leq \hat{\kappa}_{i+1,j,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3\kappa_{i,j,k} + 6\kappa_{i+1,j,k} - \kappa_{i+2,j,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\kappa}_{i+1,j,k} < 5/6, \\ \kappa_{i,j,k} & \text{se } 5/6 \leq \hat{\kappa}_{i+1,j,k} \leq 1. \end{cases}$$

- **VONOS:**

$$\kappa_{i+1/2,j,k} = \begin{cases} \kappa_{i+1,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i+1,j,k} \notin [0, 1], \\ 10\kappa_{i+1,j,k} - 9\kappa_{i+2,j,k} & \text{se } 0 \leq \hat{\kappa}_{i+1,j,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3\kappa_{i,j,k} + 6\kappa_{i+1,j,k} - \kappa_{i+2,j,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\kappa}_{i+1,j,k} < 1/2, \\ 1, 5\kappa_{i+1,j,k} - 0.5\kappa_{i+2,j,k} & \text{se } 1/2 \leq \hat{\kappa}_{i+1,j,k} < 2/3, \\ \kappa_{i,j,k} & \text{se } 2/3 \leq \hat{\kappa}_{i+1,j,k} \leq 1. \end{cases}$$

em que

$$\hat{\kappa}_{i+1,j,k} = (\kappa_{i+1,j,k} - \kappa_{i+2,j,k}) / (\kappa_{i,j,k} - \kappa_{i+2,j,k}).$$

- Aproximações para $\kappa_{i-1/2,j,k}$, quando $\bar{u}_2 > 0$:

- **CD:** $\kappa_{i-1/2,j,k} = 0, 5(\kappa_{i,j,k} + \kappa_{i-1,j,k})$

- **FOU:** $\kappa_{i-1/2,j,k} = \kappa_{i-1,j,k}$

- **QUICK:** $\kappa_{i-1/2,j,k} = \frac{1}{8}(3\kappa_{i,j,k} + 6\kappa_{i-1,j,k} - \kappa_{i-2,j,k})$

- **HLP:**

$$\kappa_{i-1/2,j,k} = \begin{cases} \kappa_{i-1,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i-1,j,k} \notin [0, 1], \\ \kappa_{i-1,j,k} + (\kappa_{i,j,k} - \kappa_{i-1,j,k})\hat{\kappa}_{i-1,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i-1,j,k} \in [0, 1]. \end{cases}$$

- **SMART:**

$$\kappa_{i-1/2,j,k} = \begin{cases} \kappa_{i-1,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i-1,j,k} \notin [0, 1], \\ 10\kappa_{i-1,j,k} - 9\kappa_{i-2,j,k} & \text{se } 0 \leq \hat{\kappa}_{i-1,j,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3\kappa_{i,j,k} + 6\kappa_{i-1,j,k} - \kappa_{i-2,j,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\kappa}_{i-1,j,k} < 5/6, \\ \kappa_{i,j,k} & \text{se } 5/6 \leq \hat{\kappa}_{i-1,j,k} \leq 1. \end{cases}$$

- **VONOS:**

$$\kappa_{i-1/2,j,k} = \begin{cases} \kappa_{i-1,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i-1,j,k} \notin [0, 1], \\ 10\kappa_{i-1,j,k} - 9\kappa_{i-2,j,k} & \text{se } 0 \leq \hat{\kappa}_{i-1,j,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3\kappa_{i,j,k} + 6\kappa_{i-1,j,k} - \kappa_{i-2,j,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\kappa}_{i-1,j,k} < 1/2, \\ 1, 5\kappa_{i-1,j,k} - 0.5\kappa_{i-2,j,k} & \text{se } 1/2 \leq \hat{\kappa}_{i-1,j,k} < 2/3, \\ \kappa_{i,j,k} & \text{se } 2/3 \leq \hat{\kappa}_{i-1,j,k} \leq 1. \end{cases}$$

em que

$$\hat{\kappa}_{i-1,j,k} = (\kappa_{i-1,j,k} - \kappa_{i-2,j,k}) / (\kappa_{i,j,k} - \kappa_{i-2,j,k}).$$

- Aproximações para $\kappa_{i-1/2,j,k}$, quando $\bar{u}_2 < 0$:

- **CD:** $\kappa_{i-1/2,j,k} = 0, 5(\kappa_{i,j,k} + \kappa_{i-1,j,k})$

- **FOU:** $\kappa_{i-1/2,j,k} = \kappa_{i,j,k}$

- **QUICK:** $\kappa_{i-1/2,j,k} = \frac{1}{8}(3\kappa_{i-1,j,k} + 6\kappa_{i,j,k} - \kappa_{i+1,j,k})$

- **HLP:**

$$\kappa_{i-1/2,j,k} = \begin{cases} \kappa_{i,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i,j,k} \notin [0, 1], \\ \kappa_{i,j,k} + (\kappa_{i-1,j,k} - \kappa_{i,j,k})\hat{\kappa}_{i,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i,j,k} \in [0, 1]. \end{cases}$$

• SMART:

$$\kappa_{i-1/2,j,k} = \begin{cases} \kappa_{i,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i,j,k} \notin [0, 1], \\ 10\kappa_{i,j,k} - 9\kappa_{i+1,j,k} & \text{se } 0 \leq \hat{\kappa}_{i,j,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3\kappa_{i-1,j,k} + 6\kappa_{i,j,k} - \kappa_{i+1,j,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\kappa}_{i,j,k} < 5/6, \\ \kappa_{i-1,j,k} & \text{se } 5/6 \leq \hat{\kappa}_{i,j,k} \leq 1. \end{cases}$$

• VONOS:

$$\kappa_{i-1/2,j,k} = \begin{cases} \kappa_{i,j,k} & \text{se } \hat{\kappa}_{i,j,k} \notin [0, 1], \\ 10\kappa_{i,j,k} - 9\kappa_{i+1,j,k} & \text{se } 0 \leq \hat{\kappa}_{i,j,k} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3\kappa_{i-1,j,k} + 6\kappa_{i,j,k} - \kappa_{i+1,j,k}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\kappa}_{i,j,k} < 1/2, \\ 1, 5\kappa_{i,j,k} - 0.5\kappa_{i+1,j,k} & \text{se } 1/2 \leq \hat{\kappa}_{i,j,k} < 2/3, \\ \kappa_{i-1,j,k} & \text{se } 2/3 \leq \hat{\kappa}_{i,j,k} \leq 1. \end{cases}$$

em que

$$\hat{\kappa}_{i,j,k} = (\kappa_{i,j,k} - \kappa_{i+1,j,k}) / (\kappa_{i-1,j,k} - \kappa_{i+1,j,k}).$$

Da mesma forma como os termos não-lineares em (4.17) e (4.19) foram aproximados pelos esquemas de convecção, todas as outras derivadas convectivas nas equações de conservação são implementadas de maneira completamente similar. É importante observar que cada um dos esquemas QUICK, SMART, HPLA e VONOS faz uso de três pontos vizinhos (**D**, **U** e **R**) para aproximar propriedades. Portanto, podem ocorrer valores fora do domínio de solução para as células computacionais que estão próximas às fronteiras. Por exemplo, em (4.17), quando se aproxima $u_{i+1/2,j+1/2,k}$ para o caso de $\bar{v}_1 < 0$, o valor da propriedade transportada u no ponto $\mathbf{R}=(i+1/2, j+2, k)$ deve estar definido. Analogamente, na aproximação (4.19), para aproximar $\kappa_{i-1/2,j,k}$ quando $\bar{u}_2 > 0$, o valor da propriedade transportada κ no ponto $\mathbf{R}=(i-2, j, k)$ é requerido. Em ambos os casos, um esquema de primeira ordem deve ser empregado. Nas implementações, adota-se o esquema HYBRID em todos os volumes

de controle adjacentes às fronteiras. Convém observar também que os esquemas SMART, HLPa e VONOS exigem o valor normalizado da propriedade transportada ϕ em $\mathbf{U}$ ($\hat{\phi}_U$), dado por (4.6), para estimar propriedades. Para a sua avaliação, é necessário verificar o denominador para não ocorrer divisão por zero. Nas implementações, testou-se o denominador em (4.3); se ele for menor do que a tolerância $1,0 \times 10^{-14}$, aplica-se o esquema FOU.

Capítulo 5

Aplicação de Esquemas Convectivos em Problemas com Simetria Radial

5.1 Introdução

Os esquemas de convecção FOU, QUICK, SMART, HLPa e VONOS, analisados no capítulo 4 e implementados no código GENSMAC com simetria radial, são agora aplicados na simulação de escoamentos laminares em situações reais. Em particular, seus desempenhos são examinados no problema do ressalto hidráulico circular.

Ressaltos hidráulicos são escoamentos que aparecem com frequência na natureza e com várias aplicações tecnológicas. Eles podem ser observados facilmente nos escoamentos de líquidos em camadas finas (películas) sobre superfícies sólidas. Os movimentos da água sobre o solo, sobre as janelas ou sobre os telhados são bons exemplos. A compreensão dos fenômenos envolvidos nesses problemas é de interesse comercial, particularmente na indústria. Por exemplo, o resfriamento de corpos, o processamento físico-químico de metais e outros materiais sólidos, a captação de energia por técnicas de engenharia hidráulica ou, ainda, a remoção de gelo em superfícies. Nesses tipos de problemas estão sempre presentes o transporte de energia, a transferência de massa e, sobretudo, a presença de uma descontinuidade no movimento análoga às ondas de choque que aparecem nos escoamentos compressíveis em altas velocidades. Tais peculiaridades mais a presença da fronteira móvel criam sérias dificuldades no tratamento numérico desses escoamentos. O conhecimento do

campo de velocidades em várias regiões do escoamento é, portanto, indispensável para o bom entendimento dos fenômenos envolvidos.

Escoamentos radiais em camadas finas formam uma classe especial de películas. Esses tipos de películas podem ser observados quando jatos circulares de fluido incidem sobre superfícies sólidas planas e impermeáveis. Nessas condições, os jatos espalham radialmente pelas superfícies a partir do ponto de estagnação. Os efeitos de inércia, gravidade, viscosidade e tensão superficial governam tais problemas. Segundo [Kurihara (1946)] e [Tani (1948)], durante o espalhamento a espessura de fluido decresce e, então, a uma certa distância cresce repentinamente sob a ação de um gradiente de pressão adverso. Esse gradiente de pressão pode causar separação da película em alguma distância radial, levando à formação de um fenômeno interessante conhecido como ressalto hidráulico circular. As visualizações experimentais¹ mostradas na figura 5.1 ilustram muito bem esse tipo de fenômeno.

Figura 5.1: Visualização de duas estruturas do ressalto hidráulico, mostrando: **a)** Um ressalto hidráulico circular a número de Reynolds moderado; **b)** Um ressalto hidráulico a número de Reynolds elevado.

Em termos de parâmetros adimensionais, um ressalto hidráulico ocorre quando o escoamento sofre uma transição repentina de supercrítico ($Fr > 1$) para subcrítico ($Fr < 1$). Durante a transição, existem mistura acentuada de fluido e dissipação de energia ([Bohr et al. (1993)]).

---

¹Visualizações extraídas do livro “Modeling Axisymmetric Flows” de Stanley Middleman, com a permissão de Academic Press.

O espalhamento radial de películas sobre superfícies horizontais e o ressalto hidráulico circular foram estudados tanto teoricamente ([Kurihara (1946)], [Bohr et al. (1993)]) como experimentalmente ([Tani (1948)], [Olsson & Turkdogan (1966)]), de várias maneiras diferentes. Talvez a contribuição teórica mais significativa esteja contida no trabalho pioneiro de Watson [Watson (1964)], que determinou, considerando o crescimento da camada de fluido suficientemente longe do ponto de estagnação, uma solução aproximada das equações de conservação simplificadas. Com o objetivo de investigar o movimento de fluidos em camadas finas, Watson empregou as hipóteses da teoria de camada-limite, em que o número de Reynolds do jato incidente é suficientemente elevado. Do ponto de vista experimental, Liu e Lienhard ([Liu & Lienhard (1993)]) sugeriram que a tensão superficial desempenha um papel muito importante no estabelecimento das várias estruturas que aparecem a partir do ressalto hidráulico circular simples (figura 5.1a)).

No presente capítulo, mostra-se que as quatro estruturas básicas do ressalto hidráulico circular podem ser simuladas utilizando-se o código GENSMAC com simetria radial, adaptado para problemas que envolvem altos valores do número de Reynolds. Também, verifica-se que os resultados numéricos apresentados neste capítulo, para a camada de fluido sobre contornos rígidos, estão, quantitativamente, de acordo com os resultados analíticos obtidos por Watson. E, para finalizar, comparam-se as simulações numéricas com os experimentos realizados por Taylor, os quais podem ser visualizados em [The NCFMF of Film Notes (1974)].

5.2 Estruturas do Ressalto Hidráulico Circular

Várias formas de ressalto hidráulico circular podem ser observadas pela mudança de alguns parâmetros, dos quais os mais importantes são o número de Reynolds, o número de Froude e o número de Weber ($U_0^2 L / \tau$, sendo τ o coeficiente de tensão superficial). A figura 5.1 mostra duas formas diferentes do ressalto hidráulico circular. A figura 5.2 ilustra as instabilidades do ressalto hidráulico circular, mostrando quatro formas principais que foram observadas experimentalmente por Liu e Lienhard ([Liu & Lienhard (1993)]) e, mais recentemente, confirmadas também experimentalmente por Ellegaard et al. ([Ellegaard et al. (1998)]) e ([Ellegaard et al. (1999)]). Em particular, os experimentos realizados por Bohr et

al. ([Bohr et al. (1996)]) e Ellegaard et al. ([Ellegaard et al. (1998)]) mostraram, sob certas condições, que várias estruturas do ressalto hidráulico circular podem ser observadas pela variação da altura d de um obstáculo circular posicionado a uma distância radial específica na superfície rígida. Por exemplo, quando d é suficientemente pequeno ou nulo, um ressalto hidráulico com uma estrutura turbilhonar simples é formada adjacente ao contorno rígido, analogamente àquele da figura 5.2b). Variando-se os diferentes parâmetros, outras estruturas podem ser observadas também.

Figura 5.2: Instabilidades observadas experimentalmente no ressalto hidráulico circular, mostrando: **a)** Uma estrutura suave; **b)** Uma estrutura turbilhonar simples formada adjacente à fronteira rígida; **c)** Duas estruturas turbilhonares: uma adjacente à fronteira rígida e a outra na fronteira livre; **d)** Uma estrutura com transição para turbulência.

Nesta seção mostra-se que as várias estruturas do ressalto hidráulico circular, ilustradas na figura 5.2, podem ser simuladas numericamente utilizando-se o código GENS-MAC com simetria radial e equipado com o algoritmo de convecção VONOS. Os resultados numéricos indicam que as estruturas obtidas estão, qualitativamente, em concordância com os resultados numéricos e experimentais de Tani ([Tani (1948)]), Bowles e Smith ([Bowles & Smith (1992)]), Liu e Lienhard ([Liu & Lienhard (1993)]) e Bohr et al. ([Bohr et al. (1996)]). Para as simulações numéricas das quatro estruturas, os quatro modelos seguintes foram empregados:

MODELO I – forma suave:

- Dimensões do domínio: $0,05 \text{ m} \times 0,03 \text{ m}$;
- Diâmetro do injetor (D): $0,008 \text{ m}$;
- Velocidade de injeção (U_0): $1,0 \text{ ms}^{-1}$;
- Constante gravitacional (g): $9,81 \text{ ms}^{-2}$;
- Coeficiente de viscosidade cinemática (ν): $8,0 \times 10^{-5} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$;
- Parâmetros de escala: $D = 0,008 \text{ m}$ e $U_0 = 1,0 \text{ ms}^{-1}$;
- Número de Reynolds ($Re = U_0 D / \nu$): 100 ;
- Número de Froude ($Fr = U_0 / \sqrt{gD}$): $3,5696$;
- Altura do injetor a partir da superfície sólida (H): $0,03 \text{ m}$.

MODELO II – forma com uma estrutura turbilhonar:

- Dimensões do domínio: $0,05 \text{ m} \times 0,03 \text{ m}$;
- Diâmetro do injetor (D): $0,008 \text{ m}$;
- Velocidade de injeção (U_0): $0,375 \text{ ms}^{-1}$;
- Constante gravitacional (g): $9,81 \text{ ms}^{-2}$;
- Coeficiente de viscosidade cinemática (ν): $1,2 \times 10^{-5} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$;
- Parâmetros de escala: $D = 0,008 \text{ m}$ e $U_0 = 0,375 \text{ ms}^{-1}$;
- Número de Reynolds ($Re = U_0 D / \nu$): 250 ;
- Número de Froude ($Fr = U_0 / \sqrt{gD}$): $1,3386$;
- Altura do injetor a partir da superfície sólida (H): $0,03 \text{ m}$.

MODELO III – forma com duas estruturas turbilhonares:

- Dimensões do domínio: $0,05 \text{ m} \times 0,03 \text{ m}$;
- Diâmetro do injetor (D): $0,008 \text{ m}$;
- Velocidade de injeção (U_0): $1,0 \text{ ms}^{-1}$;
- Constante gravitacional (g): $9,81 \text{ ms}^{-2}$;
- Coeficiente de viscosidade cinemática (ν): $1,0 \times 10^{-5} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$;
- Parâmetros de escala: $D = 0,008 \text{ m}$ e $U_0 = 1,0 \text{ ms}^{-1}$;
- Número de Reynolds ($Re = U_0 D / \nu$): 800 ;
- Número de Froude ($Fr = U_0 / \sqrt{gD}$): $3,5696$;
- Altura do injetor a partir da superfície sólida (H): $0,03 \text{ m}$.

MODELO IV – estrutura com transição para turbulência:

- Dimensões do domínio: $0,05 \text{ m} \times 0,03 \text{ m}$;
- Diâmetro do injetor (D): $0,008 \text{ m}$;
- Velocidade de injeção (U_0): $2,0 \text{ ms}^{-1}$;
- Constante gravitacional (g): $9,81 \text{ ms}^{-2}$;
- Coeficiente de viscosidade cinemática (ν): $1,0 \times 10^{-5} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$;
- Parâmetros de escala: $D = 0,008 \text{ m}$ e $U_0 = 2,0 \text{ ms}^{-1}$;
- Número de Reynolds ($Re = U_0 D / \nu$): 1600 ;
- Número de Froude ($Fr = U_0 / \sqrt{gD}$): $7,1392$;
- Altura do injetor a partir da superfície sólida (H): $0,03 \text{ m}$.

