Expansão do sistema FreeFlow-3D para escoamentos com influência da temperatura

Marcelo Henrique Sabatini

Orientador:

Prof. Dr. *Antonio Castelo Filho*

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

USP – São Carlos
Janeiro/2003

“VERSÃO REVISADA APÓS A DEFESA”

Data da Defesa:

12/12/2002

Visto do Orientador:

Dedico este trabalho a minha mãe,
Roseli.

Agradecimentos

Ao professor Antonio Castelo Filho pela orientação na fase final desse trabalho.

Aos professores do grupo de análise numérica e em especial aos professores Norberto Mangiavacchi e Antonio Castelo Filho, os quais tiveram participação na realização desse trabalho com valiosas sugestões, ajuda e boa vontade.

Aos amigos do LCAD, Luciane, Ricardo, Maria Luísa, Juliana, Pio, Helton, Valdemir, Fabrício, Fernando e Hévilla pelas dicas e pelos momentos agradáveis no laboratório.

A todos meus amigos e amigas da USP em especial ao Luis Fernando, Luciano, Thiago, Ricardo, Silvio, Wellington pelos bons momentos de descontração.

À minha mãe pelo apoio e incentivo.

Ao CNPq, pelo suporte financeiro para o desenvolvimento desse projeto.

Finalmente, agradeço a todas as pessoas que diretamente ou indiretamente colaboraram para a realização desse trabalho.

Resumo

O objetivo desse trabalho é estender o ambiente de simulação FreeFlow-3D para escoamentos incompressíveis com superfície livre não-isotérmicos. As equações de Navier-Stokes com as condições de fronteira associadas são discretizadas usando o método de diferenças finitas sobre malhas deslocadas. Os efeitos da temperatura são incluídos no código usando a aproximação de Boussinesq e a viscosidade é calculada como uma função da temperatura ou é colocada constante dependendo da escolha do usuário do FreeFlow-3D. Resultados numéricos mostrando a aplicabilidade do ambiente FreeFlow-3D para escoamentos não-isotérmicos são apresentados e discutidos.

Palavras-Chave: Escoamentos com Superfície Livre; Escoamentos Não-Isotérmicos; Equações de Navier-Stokes; Aproximação de Boussinesq

Abstract

The aim of this work is to extend the FreeFlow-3D simulation system to incompressible non-isothermal free surface flows. The Navier-Stokes equations together with appropriate boundary conditions are discretized using the finite difference method on a staggered grid. Temperature effects are included in the code by using the Boussinesq approximation and the viscosity is calculated as a function of the temperature or it is set constant depending on the choice of the FreeFlow-3D's user. Numerical results demonstrating the capabilities of the FreeFlow-3D code for solving non-isothermal free surface flows are presented and discussed.

Keywords: Free Surface Flows; Non-Isothermal Flows; Navier-Stokes Equations; Boussinesq Approximation

Sumário

Introdução	1
1 Escoamentos Não-Isotérmicos	3
1.1 Conceitos Fundamentais	3
1.2 Equações de Navier-Stokes	5
1.3 Modelos para Escoamentos Não-Isotérmicos	10
1.3.1 Modelo de Boussinesq	10
1.3.2 O Cálculo da Viscosidade em Função da Temperatura	11
1.4 Condições de Contorno	12
1.4.1 Condições de Contorno na Superfície Livre	12
1.4.2 Condições no Contorno Rígido	14
1.5 Adimensionalização das equações	14
2 Método Computacional	17
2.1 Método para o Cálculo da Velocidade, Pressão e Temperatura	17
2.2 Modificações no Método GENSMAC-3D	22
3 Discretizações	23
3.1 Definição das Células	23
3.2 Discretização do Domínio	24
3.3 Discretização das Equações de Conservação de Quantidade de Movimento .	25
3.4 Discretização da Equação da Energia	27
3.5 Aproximação dos Termos Convectivos	28
3.6 Discretização da Equação de Poisson para ψ	33
3.7 Condições de Contorno	34

3.7.1	Condições de Contorno na Superfície Livre	34
3.7.2	Condições no Contorno Rígido	40
3.8	Controle do Passo no Tempo	45
4	O Ambiente de Simulação FreeFlow-3D para Escoamentos	
	Não-Isotérmicos	46
4.1	O Ambiente de Simulação FreeFlow-3D	46
4.2	Estrutura de Dados	47
4.3	O Ambiente de Simulação FreeFlow-3D para Escoamentos Não-Isotérmicos	49
4.3.1	O Modelador	49
4.3.2	O Simulador	50
4.3.3	O Visualizador	51
5	Resultados Numéricos	53
5.1	Convecção Natural no Cubo Fechado	53
5.2	Outros Exemplos Numéricos	59
6	Conclusão	67
	Referências Bibliográficas	69

Lista de Figuras

3.1	Tipo de células.	24
3.2	Célula computacional, mostrando onde as variáveis são discretizadas.	25
3.3	Estêncil usado para calcular ϕ_A e ϕ_B usando vários esquemas.	29
3.4	Célula (S) com a face $(k + \frac{1}{2})$ adjacente a célula (E).	35
3.5	Exemplo de uma superfície planar inclinada a 45°	35
3.6	Célula (S) com as faces $(k + \frac{1}{2})$ e $(i + \frac{1}{2})$ adjacentes a células (E).	36
3.7	Exemplo de uma superfície planar inclinada a 60°	36
3.8	Célula (S) com as faces $(i + \frac{1}{2})$, $(k + \frac{1}{2})$ e $(j + \frac{1}{2})$ adjacentes a células (E).	37
3.9	Célula (S) tendo uma face adjacente a uma célula (E).	38
3.10	Célula (S) tendo duas faces adjacentes a células (E).	39
3.11	Célula (B) com a face $(i + \frac{1}{2})$ adjacente com uma célula (S) ou (F).	40
3.12	Célula (B) com as faces $(i + \frac{1}{2})$ e $(j + \frac{1}{2})$ adjacentes a células (S) ou (F).	41
3.13	Célula (B) com as faces $(i + \frac{1}{2})$, $(j + \frac{1}{2})$ e $(k + \frac{1}{2})$ adjacentes a células (S) ou (F).	43
3.14	Célula (B) com a face $(i + \frac{1}{2})$ adjacente a célula (S) ou (F).	44
4.1	Níveis hierárquicos da estrutura de dados “ <i>half-edge</i> ”.	48
4.2	Entrada de dados.	49
4.3	Entrada dados para simulação de escoamentos não-isotérmicos.	50
4.4	Interface do módulo Modflow-3D para escoamentos não-isotérmicos, com o modelo para a simulação de uma injeção de um líquido e a janela de entrada dados do objeto do tipo “ <i>open box</i> ”.	51
4.5	Visualização de um escoamento não-isotérmico: “ <i>rendering</i> ” tridimensional com recurso de iluminação (esquerda) e visualização da temperatura (direita).	52

4.6	Alguns recursos de visualização do módulo Visflow-3D.	52
5.1	Modelo do problema da convecção natural.	54
5.2	Visualização da temperatura. (a) $Ra = 10^3$; (b) $Ra = 10^4$; (c) $Ra = 10^5$. . .	55
5.3	Linhas de temperatura. (a) $Ra = 10^3$; (b) $Ra = 10^4$; (c) $Ra = 10^5$	55
5.4	Curvas de níveis da velocidade u . (a) $Ra = 10^3$; (b) $Ra = 10^4$; (c) $Ra = 10^5$. . .	56
5.5	Curvas de níveis da velocidade z . (a) $Ra = 10^3$; (b) $Ra = 10^4$; (c) $Ra = 10^5$. . .	56
5.6	Ajuste de um conjunto de dados pelo método dos mínimos quadrados utilizando-se o modelo (1.18) para o cálculo da viscosidade.	56
5.7	Linhas de temperatura, $Ra = 10^4$. (a) Modelo de Boussinesq com a viscosidade constante; (b) Modelo de Boussinesq com a viscosidade variando em função da temperatura.	57
5.8	Normas $\ \cdot\ _\infty$ dos erros das componentes de velocidade para cada malha, em escala logarítmica.	59
5.9	Visualização da temperatura em um recipiente com razão 2:1:1.	60
5.10	Visualização do modelo.	61
5.11	Visualização tridimensional da temperatura.	62
5.12	Visualização bidimensional da temperatura no plano xz referente a figura 5.11.	63
5.13	Representação do perfil de temperatura imposto no fundo do recipiente.	64
5.14	Representação do fundo do recipiente mostrando $x_i, y_i, i = 0, 1, 2$	64
5.15	Visualização da temperatura.	64
5.16	Visualização da temperatura, $t = 0.75$ s, por vários ângulos.	65
5.17	Ajuste de um conjunto de dados pelo método dos mínimos quadrados utilizando-se o modelo (1.19) para o cálculo da viscosidade.	65
5.18	Visualização da temperatura.	66
5.19	Visualização da viscosidade.	66

Introdução

Com o contínuo avanço tecnológico computacional e das técnicas numéricas, é hoje possível a modelagem e simulação de problemas de grande porte em mecânica de fluidos. Nas últimas décadas muitos problemas em mecânica dos fluidos têm sido estudados sendo que uma classe de problemas que tem tido destaque é o escoamento de fluidos com superfícies livres, o qual possui aplicações industriais tais como o preenchimento de cavidades e injeção de moldes nas indústrias alimentícias, siderúrgicas e de plásticos.

O tratamento de escoamentos com superfícies livres têm obtido sucesso usando o método de diferenças finitas. Em 1965, Harlow e Welch introduziram o método MAC (*“Marker-and-Cell”*) (Harlow e Welch, 1965), que foi uma das primeiras técnicas para a solução de problemas com superfícies livres a apresentar resultados satisfatórios. Nesse método o fluido é representado por partículas virtuais. Em seguida, 1970, Harlow e Amsden propuseram o método SMAC (*“Simplified MAC”*) (Amsden e Harlow, 1970) o qual divide o ciclo de cálculo em velocidade e pressão. Assim, algumas das dificuldades encontradas no método MAC, relativas ao processo iterativo no cálculo da velocidade e pressão, deixaram de existir. Em 1994, com base no método SMAC, Tomé e McKee desenvolveram o método GENSMAC (Tomé e McKee, 1994; Tomé et al., 1996b) para escoamentos bidimensionais de fluidos newtonianos incompressíveis com superfícies livres em domínios complexos.

Existe um projeto em desenvolvimento no ICMC-USP denominado SNENS: Solução Numérica das Equações de Navier Stokes, que trata de simulação de escoamentos de fluidos com superfícies livres. O ambiente integrado para modelagem, simulação e visualização de escoamentos incompressíveis com superfícies livres tridimensionais desenvolvido nesse projeto é denominado FreeFlow-3D (Castelo Filho et al., 1999). Neste sistema está implementado o método GENSMAC-3D (Tomé et al., 2001), que é uma extensão do método

GENSMAC.

Um dos objetivos desse projeto é expandir a aplicabilidade do sistema FreeFlow-3D para novos tipos de escoamentos. Assim, essa dissertação de mestrado tem como objetivo desenvolver módulos para o ambiente FreeFlow-3D para modelar, simular e visualizar escoamentos não-isotérmicos, pois é de freqüente interesse a determinação da variação de temperatura no fluido e ou a transferência de calor no fluido.

Os efeitos da temperatura no fluido são representados pela aproximação de Boussinesq, a qual é amplamente utilizada na literatura, e a viscosidade é calculada em função da temperatura ou é constante dependendo da escolha do usuário. Resultados Numéricos são apresentados.

A dissertação de mestrado foi dividida nos seguintes capítulos:

- capítulo 1: são apresentados alguns conceitos fundamentais da mecânica dos fluidos, as equações governantes para escoamentos não-isotérmicos com superfícies livres e a adimensionalização dessas equações;
- capítulo 2: apresenta-se um estudo do método computacional utilizado;
- capítulo 3: as aproximações por diferenças finitas das equações introduzidas no capítulo 1 são apresentadas, assim como técnicas para o tratamento das condições de contorno na superfície livre e no contorno rígido;
- capítulo 4: apresenta-se uma descrição do sistema FreeFlow-3D e as modificações feitas em seus módulos;
- capítulo 5: os resultados numéricos obtidos são apresentados;
- capítulo 6: são apresentadas as conclusões sobre esse trabalho.

Capítulo 1

Escoamentos Não-Isotérmicos

Para se poder simular um escoamento em que o domínio e/ou fluido não estão na mesma temperatura, as equações de Navier-Stokes devem ser ajustadas corretamente. Portanto, este capítulo tem por objetivo apresentar de forma resumida os conceitos básicos da mecânica dos fluidos (Fox e McDonald, 1995; Schmidt et al., 1996), as equações de Navier-Stokes para simular escoamentos incompressíveis com superfície livre não-isotérmicos, definir as condições de contorno e a adimensionalização destas equações.

1.1 Conceitos Fundamentais

Fluido é uma substância que se deforma continuamente sob a aplicação de uma tensão de cisalhamento τ , não importando o quão pequena possa ser essa tensão, isto é, ele escoa. O campo de escoamento é uma representação desse movimento no espaço em diferentes instantes. A propriedade que descreve o campo do escoamento é o vetor velocidade $\mathbf{u}$.

Os fluidos podem ser classificados como:

- *newtonianos*: fluidos nos quais existe uma relação linear entre a tensão de cisalhamento aplicada e a taxa da deformação resultante;
- *não-newtonianos*: fluidos que não são newtonianos.

Gases e líquidos são, em geral, fluidos newtonianos como por exemplo: ar e água. O sangue, porém é um fluido não-newtoniano.

A propriedade que relaciona a tensão de cisalhamento com a taxa de deformação associada ao movimento do fluido é a viscosidade μ . A lei de Newton da viscosidade estabelece que, para uma dada taxa de deformação angular de um fluido, a tensão de cisalhamento é diretamente proporcional à viscosidade. A viscosidade μ é chamada de viscosidade absoluta ou dinâmica para se evitar confusão com a viscosidade cinemática ν , que é a relação entre a viscosidade e a massa específica, isto é, $\nu = \frac{\mu}{\rho}$. Mel e óleo lubrificante são exemplos de líquidos muito viscosos, entretanto a água e o ar têm baixas viscosidades.

Um escoamento é considerado incompressível se a variação da massa específica do fluido for desprezível. Caso contrário, o escoamento é considerado compressível. Um escoamento é classificado como estacionário se as grandezas como velocidade e pressão não variam com o tempo; caso contrário o escoamento é denominado transiente. O escoamento é considerado interno quando o fluido está totalmente cercado por paredes e é classificado como externo quando o fluido não está confinado por paredes e pode ou não apresentar superfícies livres. Escoamento laminar é aquele no qual as camadas muito finas (lamínas) de fluido parecem deslizar umas sobre as outras. Escoamento turbulento é aquele em que ocorre movimentos desordenados de pequenas massas de fluido, contrariando o que ocorre no escoamento laminar.

Neste trabalho, as equações governantes e condições de contorno serão resolvidas na forma adimensional. Algumas constantes de adimensionalização importantes por caracterizarem o escoamento são definidas a seguir:

- número de *Reynolds*: $Re = \frac{\rho UL}{\mu} = \frac{UL}{\nu}$, onde L é um comprimento característico, U uma velocidade característica e ν a viscosidade cinemática. O número de Reynolds é a razão entre as forças inerciais e as forças viscosas de um fluido e é um critério que pode indicar se o escoamento é laminar ou turbulento;
- número de *Froude*: $Fr = \frac{U}{\sqrt{Lg}}$, onde g é a constante gravitacional. O número de Froude é a razão entre forças de inércia e de gravidade e tem papel importante em escoamentos com superfícies livres;
- número de *Prandtl*: $Pr = \frac{\nu}{\alpha}$ em que $\alpha = \frac{k}{\rho c_p}$ é a difusividade térmica do fluido. O número de Prandtl é a razão entre a viscosidade cinemática e a difusividade térmica do fluido e aparece em escoamentos não-isotérmicos;

- número de *Rayleigh*: $Ra = \frac{g\beta\Delta T L^3}{\nu^2} Pr$ em que β é o coeficiente de expansão térmica do fluido e ΔT a diferença entre as temperaturas máxima e mínima. O número de Rayleigh é a razão entre as forças de empuxo e as forças de difusão e aparece em escoamentos não-isotérmicos;
- Número de *Nusselt*: $Nu = \frac{hL}{k}$ em que h é o coeficiente de transferência de calor e k a condutividade térmica do fluido. O número de Nusselt é a razão entre a transferência de calor e a condutividade térmica do fluido e aparece em escoamentos não-isotérmicos.

1.2 Equações de Navier-Stokes

As equações que modelam os escoamentos de fluidos são as de Navier-Stokes. Essas equações representam os princípios básicos das leis de conservação (Fortuna, 2000).

- conservação de massa:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.1)$$

- conservação de quantidade de movimento:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} \quad (1.2)$$

em que ρ é a massa específica, $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ o vetor velocidade, $\boldsymbol{\sigma}$ o tensor de tensões e $\mathbf{g}$ o campo gravitacional do fluido. Como pretendemos tratar de escoamentos de um fluido generalizado, consideram-se as seguintes equações constitutivas

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

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu(T)\mathbf{d} \quad (1.4)$$

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

em que $p = p(\mathbf{x}, t)$ é a pressão, $\mathbf{I}$ o tensor identidade, $\boldsymbol{\tau}$ o tensor extra tensão, $\mathbf{d}$ o tensor razão de deformação de um fluido e $\mu(T)$ é uma expressão que descreve o comportamento da viscosidade em função da temperatura.