Com o esquema de convecção VONOS implementado, o código GENSMAC simulou os problemas **I – IV** utilizando o seguinte critério de parada: os processos foram interrompidos quando se detectou a configuração desejada, e quando o número de iterações no método de gradientes conjugados permaneceu praticamente constante, caracterizando um regime estacionário. Nas quatro simulações, a malha 50×100 ($dr = dz = 0,0005 \text{ m}$) foi utilizada em todos os modelos. Para descrever a posição da superfície livre a cada passo no tempo, em cada um dos modelos, utilizaram-se quatro partículas virtuais nas células que descrevem as condições de entrada. Nos quatro problemas, a tolerância para resolver a equação de Poisson foi $1,0 \times 10^{-10}$, exigindo-se em média 20 iterações a cada ciclo, e a marcha no tempo foi da

ordem de $1,0 \times 10^{-4}$. A figura 5.3 mostra os resultados das simulações do ressalto hidráulico para quatro escolhas do número de Reynolds, em que a curva verde representa a superfície livre enquanto que as setas vermelhas indicam a direção dos vetores velocidade. A partir dessa figura, observa-se claramente que os resultados estão muito próximos das estruturas mostradas na figura 5.2. Em particular, a figura 5.3c) mostra a existência de uma separação formada na superfície rígida em conjunto com o ressalto hidráulico. Ainda mais, essa região de recirculação de fluido está, qualitativamente, de acordo com os resultados experimentais de [Tani (1948)], [Craik et al. (1981)] e [Bowles & Smith (1992)].

Figura 5.3: Simulação numérica de quatro estruturas do ressalto hidráulico com o esquema VONOS, mostrando: **a)** Um ressalto hidráulico suave, em que $Re = 100$; **b)** Um ressalto hidráulico com uma estrutura turbilhonar, em que $Re = 250$; **c)** Um ressalto hidráulico com duas estruturas turbilhonares, em que $Re = 800$; **d)** Um ressalto hidráulico com transição para turbulência, em que $Re = 1600$.

5.3 Comparação com a Solução Analítica Aproximada de Watson

Para compreender o movimento de uma película sobre contornos rígidos, antes do ressalto hidráulico ocorrer, é necessário empregar as hipóteses da teoria de camada-limite, as quais requerem que o número de Reynolds seja suficientemente elevado. Nessa linha de pesquisa, uma contribuição muito importante foi dada por Watson ([Watson (1964)]), que determinou uma solução por similaridade das equações de camada-limite. Levando em conta uma distância radial apropriada em sua análise, Watson desprezou os efeitos de tensão superficial, do campo gravitacional e os das várias formas do ressalto hidráulico. Examinando a distribuição de velocidade de um jato incidindo perpendicularmente sobre uma superfície rígida, Watson apresentou duas soluções analíticas para a espessura da camada de fluido: uma no caso viscoso, denominada aqui de solução VISCOSA; e a outra, para o caso não-viscoso, definida aqui como solução NÃO-VISCOSA. Na seqüência, os principais resultados obtidos por Watson são resumidos.

Watson considerou apropriado distinguir quatro regiões nesses problemas com superfície livre: a) a região próxima ao ponto de estagnação, onde a distância radial r é da ordem do raio a do jato incidente. Nessa região, a espessura da camada-limite comporta-se como $(\nu a/U_0)^{1/2}$, em que ν é o coeficiente de viscosidade cinemática do fluido, e U_0 a velocidade de injeção; b) a região onde $r \gg a$. Aí, as condições válidas na região a) não são importantes e a camada-limite cresce analogamente àquela de Blasius sobre superfícies sólidas ([White (1991)]); c) a região onde r assume um valor específico, de maneira que as tensões viscosas afetam cada vez mais o fluido, e, conseqüentemente, a espessura da camada-limite aumenta até absorver toda camada de fluido. Nessa região, o perfil de velocidade varia gradualmente do tipo Blasius até à proposta de Watson; e d) a região suficientemente remota do ponto de estagnação, onde a solução por similaridade de Watson é válida, independentemente de como o escoamento foi originado. Segundo a análise de Watson, a solução VISCOSA é válida somente nas regiões b) e d), e para números de Reynolds $R = Q/\nu a \gg 1$, sendo $Q = \pi a^2 U_0$ a vazão. Sua solução aproximada não é aplicável nas vizinhanças do ponto de estagnação. Desprezando a região de transição c) e utilizando a técnica de Kármán-Pohlhausen ([Schlichting (1979)]), Watson combinou as soluções na região b), dada pelo perfil de Blasius

e na região d), dada pelo perfil de velocidade

$$u = U(r)f(z/\delta), \quad (5.1)$$

em que $U(r)$ é a velocidade na superfície livre, e f é o perfil de similaridade, que depende de uma representação de baixa ordem da função elíptica de Jacobi (ver ([Watson (1964)]) pg. 484). Usando o perfil de velocidades aproximado (5.1) na equação integral da quantidade de movimento, Watson deduziu a seguinte relação explícita para a espessura δ da camada-limite

$$r^2\delta^2 - \frac{c^3\sqrt{3}}{(\pi - c\sqrt{3})} \frac{\nu r^3}{U_0} = C, \quad (5.2)$$

em que $c = 1,402$ e C uma constante de integração. Com base em uma análise de ordem de magnitude, Watson concluiu que $C = O(\nu a^3/U_0)$ na região onde $r = O(a)$, e $C = O(a^3/r^3)$ na região onde $a \ll r < r_0$, sendo $r_0 = 0,3155aRe^{1/3}$ a posição radial na qual a camada-limite absorve o escoamento todo. Essa constante de integração foi desprezada por Watson e, como resultado, ele estimou o valor da espessura ξ da camada de fluido pela expressão

$$\xi(r) = (a^2/2r) + (1 - (2\pi/3\sqrt{3}c^2))\delta, \text{ se } r < r_0, \quad (5.3)$$

e

$$\xi(r) = \frac{2\pi^2}{3\sqrt{3}} \frac{\nu(r^3 + l^3)}{Qr}, \text{ se } r \geq r_0, \quad (5.4)$$

em que l é uma constante arbitrária, estimada considerando-se o desenvolvimento inicial da camada-limite, e dada por $l = 0,567aR^{1/3}$. Além disso, aplicando o balanço da quantidade de movimento e conhecendo a altura d da película depois do ressalto, considerada como prescrita pelas condições de contorno de saída, Watson derivou relações para a posição $r = r_1$ em que o ressalto hidráulico deve ocorrer

$$\frac{r_1 d^2 g_z a^2}{Q^2} + \frac{a^2}{2\pi^2 r_1 d} = 0,01676 \left((r_1/a)^3 R^{-1} + 0,1826 \right)^{-1}, \text{ se } r_1 \geq r_0, \quad (5.5)$$

e

$$\frac{r_1 d^2 g_z a^2}{Q^2} + \frac{a^2}{2\pi^2 r_1 d} = 0,10132 - 0,1297(r_1/a)^{3/2} R^{-1/2}, \text{ se } r_1 < r_0, \quad (5.6)$$

em que g_z é a componente da aceleração gravitacional na direção vertical z .

O propósito desta seção é mostrar que os resultados numéricos, obtidos com o código GENSMAC para geometrias cilíndricas e com os vários algoritmos de convecção implementados, concordam com os resultados obtidos por Watson. Uma análise quantitativa dos resultados foi obtida pela comparação da espessura ξ do fluido, computada pelo código GENSMAC e a obtida pela solução analítica viscosa de Watson. A região específica do escoamento para análise foi escolhida de maneira que $R = \frac{\pi}{2}Re \gg 1$ e $r \gg a$, isto é, a região onde o número de Reynolds é grande, remota do ponto de estagnação e anterior à ocorrência do ressalto hidráulico. As comparações foram realizadas entre a altura da superfície livre ξ do fluido, obtida com o código GENSMAC, e as correspondentes soluções analíticas (5.3) e (5.4) de Watson. Os esquemas de convecção FOU, QUICK, SMART, HPLA e VONOS foram implementados para simular o problema em questão, e o seguinte modelo foi utilizado:

- Dimensões do domínio: 0,05 m $\times$ 0,03 m ;
- Diâmetro do injetor (D): 0,008 m;
- Velocidade de injeção (U_0): 1,0 ms⁻¹ ;
- Constante gravitacional (g): 9,81 ms⁻²;
- Coeficiente de viscosidade cinemática (ν): $1,0 \times 10^{-5}$ m²s⁻¹ ;
- Parâmetros de escala: D = 0,008 m and $U_0 = 1,0$ ms⁻¹ ;
- Número de Reynolds ($Re = U_0 D / \nu$): 800 ;
- Número de Froude ($Fr = U_0 / \sqrt{gD}$): 3,5696;
- Altura do injetor (H): 0,03 m.

É importante enfatizar que o modelo anterior foi proposto de maneira que o número de Froude, com respeito à velocidade de injeção e diâmetro do injetor D ($D = 2a$ nas simulações), fosse suficientemente elevado para evitar a formação do ressalto hidráulico antes que o jato alcançasse o contorno de saída de fluido.

O código GENSMAC com simetria radial, equipado com os algoritmos “upwind”, simulou o problema anterior até o jato alcançar a fronteira de saída. O critério de parada, o número de partículas por célula e o critério de convergência para a equação de Poisson foram, essencialmente, os mesmos daqueles utilizados nos modelos I–IV da seção 5.2. Duas simulações foram realizadas inicialmente, utilizando-se cada um dos esquemas de convecção FOU, QUICK, SMART, HPLA e VONOS. Na primeira simulação, uma malha de tamanho 100×60 células computacionais ($\delta r = \delta z = 0,0005$ m), chamada de malha grossa, foi

empregada. Na segunda, uma malha de tamanho 200×120 células ($\delta r = \delta z = 0,00025$ m), chamada malha média, foi adotada. A figura 5.4 ilustra a superfície do fluido no tempo final de simulação ($t = 8,0$ s), utilizando-se a malha média e os vários esquemas de convecção. Como se pode observar, a partir dessa figura, os esquemas QUICK, SMART, HLPa e VONOS apresentaram resultados muito semelhantes, ao passo que o esquema FOU produziu uma película mais espessa (figura 5.4d)). A camada mais grossa, obtida pelo esquema FOU, é devida à introdução excessiva de dissipação artificial. A figura 5.5 mostra as comparações na espessura da camada de fluido utilizando-se os esquemas QUICK, SMART, VONOS, HLPa e FOU, na malha média, e a solução VISCOSA de Watson.

Figura 5.4: Superfície de um jato de fluido incidindo sobre uma superfície sólida no tempo final de simulação, $t = 8,0$ s, obtida na malha média e com vários esquemas de convecção, mostrando: **a)** A simulação com o esquema QUICK, **b)** A simulação com o esquema VONOS, **c)** A simulação com o esquema SMART, **d)** A simulação com o esquema FOU, **e)** A simulação com o esquema HLPa.

Figura 5.5: Comparação entre soluções numéricas obtidas com o código GENS MAC e as soluções analíticas de Watson, mostrando: As figuras a)-e) que correspondem às comparações usando-se os vários esquemas de convecção na malha média; A figura f) que corresponde à solução numérica usando-se o esquema HPLA nas três malhas.

Nas comparações, restringiu-se a análise na região $0,2 \leq (r/a)R^{-\frac{1}{3}} \leq 1,0$, com $R = \pi a U_0 / \nu = \pi Re / 2 \approx 1257$, devido à imposição de que $r/a \gg 1$ e à presença do contorno de saída posicionado próximo à $(r/a)R^{-\frac{1}{3}} = 1,0$. Como se pode observar nas figuras 5.5a)-d), os resultados obtidos com os esquemas QUICK, SMART, HLPa e VONOS são bastante semelhantes, mostrando uma ligeira discrepância da solução viscosa de Watson. Atribui-se essa diferença ao fato de que a solução VISCOSA é somente uma aproximação. De fato, quando a malha foi refinada mais uma vez, considerando-se uma malha de tamanho 400×240 células computacionais (malha fina, $\delta r = \delta z = 0,000125$ m), a solução numérica convergiu para uma solução que está muito próxima daquela obtida na malha média para os quatro esquemas. Como exemplo, a figura 5.5f) mostra a solução numérica nas três malhas utilizando-se o esquema HLPa.

A partir da figura 5.5e), observa-se que a solução obtida com o esquema FOU na malha média desviou-se consideravelmente da solução analítica na região de interesse. Esse fato é mais uma evidência de que o algoritmo FOU introduz, de fato, viscosidade numérica considerável nesses problemas com superfícies livres.

Uma síntese, na norma l_2 , do erro entre as soluções numéricas e a VISCOSA de Watson, para as malhas grossa, média e fina, é apresentada na tabela II. Esses resultados quantificam as observações consideradas na figura 5.5. Novamente, os esquemas QUICK, SMART, HLPa e VONOS mostraram resultados muito semelhantes com erros relativos pequenos: os esquemas QUICK e HLPa apresentaram os melhores resultados na malha média; e os esquemas SMART e VONOS apresentaram os melhores resultados na malha fina. Por outro lado, o esquema clássico FOU apresentou erros significativos em ambas as malhas média e fina.

tamanho da malha	QUICK	SMART	VONOS	HLPa	FOU
malha grossa (100×60)	0,2181066	0,2181084	0,2116055	0,2121379	0,3260995
malha média (200×120)	0,0609543	0,0622931	0,0704282	0,0613914	0,4621081
malha fina (400×240)	0,0554971	0,0510175	0,0499362	0,0521920	0,3911262

Table II: Erros relativos (E_{rel}) na norma l_2 entre a solução analítica de Watson e as simulações numéricas utilizando-se três malhas: $E_{rel} = \left(\frac{\|\xi_{VISCOSA} - \xi_{NUMERICA}\|_2}{\|\xi_{VISCOSA}\|_2} \right)$.

A discrepância mencionada anteriormente entre a solução analítica, obtida por Watson, e a solução numérica, obtida pelo código GENSMAC, pode ser vista utilizando-se a relação explícita aproximada (5.2) para a espessura δ da camada-limite.

A figura 5.6a) mostra o comportamento da espessura da camada-limite dada por Watson (WATSON) e aquela derivada pelo código GENSMAC (GENSMAC) utilizando-se a malha média. A partir dessa figura, fica claro que o código GENSMAC, equipado com o esquema de convecção VONOS, prediz corretamente o crescimento da camada-limite longe do ponto de estagnação, isto é, na região em que $(r/a)R^{-\frac{1}{3}} > 0,2$.

A figura 5.6b) mostra a distribuição do erro ($C = C(r/a)R^{-\frac{1}{3}}$) dada por (5.2). É a partir dessa figura que a discordância entre as soluções teórica e numérica pode ser atribuída ao fato de que, em sua solução analítica aproximada, Watson desprezou a constante de integração C em todo lugar.

Figura 5.6: Discrepâncias entre as soluções analítica e numérica, mostrando: **a)** Os comportamentos da espessura da camada-limite obtidos por Watson (WATSON) e pelo código GENSMAC (GENSMAC); **b)** O comportamento do erro C em função de $\frac{r}{a}R^{-\frac{1}{3}}$, dado pela expressão (5.2).

5.4 Comparação com os Experimentos de Taylor

Este capítulo é finalizado apresentando-se as comparações qualitativas das simulações numéricas com os experimentos de Taylor ([Taylor (1965)], [The NCFMF of Film Notes (1974)]). O escoamento em questão é o de um jato com simetria radial sobre um corpo de mesmo fluido em repouso. Para as comparações com as visualizações dos experimentos de Taylor, o código GENSMAC para problemas com simetria radial, adaptado com o esquema de convecção VONOS, simulou os modelos apresentados a seguir:

MODELO I – $Re = 10$:

- Dimensões do domínio: $0,0605 \text{ m} \times 0,20 \text{ m}$;
- Diâmetro do injetor (D): $0,005 \text{ m}$;
- Velocidade de injeção (U_0): $0,5 \text{ ms}^{-1}$;
- Constante gravitacional (g): $9,81 \text{ ms}^{-2}$;
- Coeficiente de viscosidade cinemática (ν): $2,5 \times 10^{-4} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$;
- Parâmetros de escala: $D = 0,005 \text{ m}$ e $U_0 = 0,5 \text{ ms}^{-1}$;
- Número de Reynolds ($Re = U_0 D / \nu$): 10 ;
- Número de Froude ($Fr = U_0 / \sqrt{gD}$): $2,25762$;
- Altura do injetor a partir do corpo de fluido (H): $0,03 \text{ m}$.

MODELO II – $Re = 200$:

- Dimensões do domínio: $0,0605 \text{ m} \times 0,20 \text{ m}$;
- Diâmetro do injetor (D): $0,005 \text{ m}$;
- Velocidade de injeção (U_0): $0,5 \text{ ms}^{-1}$;
- Constante gravitacional (g): $9,81 \text{ ms}^{-2}$;
- Coeficiente de viscosidade cinemática (ν): $1,25 \times 10^{-5} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$;
- Parâmetros de escala: $D = 0,005 \text{ m}$ e $U_0 = 0,5 \text{ ms}^{-1}$;
- Número de Reynolds ($Re = U_0 D / \nu$): 200 ;
- Número de Froude ($Fr = U_0 / \sqrt{gD}$): $2,25762$;
- Altura do injetor a partir do corpo de fluido (H): $0,03 \text{ m}$.

As figuras apresentadas na sequência ilustram as comparações entre as simulações e os experimentos de Taylor, mostrando, qualitativamente, uma concordância satisfatória. As dis-

crepâncias podem ser atribuídas ao fato de os modelos **I** e **II** não serem fiéis ao modelo físico adotado nos experimentos de Taylor.

a)

b)

c)

Figura 5.7: Comparação entre a solução numérica, obtida com o código GENSMAC adaptado com o esquema de convecção VONOS, e o experimento realizado por Taylor, mostrando para o caso em que $Re = 10$: **a)** A visualização do experimento de Taylor; **b)** A visão frontal da simulação numérica no tempo adimensional $t = 10$; **c)** Uma visão tridimensional da simulação numérica no mesmo tempo da visualização de frente.

a)

b)

c)

Figura 5.8: Comparação entre a solução numérica, obtida com o código GENSMAC adaptado com o esquema de convecção VONOS, e o experimento realizado por Taylor, mostrando, para o caso em que $Re = 10$: **a)** A visualização do experimento de Taylor; **b)** A visão frontal da simulação numérica no tempo adimensional $t = 121$; **c)** Uma visão tridimensional da simulação numérica no mesmo tempo da visualização de frente.

a)

b)

c)

Figura 5.9: Comparação entre a solução numérica, obtida com o código GENSMAC adaptado com o esquema de convecção VONOS, e o experimento realizado por Taylor, mostrando para o caso em que $Re = 200$: **a)** A visualização do experimento de Taylor; **b)** A visão frontal da simulação numérica no tempo adimensional $t = 63,00225$; **c)** Uma visão tridimensional da simulação numérica no mesmo tempo da visualização de frente.

a)

b)

c)

Figura 5.10: Comparação entre a solução numérica, obtida com o código GENSMAC adaptado com o esquema de convecção VONOS, e o experimento realizado por Taylor, mostrando, para o caso em que $Re = 200$: **a)** A visualização do experimento de Taylor; **b)** A visão frontal da simulação numérica no tempo adimensional $t = 146,0017$; **c)** Uma visão tridimensional da simulação numérica no mesmo tempo da visualização de frente.