Em coordenadas cartesianas tridimensionais tem-se

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} u(\mathbf{x}, t) \\ v(\mathbf{x}, t) \\ w(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

então

$$(\nabla \mathbf{u})^T = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (\nabla \mathbf{u}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial v}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}.$$

Então (1.5) torna-se

$$\mathbf{d} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} & 2\frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} & 2\frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix}$$

e portanto (1.4) é dada por

$$\boldsymbol{\tau} = \mu(T) \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} & 2\frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} & 2\frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix}.$$

Logo (1.3) pode ser escrita como

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

Assim

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix}$$

em que

$$\begin{aligned}
A_1 &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu(T) \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \mu(T) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\
&\quad + 2\frac{\partial \mu(T)}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial \mu(T)}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial \mu(T)}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\
A_2 &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu(T) \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \mu(T) \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\
&\quad + 2\frac{\partial \mu(T)}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial \mu(T)}{\partial x} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial \mu(T)}{\partial z} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\
A_3 &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu(T) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + \mu(T) \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\
&\quad + 2\frac{\partial \mu(T)}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial \mu(T)}{\partial x} \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial \mu(T)}{\partial y} \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right).
\end{aligned}$$

Utilizando a equação da continuidade em $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}$ reduz-se a

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{bmatrix} \tag{1.6}$$

em que

$$\begin{aligned}
B_1 &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu(T) \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + 2 \frac{\partial \mu(T)}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \\
&\quad + \frac{\partial \mu(T)}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial \mu(T)}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\
B_2 &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu(T) \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + 2 \frac{\partial \mu(T)}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \\
&\quad + \frac{\partial \mu(T)}{\partial x} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial \mu(T)}{\partial z} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\
B_3 &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu(T) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + 2 \frac{\partial \mu(T)}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial z} \\
&\quad + \frac{\partial \mu(T)}{\partial x} \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial \mu(T)}{\partial y} \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) .
\end{aligned}$$

Logo (1.6) pode ser escrita na forma vetorial

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\nabla p + \mu(T) \nabla^2 \mathbf{u} + (\nabla \mu(T)) [(\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T] .$$

Aplicando-se o operador diferencial

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)$$

sobre o vetor $\mathbf{u}$ obtem-se

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}$$

que na forma conservativa é dado por

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})$$

onde

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

Assim

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} + \frac{\partial(uw)}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(vu)}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} + \frac{\partial(vw)}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial(wu)}{\partial x} + \frac{\partial(wv)}{\partial y} + \frac{\partial w^2}{\partial z} \end{bmatrix}. \quad (1.7)$$

Dividindo (1.2) por ρ tem-se

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{g}. \quad (1.8)$$

Assim a partir de (1.6), (1.7) e (1.8) obtem-se as equações de conservação de quantidade de movimento na forma conservativa e em coordenadas cartesianas tridimensionais

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} + \frac{\partial(uw)}{\partial z} = & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu(T) \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \\ & + \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] + g_x \end{aligned} \quad (1.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} + \frac{\partial(vw)}{\partial z} = & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu(T) \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \\ & + \left[\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + 2 \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] + g_y \end{aligned} \quad (1.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial(uw)}{\partial x} + \frac{\partial(vw)}{\partial y} + \frac{\partial w^2}{\partial z} = & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu(T) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \\ & + \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + 2 \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] + g_z \end{aligned} \quad (1.11)$$

em que $\mathbf{g} = (g_x, g_y, g_z)^T$.

- conservação de energia: na forma conservativa e em coordenadas cartesianas tridimensionais a equação da energia¹ é dada por

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(uT)}{\partial x} + \frac{\partial(vT)}{\partial y} + \frac{\partial(wT)}{\partial z} = \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (1.12)$$

¹Deduções detalhadas da equação da energia podem ser encontradas em livros de mecânica dos fluidos, por exemplo (Fletcher, 1988).

em que T é a temperatura e $\alpha = \frac{\kappa}{\rho c_p}$ é o coeficiente de difusividade térmica do fluido; κ é o coeficiente de condutividade térmica do fluido e c_p o calor específico a pressão constante do fluido.

1.3 Modelos para Escoamentos Não-Isotérmicos

Mudanças na temperatura do fluido causam mudanças em suas propriedades (Griebel et al., 1997). Por exemplo, se um fluido é aquecido seu volume aumenta, fazendo com que ele se torne mais leve. Nos últimos anos, modelos para a simulação de escoamentos não-isotérmicos tem sido discutidos onde a grande maioria utiliza a aproximação de Boussinesq. Foram implementados modelos para a simulação de escoamentos não-isotérmicos utilizando-se a aproximação de Boussinesq e a viscosidade variando em função da temperatura.

1.3.1 Modelo de Boussinesq

A aproximação de Boussinesq (Fortuna, 2000; Griebel et al., 1997), considera constante todas as propriedades do fluido exceto a massa específica no termo fonte das equações de conservação de quantidade de movimento, a qual é assumida uma relação linear entre a massa específica ρ e a temperatura T , isto é,

$$\rho(T) = \rho_\infty + \left. \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_{T_\infty} (T - T_\infty) + O(T - T_\infty)^2 \quad (1.13)$$

que pode ser escrita como

$$\rho(T) \approx \rho_\infty [1 - \beta(T(\mathbf{x}, t) - T_\infty)] \quad (1.14)$$

em que ρ_∞ e T_∞ são valores de referência da massa específica e da temperatura respectivamente, e $\beta = -\frac{1}{\rho_\infty} \left. \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_{T_\infty}$ é o coeficiente de expansão térmica do fluido.

Assim, as equações de conservação de quantidade de movimento (1.9), (1.10) e (1.11) dadas anteriormente podem ser escritas como

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} + \frac{\partial(uw)}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu(T) \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \\
+ \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] \\
+ [1 - \beta(T(\mathbf{x}, t) - T_\infty)] g_x
\end{aligned} \tag{1.15}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} + \frac{\partial(vw)}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu(T) \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \\
+ \left[\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + 2 \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] \\
+ [1 - \beta(T(\mathbf{x}, t) - T_\infty)] g_y
\end{aligned} \tag{1.16}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial(uw)}{\partial x} + \frac{\partial(vw)}{\partial y} + \frac{\partial w^2}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu(T) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \\
+ \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + 2 \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] \\
+ [1 - \beta(T(\mathbf{x}, t) - T_\infty)] g_z
\end{aligned} \tag{1.17}$$

em que $[1 - \beta(T(\mathbf{x}, t) - T_\infty)]\mathbf{g}$ é denominado o termo fonte.²

Para determinarmos a convecção e a difusão da temperatura no domínio, deve-se resolver a equação da energia (1.12).

Portanto as equações a serem resolvidas em escoamentos não-isotérmicos utilizando-se a aproximação de Boussinesq são as equações (1.12), (1.15), (1.16), (1.17), além da equação da continuidade (1.1).

1.3.2 O Cálculo da Viscosidade em Função da Temperatura

A viscosidade $\nu(T)$ é uma função conhecida representando a dependência do fluido em função da temperatura. Para o tratamento da viscosidade, neste trabalho utilizam-se dois modelos, os quais são:

$$\nu(T) = aT^2 + bT + c \tag{1.18}$$

e

²Para o modelo de Boussinesq pode se considerar $\rho = \rho_\infty$. Ver (Silva, 2002).

$$\nu(T) = \frac{1}{aT^2 + bT + c} . \quad (1.19)$$

Nos modelos acima a , b e c são constantes a serem determinadas de forma a ajustar um conjunto de dados conhecidos da viscosidade em função da temperatura pelo método dos mínimos quadrados, sendo que o modelo que melhor ajustar os dados deverá ser escolhido. A escolha desses modelos foi feita observando-se conjuntos de dados da viscosidade em função da temperatura, de onde notamos que o modelo (1.18) melhor ajusta os dados para fluidos gasosos enquanto que o modelo (1.19) fluidos líquidos. Na literatura pode ser encontrada tabelas de propriedades físicas de fluidos contendo esses dados, como por exemplo o ar (Griebel et al., 1997).

1.4 Condições de Contorno

1.4.1 Condições de Contorno na Superfície Livre

Na superfície livre as condições de fronteira são obtidas impondo que tensões normal e tangencial se anulem. Na ausência de tensão na superfície estas condições podem ser representadas por (Tomé et al., 1996a)

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (1.20)$$

$$\mathbf{m1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (1.21)$$

$$\mathbf{m2} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (1.22)$$

em que $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ é o vetor normal unitário, $\mathbf{m1} = (m1_x, m1_y, m1_z)$ e $\mathbf{m2} = (m2_x, m2_y, m2_z)$ são os vetores tangenciais à superfície respectivamente. O tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$ é dado por (1.3).

Escrevendo (1.20) em coordenadas cartesianas tridimensionais tem-se

$$\begin{aligned}
\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} &= \left(-p + 2\mu(T) \frac{\partial u}{\partial x} \right) n_x^2 + \mu(T) \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_x n_y + \mu(T) \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) n_x n_z \\
&+ \mu(T) \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) n_x n_y + \left(-p + 2\mu(T) \frac{\partial v}{\partial y} \right) n_y^2 + \mu(T) \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) n_y n_z \\
&+ \mu(T) \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) n_x n_z + \mu(T) \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) n_y n_z + \left(-p + 2\mu(T) \frac{\partial w}{\partial z} \right) n_z^2 \\
&= -p (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) + 2\mu(T) \left[\frac{\partial u}{\partial y} n_x^2 + \frac{\partial v}{\partial y} n_y^2 + \frac{\partial w}{\partial z} n_z^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_x n_y \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) n_x n_z + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) n_y n_z \right]
\end{aligned}$$

e como $||\mathbf{n}|| = 1$ obtém-se

$$\begin{aligned}
&-p + 2\mu(T) \left[\frac{\partial u}{\partial y} n_x^2 + \frac{\partial v}{\partial y} n_y^2 + \frac{\partial w}{\partial z} n_z^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_x n_y \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) n_x n_z + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) n_y n_z \right] = 0.
\end{aligned} \tag{1.23}$$