Capítulo 6

Aplicação de Esquemas Convectivos em Problemas Tridimensionais

6.1 Introdução

Os algoritmos de convecção discutidos no capítulo 4 foram também analisados e implementados no código GENSMAC3D para a simulação de escoamentos tridimensionais laminares, transientes, incompressíveis, viscosos e com superfícies livres. É importante salientar que até a presente data não se conhecem simulações tridimensionais similares às apresentadas neste trabalho. O objetivo do presente capítulo é, então, mostrar simulações numéricas de problemas tridimensionais complexos utilizando-se o código GENSMAC3D adaptado para números de Reynolds elevados. Com os algoritmos de convecção FOU, CD, QUICK, SMART, HPLA e VONOS implementados no código, apresentam-se inicialmente simulações de dois jatos tridimensionais: um com simetria radial e o outro planar. O propósito dessas simulações foi averiguar a introdução de viscosidade artificial do esquema FOU, as instabilidades numéricas associadas aos esquemas CD e QUICK e as boas propriedades dos esquemas SMART, HPLA e VONOS em problemas tridimensionais com superfície livre. A seguir, apresentam-se simulações de problemas envolvendo números de Reynolds menores do que 1. O propósito dessas simulações foi verificar que os esquemas de alta ordem podem ser utilizados também na simulação de escoamentos em que o coeficiente de viscosidade molecular é o fator predominante. Apresentam-se também simulações do ressalto hidráulico

circular discutido no capítulo 5, sem qualquer hipótese de simetria e com a aplicação das condições (3.16) para a determinação da pressão na superfície do jato. Por último, compara-se qualitativamente uma simulação com resultado experimental.

6.2 Jatos Cilíndricos e Planares

Para verificar a introdução de dissipação artificial associada ao esquema FOU, as instabilidades numéricas relacionadas aos esquemas CD e QUICK e as vantagens dos esquemas SMART, HLP e VONOS, dois problemas com superfície livre foram propostos: um jato com simetria radial e um jato planar. Ambos os jatos são constituídos de fluidos viscosos e com velocidade constante $U_0 = 1,0 \text{ ms}^{-1}$ na entrada do domínio de solução. Os escoamentos foram projetados sobre uma superfície sólida impermeável a uma altura fixa H do injetor. As malhas utilizadas foram $80 \times 80 \times 120$ células ($\delta x = \delta y = \delta z = 0,0005 \text{ m}$) no caso do jato com simetria radial e $80 \times 120 \times 100$ células ($\delta x = \delta y = \delta z = 0,0005 \text{ m}$) para o jato planar. A tolerância para resolver a equação de Poisson foi $1,0 \times 10^{-10}$ nos dois problemas, exigindo-se em média 50 iterações a cada ciclo para o jato cilíndrico e 70 para o planar. Os dois escoamentos estão sujeitos ao campo gravitacional $\mathbf{g}$ com $g_x = g_y = 0$ e $g_z = -9,81 \text{ ms}^{-2}$. Os demais dados para esses problemas são apresentados como segue:

MODELO I – para um jato cilíndrico:

- Dimensões do domínio: $0,04 \text{ m} \times 0,04 \text{ m} \times 0,06 \text{ m}$;
- Dimensões da superfície sólida impermeável: $0,04 \text{ m} \times 0,04 \text{ m} \times 0,0015 \text{ m}$;
- Dimensões do injetor: diâmetro (L) = $0,008 \text{ m}$ e altura (H) = $0,01 \text{ m}$;
- Parâmetros de escala: $U_0 = 1,0 \text{ ms}^{-1}$ e $L = 0,008 \text{ m}$;
- Número de Froude: $Fr = 3,569$.

MODELO II – para um jato planar:

- Dimensões do domínio: $0,04 \text{ m} \times 0,06 \text{ m} \times 0,05 \text{ m}$;
- Dimensões da superfície sólida impermeável: $0,04 \text{ m} \times 0,06 \text{ m} \times 0,0015 \text{ m}$;
- Dimensões do injetor: $0,004 \text{ m} \times 0,04 \text{ m}$ e altura (H) = $0,005 \text{ m}$;
- Parâmetros de escala: $U_0 = 1,0 \text{ ms}^{-1}$ and $L = 0,004 \text{ m}$;
- Número de Froude: $Fr = 5,048$.

O código GENSMAC3D equipado com os esquemas de convecção FOU, CD, QUICK, SMART, HPLA e VONOS simulou os problemas **I** e **II**, até os jatos espalharem na fronteira rígida. Os valores $\nu = 0,0008, 0,00008$ e $0,000008 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ foram empregados para o coeficiente de viscosidade cinemática molecular no caso do jato cilíndrico, produzindo-se, respectivamente, os números de Reynolds 10, 100 e 1000. Para o modelo **II**, o coeficiente de viscosidade variou de $\nu = 0,0004, 0,00004$ até $0,000004 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, produzindo-se os números de Reynolds 10, 100 e 1000, respectivamente.

Um tamanho de passo no tempo de $\delta t \approx 0,000001 \text{ s}$ foi utilizado em ambas as simulações. Em cada célula posicionada na entrada do domínio de solução, duas partículas virtuais foram empregadas para descrever a posição da superfície livre a cada passo no tempo. Para cada modelo, foram realizadas 18 simulações: seis para cada número de Reynolds, totalizando 36 simulações. É importante observar que, com exceção do número de Reynolds e a discretização dos termos convectivos, todas os demais dados foram idênticos em todas as simulações para cada um dos modelos **I** e **II**.

Os resultados das simulações, no tempo $t = 0,035 \text{ s}$ para o caso cilíndrico e $t = 0,045 \text{ s}$ no caso planar, estão apresentados, respectivamente, nas figuras 6.1 e 6.2. Cada conjunto de três figuras em uma mesma linha corresponde ao resultado obtido com um determinado esquema, para os três números de Reynolds selecionados. Por exemplo, as figuras representadas por CD correspondem aos resultados numéricos obtidos com o esquema CD.

Como se pode observar a partir das figuras 6.1 e 6.2, os esquemas CD e QUICK não alcançaram os tempos finais ($t = 0,035 \text{ s}$ no caso cilíndrico e $t = 0,045 \text{ s}$ no caso planar), quando o número de Reynolds tornou-se suficientemente grande. Em particular, o esquema CD resultou instável mesmo no caso em que $Re = 100$. Teoricamente, as instabilidades numéricas verificadas nesses casos específicos não foram surpresa, uma vez que os esquemas CD e QUICK não satisfazem o critério CBC incondicionalmente. Com um refinamento suficiente da malha, os esquemas CD e QUICK teriam alguma chance de atingir os tempos finais; mas isso, além de acarretar decréscimo acentuado no tamanho de passo δt , consumiria muito mais espaço de memória da máquina.

Observando-se com bastante atenção as figuras 6.1 e 6.2, particularmente nos casos em que $Re = 100$ e $Re = 1000$, nota-se que o esquema FOU é, de fato, bastante difusivo nesses problemas particulares com superfície livre.

Figura 6.1: Simulações numéricas tridimensionais obtidas com o código GENSMAC3D, equipado com os vários esquemas de convecção, mostrando: A superfície de um jato com simetria radial, no tempo $t = 0,035$ s, incidindo perpendicularmente sobre uma superfície rígida.

Figura 6.1: Continuação.

Figura 6.2: Simulações numéricas tridimensionais obtidas com o código GENSMAC3D, equipado com os vários esquemas de convecção, mostrando: A superfície de um jato planar, no tempo $t = 0,045$ s, incidindo perpendicularmente sobre uma superfície rígida.

Figura 6.2: Continuação.

A difusão numérica associada ao esquema FOU pode ser mais bem observada na figura 6.3, ao se comparar as simulações dos jatos cilíndrico e planar utilizando-se referenciais diferentes de observação e os vários esquemas de convecção. De fato, uma observação frontal dos escoamentos a $Re = 1000$, mostrada nas figuras 6.3a) e b), evidencia esta característica do esquema FOU. Para uma observação mais detalhada do fenômeno, rotacionou-se a figura 6.3a) de 90 graus no sentido horário para o caso do jato cilíndrico em $t = 0,055$ s e $Re = 1000$. Os resultados estão na figura 6.3c), mostrando que, com o esquema de convecção VONOS, o fluido espalhou mais na superfície rígida.

Figura 6.3: Jatos cilíndrico e planar em $Re = 1000$: a) e b) visões frontais em $t = 0,045$ s; c) figuras a) rotacionadas de 90° no sentido horário para o jato cilíndrico em $t = 0,055$ s.

6.3 Jatos Oscilantes

As instabilidades físicas associadas aos jatos de fluido a baixos valores do número de Reynolds podem ser facilmente observadas no cotidiano. Por exemplo, durante o banho diário, o jato de shampoo caindo na mão, ou ainda o mel de abelha escorrendo de uma colher. Esses escoamentos tornam-se instáveis a uma certa distância de uma superfície sólida ([Taylor (1968)], [Buckmaster (1973)], [Cruickshank (1988)], [Acheson (1990)]). Sob determinadas condições específicas, como foi mostrado experimentalmente por Cruickshank ([Cruickshank (1988)]) e verificado numericamente por Tomé et al. ([Tomé et al. (2000c)]), alguns fluidos com alto coeficiente de viscosidade afinam devido ao efeito da tensão superficial e à presença do campo gravitacional. Ao aderirem a superfícies rígidas, esses fluidos formam dobras ou espirais, e, por essa razão, são denominados freqüentemente de jatos oscilantes. Taylor ([Taylor (1968)]) foi talvez um dos primeiros pesquisadores a estudar o fenômeno e, recentemente, o assunto não tem merecido muito destaque na literatura especializada.

Sem levar em conta os efeitos da tensão superficial, na presente seção apresentam-se algumas simulações numéricas para mostrar que os esquemas de alta ordem SMART, HLPa e VONOS, embora construídos para simular problemas com números de Reynolds elevados, podem ser utilizados também, com sucesso, na simulação de jatos oscilantes.

Para ilustrar o fenômeno familiar discutido acima, dois jatos de fluidos suficientemente viscosos foram projetados sobre superfícies sólidas impermeáveis, sob a ação do campo gravitacional ($g_x = g_y = 0$ e $g_z = -9,81 \text{ ms}^{-2}$). Respeitando-se as condições propostas por Cruickshank, os seguintes modelos foram empregados nas simulações:

MODELO I – para um jato planar:

- Dimensões do domínio: $0,06 \text{ m} \times 0,12 \text{ m} \times 0,123 \text{ m}$;
- Tamanho da malha: $60 \times 120 \times 123$ células ($\delta x = \delta y = \delta z = 0,001 \text{ m}$);
- Dimensões da superfície sólida impermeável: $0,06 \text{ m} \times 0,12 \text{ m} \times 0,003 \text{ m}$;
- Dimensões do injetor: $0,006 \text{ m} \times 0,06 \text{ m} \times 0,003 \text{ m}$;
- Velocidade de injeção: $U_0 = 0,5 \text{ ms}^{-1}$;
- Parâmetros de escala: $U_0 = 0,5 \text{ ms}^{-1}$ e $L = 0,006 \text{ m}$;
- Coeficiente de viscosidade cinemática do fluido: $\nu = 6,0 \times 10^{-3} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$;
- Número de Froude: $Fr = 2,061$; Número de Reynolds: $Re = 0,5$.

MODELO II – para um jato com simetria radial:

- Dimensões do domínio: $0,05 \text{ m} \times 0,05 \text{ m} \times 0,1 \text{ m}$;
- Tamanho da malha: $50 \times 50 \times 100$ células ($\delta x = \delta y = \delta z = 0,001 \text{ m}$);
- Dimensões da superfície sólida impermeável: $0,05 \text{ m} \times 0,05 \text{ m} \times 0,003 \text{ m}$;
- Diâmetro do injetor: $0,01 \text{ m}$; (altura $0,007 \text{ m}$);
- Velocidade de injeção: $U_0 = 0,3 \text{ ms}^{-1}$;
- Parâmetros de escala: $U_0 = 0,3 \text{ ms}^{-1}$ e $L = 0,01 \text{ m}$;
- Coeficiente de viscosidade cinemática do fluido: $\nu = 6,0 \times 10^{-3} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$;
- Número de Froude: $Fr = 0,9578$; Número de Reynolds: $Re = 0,5$.

Novamente, o código GENSMAC3D equipado com os esquemas de convecção CD, SMART, HLPa e VONOS simulou os problemas **I** e **II** descritos acima até os escoamentos apresentarem configurações caracterizando os fenômenos de dobras (para o modelo **I**) e espirais (para o modelo **II**).

Um tamanho de passo no tempo de $\delta t \approx 0,000001 \text{ s}$ foi utilizado nas duas simulações. A tolerância para resolver a equação de Poisson foi $1,0 \times 10^{-08}$, exigindo-se em média 10 iterações a cada ciclo de cálculo para ambos problemas. Em cada célula “inflow”, duas partículas virtuais foram suficientes para descrever a posição da superfície livre dentro do domínio. Os resultados dessas simulações são apresentados nas figuras 6.4 e 6.5 em tempos diferentes. No caso do jato planar, duas visões diferentes são mostradas nas figuras 6.5a) e 6.5b). Para o jato cilíndrico, os resultados dessas observações estão nas figuras 6.5c) e 6.5d). Em todas essas figuras, as colunas representam, respectivamente, os resultados das simulações obtidas com os esquemas CD, SMART, HLPa e VONOS.

Por simples inspeção das figuras 6.4 e 6.5, observa-se que os esquemas SMART, HLPa e VONOS são bem competitivos com o esquema CD, sendo que, para o modelo do jato planar, o esquema SMART apresentou, qualitativamente, uma configuração muito mais próxima daquela obtida nos experimentos de Cruickshank. Por outro lado, no modelo do jato cilíndrico, as simulações com os esquemas SMART, HLPa e VONOS mostraram-se muito semelhantes, porém ligeiramente diferentes dos resultados com o esquema CD. Essas discrepâncias qualitativas podem ser atribuídas às instabilidades físicas intrinsecamente associadas a esses problemas.

Figura 6.4: Simulações tridimensionais de um jato planar oscilante em tempos diferentes, utilizando-se o código GENSMAC3D e os vários esquemas de convecção. As colunas CD, SMART, HLP e VONOS correspondem aos resultados das simulações com os respectivos esquemas. Cada linha representa simulações diferentes no mesmo tempo.

Figura 6.5: Simulações tridimensionais de jatos oscilantes: **a)** e **b)** mostram visões diferentes do jato planar em $t = 0,5$ s; **c)** e **d)** correspondem à simulação do jato cilíndrico em dois tempos, sendo para **c)** $t = 0,40$ s e para **d)** $t = 0,70$ s. As colunas correspondem às simulações utilizando-se os esquemas CD, SMART, HLPA e VONOS, respectivamente.

6.4 Simulação do Ressalto Hidráulico Circular

No capítulo 5, foram apresentadas simulações do ressalto hidráulico circular utilizando-se o código GENSMAC para problemas com simetria radial e com os vários esquemas convectivos implementados. Na presente seção, mostra-se que o ressalto hidráulico circular pode ser simulado também com o código GENSMAC3D, para números de Reynolds elevados, sem qualquer hipótese de simetria nas implementações e com as condições de contorno adequadas para a pressão na superfície livre do fluido.

Nas simulações apresentadas a seguir, um jato de fluido viscoso com simetria radial foi projetado sobre uma superfície sólida horizontal com parâmetros de escala escolhidos apropriadamente, de maneira que um ressalto hidráulico circular pudesse ser formado na fronteira rígida em alguma posição ao longo das direções radiais. O modelo apresentado a seguir foi empregado nas simulações:

MODELO – ressalto hidráulico circular:

- Dimensões do domínio: $0,1 \text{ m} \times 0,1 \text{ m} \times 0,1 \text{ m}$;
- Tamanho da malha: $100 \times 100 \times 100$ células ($\delta x = \delta y = \delta z = 0,001 \text{ m}$);
- Dimensões do injetor: diâmetro (D) = $0,008 \text{ m}$ e altura (H) = $0,02 \text{ m}$;
(O injetor está posicionado a $0,048 \text{ m}$ da base);
- Velocidade de injeção (U_0): $0,5 \text{ ms}^{-1}$;
- Constante gravitacional (g): $9,81 \text{ ms}^{-2}$;
- Coeficiente de viscosidade cinemática (ν): $1,0 \times 10^{-5} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$;
- Parâmetros de escala: $D = 0,008 \text{ m}$ e $U_0 = 0,5 \text{ ms}^{-1}$;
- Número de Reynolds ($Re = LU_0/\nu$): $4,0 \times 10^2$;
- Número de Froude ($Fr = U_0/\sqrt{gL}$): $1,785$;

O código GENSMAC3D simulou o modelo anterior utilizando os vários esquemas de convecção estudados no capítulo 4. Em cada simulação, duas partículas virtuais foram suficientes nas células do injetor para descrever a superfície livre do fluido. A tolerância para a conservação da massa no método de gradientes conjugados foi $1,0 \times 10^{-8}$. Após várias tentativas com um mesmo tamanho de passo no tempo, conclui-se que, para esse escoamento

particular, ambos os esquemas CD e QUICK não conseguiram simular o problema por causa das instabilidades numéricas. Por outro lado, os esquemas FOU, SMART, HLPa, e VONOS não mostraram sinal algum de instabilidade numérica, e o fenômeno do ressalto hidráulico circular mostrado na figura 5.1a) foi, então, simulado com sucesso. A figura 6.6 mostra os resultados das simulações no tempo $t = 0, 30$ s. Como se pode observar a partir dessa figura, a simulação desse escoamento complexo pode ser realizada com os esquemas FOU, SMART, HLPa e VONOS sem qualquer vestígio de instabilidade numérica. Entretanto, o esquema FOU não produziu um raio circular característico do problema físico correspondente. Essa anomalia é atribuída ao excesso de viscosidade artificial introduzido pelo esquema. Já os esquemas HLPa, SMART e VONOS apresentaram uma boa simulação do ressalto hidráulico circular. Isso vem, realmente, confirmar a utilidade dos esquemas antidifusivos de alta ordem e limitados na simulação de escoamentos tridimensionais complicados que envolvem fronteiras livres/rígidas.

Figura 6.6: Simulações numéricas tridimensionais utilizando-se os esquemas de convecção FOU, SMART, HLPa E VONOS, mostrando o ressalto hidráulico circular em $t = 0, 30$ s.

6.5 Comparação entre Soluções Numéricas Tridimensionais e Bidimensionais com Simetria Radial

Nesta seção, apresenta-se uma comparação das soluções numéricas obtidas com o código GENSMAC, para problemas com simetria radial, e GENSMAC3D, para problemas tridimensionais. Em ambos os códigos GENSMAC, os esquemas de convecção FOU e VONOS foram utilizados para aproximar os termos convectivos. O escoamento escolhido para a comparação foi o ressalto hidráulico circular, já discutido anteriormente. Também, para uma comparação com a solução viscosa de Watson, a posição analítica do ressalto $r = r_1$ foi calculada utilizando-se as equações (5.5) e (5.6) da seção 5.3.

No caso do problema em coordenadas cilíndricas, a geometria e os parâmetros para a simulação numérica são apresentados na figura 6.7. Os números de Reynolds e de Froude envolvidos nestas simulações foram, respectivamente,

$$Re = DU_0/\nu = 150 \quad \text{e} \quad Fr = U_0/\sqrt{gD} = 1,693.$$

Os tamanhos das malhas utilizadas nas simulações foram 55×22 células computacionais ($\delta r = \delta z = 0,00125$ m) no caso em coordenadas cilíndricas, e $110 \times 110 \times 22$ células computacionais ($\delta x = \delta y = \delta z = 0,00125$ m) no problema tridimensional.

Figura 6.7: Geometria para o problema com simetria radial, mostrando os parâmetros e dimensões utilizadas na simulação: $D = 0,02$ m; $U_0 = 0,75$ m/s; $h = 0,01$; $d = 0,005$; $b = 0,00375$.

A figura 6.8a) mostra, no tempo $t = 0,138$ s, a geometria do problema tridimensional equivalente e a superfície livre do fluido escoando sobre o contorno rígido. A partir dessa figura, observa-se que a fronteira rígida, sobre a qual o fluido está incidindo, e o contorno de saída, através do qual o fluido está saindo, possuem formas geométricas não-cilíndricas. A figura 6.8b) mostra, no tempo final de simulação ($t = 0,588$ s), a superfície livre tridimensional utilizando-se o esquema de convecção VONOS. Na sequência, várias seções transversais (cortes perpendiculares) da superfície livre, obtida da simulação tridimensional, são comparadas com a superfície livre obtida da simulação do mesmo problema em coordenadas cilíndricas.

Figura 6.8: Simulação tridimensional com esquema VONOS, mostrando: **a)** A geometria e a superfície livre no tempo $t = 0,138$ s; **b)** A superfície livre no tempo final $t = 0,588$ s.

A figura 6.9 mostra o perfil transiente da superfície livre, ao longo do plano $x - z$ na posição $y = 0,0$, da simulação tridimensional usando-se o esquema VONOS. Pode-se inferir, a partir dessa figura, que a localização do ressalto aproxima-se da posição estacionária simulada com o código GENSMAC para problemas com simetria radial. No problema tridimensional não foi possível alcançar o estado estacionário equivalente por causa das limitações impostas pela memória da máquina; de fato, no último nível de tempo ($t = 0,588$ s), a memória excedeu 1,3 GB.

Figura 6.9: Perfil transiente da superfície livre, ao longo do plano $x - z$ na posição $y = 0,0$, obtido da simulação tridimensional.

A figura 6.10 mostra a comparação entre o perfil da superfície livre, ao longo do plano $x - z$ na posição $y = 0, 0$, obtida no caso tridimensional (TRIDIMENSIONAL) e a superfície livre obtida da versão do problema em coordenadas cilíndricas (“AXISYMMETRIC”). Ambos os perfis foram simulados pela aplicação do esquema VONOS. A partir dessa figura, observa-se que a concordância dos dois perfis é bastante satisfatória, muito embora o container tridimensional escolhido durante o processo de modelagem não possua geometria cilíndrica.

Figura 6.10: Comparação, no tempo final de simulação ($t = 0,588$ s), entre o perfil da simulação tridimensional (TRIDIMENSIONAL), ao longo do plano $x - z$ na posição $y = 0, 0$, e o perfil do caso com simetria radial (“AXISYMMETRIC”).

Com o objetivo de observar os efeitos da orientação da malha computacional na evolução do escoamento tridimensional, várias seções transversais da superfície livre tridimensional foram comparadas com a superfície livre do caso da simulação em coordenadas cilíndricas. A figura 6.11 mostra três perfis determinados por seções transversais da superfície livre tridimensional obtida utilizando-se o esquema VONOS. Esses perfis correspondem às rotações, no sentido anti-horário, do plano $x - z$ de 30° , 45° e 90° , medidos a partir do eixo x . A partir dessa figura, observa-se que a distância da posição média do ressalto até o ponto de estagnação é praticamente a mesma nos três casos. Além disso, há uma concordância bastante aceitável dos três perfis e aquele obtido da seção transversal do plano $x - z$ de zero graus (figura 6.10). As diferenças no comprimento dos perfis 30° e 45° , observadas além do ressalto, são causadas pelo fato de o container no modelo tridimensional não possuir geometria cilíndrica.

Figura 6.11: Perfis obtidos de seções transversais da superfície livre tridimensional, mostrando, de cima para baixo, o primeiro, o segundo e o terceiro perfis, que correspondem às rotações 30, 45 e 90 graus, respectivamente.

As figuras 6.12 e 6.13 mostram, respectivamente, seções transversais paralelas ao plano $x - y$ na posição vertical $z = 0,01247$ da superfície livre tridimensional obtida utilizando-se os esquemas VONOS e FOU. Essa posição vertical corresponde à média entre a posição da superfície livre antes e depois do ressalto, isto é, a posição do ponto médio do ressalto. Para uma comparação, esses perfis e a superfície livre obtida no caso do problema em coordenadas cilíndricas são sobrepostos à curva analítica da localização $r_1 = 0,03308$ do ressalto. Mais uma vez, a concordância das duas soluções numéricas utilizando-se o esquema VONOS mostrou-se realmente bastante satisfatória. Pode-se observar também, a partir dessas figuras, que o esquema VONOS produziu uma solução numérica para o ressalto hidráulico aproximadamente circular, indicando que os efeitos da orientação da malha são desprezíveis. Por outro lado, o esquema FOU mostrou-se particularmente pobre em reproduzir, numericamente, um ressalto circular característico do problema.

Figura 6.12: Comparação das seções transversais paralelas ao plano $x - y$ na posição $z = 0,01247$, das simulações tridimensionais (3D-VONOS) com a simulação no caso em coordenadas cilíndricas (2D-“AXIS”) e com o valor analítico da posição do ressalto (WATSON). O esquema VONOS foi usado para aproximar os termos convectivos.

Figura 6.13: Comparação das seções transversais paralelas ao plano $x - y$ na posição $z = 0,01247$, das simulações tridimensionais (3D-FOU) com o valor analítico da posição do ressalto (WATSON). O esquema FOU foi usado para aproximar os termos convectivos.

6.6 Comparação com o Experimento de Storr/Behnia

Este capítulo é finalizado mostrando-se a comparação da simulação numérica, obtida com o código GENSMAC3D equipado com o esquema de convecção VONOS, e o experimento realizado por Storr e Behnia ([Storr & Behnia (1999)]).

O escoamento proposto para a comparação qualitativa é o de um jato de água sobre um corpo de água em repouso. Para a simulação desse problema tridimensional, utilizou-se como critério de convergência na equação de Poisson a tolerância $1,0 \times 10^{-8}$. Para uma boa representação da superfície livre, empregaram-se três partículas marcadoras em cada célula computacional descrevendo o “inflow” e o fluido em repouso no container. Os demais dados para o problema são apresentados no modelo a seguir:

MODELO:

- Dimensões do domínio: $0,10 \text{ m} \times 0,10 \text{ m} \times 0,10 \text{ m}$;
- Tamanho da malha: $100 \times 100 \times 100$ células ($\delta x = \delta y = \delta z = 1,0 \times 10^{-3} \text{ m}$);
- Diâmetro do injetor (D): $6,0 \times 10^{-3} \text{ m}$;
- Velocidade de injeção (U_0): $1,0 \text{ ms}^{-1}$;
- Constante gravitacional (g): $9,81 \text{ ms}^{-2}$;
- Coeficiente de viscosidade cinemática (ν): $2,0 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$;
- Parâmetros de escala: $D = 0,006 \text{ m}$ e $U_0 = 1,0 \text{ ms}^{-1}$;
- Número de Reynolds ($Re = U_0 D / \nu$): $3,0 \times 10^3$;
- Número de Froude ($Fr = U_0 / \sqrt{gD}$): 4,12183;
- Altura do injetor a partir da base do container (H): 0,08 m.

A figura 6.14 contém as visualizações da simulação numérica e o experimento¹ realizado por Storr e Behnia, mostrando, qualitativamente, uma concordância aceitável. As discrepâncias entre a simulação e o experimento podem ser atribuídas aos fatos de o modelo descrito acima não ser fiel ao modelo físico adotado por Storr/Behnia e o código não levar em conta a tensão superficial.

---

¹Visualização extraída do artigo “Comparisons between experiment and numerical simulation using a free surface technique of free-falling liquid jets” de Storr, G.J. e Behnia, M., com a permissão de G.J. Storr.

Figura 6.14: Comparação da simulação numérica obtida com o código GENSMAC3D e o experimento realizado por Storr e Behnia, para o caso em que $Re = 3000$, mostrando: **a)** A visualização experimental de Storr e Behnia; **b)** A visão frontal da simulação numérica no tempo final de simulação $t = 6,0 \times 10^{-2}$ s; **c)** Uma visão tridimensional da simulação numérica no mesmo tempo.

Capítulo 7

Aplicação dos Modelos de Turbulência $\kappa - \varepsilon$ em Problemas Bidimensionais e com Simetria Radial

7.1 Introdução

São muitas as aplicações em que há a necessidade de se compreender os processos turbulentos nos fluidos. O desprendimento de estruturas turbilhonares em pontes suspensas, a formação de ressaltos hidráulicos em canais abertos e películas, a camada-limite nas vizinhanças de superfícies sólidas e os movimentos atmosféricos são exemplos representativos. Muito embora a turbulência seja um fenômeno intrinsecamente tridimensional, existem situações em que o tratamento bidimensional é suficiente para a descrição do escoamento. Um exemplo típico é o plasma na ionosfera equatorial ou, ainda, a dinâmica em larga escala (acima de 400 km) na atmosfera terrestre. Em geral, os números de Reynolds envolvidos nesses problemas são bastante elevados, ocasionando dificuldades na determinação de soluções numéricas. O amplo intervalo entre as pequenas e as grandes escalas do movimento é um dos fatores principais. Em escalas menores, semelhantes às envolvidas neste trabalho, complicações numéricas adicionais aparecem quando se deseja compreender o comportamen-

to da turbulência na presença de contornos rígidos e/ou livres. Como exemplos, podem-se citar jatos em altas velocidades incidindo perpendicularmente sobre superfícies sólidas e a camada-limite turbulenta desenvolvida nas adjacências desses contornos. Nos problemas de escoamentos incompressíveis, muitos dos resultados da literatura são para o movimento não-transiente confinado por paredes sólidas ou externo ao corpo rígido. São poucos os resultados que relatam experimentos numéricos de escoamentos transientes com fronteiras móveis. Como decorrência, os métodos numéricos para a simulação do regime turbulento, associado aos contornos livres e rígidos, têm aparecido somente esporadicamente.

No presente capítulo, apresentam-se resultados de simulações numéricas obtidos com os códigos GENSMAC, para problemas bidimensionais e com simetria radial, de escoamentos incompressíveis em regimes turbulentos e na presença de contornos rígidos e/ou livres. Os modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ e as condições iniciais e de contorno analisados anteriormente foram implementados para simular os efeitos da turbulência sobre o comportamento médio do escoamento. Os termos não-lineares nas equações de transporte foram discretizados pelos esquemas HHPA e VONOS estudados no capítulo 4. Tais esquemas foram adotados aqui, tomando-se por base os bons resultados obtidos nos problemas em regime laminar e na tentativa de se garantir, a cada passo no tempo, positividade das variáveis turbulentas κ e ε . Convém salientar também que, nos problemas envolvendo superfícies livres, a pressão efetiva nessas fronteiras foi especificada utilizando-se as relações (3.16).

7.2 Comparação com Estimativas Teóricas do Coeficiente de Tensão de Cisalhamento em Superfícies Bidimensionais Planas

A números de Reynolds elevados, a camada-limite que se desenvolve ao longo de superfícies rígidas suaves desempenha papel muito importante em aplicações de engenharia. O conhecimento do atrito superficial gerado nas paredes de turbomáquinas, nos cascos de navios e nas asas de aviões, por exemplo, é de grande interesse comercial. Do ponto de vista numérico, o escoamento é considerado difícil de se simular, em virtude dos gradientes elevados nas vizinhanças da parede e da diversidade de escalas no movimento. Por essas

razões, o problema foi proposto como um caso-teste na conferência de Stanford ([Kline et al. (1981)]) para testar o desempenho de modelos de turbulência.

O problema de uma camada-limite turbulenta desenvolvida sobre paredes sólidas tem aparecido constantemente na literatura, e numerosos métodos para estimar o atrito na superfície têm sido propostos ([Ferziger et al. (1982)]). Os métodos variam desde a interpolação de dados experimentais e relações baseadas na formulação integral da equação do movimento, até a simulação numérica. Na seqüência, apresentam-se três estimativas para o coeficiente de tensão de cisalhamento C_f (“skin-friction coefficient”) derivadas de teorias bem estabelecidas. Essas estimativas são, então, comparadas com a estimativa obtida pelo código GENSMAC equipado com os modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ e o esquema de convecção VONOS para os termos convectivos.

- Estimativa de Prandtl:

$$C_f = \frac{0,058}{Re_x^{1/5}}, \quad (7.1)$$

- Estimativa pela Lei da Potência:

$$C_f = \frac{0,027}{Re_x^{1/7}}, \quad (7.2)$$

- Estimativa de White:

$$C_f = \frac{0,455}{\ln^2(0.06Re_x)}, \quad (7.3)$$

em que C_f é definido por $C_f = 2\tau_w/\rho U_0^2$. Nas estimativas (7.1)-(7.3), $Re_x = U_0 x/\nu$ representa o número de Reynolds local do escoamento ao longo da superfície, em que U_0 é a escala de velocidade considerada ao longe (“freestream”) e x a posição tomada ao longo da superfície. As teorias para a derivação dessas estimativas podem ser encontradas, por exemplo, em [White (1969)], [Schlichting (1979)] ou [White (1991)]. A estimativa de Prandtl foi desenvolvida para um intervalo limitado de números de Reynolds pequenos, sendo, portanto, considerada não muito precisa para números de Reynolds elevados. A estimativa dada pela lei da potência concorda muito bem com dados experimentais e, conseqüentemente, é recomendada para uso geral ([White (1991)]). Segundo o próprio White, a sua estimativa pode ser considerada como uma relação “mais ou menos exata” para o coeficiente de atrito.

Apresenta-se, a seguir, a comparação da estimativa numérica para C_f com as estimativas teóricas (7.1)-(7.3), no caso da camada-limite turbulenta sobre placa plana. O

propósito aqui é mostrar que o código GENSMAC equipado com o modelo de turbulência $\kappa - \varepsilon$ clássico, denominado aqui de $\kappa - \varepsilon$ *alto Re*, estima satisfatoriamente bem o comportamento do atrito em escoamentos bidimensionais externos a uma fronteira rígida. Para tanto, uma placa plana de comprimento $L = 5,0$ m foi exposta a uma corrente uniforme com velocidade $U_0 = 1,0$ m/s. A condição “free-slip” foi considerada no contorno $y = y_1 = 1,0$ m, e o número de Reynolds envolvido no problema foi $Re = y_1 U_0 / \nu = 2,0 \times 10^6$.

Três simulações foram realizadas empregando-se malhas diferentes, a saber: a malha grossa (20×100 células computacionais, $\delta x = \delta y = 0,05$ m); a malha média (40×200 células computacionais, $\delta x = \delta y = 0,025$ m); e a malha fina (80×400 células computacionais, $\delta x = \delta y = 0,0125$ m). Nesse problema o número de Reynolds crítico y_c^+ , solução de (3.44), e as constantes K e B , nas leis de parede, assumiram os valores $y_c^+ \approx 11,4453191$, $K = 0,41$ e $B = 5,5$. Nas simulações, utilizaram-se três partículas marcadoras nas células “inflow” e nas células contendo fluido. O critério de convergência para a equação de Poisson e o tamanho do passo temporal utilizados foram, respectivamente, $1,0 \times 10^{-10}$ e $1,0 \times 10^{-5}$ nas três simulações. Os processos foram finalizados quando o número de iterações no método de gradientes conjugados reduziu-se a zero, caracterizando um regime estacionário com respeito à média temporal de Reynolds. Os números de Reynolds locais (y^+), mínimos e máximos, dados em (3.29) alcançaram os seguintes valores finais: $y_{min}^+ \approx 209,699047$, $y_{max}^+ \approx 223,575913$ na malha grossa; $y_{min}^+ \approx 140,380721$, $y_{max}^+ \approx 158,088122$ na malha média; e $y_{min}^+ \approx 95,31083$, $y_{max}^+ \approx 111,78311$ na malha fina. A figura 7.1 ilustra a simulação numérica na malha fina e no tempo adimensional $t = 6477$, mostrando o campo de vorticidades e a camada-limite turbulenta desenvolvida adjacente ao contorno rígido.

Figura 7.1: Simulação numérica, utilizando-se o código GENSMAC com $\kappa - \varepsilon$ *alto Re* e o esquema VONOS, da camada-limite turbulenta numa placa plana, mostrando o campo de vorticidades.

A figura 7.2 mostra a comparação entre os perfis $C_f = C_f(Re_x)$ obtidos pelos código GENSMAC com $\kappa - \varepsilon$ *alto* Re , nas três malhas e no tempo $t = 6477$, e aquele das estimativas (7.1)-(7.3). Nessa figura, para simples comparação, um perfil do regime laminar é apresentado. Observa-se, a partir das figuras 7.2a), b) e c), que a estimativa numérica é geralmente satisfatória para Re_x além de $1,0 \times 10^6$. Observa-se, ainda, na figura 7.2d) que, quando a malha grossa foi duas vezes refinada, houve convergência para um perfil que está muito próximo aos da lei da potência e de White. Por outro lado, para $Re_x \leq 1,0 \times 10^6$, as discrepâncias podem ser atribuídas às malhas utilizadas e ao fato de o perfil de velocidade inicial não ser suficientemente turbulento em $x = 0$. De fato, próximo a $Re_x = 10^6$, nota-se a tendência de o perfil simulado na malha fina (figura 7.2c) acompanhar os perfis teóricos.

Figura 7.2: Comparação do coeficiente de atrito C_f em escoamento turbulento sobre placa plana, mostrando estimativas teóricas e a obtida pelo código GENSMAC com $\kappa - \varepsilon$ *alto* Re em três malhas: a) Grossa; b) Média; c) Fina; d) Comparação das três soluções numéricas.

A solução numérica da camada-limite turbulenta sobre placa plana foi investigada também na região onde o cisalhamento turbulento é dominante. Para tanto, fixou-se a posição $x = 3,75$ na placa e extraiu-se o perfil de velocidades $u^+ = u^+(lny^+)$ naquele ponto. O perfil obtido foi, então, comparado com dados experimentais de Wieghardt e Tillmann ([Wieghardt & Tillmann(1951)]) e com dois perfis obtidos pela variação das constantes K e B na lei logarítmica (3.36). Um desses perfis, proposto por Nikuradse e Prandtl ([White (1991)]), assume os valores $K = 0,40$ e $B = 5,5$; o outro perfil, estimado por Coles e Hirst ([Coles & Hirst (1968)]), utiliza $K = 0,41$ e $B = 5,0$. A figura 7.3 apresenta a comparação desses dois perfis e alguns dos dados experimentais com o perfil numérico. Os resultados indicam compatibilidade entre esses dados e perfis e a solução numérica na esteira turbulenta, mostrando que a tensão de cisalhamento efetiva estimada na parede transfere corretamente os seus efeitos para regiões onde $y^+ > 500$. Isto confirma que o código GENSMAC equipado com o modelo $\kappa - \varepsilon$ *alto Re* simula satisfatoriamente bem os efeitos da turbulência em regiões remotas do contorno rígido.