Do mesmo modo, para (1.21) tem-se

$$\begin{aligned}
\mathbf{m1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} &= -p (n_x m1_x + n_y m1_y + n_z m1_z) + 2\mu(T) \frac{\partial u}{\partial x} n_x m1_x + 2\mu(T) \frac{\partial v}{\partial y} n_y m1_y \\
&+ 2\mu(T) \frac{\partial w}{\partial z} n_z m1_z + \mu(T) \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (n_y m1_x + n_x m1_y) \\
&+ \mu(T) \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) (n_z m1_x + n_x m1_z) + \mu(T) \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) (n_z m1_y + n_y m1_z)
\end{aligned}$$

e como $\mathbf{n} \cdot \mathbf{m1} = 0$ obtém-se

$$\begin{aligned}
&2 \frac{\partial u}{\partial x} n_x m1_x + 2 \frac{\partial v}{\partial y} n_y m1_y + 2 \frac{\partial w}{\partial z} n_z m1_z + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (n_y m1_x + n_x m1_y) \\
&+ \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) (n_z m1_x + n_x m1_z) + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) (n_z m1_y + n_y m1_z) = 0
\end{aligned} \tag{1.24}$$

e analogamente para (1.22) tem-se

$$\begin{aligned}
&2 \frac{\partial u}{\partial x} n_x m2_x + 2 \frac{\partial v}{\partial y} n_y m2_y + 2 \frac{\partial w}{\partial z} n_z m2_z + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (n_y m2_x + n_x m2_y) \\
&+ \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) (n_z m2_x + n_x m2_z) + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) (n_z m2_y + n_y m2_z) = 0.
\end{aligned} \tag{1.25}$$

As equações (1.23), (1.24) e (1.25) formam as condições de contorno para as velocidades e a pressão na superfície livre. Para a temperatura utiliza-se a condição de fronteira de Robin em que o fluxo de calor $q = -\kappa \nabla T \cdot \mathbf{n}$ é proporcional a diferença de temperatura entre a superfície e o fluido. Assim

$$-\kappa \nabla T \cdot \mathbf{n} = h(T - T_A) \quad (1.26)$$

em que κ é a condutividade térmica, h é o coeficiente de transferência de calor e T_A a temperatura de referência na superfície livre.

1.4.2 Condições no Contorno Rígido

As condições de não escorregamento “*no-slip*” e injeção “*prescribed inflow*” compõem as condições de contorno na superfície rígida. Essas condições de contorno são aplicadas na fronteira delimitada pelo contorno rígido (recipientes e injetores) em contato com o fluido. Assim, a velocidade tangencial e normal do fluido em relação à parede sólida são definidas iguais à zero.

Para a temperatura é utilizada a condição adiabática, isto é, o fluxo de calor é nulo entre a parede do recipiente e o fluido, ou a condição de Dirichlet, isto é, a temperatura é prescrita na fronteira.

1.5 Adimensionalização das equações

Adimensionalizando as equações (1.1), (1.12), (1.15), (1.16), (1.17), (1.18), (1.19), (1.23), (1.24) e (1.25) surgem as grandezas adimensionais chamadas de número de Reynolds, Froude, Prandtl e Nusselt. Definindo as variáveis adimensionais pelas transformações (Ferreira et al., 1999; Griebel et al., 1997)

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= U \mathbf{u}^*, \mathbf{x} = L \mathbf{x}^*, \nu(T) = \nu_0 \nu^*(T), p = \rho_\infty U^2 p^*, \rho = \rho^* \rho_\infty, \\ t &= \frac{L}{U} t^*, \mathbf{g} = g \mathbf{g}^*, T = T^* \Delta T + T_\infty, \beta = \beta^* \Delta T \end{aligned}$$

em que U , L , ν_0 e ρ_∞ são os valores de referência para o comprimento, velocidade, viscosidade e a massa específica respectivamente, $\Delta T = T_{max} - T_{min}$, a diferença entre as temperaturas máxima e mínima no escoamento em que T_{min} é a temperatura mínima

do escoamento e T_{max} a temperatura máxima no escoamento, T_∞ uma temperatura de referência, a qual é tomada como T_{min} ³.

Substituindo-se essas transformações, desconsiderando o símbolo “*” por simplicidade, nas equações (1.1), (1.12), (1.15), (1.16), (1.17), (1.18), (1.19), (1.23), (1.24) e (1.25), obtém-se a forma adimensional das equações

- equação da conservação de massa:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (1.27)$$

- equações de conservação de quantidade de movimento:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} + \frac{\partial(uw)}{\partial z} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\nu(T)}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \\ &+ \frac{1}{\text{Re}} \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] \\ &+ (1 - \beta T) \frac{1}{\text{Fr}^2} g_x \end{aligned} \quad (1.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(v^2)}{\partial y} + \frac{\partial(vw)}{\partial z} &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\nu(T)}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \\ &+ \frac{1}{\text{Re}} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + 2 \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] \\ &+ (1 - \beta T) \frac{1}{\text{Fr}^2} g_y \end{aligned} \quad (1.29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial(uw)}{\partial x} + \frac{\partial(vw)}{\partial y} + \frac{\partial(w^2)}{\partial z} &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\nu(T)}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \\ &+ \frac{1}{\text{Re}} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + 2 \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] \\ &+ (1 - \beta T) \frac{1}{\text{Fr}^2} g_z \end{aligned} \quad (1.30)$$

- equação da energia:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(uT)}{\partial x} + \frac{\partial(vT)}{\partial y} + \frac{\partial(wT)}{\partial z} = \frac{1}{\text{RePr}} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (1.31)$$

³Quando se escolhe $T_\infty = T_{min}$, tem-se $T^* \in [0, 1]$.

- modelos para o cálculo de $\nu(T)$:

$$\nu(T) = \frac{1}{\nu_0} (c_0 T^2 + c_1 T + c_2) \quad (1.32)$$

$$\nu(T) = \frac{1}{\nu_0(c_0 T^2 + c_1 T + c_2)} \quad (1.33)$$

em que

$$c_0 = a\Delta T^2$$

$$c_1 = 2aT_\infty\Delta T + b\Delta T$$

$$c_2 = aT_\infty^2 + bT_\infty + c$$

- equações das condições de contorno na superfície livre:

$$\begin{aligned} p - \frac{2\nu(T)}{\text{Re}} \left[\frac{\partial u}{\partial x} n_x^2 + \frac{\partial v}{\partial y} n_y^2 + \frac{\partial w}{\partial z} n_z^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_x n_y \right. \\ \left. + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) n_x n_z + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) n_y n_z \right] = 0 \end{aligned} \quad (1.34)$$

$$\begin{aligned} 2\frac{\partial u}{\partial x} m1_x n_x + 2\frac{\partial v}{\partial y} m1_y n_y + 2\frac{\partial w}{\partial z} m1_z n_z + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (m1_x n_y + m1_y n_x) \\ + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) (m1_x n_z + m1_z n_x) + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) (m1_y n_z + m1_z n_y) = 0 \end{aligned} \quad (1.35)$$

$$\begin{aligned} 2\frac{\partial u}{\partial x} m2_x n_x + 2\frac{\partial v}{\partial y} m2_y n_y + 2\frac{\partial w}{\partial z} m2_z n_z + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (m2_x n_y + m2_y n_x) \\ + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) (m2_x n_z + m2_z n_x) + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) (m2_y n_z + m2_z n_y) = 0 \end{aligned} \quad (1.36)$$

$$-\nabla T \cdot \mathbf{n} = \text{Nu}(T - T_A) \quad (1.37)$$

Capítulo 2

Método Computacional

Soluções analíticas para as equações de Navier-Stokes são determinadas para poucos casos. A dificuldade de se encontrar soluções analíticas decorre do fato que as equações de Navier-Stokes são equações diferenciais parciais não-lineares, e a teoria matemática para essa classe de equações ainda não está suficientemente desenvolvida para permitir a obtenção de soluções analíticas em domínios e condições gerais.

Portanto, desenvolveram-se métodos numéricos para a solução das equações de Navier-Stokes, como os métodos GENSMAC (*“Generalized-Simplified-Marker-and-Cell”*) (Tomé e McKee, 1994) e o GENSMAC-3D (extensão do método GENSMAC para três dimensões) (Tomé et al., 2001).

2.1 Método para o Cálculo da Velocidade, Pressão e Temperatura

A seguir será apresentada uma adaptação do procedimento computacional contido no código GENSMAC-3D para a simulação de escoamentos não-isotérmicos. A idéia básica do método GENSMAC-3D é resolver as equações de Navier-Stokes sobre uma malha diferenciada no tempo $t = t_0 + \delta t$ utilizando partículas marcadoras para representar o fluido.

Suponhamos que em um dado tempo t_0 o campo de velocidades $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0)$ é conhecido e as condições de fronteira para a velocidade e pressão sejam dadas. A temperatura $T(\mathbf{x}, t_0)$

também é conhecida e as suas condições de fronteiras também são dadas.