Figura 7.3: Perfis de velocidade na camada-limite turbulenta, mostrando a comparação entre a solução numérica (GENSMAC), os dois perfis derivados da lei logarítmica e os dados experimentais de Wieghardt e Tillmann.

7.3 Comparação com a Solução Analítica Aproximada de Watson

Apresenta-se, nesta seção, a comparação entre a solução numérica obtida com o código GENSMAC, para problemas com simetria radial, e a solução analítica aproximada obtida por Watson ([Watson (1964)]). O escoamento em questão é o de uma película em regime turbulento movimentando-se sobre uma superfície rígida impermeável.

Da mesma maneira como feito para o caso de escoamentos laminares (capítulo 5), a comparação foi realizada entre a espessura ξ da camada de fluido determinada pelo código GENSMAC e aquela derivada da solução analítica aproximada de Watson. Para o caso de o movimento da camada de fluido estar em regime turbulento, Watson empregou a metodologia de Glauert ([Glauert (1956)]) que introduziu uma viscosidade turbulenta adicional ϵ , variando através da camada-limite como u_r^6 , e a fórmula empírica de Blasius para escoamentos turbulentos em dutos circulares. Utilizando essa viscosidade turbulenta na equação do movimento, Watson obteve uma solução analítica aproximada, análoga àquela apresentada na seção 5.3 para o caso do problema em regime laminar. A seguir, utilizando-se as mesmas definições e notações empregadas naquela seção, os resultados principais da teoria aproximada de Watson para o caso de escoamentos turbulentos são sintetizados. Admitindo a aproximação de Lin ([Lin (1945)]) para o perfil de velocidades, Watson estimou inicialmente o número de Reynolds crítico R para a estabilidade do escoamento

$$R = \frac{Q}{a\nu} \approx 2,57 \times 10^4. \quad (7.4)$$

Em seguida, considerando a solução similar de Glauert

$$u = U(r)F(\eta), \quad (7.5)$$

em que $\eta = z/\delta(r)$ é a variável de similaridade, ele concluiu que a viscosidade turbulenta adjacente à superfície rígida deveria variar de acordo com a relação

$$\epsilon = \gamma U(r)^{3/4} \delta^{3/4} F^{(VI)}(\eta), \quad (7.6)$$

sendo γ uma constante. Uma relação explícita para a espessura δ da camada-limite turbulenta foi determinada por Watson, assumindo que o perfil de velocidade (7.5) é válido para

$r < r_0$ e com $U(r) = U_0$

$$(r\delta)^{5/4} - \frac{k^{5/4}}{80(A - 2/9)} \left(\frac{7\nu}{U_0} \right)^{1/4} r^{9/4} = C, \quad (7.7)$$

em que C é uma constante de integração e $A = 0,239$. Mais uma vez, Watson desprezou a constante C em (7.7) para obter a expressão da espessura δ , que em forma adimensional expressa-se como

$$\delta^* = \left(80(A - 2/9) \right)^{-4/5} k(7\pi)^{1/5} r^{*4/5}, \quad (7.8)$$

em que $\delta = \delta^* a R^{-1/9}$ e $r = r^* a R^{1/9}$. Finalmente, assumindo o perfil de velocidades dado por (7.5) e considerando a posição radial $r^* = r^*_0$ onde a camada-limite absorve o escoamento, Watson determinou as seguinte expressões para a espessura ξ^* da camada de fluido escoando sobre o contorno rígido:

$$\xi^* = \frac{9k}{200} (14\pi A)^{1/4} \frac{r^{*9/4} + l^{*9/4}}{r^*}, \quad \text{se } r^* \geq r^*_0, \quad (7.9)$$

e

$$\xi^* = \frac{1}{2r^*} + \left(\frac{k - A}{k} \right) \delta^*, \quad \text{se } r^* < r^*_0, \quad (7.10)$$

em que $k = 0,260$. A constante r^*_0 , adimensionalizada segundo a relação $r_0 = r^*_0 a R^{1/9}$, foi derivada por Watson como

$$r^*_0 = (7\pi)^{-1/9} (2A)^{-5/9} \left(80(A - 2/9) \right)^{4/9}. \quad (7.11)$$

A constante l^* que aparece em (7.9), adimensionalizada como $l = l^* a R^{1/9}$, depende das condições em que a camada-limite alcança a superfície livre do fluido, e foi estimada por Watson como

$$l^* = 20(1 - 2A)(14\pi)^{-1/4} A^{-5/4}. \quad (7.12)$$

Para a comparação entre a solução numérica e a solução analítica de Watson, o seguinte modelo foi adotado para a simulação:

- Dimensões do domínio: $0,05 \text{ m} \times 0,10 \text{ m}$;
- Diâmetro do injetor ($D = 2a$): $0,02 \text{ m}$;
- Velocidade de injeção (U_0): $1,0 \text{ ms}^{-1}$;
- Constante gravitacional (g): $9,81 \text{ ms}^{-2}$;
- Coeficiente de viscosidade cinemática (ν): $6,25 \times 10^{-7} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$;
- Parâmetros de escala: $D = 0,02 \text{ m}$ e $U_0 = 1,0 \text{ ms}^{-1}$;
- Número de Reynolds ($R = \frac{\pi}{2}U_0D/\nu$): $5,03 \times 10^4$;
- Número de Froude ($Fr = U_0/\sqrt{gD}$): $2,25762$;
- Altura do injetor a partir da superfície sólida (H): $0,015 \text{ m}$.

O código GENSMAC com o modelo $\kappa - \varepsilon$ *alto Re* simulou o problema anterior utilizando as seguintes malhas: a malha grossa (50×100 , $\delta r = \delta z = 0,001 \text{ m}$); a malha média (100×200 , $\delta r = \delta z = 0,0005 \text{ m}$); e a malha fina (200×400 , $\delta r = \delta z = 0,00025 \text{ m}$). A superfície do fluido na malha fina e no tempo final adimensional $t = 15,97657$ é mostrada na figura 7.4.

Figura 7.4: Simulação numérica utilizando-se o modelo $\kappa - \varepsilon$ *alto Re*, mostrando a superfície de um jato com simetria radial em regime turbulento sobre uma superfície rígida.

Nas simulações, foram utilizadas três partículas nas células “inflow” para descrever a superfície livre do fluido. Para esse problema, o Reynolds crítico y_c^+ e as constantes K e B assumiram os valores $y_c^+ \approx 11,047899$, $K = 0,41$ e $B = 5,1$. O critério de convergência para a equação de Poisson e o tamanho do passo temporal foram, para as três simulações, da mesma ordem que aqueles do problema de camada-limite turbulenta da seção anterior. Os processos foram finalizados quando o número de iterações no método de gradientes conjugados tornou-se menor que 5, caracterizando, na média, um regime quase estacionário. Os números de Reynolds locais (y^+), mínimos e máximos, alcançaram os seguintes valores finais: $y_{min}^+ \approx 7,536894$, $y_{max}^+ \approx 30,078148$ na malha grossa; $y_{min}^+ \approx 3,713169$, $y_{max}^+ \approx 21,049341$

na malha média; e $y_{min}^+ \approx 1,788743$, $y_{max}^+ \approx 14,361736$ na malha fina. A figura 7.5 mostra, no tempo adimensional $t = 20,477$, a comparação entre a espessura ξ da camada de fluido obtida pelo código GENSMAC com o modelo $\kappa - \varepsilon$ *alto Re*, nas três malhas, e aquela derivada por Watson. Observa-se, a partir da figura 7.5(d), que as soluções numéricas nas malhas grossa e média convergiram monotonicamente para a solução na malha fina. E a solução na malha fina (figura 7.5(c)) mostrou concordância razoável com a solução viscosa de Watson. As discrepâncias entre a solução numérica e a analítica são atribuídas à baixa resolução junto ao contorno rígido. Um refinamento da malha na adjacência desse contorno é, então, indispensável para melhorar o desempenho do modelo.

Figura 7.5: Soluções analítica de Watson e a obtida pelo código GENSMAC com $\kappa - \varepsilon$ *alto Re*, mostrando: **a)** Comparação na malha grossa; **b)** Comparação na malha média; **c)** Comparação na malha fina; **d)** Solução numérica nas três malhas.

O código GENSMAC equipado também com o modelo de turbulência para baixos números de Reynolds de Yang e Shih, o qual é chamado aqui de $\kappa - \varepsilon$ *baixo Re*, simulou, nas três malhas, o mesmo problema que o modelo $\kappa - \varepsilon$ *alto Re* simulou. O número de partículas virtuais nas células descrevendo o “inflow”, o critério de convergência na equação de Poisson e o término dos processos foram idênticos aos da simulação anterior.

A simulação do escoamento com o modelo $\kappa - \varepsilon$ *baixo Re* apresentou mais dificuldade do que a simulação com o modelo $\kappa - \varepsilon$ clássico; para manter a solução numérica estável na malha fina foi necessário reduzir o tamanho do passo temporal, da simulação anterior na mesma malha, de 10% aproximadamente, atingindo o valor $\delta t \approx 1,7 \times 10^{-6}$. A superfície do fluido obtida com esse modelo na malha fina e no tempo final adimensional $t = 15,97657$ é mostrada na figura 7.6. Comparando-se essa simulação com aquela da figura 7.4, observa-se que as espessuras da camada de fluido são, qualitativamente, semelhantes. Isso fornece fortes indícios de que as condições de contorno implementadas na fronteira rígida são aceitáveis para esse problema.

Figura 7.6: Simulação numérica utilizando-se o código GENSMAC equipado com modelo $\kappa - \varepsilon$ *baixo Re*, mostrando a superfície livre de um jato com simetria radial em regime turbulento sobre uma superfície rígida.

A comparação, no mesmo tempo adimensional da simulação anterior (figura 7.5), entre a espessura da camada ξ obtida com o código GENSMAC equipado com $\kappa - \varepsilon$ *baixo Re* e a obtida por Watson foi realizada novamente, e os resultados estão apresentados na figura 7.7. Pode-se ver claramente, a partir das figuras 7.7a) e 7.7b), que os resultados obtidos com o modelo $\kappa - \varepsilon$ *baixo Re*, nas malhas grossa e média, são insatisfatórios. Por outro lado, na malha fina (figura 7.7c)), o modelo comportou-se melhor; coincidindo com a solução analítica de Watson em algumas regiões e apresentando erros consideráveis em outras regiões do escoamento. Acredita-se que, nesse problema específico com superfície livre, o mau

desempenho do modelo $\kappa - \varepsilon$ *baixo* Re está associado também ao fato de que houve poucas células computacionais na camada viscosa. E, mais uma vez, fica evidente a necessidade de se resolver adequadamente a camada interna da camada-limite turbulenta.

Figura 7.7: Soluções analítica de Watson e a obtida pelo código GENSMAC com $\kappa - \varepsilon$ *baixo* Re , mostrando: **a)** Comparação na malha grossa; **b)** Comparação na malha média; **c)** Comparação na malha fina; **d)** Solução numérica nas três malhas.

Vale mencionar ainda que as discrepâncias entre as soluções numéricas, obtidas com os modelos $\kappa - \varepsilon$ *alto* Re e $\kappa - \varepsilon$ *baixo* Re , e a solução teórica, derivada por Watson, podem ser atribuídas também às hipóteses adotadas por Glauert e às aproximações feitas por Watson. De fato, segundo o próprio Watson (ver [Watson (1964)], pg. 495), a sua solução analítica não concorda bem com dados experimentais para o caso de escoamentos turbulentos.

7.4 Simulações Numéricas de Escoamentos em Regime Turbulento

Este capítulo é encerrado apresentando-se quatro simulações de escoamentos incompressíveis em regime turbulento. O objetivo, nesta seção, é mostrar que os modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$, associados com o esquema de convecção HLP, são efetivos também numa variedade de situações bidimensionais. Os problemas escolhidos para as simulações foram os seguintes: a) jato sobre fronteiras rígidas (**MODELO I**), em que $U_0 = 30 \text{ ms}^{-1}$, $D = 6,0 \times 10^{-3} \text{ m}$, $Re = DU_0/\nu = 1,8 \times 10^5$ e $Fr = U_0/\sqrt{gD} = 1,23655 \times 10^2$; b) fluxo confinado sobre obstáculo (**MODELO II**), em que $U_0 = 2,5 \text{ ms}^{-1}$, $D = 1,0 \times 10^{-2} \text{ m}$ e $Re = DU_0/\nu = 2,5 \times 10^4$; c) jato sobre mesmo fluido em repouso (**MODELO III**), em que $U_0 = 2,0 \text{ ms}^{-1}$, $D = 2,5 \times 10^{-1} \text{ m}$, $Re = DU_0/\nu = 5,0 \times 10^4$ e $Fr = U_0/\sqrt{gD} \approx 1,2771$; e d) descarga numa corrente de mesmo fluido (**MODELO IV**), em que $U_0 = 0,227 \text{ ms}^{-1}$, $U_1 = 1,0 \text{ ms}^{-1}$, $D = 1,0 \times 10^{-2} \text{ m}$ e $Re = DU_1/\nu \approx 6,2 \times 10^3$.

Novamente, equipado com o esquema de convecção HLP para aproximar os termos não-lineares das equações de transporte e os modelos $\kappa - \varepsilon$ de turbulência para descrever os efeitos de turbulência sobre o escoamento médio, o código GENSMAC para problemas bidimensionais simulou os quatro modelos descritos acima. Nas simulações, os seguintes critérios de parada foram considerados: no problema **I** o processo terminou quando o fluido preencheu todo o domínio de solução; no problema **II**, o processo foi interrompido quando se detectou uma configuração completamente oscilatória, caracterizando o desprendimento de estruturas turbilhonares atrás do obstáculo; e nos problemas **III** e **IV**, fixou-se o tempo adimensional de simulação; $t = 128,8$ para o modelo **III** e $t = 64,0$ para o modelo **IV**. As malhas adotadas nas simulações de cada um dos modelos foram, respectivamente, 200×100 ($dx = dy = 0,00025 \text{ m}$) para o problema **I**; 240×150 ($dx = dy = 0,001 \text{ m}$) para o problema **II**; 200×200 ($dx = dy = 0,0005 \text{ m}$) para o problema **III**; e 200×200 ($dx = dy = 0,05 \text{ m}$) para o problema **IV**.

As geometrias, bem como os parâmetros envolvidos nas simulações dos quatro modelos considerados, estão ilustradas na figura 7.8, apresentada na sequência.

Figura 7.8: Geometrias e parâmetros envolvidos na simulação com modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ de quatro modelos bidimensionais, sendo dois modelos apresentando superfície livre e dois confinados.

Em cada um dos modelos de **I** a **IV**, utilizaram-se três partículas marcadoras nas células que descrevem as condições de entrada. Nos casos em que há fluido em repouso, como nos modelos **II**, **III** e **IV**, duas partículas foram colocadas nas células contendo fluido. Nos quatro modelos, a tolerância para resolver a equação de Poisson foi $1,0 \times 10^{-10}$, exigindo-se em média 100 iterações, a cada ciclo, no caso do modelo **I**, 200 no modelo **II**, 150 no modelo **III** e 600 no modelo **IV**. As marchas no tempo foi da ordem de $1,0 \times 10^{-5}$ para simular o problema **I**, $1,0 \times 10^{-4}$ para os problemas **II** e **IV**, e $1,0 \times 10^{-6}$ para o problema **III**.

As figuras apresentadas a seguir mostram, qualitativamente, os resultados das simulações em tempos adimensionais diferentes para os quatro problemas; lembrando que nessas figuras $\kappa - \varepsilon$ *alto* Re e $\kappa - \varepsilon$ *baixo* Re representam, respectivamente, os resultados obtidos com os modelos $\kappa - \varepsilon$ de turbulência para altos e baixos valores do número de Reynolds.

Figura 7.9: Simulação numérica do enchimento de container com os modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$, mostrando a superfície livre do fluido em vários tempos adimensionais: À esquerda $\kappa - \varepsilon$ *baixo* Re ; e à direita $\kappa - \varepsilon$ *alto* Re .

Figura 7.10: Simulação numérica do enchimento de container com os modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$, mostrando o campo de vorticidades em vários tempos adimensionais: À esquerda $\kappa - \varepsilon$ *baixa* Re ; e à direita $\kappa - \varepsilon$ *alta* Re .

Figura 7.11: Simulação numérica do desprendimento de estruturas turbilhonares em um obstáculo com os modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$, mostrando o campo de velocidades em vários tempos adimensionais: À esquerda $\kappa - \varepsilon$ *baixa* Re ; e à direita $\kappa - \varepsilon$ *alta* Re .

Figura 7.12: Simulação numérica do desprendimento de estruturas turbilhonares em um obstáculo com os modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$, mostrando o campo de vorticidades em vários tempos adimensionais: À esquerda $\kappa - \varepsilon$ *baixa* Re ; e à direita $\kappa - \varepsilon$ *alta* Re .

Figura 7.13: Simulação numérica com o modelo $\kappa - \varepsilon$ *baixa* Re da penetração de um jato plano no mesmo fluido em repouso, mostrando a superfície livre do fluido em vários tempos adimensionais.

Figura 7.14: Simulação numérica com o modelo $\kappa - \varepsilon$ *baixo* Re da penetração de um jato plano no mesmo fluido em repouso, mostrando o campo de vorticidades em vários tempos adimensionais.

Figura 7.15: Simulação numérica com o modelo $\kappa - \varepsilon$ *alto Re* da descarga de fluido numa corrente de mesmo fluido, mostrando em vários tempos adimensionais: À esquerda o campo de velocidades; e à direita o campo de vorticidades.

Com respeito às simulações apresentadas nas figuras precedentes, algumas conclusões podem ser extraídas desses testes numéricos.

O esquema HLPa assegurou soluções numéricas estáveis para esses quatro problemas particulares. Muito embora as condições de contorno implementadas nas fronteiras rígida e livre sejam uma questão polêmica, os comportamentos desses escoamentos obtidos com os modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ estão bem próximos daqueles derivados de simulações similares que aparecem na literatura.

Quanto à simulação do problema **I**, observa-se que o modelo $\kappa - \varepsilon$ *baixo Re* é mais difusivo do que o modelo $\kappa - \varepsilon$ *alto Re*. Esse caráter dissipativo do primeiro modelo pode ser perfeitamente atribuído à baixa resolução espacial junto aos contornos rígidos, ao tratamento das não-linearidades com o esquema HLPa e à presença do termo-fonte E na equação de dissipação de energia. Apesar de o modelo **II** não apresentar superfície livre, foi difícil simular a esteira de estruturas turbilhonares atrás do obstáculo com ambos os modelos de turbulência. É muito provável que o efeito de separação da camada-limite e a presença de quinas no obstáculo causaram as dificuldades. A partir das figuras 7.11 e 7.12, observa-se que a esteira, obtida com o modelo $\kappa - \varepsilon$ *alto Re*, apresenta aparentemente um movimento organizado. Embora isto pareça não ocorrer em situações práticas [Gerard (1966)], os resultados estão, qualitativamente, de acordo com a simulação apresentada em [Mohammadi & Pironneau (1997)]. As possíveis discrepâncias podem estar relacionadas às funções de parede e à difusão numérica promovida pelo esquema HLPa. Por outro lado, as simulações com o modelo $\kappa - \varepsilon$ *baixo Re* apresentaram uma esteira de estruturas turbilhonares mais consistente com a física do problema. Embora não se encontrem simulações similares à simulação do modelo **III**, acredita-se que o resultado numérico é fisicamente razoável. A partir das figuras 7.13 e 7.14, a interação da primeira estrutura turbilhonar com a superfície livre resultou na formação de duas outras estruturas turbilhonares semelhantes à primeira, migrando em direções de zonas de recirculação de fluido. Finalmente, comparado às simulações dos modelos anteriores, o modelo **IV** simulado com o modelo $\kappa - \varepsilon$ *alto Re* exigiu tempo elevado de computação. Como está mostrado na figura 7.15, observa-se uma região de recirculação atrás do jato. E esta estrutura está qualitativamente em concordância com os resultados apresentados por McGuirk e Rodi ([McGuirk & Rodi (1978)]).

Capítulo 8

Conclusões e Trabalhos Futuros

A despeito de os resultados e conclusões dos problemas de escoamento de fluidos analisados nesta tese terem sido discutidos nos capítulos precedentes, os objetivos neste capítulo são sintetizar os tópicos analisados, destacar as publicações resultantes da pesquisa, fornecer sugestões para os interessados na área e apresentar propostas para trabalhos futuros.

8.1 Síntese da Pesquisa

Modeladas por equações diferenciais parciais, as leis de conservação da mecânica do contínuo foram resumidas no capítulo 2 desta tese. Uma discussão breve de condições de contorno e modelos de turbulência foi também apresentada. As considerações teóricas relacionadas naquele capítulo resultaram de uma revisão bibliográfica bastante minuciosa sobre o tema proposto originalmente. Na opinião do autor, as referências lá citadas são bastante relevantes dos tópicos concernentes.

Com o objetivo de simular os efeitos de turbulência em escoamentos incompressíveis com superfície livre, discutiram-se, no capítulo 3, o procedimento computacional, as restrições no passo temporal, as condições iniciais e de contorno e a discretização por diferenças finitas das equações. Destaque especial foi dado às condições iniciais e de contorno e à discretização, termo-a-termo, das equações de conservação. Lá, deixou-se bem claro que as condições de contorno aplicadas na fronteira livre são, ainda, assunto de muita controvérsia, e, portanto, a pesquisa na busca de um tratamento mais adequado continua.

Em se tratando das condições de contorno na fronteira rígida, utilizando-se o modelo $\kappa - \varepsilon$ clássico, a metodologia e a implementação propostas neste trabalho foram diferentes das de uso habitual que aparecem na literatura em problemas confinados. Utilizou-se consistência com a derivação das leis de parede clássicas e com a discretização das equações médias de Navier-Stokes. A estratégia básica para a integração do sistema de EDP foi garantir a conservação da massa e da quantidade de movimento em todo o domínio de solução. As equações de transporte para as grandezas κ e ε foram resolvidas no domínio todo, exceto adjacientemente aos contornos sólidos onde se empregou a solução analítica das equações de camada-limite turbulenta. Por outro lado, no modelo para baixos números de Reynolds de Yang e Shih todas as equações de conservação foram integradas em todo o campo de escoamento, sem quaisquer hipóteses de equilíbrio na região interna da camada-limite. As constantes envolvidas nesse modelo foram aquelas derivadas da análise de Hoffman ([Hoffman (1975)]). Por fim, derivaram-se as equações de diferenças finitas correspondentes que estão implementadas atualmente nos códigos GENSMAC para problemas bidimensionais e com simetria radial.

Aproximações “upwind” para o tratamento dos termos convectivos foram apresentadas e analisadas no capítulo 4. Também, discutiram-se o conceito de variáveis normalizadas de Leonard e as condições necessárias e suficientes para a estabilidade, devidas a Gaskell e Lau. Em seguida, apresentaram-se os esquemas de convecção específicos FOU, HIBRID, CD, QUICK, SMART, HPLA e VONOS adotados no trabalho. Discutiram-se em detalhes as aproximações e discretizações das derivadas convectivas e, finalmente, comentou-se sobre a aplicação dos esquemas de três pontos nas células computacionais adjacentes aos contornos.

Analisou-se, no capítulo 5, a aplicação dos algoritmos “upwind” na simulação, em regime laminar, de três tipos de problemas com superfície livre: as estruturas do ressalto hidráulico circular; o espalhamento de camada fina de fluido sobre superfície rígida; e os experimentos de Taylor. Boa parte dos resultados numéricos apresentados naquele capítulo foi discutida nas comunicações [Cuminato et al. (1999)], [Castelo et al. (1999a)], [Ferreira et al. (1999)] e [Ferreira et al. (2000c)], e sintetizada nas publicações [Ferreira et al. (2000a)] e [Ferreira et al. (2000f)].

Os desempenhos dos sete esquemas analisados no capítulo 4 foram investigados no capítulo 6 para o caso de seis problemas tridimensionais-teste: dois jatos, um cilíndrico e outro planar; dois tipos de jatos oscilantes; o ressalto hidráulico circular; e um jato sobre o mesmo fluido em repouso. Muitos dos resultados das simulações numéricas lá apresentados foram discutidos também nas comunicações [Ferreira et al. (1999)] e [Cuminato et al. (2000)], e resumidos nas publicações [Ferreira et al. (2000c)] e [Ferreira et al. (2000f)].

E, finalmente, apresentaram-se no capítulo 7 algumas simulações numéricas utilizando-se os modelos $\kappa - \varepsilon$ de turbulência implementados nos códigos GENSMAC para problemas bidimensionais e com simetria radial. Mostrou-se a capacidade desses códigos em simular a dinâmica da turbulência nos problemas transientes envolvendo superfícies livres. Alguns dos resultados numéricos principais lá apresentados foram discutidos nas comunicações [Ferreira et al. (1998)], [Ferreira et al. (2000b)], [Ferreira et al. (2000d)], [Ferreira et al. (2000e)], [Ferreira et al. (2001a)] e [Ferreira et al. (2001b)], e sintetizados nas publicações [Ferreira et al. (2000e)], [Ferreira et al. (2000f)] e [Ferreira et al. (2001c)].

8.2 Conclusões e Sugestões

Os algoritmos de convecção limitados e de alta ordem SMART, HPLA e VONOS e os modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ particulares, o clássico e o de Yang e Shih, analisados e implementados neste trabalho são componentes vitais quando se pretende compreender os fenômenos complexos que ocorrem nos escoamentos de fluidos incompressíveis, com superfície livre e a números de Reynolds elevados. Entretanto, antes de tais ferramentas serem utilizadas em práticas de engenharia, faz-se necessário examinar seus desempenhos numa variedade de situações. Para esses propósitos, várias simulações numéricas de escoamentos incompressíveis com superfície livre foram apresentadas, desde simulações do regime laminar até simulações do regime turbulento. As conclusões principais que decorrem do estudo podem ser resumidas como segue.

- Os esquemas de primeira ordem FOU e HYBRID devem ser considerados como de interesse histórico na evolução dos esquemas de convecção em CFD. A aplicação indiscriminada desses algoritmos deve ser feita com muita cautela pois, como foi comprovado nos

capítulos 5 e 6, os efeitos da viscosidade artificial sobre a solução podem ser devastadores. Tomando-se como base as simulações apresentadas neste trabalho, recomenda-se que os praticantes dessas técnicas devam estar cientes de que haverá geralmente redução na precisão em favor da estabilidade numérica. Deve-se pensar, portanto, numa justificativa rigorosa deste compromisso.

- Os resultados numéricos mostraram que é extremamente benéfico estimar os termos não-lineares das equações de transporte por algoritmos “upwind” limitados e de ordens elevadas. As propriedades dissipativas dessas aproximações são suficientes para controlar, de maneira adequada, as possíveis oscilações/instabilidades produzidas pelas equações discretas implementadas neste trabalho. Entretanto, os esquemas CD e QUICK devem ser aplicados com precaução, uma vez que eles não satisfazem o critério CBC incondicionalmente. Embora os esquemas SMART e HLPa tenham tido um desempenho satisfatório nos problemas transientes e com superfície livre investigados neste trabalho, o esquema VONOS mostrou ser o mais indicado para tais problemas. Sugere-se adotar esse algoritmo como o padrão em modelos de turbulência que envolvem EDPs de transporte.

- Quando as equações dos modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ são integradas na camada viscosa, é crucial que o número de Reynolds local y^+ seja muito menor que 1 para reduzir os erros a um nível aceitável. Se essa restrição não é satisfeita, os erros na solução por toda a camada-limite turbulenta podem ser bastante significativos a ponto de comprometer a precisão no domínio inteiro.

- Muito embora a questão dos erros de discretização e das condições do contorno nas fronteiras livres e rígidas seja ainda um assunto de bastante pesquisa, a experiência com os modelos $\kappa - \varepsilon$, associados aos esquemas de convecção monotônicos e antidifusivos, é encorajadora. Na opinião do autor, tudo indica que, tomando-se alguns cuidados, tais modelos são, de fato, efetivos em refletir a complexidade da turbulência nos problemas com superfícies livres. No entanto, antes de se extrair conclusões definitivas, mais pesquisas são necessárias para o entendimento e a validação dos modelos. Recomenda-se tratar as condições de contorno com muito cuidado, principalmente aquelas associadas à fronteira rígida e escolher passos temporais (δt) suficientemente pequeno, especialmente no modelo de Yang e Shih.

- Não se deve abandonar a idéia de que os modelos $\kappa - \varepsilon$ de turbulência não são completamente fundamentados na física do problema, mas sim, em grande parte, em modelos matemáticos. Entretanto, quando tais modelos são aplicados na simulação de escoamentos turbulentos com superfícies livres, seus parâmetros e/ou funções devem ser calibrados, de maneira que os resultados numéricos concordem com dados experimentais. Assim, para melhorar os resultados numéricos de escoamentos incompressíveis com superfícies livres, o usuário está à vontade para adicionar, subtrair ou modificar seus parâmetros e/ou funções.

8.3 Contribuição

A presente tese contribuiu no campo de CFD de duas maneiras:

- Quanto ao tratamento das não-linearidades nas equações de conservação, algoritmos “upwind” foram implementados e testados nos códigos GENSMAC para evitar instabilidades/oscilações nas soluções numéricas e, ao mesmo tempo, adicionar pouca viscosidade artificial em problemas bidimensionais, com simetria radial e tridimensionais.

- Sobre a simulação da dinâmica da turbulência, dois modelos tipo $\kappa - \varepsilon$ foram implementados nos códigos GENSMAC para problemas bidimensionais e com simetria radial, com o objetivo de simular os efeitos de turbulência sobre o comportamento médio do escoamento.

Ambos os esquemas de convecção e os modelos de turbulência investigados e implementados neste trabalho oferecem ferramentas indispensáveis para o tratamento numérico de uma ampla variedade de escoamentos transientes com superfícies livres. Para exemplificar a utilidade dessas ferramentas, destaca-se o uso das implementações dos esquemas HLPa e VONOS na simulação de escoamentos com influência de tensão superficial ([Mangiavacchi et al. (2000)], [Mangiavacchi et al. (2001)] e [Sousa et al. (2001)]), várias fases ([Santos (2001)]), temperatura ([Silva et al. (2001)]) e de efeitos não-newtonianos ([Tomé et al. (2000b)], [Grossi et al. (2001)] e [Siquieri et al. (2001)]).

Acredita-se que num futuro próximo, com os avanços dos métodos numéricos associados ao progresso contínuo dos computadores modernos, será possível resolver numericamente muitos escoamentos tridimensionais com superfície livre, a números de Reynolds elevados e em geometrias mais complicadas.

8.4 Trabalhos Futuros

Os resultados numéricos obtidos neste trabalho podem ser modificados, melhorados e generalizados de várias maneiras, sobretudo no que diz respeito a algoritmos de convecção e modelos $\kappa - \varepsilon$ de turbulência. A seguir, os aspectos mais relevantes dos temas que serão considerados nos trabalhos futuros são discutidos.

- Os esquemas “upwind” limitados e de alta ordem podem ser aplicados também numa variedade de problemas com superfície livre. Por exemplo, os escoamentos envolvendo transferência de calor, os fenômenos de convecção e difusão que ocorrem nos fluidos não-newtonianos com efeitos de elasticidade e os problemas multifásicos. Em particular, uma pesquisa bastante interessante é equipar o código GENSMAC atual com a equação da energia para investigar a transferência de calor nos escoamentos radiais, em analogia à comparação feita com os resultados analíticos de Watson ([Watson (1964)]). Para tanto, a solução teórica apresentada por Chaudhury ([Chaudhury (1964)]) é o ponto de partida.

- O problema fundamental da precisão dos modelos de convecção em escoamentos tridimensionais realísticos é um assunto de extrema importância e que precisa ser bem explorado. A simulação das várias estruturas poligonais do ressalto hidráulico circular ([Ellegaard et al. (1998)], [Ellegaard et al. (1999)]) constitui um excelente exemplo de validação.

- No contexto de discretização das equações de conservação por volumes finitos em malhas não-estruturadas, a necessidade de estimativas precisas para os termos não-lineares é um tema atual e que pode ser investigado perfeitamente utilizando-se os esquemas convectivos considerados no capítulo 4.

- Os códigos GENSMAC atuais empregam malhas uniformes para descrever o domínio de solução. Um refinamento localizado da malha computacional é, então, fator essencial para uma análise mais elaborada dos modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ quando aplicados nas vizinhanças dos contornos rígidos e camadas cisalhantes. É muito importante resolver com precisão a camada-limite, pois é nela que gradientes elevados se desenvolvem.

- Generalizações das implementações dos modelos de turbulência analisados nesta tese são naturais em situações tridimensionais. O cuidado maior que se deve tomar é com o tratamento das condições de contorno nas fronteiras livre e rígida.

- As constantes envolvidas nos modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ ([Launder & Spalding (1974)], [Hoffman (1975)]) foram deduzidas a partir de comparações entre análises e experimentos para problemas que são muito diferentes dos considerados neste trabalho. Portanto, a comparação dos resultados obtidos, utilizando-se tais modelos de turbulência, com dados experimentais e analíticos (se existirem) em problemas com superfície livre é uma questão muito importante e merece ser investigada com bastante rigor. Para isso, a adequação das constantes envolvidas nos modelos a problemas específicos exigirá atenção especial.

- Atualmente, vários pesquisadores (ver, por exemplo, [Merci et al. (2000)]) acreditam que os termos-fonte nos modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ para baixos valores do número de Reynolds requerem tratamento cuidadoso, quando se pretende derivar discretizações estáveis das equações de conservação. Esse assunto desperta bastante curiosidade na comunidade científica em CFD e merece ser investigado no contexto desta tese.

- Segundo vários pesquisadores na área de modelagem da turbulência (ver, por exemplo, [Thangam & Speziale (1992)]), as principais origens de erros nos modelos $\kappa - \varepsilon$ estudados podem ser atribuídas ao uso de uma viscosidade turbulenta isotrópica. A introdução de uma viscosidade turbulenta mais geral nos modelos permitirá dar continuidade à pesquisa em busca de melhores resultados.

E, para concluir, tomando-se por base os desempenhos das técnicas numéricas analisadas e implementadas nesta tese, acredita-se que resultados computacionais bem mais significativos de escoamentos incompressíveis com superfície livre e a números de Reynolds elevados podem ser alcançados nas direções destas propostas.

Referências Bibliográficas

- [Abe et al. (1994)] ABE, K., KONDOH, T., NAGANO, Y., 1994. A new turbulence model for predicting fluid flow and heat transfer in separating and reattaching flows –I. Flow field calculations. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **1**, 139-151.
- [Acheson (1990)] ACHESON, D.J., 1990. *Elementary fluid dynamics*. Claradon Press, Oxford.
- [Amano & Brandt (1984)] AMANO, R.S., BRANDT, H., 1984. Numerical study of turbulent axisymmetric jets impinging on a flat plate and flowing into an axisymmetric cavity. *J. Fluids Engrg.*, **106**, 410-417.
- [Ames (1965)] AMES, W.F., 1965. *Nonlinear partial differential equations in engineering, Vol. I*. Academic Press, New York.
- [Ames (1972)] AMES, W.F., 1972. *Nonlinear partial differential equations in engineering, Vol. II*. Academic Press, New York.
- [Amsden & Harlow (1968)] AMSDEN, A.A., HARLOW, F.H., 1968. Transport of turbulence in numerical fluid dynamics. *J. Comput. Phys.*, **3**, 94-110.
- [Amsden & Harlow (1970)] AMSDEN, A.A., HARLOW, F.H., 1970. A simplified MAC technique for incompressible fluid flow calculations. *J. Comput. Phys.*, **6**, 332-335.
- [Anderson et al. (1984)] ANDERSON, D.A., TANNEHILL, J.C., PLETCHER, R.H., 1984. *Computational fluid mechanics and heat transfer*. Hemisphere Publishing Corporation, Nova York.
- [Aris (1962)] ARIS, R., 1962. *Vectors, tensors, and the basic equation of fluid mechanics*. Dover, New York.

- [Armenio (1997)] ARMENIO, V., 1997. An improved MAC method (SIMAC) for unsteady high-Reynolds free surface Flows. *Int. J. Numer. Meths. Fluids*, **24**, 185-214.
- [Bohr et al. (1993)] BOHR, T., DIMON, P., PUTKARADZE, V., 1993. Shallow-water approach to the circular hydraulic jump. *J. Fluid Mech.*, **254**, 635-648.
- [Bohr et al. (1996)] BOHR, T., ELLEGAARD, C., HANSEN, A.E., HAANING, A., 1996. Hydraulic jumps, flow separation wave breaking: An experimental study. *Physica B*, **228**, 1-10.
- [Benim & Zinser (1985)] BENIM, A.C., ZINSER, W., 1995. Investigation into the finite element analysis of confined turbulent flows using a $\kappa - \varepsilon$ model of turbulence. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, **51**, 507-523.
- [Boris & Book (1973)] BORIS, J.P., BOOK, D.L., 1973. Flux-corrected I. SHASTA, a fluid transport algorithm that works. *J. Comput. Phys.*, **11**, 38-69.
- [Boussinesq (1877)] BOUSSINESQ, J., 1877. Memoires presentes par divers savants sciences mathematique at physiques theorie de l'ecoulement tourbillant. *Academie des Sciences, Paris*, **23**, 46 p..
- [Bowles & Smith (1992)] BOWLES R.I., SMITH F.T., 1992. The standing hydraulic jump: theory, computations and comparisons with experiments, *J. Fluid Mech.*, **242**, 145-168.
- [Bradshaw et al.(1967)] BRADSHAW, P., FERRISS, D.H., ATWELL, N.P., 1967. Calculation of boundary layer development using the turbulent energy equation. *J. Fluid Mech.*, **28**, 593-616.
- [Bradshaw (1976)] BRADSHAW, P., 1976. *Turbulence. Topics in Applied Physics V. 12*, Springer-Verlag, Berlin.
- [Buckmaster (1973)] BUCKMASTER, J., 1973. The buckling of thin viscous jets. *J. Fluid Mech.*, **61**, 449-463.
- [Castelo et al. (1999)] CASTELO, A.F., MANGIAVACCHI, N., CUMINATO, J.A., FORTUNA, A.O., OLIVEIRA, J., TOMÉ, M.F., MACKEE, S., 1999. Surface tension implementation for GENSMAC2D. *XV Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica-COBEM*, Águas de Lindóia, Brasil.