O campo de velocidade atualizado $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ e a temperatura $T(\mathbf{x}, t)$, onde $t = t_0 + \delta t$ são calculados como segue:

1. Seja $\tilde{p}(\mathbf{x}, t_0)$ um campo de pressão que satisfaça a condição de tensão normal correta sobre a superfície livre em $t = t_0$.
2. Calcula-se o campo de velocidade intermediário $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ por meio das equações

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = & -\frac{\partial(u^2)}{\partial x} - \frac{\partial(uv)}{\partial y} - \frac{\partial(uw)}{\partial z} - \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x} + \frac{\nu(T)}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \\ & + \frac{1}{\text{Re}} \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] \\ & + (1 - \beta T) \frac{1}{\text{Fr}^2} g_x \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial t} = & -\frac{\partial(uv)}{\partial x} - \frac{\partial(v^2)}{\partial y} - \frac{\partial(vw)}{\partial z} - \frac{\partial \tilde{p}}{\partial y} + \frac{\nu(T)}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \\ & + \frac{1}{\text{Re}} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + 2 \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] \\ & + (1 - \beta T) \frac{1}{\text{Fr}^2} g_y \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{w}}{\partial t} = & -\frac{\partial(uw)}{\partial x} - \frac{\partial(vw)}{\partial y} - \frac{\partial(w^2)}{\partial z} - \frac{\partial \tilde{p}}{\partial z} + \frac{\nu(T)}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \\ & + \frac{1}{\text{Re}} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + 2 \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] \\ & + (1 - \beta T) \frac{1}{\text{Fr}^2} g_z \end{aligned} \quad (2.3)$$

com $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_0) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0)$, utilizando a condição de fronteira correta para $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0)$. As equações (2.1)–(2.3) são resolvidas utilizando-se aproximação por diferenças finitas.

Na forma vetorial, as equações (2.1)–(2.3) podem ser escritas como

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} = -\nabla \tilde{p} + N(\mathbf{u}) \quad (2.4)$$

com

$$\begin{aligned}
N_1 = & -\frac{\partial(u^2)}{\partial x} - \frac{\partial(uv)}{\partial y} - \frac{\partial(uw)}{\partial z} + \frac{\nu(T)}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \\
& + \frac{1}{\text{Re}} \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] \\
& + (1 - \beta T) \frac{1}{\text{Fr}^2} g_x
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N_2 = & -\frac{\partial(uv)}{\partial x} - \frac{\partial(v^2)}{\partial y} - \frac{\partial(vw)}{\partial z} + \frac{\nu(T)}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \\
& + \frac{1}{\text{Re}} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + 2 \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] \\
& + (1 - \beta T) \frac{1}{\text{Fr}^2} g_y
\end{aligned}$$

c

$$\begin{aligned}
N_3 = & -\frac{\partial(uw)}{\partial x} - \frac{\partial(vw)}{\partial y} - \frac{\partial(w^2)}{\partial z} + \frac{\nu(T)}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \\
& + \frac{1}{\text{Re}} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + 2 \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] \\
& + (1 - \beta T) \frac{1}{\text{Fr}^2} g_z .
\end{aligned}$$

Escrevendo as equações (1.28)–(1.30) na forma vetorial podemos escrever

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla p + N(\mathbf{u}). \quad (2.5)$$

Subtraindo (2.4) de (2.5) tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}) = -\nabla(p - \tilde{p}). \quad (2.6)$$

Aplicando-se o operador rotacional a ambos os lados de (2.6) obtém-se

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

donde vem

$$\nabla \times \left[\frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}) \right] = 0. \quad (2.7)$$

Escrevendo (2.7) como

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

então pode-se dizer que

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

para qualquer $f(x)$ com $t \in [t_0, t_0 + \delta t]$.

Sendo $\mathbf{u} = \tilde{\mathbf{u}}$ em $t = t_0$, temos que $\nabla \times \mathbf{u} = \nabla \times \tilde{\mathbf{u}}$ em $t = t_0$, o que implica que $f(x) = 0$.

Assim

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

para qualquer $t \in [t_0, t_0 + \delta t]$.

Assim as vorticidades associadas a $\mathbf{u}$ e $\tilde{\mathbf{u}}$ são iguais. Porém $\tilde{\mathbf{u}}$ não satisfaz $\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = 0$.

Seja $\psi(\mathbf{x}, t)$ uma função escalar tal que

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) - \nabla \psi(\mathbf{x}, t). \quad (2.8)$$

Aplicando o divergente em ambos os lados de (2.8) obtém-se

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

Impondo-se a conservação de massa obtém-se a equação de Poisson para a função $\psi(\mathbf{x}, t)$

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t). \quad (2.9)$$

3. Resolve-se a equação de Poisson

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) \quad (2.10)$$

As condições de fronteira para ψ são

$$\begin{aligned}\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} &= 0 && \text{sobre a fronteira rígida} \\ \psi &= 0 && \text{sobre a superfície livre}\end{aligned}$$

onde $\mathbf{n}$ é a direção normal ao contorno rígido. A discretização da equação de Poisson gera um sistema linear que será resolvido pelo método dos gradientes conjugados.

4. Calcular o campo de velocidade atualizado por

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) - \nabla \psi(\mathbf{x}, t). \quad (2.11)$$

5. Calcular a nova pressão. A pressão atualizada é calculada como segue. Substituindo (2.11) em (2.6), obtém-se

$$\frac{\partial(-\nabla \psi)}{\partial t} = -\nabla(p - \tilde{p}). \quad (2.12)$$

Então

$$\frac{\partial(\psi(\mathbf{x}, t))}{\partial t} = (p - \tilde{p}) \quad (2.13)$$

que pode ser aproximada por

$$\frac{\psi(\mathbf{x}, t) - \psi(\mathbf{x}, t_0)}{\delta t} = p - \tilde{p}. \quad (2.14)$$

Sendo $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0) = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_0)$ e através de (2.11) tem-se

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

implicando que $\psi(\mathbf{x}, t_0)$ é constante. Como $\psi = 0$ na superfície livre $\psi(\mathbf{x}, t_0) = 0$ então a equação (2.14) torna-se

$$p = \tilde{p} + \frac{\psi(\mathbf{x}, t)}{\delta t} \quad (2.15)$$

em que δt é o tamanho do passo no tempo.

6. Calcula-se $T(\mathbf{x}, t)$ e $\nu(T(\mathbf{x}, t))$ usando a equação da energia (1.31).
7. Mover a superfície livre. Este último passo implica o movimento das partículas marcadoras para suas novas posições. Essas partículas são geradas nos injetores e injetadas no domínio, permitindo assim uma visualização do escoamento e obtenção da orientação da superfície livre. As coordenadas das partículas virtuais são armazenadas a cada ciclo de cálculo e, atualizadas resolvendo-se o PVI

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}, \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (2.16)$$

pelo método de Euler, fornecendo assim as novas coordenadas das partículas. Isso determina se uma partícula se move para dentro de uma célula ou deixa a região do domínio através de um ejetor.

2.2 Modificações no Método GENSMAC-3D

Para a implementação do método descrito na secção anterior, fez-se algumas modificações no método GENSMAC-3D, ou seja, foi acrescentado o cálculo de $T(\mathbf{x}, t)$ e $\nu(T(\mathbf{x}, t))$ e feito o ajuste das equações de Navier-Stokes para que simulações com influência da temperatura possam ser feitas. O método acima também foi ajustado para permitir simulações em que a viscosidade é constante.

Capítulo 3

Discretizações

As equações desenvolvidas anteriormente foram incorporadas no ambiente de simulação FreeFlow-3D. Este capítulo mostra as discretizações das equações para escoamentos não-isotérmicos. Também são apresentadas técnicas para o tratamento das condições de contorno na superfície livre e no contorno rígido.

3.1 Definição das Células

Como o fluido está continuamente em movimento faz-se necessário utilizar um procedimento de identificação da região que contém o fluido e a superfície livre. Para isto, identifica-se todas as células computacionais. As células podem ser

- Injetor/“*Inflow*” (I): células que definem a entrada do fluido na região do domínio;
- Fronteira/“*Boundary*” (B): células que definem o contorno rígido se possuem metade ou mais de seu volume no contorno rígido, de modo que possam ser impostas as condições de contorno;
- Vazia/“*Empty*” (E): células que não contêm fluido;
- Superfície/“*Surface*” (S): células que contêm fluido com pelo menos uma célula vizinha vazia e definem a posição da superfície livre;
- Cheia/“*Full*” (F): células que contêm o fluido e não têm contato com células vazias;

- Ejetor/“*Outflow*” (O): células que simulam a saída do fluido da região de domínio.

Para visualizar melhor a identificação das células, ver a figura 3.1. Para a simplificação no entendimento da figura, optou-se pela supressão da nomenclatura das células vazias (E).

Figura 3.1: Tipo de células.

Em geral, durante a simulação do escoamento, uma mesma célula pode ter seu estado alterado, isto é, passando de uma célula (E) para (S), ou de (S) para (F) por exemplo.

3.2 Discretização do Domínio

A discretização das equações será feita pelo método de diferenças finitas numa malha diferenciada tridimensional. A malha é uniformemente espaçada em cada direção, tendo as células comprimento δx , largura δy e altura δz . As velocidades são definidas nas faces das células, a pressão (p), a temperatura (T) e a função potencial (ψ) em seu centro como pode ser visto na figura 3.2.

Figura 3.2: Célula computacional, mostrando onde as variáveis são discretizadas.

3.3 Discretização das Equações de Conservação de Quantidade de Movimento

A equação de quantidade de movimento na direção x será discretizada na posição $(i + \frac{1}{2}, j, k)$, na direção y será discretizada na posição $(i, j + \frac{1}{2}, k)$ e na direção z na posição $(i, j, k + \frac{1}{2})$. As derivadas temporais são discretizadas utilizando-se Euler explícito, as derivadas espaciais utilizando-se diferenças centrais.