- [Castelo et al. (1999a)] CASTELO, A.F., FERREIRA, V.G., CUMINATO, J.A., MANGIAVACCHI, N., FORTUNA, A.O., TOMÉ, M.F., 1999. Up-wind based schemes in the simulation of free surface flows. *ITLA '99, III Italian-Latinoamerican Conference on Applied and Industrial Mathematics*, Petrópolis, Brasil.
- [Chan (1975)] CHAN, R.K.C., 1975. A generalised arbitrary Lagrangian-Eulerian method for incompressible flow with sharp interfaces. *J. Comput. Phys.*, **17**, 311-331.
- [Chaudhury (1964)] CHAUDHURY, Z.H., 1964. Heat transfer in a radial liquid jet. *J. Fluid Mech.*, **20**, 501-511.
- [Chen & Patel. (1985)] CHEN, H.C., PATEL, V.C., 1985. Calculation of trailing-edge, stern and wake flows by a time-marching solution of the partially-parabolic equations. IIHR Report, **285**, Iowa Inst, Hydr. Research, University of Iowa.
- [Chen & Patel (1988)] CHEN, H.C. PATEL, V.C., 1988. Near-wall turbulence models for complex flows including separation. *AIAA J.*, **26**, 641-648.
- [Cebeci & Smith (1974)] CEBECI, T., SMITH, A.M.O., 1974. Analysis of turbulent boundary layer. *Series in Applied Mathematics and Mechanics*, V. XV. Academic Press, Orlando.
- [Choi & Moin (1994)] CHOI, H., MOIN, P., 1994. Effects of the computational time step on numerical solutions of turbulent flow. *J. Comput. Phys.*, **113**, 1-4.
- [Chorin (1967)] CHORIN, A.J., 1967. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *J. Comput. Phys.*, **2**, 12-26.
- [Chorin (1968)] CHORIN, A.J., 1968. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Math. Comp.*, **22**, 745-762.
- [Coles & Hirst (1968)] COLES, D.E., HIRST, E.A., 1968. Computation of turbulent boundary layers. *AFOSRIFP Stanford Conference*, Proc. 1968 Conf. vol. 2, Stanford Univ., Stanford, Calif.
- [Courant et al. (1952)] COURANT, R., ISAACSON, E., REES, M., 1952. On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences. *Commun. Pure Appl. Math.*, **5**, 243-255.

- [Courant & Hilbert (1962)] COURANT, R., HILBERT, D., 1962. *Methods of Mathematical Physics*, V. 2. Wiley, New York.
- [Courant et al. (1967)] COURANT, R., FRIEDRICHS, K. LEWY, H., 1967. On the partial differential equations of mathematical physics. *IBM J. Research and Development*, **11**, 215-(234).
- [Craik et al. (1981)] CRAIK, A.D., LATHAM, R.C., FAWKES, M.J., GRIBBON, W.F., 1981. The circular hydraulic jump. *J. Fluid Mech.*, **112**, 347-362.
- [Cruickshank (1988)] CRUICKSHANK, J.O., 1988. Low-Reynolds-number instabilities in stagnating jet flows. *J. Fluid Mech.*, **193**, 111-127.
- [Cuminato et al. (1999)] CUMINATO, J.A., CASTELO A.F., FERREIRA, V.G., TOMÉ, M.F., 1999. Up-wind based schemes in the numerical simulation of free surface flows. *18th Biennial Conference on Numerical Analysis*, Dundee, Scotland.
- [Cuminato et al. (2000)] CUMINATO, J.A., FERREIRA, V.G., 2000. Numerical simulations of three-dimensional free surface flows using high order upwind schemes. *III Panamerican Workshop of Computational and Applied Mathematics*, Trujillo, Peru.
- [Daly & Harlow (1970)] DALY, B.J., HARLOW, F.H., 1970. Transport equations in turbulence. *Phys. Fluids*, **13**, 2634-2649.
- [Dartzi et al. (1998)] DARTZI, P., YANG, Y.S., CHANG, C.H., 1998. Computation of internal flow with free surface using artificial compressibility. *Numer. Heat Transfer B*, **33**, 119-134.
- [Deardorff (1970)] DEARDORFF, J.W., 1970. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds Numbers. *J. Fluid Mech.*, **41**, 453-480.
- [Dennis et al. (1979)] DENNIS, C.R., INGHAM, D.B., COOK, R.N., 1979. Finite-difference methods for calculating flows in three dimensions. *J. Comput. Phys.*, **33**, 325-339.
- [deVahl & Mallison (1976)] DEVAHL, G., MALLISON, G.D., 1976. An evaluation of upwind and central difference approximations by a study of recirculating flow. *Comp. Fluids*, **4**, 29-32.

- [Deville (1974)] DEVILLE, M.O., 1974. Numerical experiments on the MAC code for a slow flow. *J. Comput. Phys.*, **15**, 362-374.
- [Dubois et al. (1999)] DUBOIS, T., JAUBERTEAU, F., TEMAN, R., 1999. *Dynamic multi-level methods and the numerical simulation of turbulence*. University Press, Cambridge.
- [Durbin (1996)] DURBIN, P.A., 1996. On the $\kappa - \varepsilon$ stagnation point anomaly. *J. Heat and Fluid Flow*, **17**, 89-90. Cambridge.
- [Elkaim et al. (1992)] ELKAIM, D., REGGIO, M., CAMARERO, R., 1992. Simulating two-dimensional turbulent flow by using the $\kappa - \varepsilon$ model and the vorticity-stream function formulation. *Int. J. Numer. Meths. Fluids*, **14**, 961-980.
- [Ellegaard et al. (1998)] ELLEGAARD, C. HANSEN, A.E., HAANING, A., HANSEN, K. MARCUSSEN, A, BOHR, T., LUNDBEK, J., WATANABE, S., 1998. Creating corners in kitchen sinks. *Nature*, **392**, 787-788.
- [Ellegaard et al. (1999)] ELLEGAARD, C. HANSEN, A.E., HAANING, A., HANSEN, K. MARCUSSEN, A, BOHR, T., 1999. Cover illustration: Poligonal hydraulic jumps. *Non-linearity*, **12**, 1-7.
- [Eric (1994)] ERIC, Y.T., 1994. A second-order projection for the incompressible Navier-Stokes equations in arbitrary domains. *J. Comput. Phys.*, **115**, 147-152.
- [Ern & Smooke (1993)] ERN, A., SMOOKE, M., 1993. Vorticity-velocity formulation for three-dimensional steady compressible flows. *J. Comput. Phys.*, **105**, 58-71.
- [ETT (2000)] EDITADO POR SILVEIRA NETO, A., 2000. *Anais da II Escola brasileira de primavera transição e turbulência*, Uberlândia.
- [Ferreira et al. (1998)] FERREIRA, V.G., CUMINATO, J.A., CASTELO, A.F., FORTUNA, A.O., TOMÉ M.F., 1998. Simulação de escoamentos turbulentos com superfícies livres, *ERMAC 98, III Colóquio de Pós-Graduação e Pesquisa em Matemática Aplicada e Computacional*, Rio Preto, Brasil.

- [Ferreira et al. (1999)] FERREIRA, V.G., TOMÉ M.F., FORTUNA, A.O., CASTELO A.F., CUMINATO, J.A., MANGIAVACCHI N., 1999. An evaluation of upwind-based schemes for three-dimensional free surface flows. *XV Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica-COBEM*, Águas de Lindóia, Brasil.
- [Ferreira et al. (2000a)] FERREIRA, V.G., TOMÉ M.F., MANGIAVACCHI N., CASTELO, A.F., CUMINATO, J.A., FORTUNA, A.O., MCKEE, S., 2000. High order upwinding and the hydraulic jump, *Cadernos de Computação do ICMC-USP*, Relatório Técnico, **01** (2000), 201-231.
- [Ferreira et al. (2000b)] FERREIRA, V.G., CUMINATO, J.A., TOMÉ M.F., 2000. Análise e implementação de um modelo de turbulência para escoamentos bi-dimensionais com superfícies livres, *Anais do V Workshop de Teses e Dissertações em Andamento - ICMC/USP*, São Carlos, Brasil.
- [Ferreira et al. (2000c)] FERREIRA, V.G., TOMÉ M.F., MANGIAVACCHI N., FORTUNA, A.O., CUMINATO, J.A., CASTELO, A.F., MCKEE, S., 2000. A comparative study of high-order upwind schemes on axisymmetric free surface flows. *Iconne 2000, Third International Conference on Nonlinear Dynamics, Chaos, Control and Their Applications in Engineering Sciences*, Campos do Jordão, Brazil.
- [Ferreira et al. (2000d)] FERREIRA, V.G., TOMÉ M.F., CUMINATO, J.A., MANGIAVACCHI N., CASTELO, A.F., FORTUNA, A.O., 2000. Análise e implementação de modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ para simulação de escoamentos incompressíveis envolvendo superfícies livres. *XXIII CNMAC, Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional*, Santos, Brasil.
- [Ferreira et al. (2000e)] FERREIRA, V.G., CUMINATO, J.A., TOMÉ M.F., MANGIAVACCHI N., FORTUNA, A.O., CASTELO, A.F., NONATO, L.G., 2000. Simulação de escoamentos incompressíveis com superfícies livres e rígidas utilizando modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$. *Transição e Turbulência*, II Escola Brasileira de Primavera, Uberlândia.
- [Ferreira et al. (2000f)] FERREIRA, V.G., TOMÉ M.F., MANGIAVACCHI N., CASTELO, A.F., CUMINATO, J.A., FORTUNA, A.O., MCKEE, S., 2000. High order upwinding and the hydraulic jump, à aparecer em *Int. J. Numer. Meths. Fluids*.

- [Ferreira et al. (2001a)] FERREIRA, V.G., CUMINATO, J.A., TOMÉ M.F., 2001. Simulação numérica de escoamentos com superfícies livres no regime de números de Reynolds elevados, *Anais do VI Workshop de Teses e Dissertações em Andamento - ICMC/USP*, São Carlos, Brasil.
- [Ferreira et al. (2001b)] FERREIRA, V.G., MANGIAVACCHI N., FORTUNA, A.O., TOMÉ M.F., CASTELO, A.F., CUMINATO, J.A., NONATO, L.G., MCKEE, S., 2001. Numerical simulation of fluid injection and container filling processes, *CAIP'2001 - 5º Congreso Interamericano de Computacion Aplicada a la Industria de Procesos*, Paper RA N° 129, aceito para apresentação.
- [Ferreira et al. (2001c)] FERREIRA, V.G., CUMINATO, J.A., TOMÉ M.F., FORTUNA, A.O., MANGIAVACCHI N., CASTELO, A.F., MCKEE, S., 2000. Análise e implementação de modelos de turbulência $\kappa - \varepsilon$ para simulação de escoamentos incompressíveis envolvendo superfícies livres e rígidas, *Tendências em Matemática Aplicada e Computacional (Tema), Seleta do XXIII CNMAC*, **2**, 81-90.
- [Ferziger et al. (1982)] FERZIGER, J.H., LYRIO, A.A., BARDINA, J.G., 1982. New skin friction and entrainment correlations for turbulent boundary layers. *J. Fluids Engrg.*, **104**, 407-544.
- [Ferziger (1987)] FERZIGER, J.H., 1987. Simulation of incompressible turbulent flows. *J. Comput. Phys.*, **69**, 1-48.
- [Ferziger & Perić (1996)] FERZIGER, J.H., PERIĆ, M., 1996. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer, Germany.
- [Ferziger (2000)] FERZIGER, J.H., 2000. Simulation of turbulence techniques and possibilities. *Brazil Spring School on Turbulence and Transition*, A Short Course, Uberlândia, Brazil.
- [Fletcher (1991)] FLETCHER, C.A.J., 1991. *Computational techniques for fluid flows*. V. I e II, 2o. ed., Springer-Verlag, Heidelberg.

- [Frisch (1995)] FRISCH, U., 1995. *Turbulence*. Cambridge University Press, Nova York.
- [Fromm & Harlow (1963)] FROMM, J.E., HARLOW, F., 1963. Numerical solution of the problem of vortex street development. *Phys. Fluids*, **6**, 975-982.
- [Fromm (1968)] FROMM, J.E., 1968. A method for reducing dispersion in convective difference schemes. *J. Comput. Phys.*, **3**, 217-223.
- [Gaskell & Lau (1988)] GASKELL, P.H., LAU, A.K., 1988. Curvature-compensated convective transport: SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm. *Int. J. Numer. Meths. Fluids*, **8**, 617-641.
- [Gerrard (1966)] GERRARD, J.H., 1966 The mechanics of the formation region of vortices behind bluff bodies. *J. Fluid Mech.*, **25**, 401-413.
- [Goda (1979)] GODA, K., 1979. A multistep technique with implicit difference schemes for calculating two-or three-dimensional cavity flows. *J. Comput. Phys.*, **30**, 76-95.
- [Goldberg (1996)] GOLDBERG, U.C., 1996. Exploring a three-equation $R-\kappa-\varepsilon$ turbulence model. *J. Fluids Engrg.*, **118**, 795-799.
- [Gresho & Sani (1987)] GRESHO, P.M., SANI R.L., 1991. On pressure boundary conditions for the incompressible Navier-Stokes equations. *Int. J. Numer. Meths. Fluids*, **7**, 1111-1145.
- [Gresho (1991)] GRESHO, P.M., 1991. Incompressible fluid dynamics: some fundamental formulation issues. *An. Rev. Fluid Mech.*, **23**, 413-453.
- [Griebel et al. (1998)] GRIEBEL, M., DORNSEIFER, T., NEUNHOEFFER, T. 1998. *Numerical simulation in fluid dynamics - A practical introduction*. SIAM, Philadelphia.
- [Grossi et al. (2001)] GROSSI, L., TOMÉ, M.F., CASTELO, A.F., MANGIAVACCHI, N., CUMINATO, J.A., MCKEE, S. 2001. A numerical technique for simulating viscoelastic free surface flows, *Proceedings CILAMCE 2001*, submetido.
- [Guj & Stella (1993)] GUJ, G., STELLA, F., 1993. A vorticity-velocity method for the numerical solution of 3D incompressible flows. *J. Comput. Phys.*, **106**, 286-298.

- [Glauert (1956)] GLAUERT, M.B., 1956. The wall jet. *J. Fluid Mech.*, **1**, 625-643.
- [Hanjalić & Launder (1972)] HANJALIĆ, K., LAUDER, B.E., 1972. A Reynolds stress model of turbulence and its applications to thin shear layer flows. *J. Fluid Mech.*, **52**, 609-620.
- [Harlow & Nakayama (1967)] HARLOW, F.H., NAKAYAMA, P.I., 1967. Turbulence transport equations. *Phys. Fluids*, **10**, 2323-2333.
- [Harlow & Welch (1965)] HARLOW, F.H., WELCH, J.E., 1965. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids*, **8**, 2182-2189.
- [Harten (1983)] HARTEN, A., 1983. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, **49**, 357-393.
- [Heywood & Rannacher (1986)] HEYWOOD, J.G., RANNACHER, R., 1986. Finite element approximation of the nonstationary Navier-Stokes, Part II: stability of solutions and error estimates uniform in time. *SIAM J. Numer. Anal.*, **23**, 750-777.
- [Hinze (1975)] HINZE, J., 1975. *Turbulence*. McGraw-Hill.
- [Hirsch (1988)] HIRSCH, C., 1988. *Numerical computation of internal and external flows*. Volumes 1 e 2, John Wiley & Sons, Chichester.
- [Hirt (1968)] HIRT, C.W., 1968. Heuristic stability theory for finite-difference equations. *J. Comput. Phys.*, **2**, 339-355.
- [Hirt & Shannon (1968)] HIRT, C.W., SHANNON, J.P., 1968. Calculating three-dimensional flows around structures and over rough terrain. *J. Comput. Phys.*, **10**, 324-340.
- [Hirt & Cook (1972)] HIRT, C.W., COOK, J.L., 1972. Free surface stress conditions for incompressible-flow calculations. *J. Comput. Phys.*, **2**, 403-411.
- [Hirt et al. (1970)] HIRT, C.W., COOK, J.L., BUTLER, T.D., 1970. A Lagrangian method for calculating the dynamics of an incompressible fluid with free surface. *J. Comput. Phys.*, **5**, 103-124.

- [Hirt et al. (1974)] HIRT, C.W., AMSDEN, A.A., COOK, J.L., 1974. An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds. *J. Comput. Phys.*, **14**, 227-253.
- [Hirt & Nichols (1981)] HIRT, C.W., NICHOLS, B.D., 1981. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.*, **39**, 201-225.
- [Hoffman (1975)] HOFFMAN, G., 1975. Improved form of the low Reynolds number $\kappa - \varepsilon$ turbulence model. *Phys. Fluids*, **18**, 309-312.
- [Jasak (1996)] JASAK, H., 1996. *Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows*. PhD. Thesis, Dep. Mech. Engrg., Imperial College, England.
- [Jeffreys & Jeffreys (1956)] JEFFREYS, H., JEFFREYS, B., 1956. *Methods of mathematical physics*. 3o. ed. Cambridge University Press, Cambridge.
- [Jones & Launder (1972)] JONES, W.P., LAUNDER, B.E., 1972. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **15**, 301-314.
- [Kline et al. (1981)] KLINE, S.J., CANTWELL, B.J., LILLEY, G.M., 1981. *The 1980-81 AFORSHTTM-Stanford conference on complex turbulent flow: Comparison of computation and experiment I, II, III*, Thermosciences Division, Mechanical Engineering Department, Stanford University, Stanford.
- [Koh (2000)] KOH, Y.M., 2000. On boundary condition and numerical method for the unsteady incompressible Navier-Stokes equations. *Computers & Fluids*, **29**, 791-812.
- [Kurihara (1946)] KURIHARA, M., 1946. A consideration about hydraulic jump. *Rep. Res. Inst. Fluid Engrg.*, Kyusyu Imp. Univ., **3**, 11-25.
- [Ladau & Lifshitz (1980)] LADAU, L.D., LIFSHITZ, E.M., 1980. *Fluid mechanics*. 2o. ed. Pergamon Press, Oxford.
- [Launder & Spalding (1972)] LAUNDER, B.E., SPALDING, D.B., 1972. *Mathematical models of turbulence*. Academic Press, New York.