Considere a equação de conservação de quantidade de movimento adimensional na direção x dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} + \frac{\partial(uw)}{\partial z} = & -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\nu(T)}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \\ & + \frac{1}{\text{Re}} \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial \nu(T)}{\partial z} \right] \\ & + (1 - \beta T) \frac{1}{\text{Pr}^2} g_x \end{aligned} \quad (3.1)$$

Na equação (3.1), a derivada temporal e o gradiente de pressão são aproximadas por

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} - u_{i+\frac{1}{2},j,k}^n}{\delta t} \quad (3.2)$$

$$\left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{p_{i+1,j,k} - p_{i,j,k}}{\delta x} \quad (3.3)$$

As derivadas dos termos convectivos são aproximadas por

$$\left. \frac{\partial u^2}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{u_{i+1,j,k}^2 - u_{i,j,k}^2}{\delta x} \quad (3.4)$$

$$\left. \frac{\partial(uv)}{\partial y} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{(uv)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} - (uv)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}}{\delta y} \quad (3.5)$$

$$\left. \frac{\partial(wu)}{\partial z} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{(wu)_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} - (wu)_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}}{\delta z} \quad (3.6)$$

sendo que em (3.4)–(3.6) os termos $u_{i+1,j,k}^2$, $u_{i,j,k}^2$, $(uv)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}$, $(uv)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}$ e $(uv)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}$ não são pontos de discretização na malha, devendo assim ser obtidos por interpolação usando um esquema de alta ordem tal como o VONOS, que será visto na secção 3.5.

As derivadas dos termos viscosos são aproximadas por

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{u_{i-\frac{1}{2},j,k} - 2u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i+\frac{3}{2},j,k}}{\delta x^2} \quad (3.7)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{u_{i+\frac{1}{2},j-1,k} - 2u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i+\frac{1}{2},j+1,k}}{\delta y^2} \quad (3.8)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k-1} - 2u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i+\frac{1}{2},j,k+1}}{\delta z^2} \quad (3.9)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{u_{i+\frac{3}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{2\delta x} \quad (3.10)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{u_{i+\frac{3}{2},j+1,k} - u_{i+\frac{1}{2},j-1,k}}{2\delta y} \quad (3.11)$$

$$\left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{v_{i+1,j,k} - v_{i,j,k}}{\delta x} \quad (3.12)$$

sendo que em (3.12)

$$v_{i,j,k} = \frac{v_{i,j+\frac{1}{2},k} + v_{i,j-\frac{1}{2},k}}{2}$$

e

$$v_{i+1,j,k} = \frac{v_{i-1,j+\frac{1}{2},k} + v_{i+1,j-\frac{1}{2},k}}{2}$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial z} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k+1} - u_{i+\frac{1}{2},j,k-1}}{2\delta z} \quad (3.13)$$

$$\left. \frac{\partial w}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{w_{i+1,j,k} - w_{i,j,k}}{\delta x} \quad (3.14)$$

sendo que em (3.14)

$$w_{i,j,k} = \frac{w_{i,j,k+\frac{1}{2}} + w_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{2}$$

e

$$w_{i+1,j,k} = \frac{w_{i+1,j,k+\frac{1}{2}} + w_{i+1,j,k-\frac{1}{2}}}{2}.$$

As derivadas de $\nu(T)$ são aproximadas por

$$\left. \frac{\partial \nu(T)}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{\nu(T_{i+1,j,k}) - \nu(T_{i,j,k})}{\delta x} \quad (3.15)$$

$$\left. \frac{\partial \nu(T)}{\partial y} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{\nu(T_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}) - \nu(T_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k})}{\delta y} \quad (3.16)$$

sendo que

$$T_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} = \frac{T_{i,j,k} + T_{i+1,j,k} + T_{i,j+1,k} + T_{i+1,j+1,k}}{4}$$

e

$$T_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k} = \frac{T_{i,j,k} + T_{i+1,j,k} + T_{i,j-1,k} + T_{i+1,j-1,k}}{4}.$$

O termo fonte é aproximado por

$$(1 - \beta T) \frac{1}{\text{Fr}^2} g_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx (1 - \beta T_{i+\frac{1}{2},j,k}) \frac{1}{\text{Fr}^2} g_x \quad (3.17)$$

sendo que

$$T_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{T_{i+1,j,k} + T_{i,j,k}}{2}.$$

As discretizações das equações de quantidade de movimento nas direções y e z são obtidas de maneira análoga.

3.4 Discretização da Equação da Energia

A equação da energia será discretizada na posição (i, j, k) . Do mesmo modo como foi feito para as equações de quantidade de movimento, a derivada temporal será discretizada utilizando-se diferenças progressivas e as derivadas espaciais utilizando-se diferenças

centrais.

A discretização da derivada temporal é dada por

$$\left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{i,j,k} \approx \frac{T_{i,j,k}^{n+1} - T_{i,j,k}^n}{\delta t} \quad (3.18)$$

Discretizando-se as derivadas espaciais temos

$$\left. \frac{\partial(uT)}{\partial x} \right|_{i,j,k} \approx \frac{(uT)_{i+\frac{1}{2},j,k} - (uT)_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\delta x} \quad (3.19)$$

$$\left. \frac{\partial(vT)}{\partial y} \right|_{i,j,k} \approx \frac{(vT)_{i,j,k+\frac{1}{2}} - (vT)_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta y} \quad (3.20)$$

$$\left. \frac{\partial(wT)}{\partial z} \right|_{i,j,k} \approx \frac{(wT)_{i,j,k+\frac{1}{2}} - (wT)_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta z} \quad (3.21)$$

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{i,j,k} \approx \frac{T_{i+1,j,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i-1,j,k}}{\delta x^2} \quad (3.22)$$

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right|_{i,j,k} \approx \frac{T_{i,j+1,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i,j-1,k}}{\delta y^2} \quad (3.23)$$

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right|_{i,j,k} \approx \frac{T_{i,j,k+1} - 2T_{i,j,k} + T_{i,j,k-1}}{\delta z^2} \quad (3.24)$$

Os termos $(uT)_{i\pm\frac{1}{2},j,k}$, $(vT)_{i,j,\pm\frac{1}{2},k}$ e $(wT)_{i,j,k\pm\frac{1}{2}}$ não são pontos de discretização na malha devendo assim ser obtidos usando o mesmo procedimento utilizado em (3.4)–(3.6).

3.5 Aproximação dos Termos Convectivos

Os termos convectivos serão tratados de maneira particular por serem os principais causadores de instabilidade numérica nas simulações, portanto a discretização adequada para os termos convectivos é de extrema importância para a qualidade da solução numérica. Para se aproximar esses termos nas equações de Navier-Stokes existem vários esquemas de interpolação. Nesta secção apresentam-se formas para se aproximar esses termos. Dependendo dos esquemas de interpolação utilizados, diferentes expressões para os termos convectivos são possíveis.

Considere a figura 3.3 para aproximar a derivada parcial de uma variável genérica ϕ no ponto P_0 , ou seja, $\frac{\partial \phi}{\partial s}$, em que s representa uma direção x , y ou z e ϕ_A , ϕ_B são os valores

Figura 3.3: Estêncil usado para calcular ϕ_A e ϕ_B usando vários esquemas.

das variáveis genéricas nos pontos P_A e P_B respectivamente, e φ_A , φ_B são os valores da velocidade de convecção nos pontos P_A e P_B respectivamente. Portanto a derivada

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial s} \right|_{P_0} = \frac{\phi_A - \phi_B}{\Delta s}$$

pode ser obtida usando um dos esquemas abaixo (Ferreira et al., 2002). Os valores de ϕ_A e ϕ_B são obtidos em termos dos valores vizinhos, ϕ_{-2} , ϕ_{-1} , ϕ_0 , ϕ_1 , ϕ_2 e das velocidades convectivas φ_A e φ_B .

- **UPO** (“Upwind” de Primeira Ordem):

$$\phi_B = \begin{cases} \phi_0 & \text{se } \varphi_B \geq 0 \\ \phi_1 & \text{se } \varphi_B < 0, \end{cases} \quad \phi_A = \begin{cases} \phi_{-1} & \text{se } \varphi_A \geq 0 \\ \phi_0 & \text{se } \varphi_A < 0. \end{cases}$$

- **DC** (*Diferenças Centrais*):

$$\phi_B = \frac{\phi_1 + \phi_0}{2}, \quad \phi_A = \frac{\phi_0 + \phi_{-1}}{2}.$$

- **QUICK** (“Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics”):

$$\phi_B = \begin{cases} \frac{3}{8}\phi_1 + \frac{6}{8}\phi_0 - \frac{1}{8}\phi_{-1} & \text{se } \varphi_B \geq 0 \\ \frac{3}{8}\phi_0 + \frac{6}{8}\phi_1 - \frac{1}{8}\phi_2 & \text{se } \varphi_B < 0, \end{cases}$$

$$\phi_A = \begin{cases} \frac{3}{8}\phi_0 + \frac{6}{8}\phi_{-1} - \frac{1}{8}\phi_{-2} & \text{se } \varphi_A \geq 0 \\ \frac{3}{8}\phi_{-1} + \frac{6}{8}\phi_0 - \frac{1}{8}\phi_1 & \text{se } \varphi_A < 0. \end{cases}$$