- [Launder & Spalding (1974)] LAUDER, B.E., SPALDING, D.B., 1974. The numerical computation of turbulent flows. *Int. J. Numer. Meths. Fluids*, **15**, 127-146.
- [Launder et al. (1975)] LAUDER, B.E., REECE, G.J., RODI, W., 1975. Progress in the development of a Reynolds-Stress turbulence closure. *J. Fluid Mech.*, **68**, 537-566.
- [Launder (1984)] LAUDER, B.E., 1984. *Second-moment closure: Methodology and practice*. Turbulence Model and Their Applications, Vol. 2, Editions Eyrolles, Paris.
- [Launder (1989)] LAUDER, B.E., 1989. Second-moment closure and its use in modelling turbulent industrial flows. *Int. J. Numer. Math. Fluids*, **9**, 693-985.
- [Launder & Kato (1993)] LAUDER, B.E., KATO, M., 1993. Modeling flow-induced oscillations in turbulent flow around a square cylinder. *ASME FED*. **157**, 189-199.
- [Lakshminarayana (1986)] LAKSHMINARAYANA, B., 1986. Turbulence modeling for complex shear flows. *AIAA J.*, **24**, 1900-1917.
- [Lemos (1992)] LEMOS, C.M., 1992. A Simple numerical technique for turbulent flows with free surfaces. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, **3**, 269-289.
- [Leonard (1979)] LEONARD, B.P., 1979. A Stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, **19**, 59-98.
- [Leonard (1980)] LEONARD, B.P., 1980. Note on the von Neumann stability of the explicit FTCS convective diffusion equation. *Appl. Math. Modelling*, **4**, 401-402.
- [Leonard (1988)] LEONARD, B.P., 1988. Simple high-accuracy resolution program for convective modeling of discontinuities. *Int. J. Numer. Meths. Fluids.*, **8**, 1291-1318.
- [Leonard & Drummond (1995)] LEONARD, B.P., DRUMMOND, J.E., 1995. Why you should not use “hybrid”, “power-law” or related exponential schemes for convective modeling - there are much better alternatives. *Int. J. Numer. Meths. Fluids*, **20**, 421-442.
- [Li et al. (1994)] LI, A., AHMIDI, G., BAYER, R., AND GAYNES, M., 1994. Aerosol particle deposition in an obstructed turbulent duct flow. *J. Aerosol. Sci.*, **25**, 91-102.

- [Lin (1945)] LIN, C.C., 1945. On the stability of two-dimensional parallel flows. Part III - Stability in a viscous fluid. *Quart. Appl. Math.*, **4**, 277-301.
- [Liu & Lienhard (1993)] LIU, X., LIENHARD, V., 1993. The hydraulic jet impingement and in other thin liquid films. *Exp. Fluids*, **15**, 108-116.
- [Lumley et al. (1999)] LUMLEY, J.L., YANG, Z., SHIH, T.H., 1999. A length-scale equation. *Flow, Turbulence and Combustion*, **63**, 1-21.
- [Mangiacavacchi et al. (2000)] MANGIAVACCHI, N., CASTELO, A.F., TOMÉ, M.F., CUMINATO, J.A., FORTUNA, A.O., FERREIRA, V.G., NONATO, L.G., MCKEE, S., 2000. Numerical simulation of surface tension dominated axisymmetric free surface flows. *Proceedings ENCIT 2000*.
- [Mangiacavacchi et al. (2001)] MANGIAVACCHI, N., SOUSA, F.S., CASTELO, A.F., NONATO, L.G., TOMÉ, M.F., CUMINATO, J.A., 2001. Simulation of 3-D free-surface flows with surface tension. *Proceedings COBEM 2001*, submetido.
- [Mallison & Davis (1977)] MALLISON, G., DAVIS, DE V., 1977. Three-dimensional natural convection in a box: a numerical study. *J. Fluid Mech.*, **83**, 1-31.
- [Manouzi & Fortin (1991)] MANOUZI, H., FORTIN, M., 1991. A treatment of wall boundaries for turbulent flows by the use of a transmission finite element method. *Int. J. Numer. Meths. Fluids.*, **31**, 113-126.
- [Mansour et al. (1989)] MANSOUR, N.N., KIM, J., MOIN, P., 1989 Near-wall $\kappa - \varepsilon$ turbulence modeling. *AIAA J.*, **27**, 1068-1073.
- [McComb (1990)] MCCOMB, W.D., 1990. *The physics of fluid turbulence*. Oxford University Press, New York.
- [McGuirk & Rodi (1978)] MCGUIRK, J.J., RODI, W., 1978. A depth-averaged mathematical model for the near field of side discharges into open channel flow. *J. Fluid Mech.*, **86**, 761-781.
- [Mellor & Herring (1973)] MELLOR, G.L., HERRING, H.J., 1973. A survey of the mean turbulent field closure models. *AIAA J.*, **11**, 590-599.

- [Meneveau & Katz (2000)] MENEVEAU, C., KATZ, J., 2000. Scale-invariance and turbulence models for large-eddy simulation. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **32**, 1-32.
- [Merci et al. (2000)] MERCI, B., STEELANT, J., VIERENDEELS, J., RIEMSLAGH, K., DICK, E., 2000. Computational treatment of source terms in two-equation turbulence models. *AIAA J.*, **38**, 2085-2093.
- [Mohammadi & Pironneau (1997)] MOHAMMADI, B., PIRONNEAU, O., 1997. Unsteady separated turbulent flows computation with wall-laws and $\kappa - \varepsilon$ model. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 148, 393-405.
- [Moin & Kim (1982)] MOIN, P., KIM, J., 1982. Numerical investigation of turbulent channel flow. *J. Fluid Mech.*, **118**, 341-347.
- [Na & Moin (1998)] NA, Y., MOIN, P., 1998. Direct numerical simulation of a separated turbulent boundary layer. *J. Fluid Mech.*, **370**, 175-201.
- [Nagano & Tagawa (1990)] NAGANO, Y., TAGAWA, P., 1990. An improved $\kappa - \varepsilon$ model for boundary layer flows. *J. Fluid Engrg.*, **112**, 33-39.
- [Nichols & Hirt (1973)] NICHOLS, B.D., HIRT, C.W., 1973. Calculating three-dimensional free surface flows in the vicinity of submerged and exposed structures. *J. Comput. Phys.*, **12**, 234-246.
- [Nickell et al. (1974)] NICKELL, R.E., TANNER, R.L., CASWELL, B., 1974. The solution of viscous incompressible jet and free-surface flows using finite-element methods. *J. Fluid Mech.*, **65**, 189-206.
- [Ng & Spalding (1972)] NG, K.H., SPALDING, D.B., 1972. Turbulence model for boundary layers near walls. *Phys. Fluids*, **15**, 20-30.
- [Norris & Reynolds (1975)] NORRIS, H.L., REYNOLDS, W.C., 1975. Turbulent channel flow with a moving wavy boundary. *Stanford Univ. Dept. Mech. Eng.*, **TR TF-7**.
- [Olsson & Turkdogan (1966)] OLSSON, R.G., TURKDOGAN, E.T., 1966. Radial spread of a liquid stream on a horizontal plate, *Nature*, **211**, 813-816.

- [Orszag & Patterson (1972)] ORSZAG, S.A., PATTERSON, G.S., 19672. Numerical simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence, *Phys. Rev. Lett.* , **28**, 76-79.
- [Panton (1984)] PANTON, R.L., 1984. *Incompressible flow*. John Wiley & Sons, New York.
- [Patankar et al. (1978)] PATANKAR, S.V., SPARROW, E.M., IVANOVIC, M., 1978. Thermal interaction among the confining walls of a turbulent recirculating flow. *Int. J. Heat Mass Trans.*, **24**, 269-274.
- [Patankar (1980)] PATANKAR, S.V., 1980. *Numerical heat transfer and fluid flows*. Hemisphere Publishing Co., New York.
- [Patel et al. (1985)] PATEL, V.C., WOLFGANG, R. AND SCHEUERER, J., 1985. Turbulence models for near-wall and low-Reynolds-number flows: a review. *AIAA, J.*, **23**, 1308-1319.
- [Patel & Chen (1987)] PATEL, V.C., CHEN, H.C., 1987. Turbulent wake of a flat plane. *AIAA, J.*, **25**, 1078-1085.
- [Peyret & Taylor (1983)] PEYRET, R., TAYLOR, T.D., 1983. *Computational methods for fluid flow*. Springer-Verlag, New York.
- [Pracht (1971)] PRACHT, W.E., 1971. A Numerical method for calculating transient creep flows. *J. Comput. Phys.*, **7**, 46-60.
- [Price et al. (1966)] PRICE, H.S., VARGA, R.S., WARREN, J.E., 1966. Applications of oscillation matrices to diffusion-correction equations. *J. Math. Physics*, **45**, 301-311.
- [Pulliam (1986)] PULLIAM, T.H., 1986. Artificial dissipation for the Euler equations. *AIAA J.*, **12**, 1931-1940.
- [Raithby (1976)] RAITHBY, G.D., 1976. A critical evaluation of upstream differencing applied to problems involving fluid flow. *Comp. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, **9**, 75-86.
- [Ramaswamy & Kawahara (1987)] RAMASWAMY, B. KAWAHARA, M, 1987. Lagrangian finite element analysis applied to viscous free surface fluid flow. *Int. J. Numer. Meths. Fluids*, **7**, 953-984.

- [Reynolds (1895)] REYNOLDS, O., 1895. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Phil. Trans. Roy. Soc. London Ser. A*, **186**, 123-164.
- [Reynolds (1976)] REYNOLDS, W.C., 1976. Computations of turbulent flows. *Annual Review Fluid Mech.*, **8**, 183-208.
- [Robinson & Hassan (1994)] ROBINSON, D.I., HASSAN, H.A., 1994. Two-equation turbulence closure model for wall bounded and free shear flows. *AIAA J.*, **115**, 147-152.
- [Rodi (1984)] RODI, W., 1984. *Turbulence models and their application in hydraulics - A State of the Art Review*. 2o. ed., International Association for Hydraulic Research, University of Karlsruhe, Germany.
- [Rodrigues (2000)] RODRIGUES, J.L.F., 2000. Escoamentos Turbulentos Parietais. *Transição e Turbulência*, II Escola Brasileira de Primavera, Uberlândia.
- [Roe (1981)] ROE, P.L., 1981. Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes. *J. Comput. Phys.*, **43**, 357-372.
- [Rogers & Moin (1987)] ROGERS, M.M., MOIN, P., 1987. The structure of the vorticity field in homogeneous turbulent flows. *J. Fluid Mech.*, **176**, 33-66.
- [Santos (2001)] SANTOS, L. P. 2001. Simulação numérica de escoamentos multifásicos utilizando o sistema Freeflow-2D. *Dissertação de Mestrado*, ICMC-USP.
- [Schlichting (1979)] SCHLICHTING H., 1979 *Boundary Layer Theory*, 7a. ed, McGraw-Hill, New York.
- [Shuja & Yilbas (1998)] SHUJA, S.Z., YILBAS, B.S., 1998. Gas-assisted laser repetitive pulsed heating of a steel surface. *Proc. Instn. Mech. Engrs. Part C*, **212**, 741-757.
- [Silva & Cruz (1998)] SILVA FREIRE, A.P., CRUZ, D.O.A., 1998. Equações do movimento e resultados assintóticos aplicados à teoria de camada limite. *Transição e Turbulência*, I Escola de Primavera, Rio de Janeiro.
- [Silva et al. (2001)] SILVA, J.M., FORTUNA, A.O., CASTELO, A.F., MANGIAVACCHI, N. 2001. Simulação numérica de fluidos não-isotérmicos com superfícies livres, *Proceedings COBEM 2001*, submetido.

- [Silveira Neto (1998)] SILVEIRA NETO, A., 1998. Simulação de Grandes Escalas de Escoamentos Turbulentos. *Transição e Turbulência*, I Escola de Primavera, Rio de Janeiro.
- [Silveira Neto (1998a)] SILVEIRA NETO, A., 1998. Turbulência nos fluidos. Módulo B: Cinemática de turbulência homogênea. *Curso apresentado no ICMC-USP*, São Carlos.
- [Siquieri et al. (2001)] SIQUIERI, R.S., TOMÉ, M.F., CASTELO, A.F., CUMINATO, J.A., MANGIAVACCHI, N. 2001. Simulação numérica de escoamentos não-newtonianos com superfície livre. *XXIV CNMAC 2001*, submetido.
- [Smagorinsky (1963)] SMAGORINSKY, J., 1963. General circulation experiments with the primitive equations. I. the basic experiment. *Mon. Weather Rev.*, **91**, 99-164.
- [Sondak & Pletcher (1995)] SONDAK, D.L., PLETCHER, R.H., 1995. Application of wall functions to generalized nonorthogonal curvilinear coordinate systems. *AIAA J.*, **33**, 33-41.
- [Sousa et al. (2001)] SOUSA, F.S., MANGIAVACCHI, N., CASTELO, A.F., NONATO, L.G., TOMÉ, M.F., CUMINATO, J.A., 2001. A mass conserving filter for the simulation of 3D free surface flows with surface tension, *Proceedings CILAMCE 2001*, submetido.
- [Sotiropoulos & Abdallah (1991)] SOTIROPOULOS, H., ABDALLAH, S., 1991. The discrete continuity equation in primitive variable solutions of incompressible flow. *J. Comput. Phys.*, **95**, 212-227.
- [Spalding (1972)] SPALDING, D.B., 1972. A novel finite differential expression involving both first and second derivatives. *Int. J. Numer. Meths. Engrg.*, **4**, 551-563.
- [Speziale (1987)] SPEZIALE, C.G., 1987. On non-linear $\kappa-l$ and $\kappa-\varepsilon$ models of turbulence. *J. Fluid Mech.*, **4**, 551-559.
- [Speziale (1987a)] SPEZIALE, C.G., 1987. On the advantages of the vorticity-velocity formulation of the equations of fluid dynamics. *J. Comput. Phys.*, **73**, 476-480.
- [Storr & Behnia (1999)] STORR, G.J., BEHNIA, M., 2000. Comparisons between experiment and numerical simulation using a free surface technique of free-falling liquid jets. *Exp. Th. Fluids Science*, **22**, 79-91.

- [Strahle (1985)] STRAHLE, W.C., 1985. Stagnation point flows with freestream turbulence - the matching condition. *AIAA J.*, **23**, 1822-1824.
- [Tani (1948)] TANI, I., 1948. Flow separation in thin liquid layers, *J. Phys. Soc. Japan*, **4**, 212-215.
- [Thangam & Speziale (1992)] THANGAM, S., SPEZIALE, G., 1992. Turbulent flow past a backward-facing step: a critical evaluation of two-equation models. *AIAA J.*, **30**, 1314-1320.
- [Taylor (1965)] TAYLOR, G.I., 1965. *Film notes for low-Reynolds number flows*, Cambridge University Press, UK, Cambridge.
- [Taylor (1968)] TAYLOR, G.I., 1968. Instability of jets, threads and sheets of viscous fluid, *Porc. Intl. Congr. Appl. Mech.*, Springer.
- [Tennekes & Lumley (1972)] TENNEKES, H. LUMLEY, L., 1972. *A first course in turbulence*. Massachusetts Institute of Technology, USA.
- [The NCFMF of Film Notes (1974)] PREFACE BY SHAPIRO, A.H., 1972. *Illustrated experiments in fluid mechanics*, Educational Development Center, Inc., Cambridge.
- [Tomé & McKee (1994)] TOMÉ, M.F., MCKEE, S., 1994. GENSMAC: A Computational marker-and-cell method for free surface flows in general domains. *J. Comput. Phys.*, **116**, 171-186.
- [Tomé et al. (1996)] TOMÉ, M.F., DUFFY, B., MCKEE, S., 1996. A numerical technique for solving unsteady non-Newtonian free surface flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **62**, 9-34.
- [Tomé et al. (2000a)] TOMÉ, M.F., CASTELO, A.F., MURAKAMI, J., CUMINATO, J.A., MINGHIM, R., OLIVEIRA, C.F., MANGIAVACCHI, N. AND MCKEE, S., 2000. Numerical simulation of axisymmetric free surface flows, *J. Comput. Phys.*, **157**, 441-472.
- [Tomé et al. (2000b)] TOMÉ, M.F., MANGIAVACCHI, N., CASTELO, A.F., CUMINATO, J.A., FORTUNA, A.O., NONATO, L.G., GROSSI, L., FERREIRA, V.G., MCKEE, S., 2000. A finite difference technique for simulating three-dimensional non-newtonian free surface flows. *Proceedings ENCIT 2000*.

- [Tomé et al. (2000c)] TOMÉ, M.F., CASTELO, A.F., CUMINATO, J.A., MCKEE, S., 2000. GENSMAC3D: A numerical method for solving unsteady three-dimensional free surface flows. To appear in *Int. J. Numer. Meths. Fluids*.
- [van Driest (1956)] VAN DRIEST, E.R., 1956. On turbulence flow near a wall. *J. Aeronautical Sciences.*, **37**, 1007-1011.
- [van Leer (1982)] VAN LEER, B., 1982. Flux-vector splitting for Euler equations. *Lecture Notes in Physics.*, **170**, 507-512.
- [Varonos & Bergeles (1998)] VARONOS, A., BERGELES, G., 1998. Development and assessment of a variable-order non-oscillatory scheme for convection term discretization. *Int. J. Numer. Meths. Fluids*, **26**, 1-16.
- [Warming & Hyett (1974)] WARMING, R.F., HYETT, B.J., 1974. The modified equation approach to the stability and accuracy analysis of finite-difference methods. *J. Comput. Phys.*, **14**, 159-179.
- [Watson (1964)] WATSON, E.J., 1964 The radial spread of a liquid jet over a horizontal plane, *J. Fluid Mech.*, **20**, 481-499.
- [Welch et al. (1966)] WELCH, J.E., HARLOW, F.H., SHANNON, J.P., DALY, B.J., 1966. *The MAC Method: A computing technique for solving viscous, incompressible, transient fluid-flow problems involving free surfaces*. Los Alamos Scientific Laboratory, Tec. Report LA-3425.
- [White (1969)] WHITE, F.M., 1969. A new integral method for analyzing the turbulent boundary layer with arbitrary pressure gradient. *J. Basic Engrg.*, **91**, 371-378.
- [White (1979)] WHITE, F.M., 1979. *Fluid Mechanics*. McGraw-Hill, Inc., New York.
- [White (1991)] WHITE, F.M., 1991. *Viscous fluid flow*. McGraw-Hill, New York.
- [Wieghardt & Tillmann(1951)] WIEGHARDT, K., TILLMANN, W., 1951. On the turbulent friction layer for rising pressure. *NACA Thechnical Memo.*, **1314**.
- [Wilcox (1988)] WILCOX, D.C., 1988. Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. *AIAA J.*, **26**, 1299-1310.

- [Wilcox (1993)] WILCOX, D.C., 1993. *Turbulence modeling for CFD*. DCW Industries, Inc, California.
- [Zhu (1992)] ZHU, J., 1992. On the higher-order bounded discretization schemes for finite volume computations of incompressible flows. *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, **98**, 345-360.
- [Yakhot & Orszag (1986)] YAKHOT, V. ORSZAG, S. A., 1986. Renormalization group analysis of turbulence. *SIAM J. Scientific Computing*, **1**, 3-51.
- [Yakhot et al. (1992)] YAKHOT, V. ORSZAG, S.A. THANGAM, S. GATSKI, T.B., SPEZIALE, C.G., 1992. Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique. *Phys. Fluids*, **4**, 1510-1520.
- [Yang & Shih (1993)] YANG, Z., SHIH, H., 1993. New time scale based $\kappa - \varepsilon$ model for near-wall turbulence. *AIAA J.*, **7**, 1191-1198.