- **HLP**A (“Hybrid-Linear Parabolic Approximation”):

$$\text{se } \varphi_B \geq 0, \quad \phi_B = \begin{cases} \phi_0 & \text{se } \hat{\phi}_B \notin [0, 1] \\ \phi_0 + (\phi_1 - \phi_0)\hat{\phi}_B & \text{se } \hat{\phi}_B \in [0, 1], \end{cases}$$

$$\text{se } \varphi_B < 0, \quad \phi_B = \begin{cases} \phi_1 & \text{se } \hat{\phi}_B \notin [0, 1] \\ \phi_1 + (\phi_0 - \phi_1)\hat{\phi}_B & \text{se } \hat{\phi}_B \in [0, 1], \end{cases}$$

$$\text{se } \varphi_A \geq 0, \quad \phi_A = \begin{cases} \phi_{-1} & \text{se } \hat{\phi}_A \notin [0, 1] \\ \phi_{-1} + (\phi_0 - \phi_{-1})\hat{\phi}_A & \text{se } \hat{\phi}_A \in [0, 1], \end{cases}$$

$$\text{se } \varphi_A < 0, \quad \phi_A = \begin{cases} \phi_0 & \text{se } \hat{\phi}_A \notin [0, 1] \\ \phi_0 + (\phi_{-1} - \phi_0)\hat{\phi}_A & \text{se } \hat{\phi}_A \in [0, 1]. \end{cases}$$

- **VONOS** (“Variable-Order Non-Oscillatory Scheme”):

$$\text{se } \varphi_B \geq 0, \quad \phi_B = \begin{cases} \phi_0 & \text{se } \hat{\phi}_B \notin [0, 1] \\ 10\phi_0 - 9\phi_{-1} & \text{se } \hat{\phi}_B \in [0, 3/74) \\ \frac{3}{8}\phi_1 + \frac{6}{8}\phi_0 - \frac{1}{8}\phi_{-1} & \text{se } \hat{\phi}_B \in [3/74, 1/2) \\ 1.5\phi_0 - 0.5\phi_{-1} & \text{se } \hat{\phi}_B \in [1/2, 2/3) \\ \phi_1 & \text{se } \hat{\phi}_B \in [2/3, 1], \end{cases}$$

$$\text{se } \varphi_B < 0, \quad \phi_B = \begin{cases} \phi_1 & \text{se } \hat{\phi}_B \notin [0, 1] \\ 10\phi_1 - 9\phi_2 & \text{se } \hat{\phi}_B \in [0, 3/74) \\ \frac{3}{8}\phi_0 + \frac{6}{8}\phi_1 - \frac{1}{8}\phi_2 & \text{se } \hat{\phi}_B \in [3/74, 1/2) \\ 1.5\phi_1 - 0.5\phi_2 & \text{se } \hat{\phi}_B \in [1/2, 2/3) \\ \phi_0 & \text{se } \hat{\phi}_B \in [2/3, 1], \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\text{se } \varphi_A \geq 0, \quad \phi_A = & \begin{cases} \phi_{-1} & \text{se } \hat{\phi}_A \notin [0, 1] \\ 10\phi_{-1} - 9\phi_{-2} & \text{se } \hat{\phi}_A \in [0, 3/74) \\ \frac{3}{8}\phi_0 + \frac{6}{8}\phi_{-1} - \frac{1}{8}\phi_{-2} & \text{se } \hat{\phi}_A \in [3/74, 1/2) \\ 1.5\phi_{-1} - 0.5\phi_{-2} & \text{se } \hat{\phi}_A \in [1/2, 2/3) \\ \phi_0 & \text{se } \hat{\phi}_A \in [2/3, 1], \end{cases} \\
\text{se } \varphi_A < 0, \quad \phi_A = & \begin{cases} \phi_0 & \text{se } \hat{\phi}_A \notin [0, 1] \\ 10\phi_0 - 9\phi_1 & \text{se } \hat{\phi}_A \in [0, 3/74) \\ \frac{3}{8}\phi_{-1} + \frac{6}{8}\phi_0 - \frac{1}{8}\phi_1 & \text{se } \hat{\phi}_A \in [3/74, 1/2) \\ 1.5\phi_0 - 0.5\phi_1 & \text{se } \hat{\phi}_A \in [1/2, 2/3) \\ \phi_{-1} & \text{se } \hat{\phi}_A \in [2/3, 1]. \end{cases}
\end{aligned}$$

As expressões para $\hat{\phi}_A$ e $\hat{\phi}_B$ que aparecem nos esquemas HLPa e VONOS são definidas por

$$\hat{\phi}_A = \frac{\phi_U - \phi_R}{\phi_D - \phi_R} \Big|_{P_A} \quad \text{e} \quad \hat{\phi}_B = \frac{\phi_U - \phi_R}{\phi_D - \phi_R} \Big|_{P_B}$$

em que ϕ_U valor da velocidade ϕ “upstream”, ϕ_R valor da velocidade ϕ “remote-upstream” e ϕ_D valor da velocidade ϕ “downstream”.

Neste trabalho utiliza-se o esquema VONOS que foi o esquema que se mostrou mais adequado para simulações de escoamentos com superfícies livres (Ferreira et al., 2002; Souza, 2002). Para implementar os esquemas acima considere por exemplo o termo $\frac{\partial(u^2)}{\partial x}$ no ponto $(i + \frac{1}{2}, j, k)$. Sua derivada é aproximada por

$$\frac{\partial(u^2)}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{\partial(uu)}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{(\hat{u}_{i+1,j,k}u_{i+1,j,k} - \hat{u}_{i,j,k}u_{i,j,k})}{\delta x}. \quad (3.25)$$

As velocidades de convecção na expressão acima são obtidas por uma média aritmética, então

$$\hat{u}_{i,j,k} = \frac{1}{2}(u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i-\frac{1}{2},j,k}) \quad \text{e} \quad \hat{u}_{i+1,j,k} = \frac{1}{2}(u_{i+\frac{3}{2},j,k} + u_{i+\frac{1}{2},j,k}).$$

Definindo

$$S_{i+1,j,k} = \begin{cases} 0 & \text{se } \hat{u}_{i+1,j,k} \geq 0 \\ 1 & \text{se } \hat{u}_{i+1,j,k} < 0, \end{cases} \quad S_{i,j,k} = \begin{cases} 0 & \text{se } \hat{u}_{i,j,k} \geq 0 \\ 1 & \text{se } \hat{u}_{i,j,k} < 0 \end{cases}$$

utilizando o esquema VONOS as velocidades transportadas em (3.25) são obtidas como

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_{i+1,j,k} &= (1 - S_{i+1,j,k}) \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{u_{i+\frac{3}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}} \right) + S_{i+1,j,k} \left(\frac{u_{i+\frac{3}{2},j,k} - u_{i+\frac{5}{2},j,k}}{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i+\frac{5}{2},j,k}} \right) \\ u_{i+1,j,k} &= (1 - S_{i+1,j,k}) \left\{ \begin{array}{ll} u_{i+\frac{1}{2},j,k} & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j,k} \notin [0, 1] \\ 10u_{i+\frac{1}{2},j,k} - 9u_{i-\frac{1}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j,k} \in [0, \frac{3}{74}) \\ \frac{3}{8}u_{i+\frac{3}{2},j,k} + \frac{6}{8}u_{i+\frac{1}{2},j,k} - \frac{1}{8}u_{i-\frac{1}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j,k} \in [\frac{3}{74}, \frac{1}{2}) \\ \frac{3}{2}u_{i+\frac{1}{2},j,k} - \frac{1}{2}u_{i-\frac{1}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j,k} \in [\frac{1}{2}, \frac{2}{3}) \\ u_{i+\frac{3}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j,k} \in [\frac{2}{3}, 1] \end{array} \right\} \\ &+ S_{i+1,j,k} \left\{ \begin{array}{ll} u_{i+\frac{3}{2},j,k} & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j,k} \notin [0, 1] \\ 10u_{i+\frac{3}{2},j,k} - 9u_{i+\frac{5}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j,k} \in [0, \frac{3}{74}) \\ \frac{3}{8}u_{i+\frac{1}{2},j,k} + \frac{6}{8}u_{i+\frac{3}{2},j,k} - \frac{1}{8}u_{i+\frac{5}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j,k} \in [\frac{3}{74}, \frac{1}{2}) \\ \frac{3}{2}u_{i+\frac{3}{2},j,k} - \frac{1}{2}u_{i+\frac{5}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j,k} \in [\frac{1}{2}, \frac{2}{3}) \\ u_{i+\frac{5}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j,k} \in [\frac{2}{3}, 1] \end{array} \right\} \\ \hat{\phi}_{i,j,k} &= (1 - S_{i,j,k}) \left(\frac{u_{i-\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{3}{2},j,k}}{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{3}{2},j,k}} \right) + S_{i,j,k} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i+\frac{3}{2},j,k}}{u_{i-\frac{1}{2},j,k} - u_{i+\frac{3}{2},j,k}} \right) \\ u_{i,j,k} &= (1 - S_{i,j,k}) \left\{ \begin{array}{ll} u_{i-\frac{1}{2},j,k} & \text{se } \hat{\phi}_{i,j,k} \notin [0, 1] \\ 10u_{i-\frac{1}{2},j,k} - 9u_{i-\frac{3}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i,j,k} \in [0, \frac{3}{74}) \\ \frac{3}{8}u_{i+\frac{1}{2},j,k} + \frac{6}{8}u_{i-\frac{1}{2},j,k} - \frac{1}{8}u_{i-\frac{3}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i,j,k} \in [\frac{3}{74}, \frac{1}{2}) \\ \frac{3}{2}u_{i-\frac{1}{2},j,k} - \frac{1}{2}u_{i-\frac{3}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i,j,k} \in [\frac{1}{2}, \frac{2}{3}) \\ u_{i+\frac{1}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i,j,k} \in [\frac{2}{3}, 1] \end{array} \right\} \\ &+ S_{i,j,k} \left\{ \begin{array}{ll} u_{i+\frac{1}{2},j,k} & \text{se } \hat{\phi}_{i,j,k} \notin [0, 1] \\ 10u_{i+\frac{1}{2},j,k} - 9u_{i+\frac{3}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i,j,k} \in [0, \frac{3}{74}) \\ \frac{3}{8}u_{i-\frac{1}{2},j,k} + \frac{6}{8}u_{i+\frac{1}{2},j,k} - \frac{1}{8}u_{i+\frac{3}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i,j,k} \in [\frac{3}{74}, \frac{1}{2}) \\ \frac{3}{2}u_{i+\frac{1}{2},j,k} - \frac{1}{2}u_{i+\frac{3}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i,j,k} \in [\frac{1}{2}, \frac{2}{3}) \\ u_{i-\frac{1}{2},j,k}, & \text{se } \hat{\phi}_{i,j,k} \in [\frac{2}{3}, 1] \end{array} \right\}. \end{aligned}$$

Os outros termos convectivos são aproximados de maneira análoga a este procedimento.

3.6 Discretização da Equação de Poisson para ψ

Considere a equação de Poisson para o cálculo da função potencial ψ , dada em (2.10) por

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

que em coordenadas cartesianas tridimensionais pode ser escrita como

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{w}}{\partial z}. \quad (3.26)$$

Aproximando (3.26) por diferenças centrais de segunda ordem na posição (i, j, k) temos

$$\left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right|_{i,j,k} \approx \frac{\psi_{i+1,j,k} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i-1,j,k}}{\delta x^2} \quad (3.27)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right|_{i,j,k} \approx \frac{\psi_{i,j+1,k} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i,j-1,k}}{\delta y^2} \quad (3.28)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right|_{i,j,k} \approx \frac{\psi_{i,j,k+1} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i,j,k-1}}{\delta z^2} \quad (3.29)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right|_{i,j,k} \approx \frac{\psi_{i,j,k+1} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i,j,k-1}}{\delta z^2} \quad (3.30)$$

$$\left. \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right|_{i,j,k} = \frac{\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j,k} - \tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\delta x} \quad (3.31)$$

$$\left. \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} \right|_{i,j,k} = \frac{\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2},k} - \tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\delta y} \quad (3.32)$$

$$\left. \frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} \right|_{i,j,k} = \frac{\tilde{w}_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \tilde{w}_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta z} \quad (3.33)$$

Definindo

$$\tilde{D}_{i,j,k} = \left. \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right|_{i,j,k} + \left. \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} \right|_{i,j,k} + \left. \frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} \right|_{i,j,k}$$

a discretização da equação (3.26) pode ser escrita como

$$-\beta\psi_{i,j,k-1} - \alpha\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i-1,j,k} + (2+2\alpha+2\beta)\psi_{i,j,k} - \psi_{i+1,j,k} - \alpha\psi_{i,j+1,k} - \beta\psi_{i,j,k+1} = \delta x^2 \tilde{D}_{i,j,k} \quad (3.34)$$

em que $\alpha = \frac{\delta x^2}{\delta y^2}$ e $\beta = \frac{\delta x^2}{\delta z^2}$.

A discretização de (3.26) resulta em um sistema de equações lineares que pode ser representado por

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{D}$$

onde $\mathbf{A}$ é uma matriz simétrica e definida positiva de ordem n , $\mathbf{x}$ é o vetor solução de ordem n e $\mathbf{D}$ o vetor divergente de ordem n , sendo n o número de células (F) da malha. Para se resolver este sistema utiliza-se o método dos gradientes conjugados (Shewchuck, 1994) onde $\mathbf{x}$ é inicializado como um vetor da função potencial no passo anterior.

3.7 Condições de Contorno

3.7.1 Condições de Contorno na Superfície Livre

Suponha que o espaçamento da malha seja suficientemente pequeno para que a superfície livre possa ser aproximada por uma superfície planar. Esta superfície planar pode ser paralela a um eixo coordenado, formar um ângulo de 45° com dois eixos coordenados ou um ângulo de 60° com três eixos coordenados. Os três casos podem ser identificados por células de superfície (S) contendo uma, duas ou três de suas faces adjacentes a uma célula vazia (E).

Por exemplo, se uma célula (S) tem somente a face $(k + \frac{1}{2})$ adjacente a uma célula (E), observe a figura 3.4, então neste caso toma-se o vetor normal $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$ e os vetores tangentes $\mathbf{m1} = (1, 0, 0)$ e $\mathbf{m2} = (0, 1, 0)$ e então as condições (1.34)–(1.36) se reduzem a

$$p = \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right) \quad (3.35)$$

$$\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0 \quad (3.36)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) = 0. \quad (3.37)$$

As equações (3.35)–(3.37) juntamente com a equação de conservação de massa (1.27) são discretizadas resultando em um sistema algébrico que é resolvido para encontrar as velocidades na célula (E) e a pressão no centro da célula (S), ver figura 3.4. Outras configurações

Figura 3.4: Célula (S) com a face $(k + \frac{1}{2})$ adjacente a célula (E).

Figura 3.5: Exemplo de uma superfície planar inclinada a 45° .

de células (S) tendo somente uma face adjacente a células (E) são tratadas analogamente.

Para células (S) tendo duas faces adjacentes a células (E) a superfície planar forma um ângulo de 45° com os eixos das faces adjacentes, ver figura 3.5. Nessas superfícies assume-se que o vetor normal é da forma $\mathbf{n} = (\pm \frac{\sqrt{2}}{2}, \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, 0)$ ou $\mathbf{n} = (\pm \frac{\sqrt{2}}{2}, 0, \pm \frac{\sqrt{2}}{2})$ ou $\mathbf{n} = (0, \pm \frac{\sqrt{2}}{2}, \pm \frac{\sqrt{2}}{2})$. Por exemplo, considerando a célula (S) mostrada na figura 3.6, toma-se $\mathbf{n} = (\frac{\sqrt{2}}{2}, 0, \frac{\sqrt{2}}{2})$, $\mathbf{m1} = (\frac{\sqrt{2}}{2}, 0, -\frac{\sqrt{2}}{2})$ e $\mathbf{m2} = (0, 1, 0)$ e então as condições (1.34)–(1.36) se reduzem a

$$p = \frac{1}{Re} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] = 0 \quad (3.38)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial w}{\partial z} \right) = 0. \quad (3.39)$$

Figura 3.6: Célula (S) com as faces $(k + \frac{1}{2})$ e $(i + \frac{1}{2})$ adjacentes a células (E).

Figura 3.7: Exemplo de uma superfície planar inclinada a 60° .

A equação (3.38) é usada para calcular a pressão no centro da célula (S) e as velocidades nas faces adjacentes às células (E) são calculadas usando (3.39) juntamente com a equação de conservação de massa (1.27). Outras configurações de células (S) tendo duas faces adjacentes a células (E) são tratadas analogamente.

Para células (S) tendo três faces adjacentes a células (E) a superfície planar forma um ângulo de 60° com os três eixos coordenados, ver figura 3.7. Nestas superfícies assume-se que o vetor normal é da forma $\mathbf{n} = (\pm \frac{\sqrt{3}}{3}, \pm \frac{\sqrt{3}}{3}, \pm \frac{\sqrt{3}}{3})$. Por exemplo, considerando a célula (S) mostrada na figura 3.8, toma-se $\mathbf{n} = (\frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3})$, $\mathbf{m1} = (0, \frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2})$ e $\mathbf{m2} = (-2\frac{\sqrt{6}}{6}, \frac{\sqrt{6}}{6}, \frac{\sqrt{6}}{6})$ e então as condições (1.34)–(1.36) se reduzem a

$$p - \frac{2}{3Re} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] = 0 \quad (3.40)$$

Figura 3.8: Célula (S) com as faces $(i + \frac{1}{2})$, $(k + \frac{1}{2})$ e $(j + \frac{1}{2})$ adjacentes a células (E).

$$2\frac{\partial v}{\partial y} - 2\frac{\partial w}{\partial z} + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) - \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) = 0 \quad (3.41)$$

$$-4\frac{\partial u}{\partial x} + 2\frac{\partial v}{\partial y} + 2\frac{\partial w}{\partial z} - \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) - 2\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) + 2\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) = 0 \quad (3.42)$$

As equações (3.40) (3.42) juntamente com a equação de conservação de massa (1.27) são usadas para se obter a pressão no centro da célula (S) e as velocidades nas faces adjacentes às células (E). Outras configurações de células (S) tendo três faces adjacentes as células (E) são tratadas analogamente.

Ainda há casos de células (S) tendo dois lados opostos adjacentes a células (E). Um tratamento para esses casos consiste em definir a pressão nula no centro da célula (S) e as velocidades são calculadas de modo a satisfazer a equação de conservação de massa. Uma descrição detalhada de cada caso pode ser encontrada em (Tomé et al., 1996a).

Para o cálculo da temperatura na superfície livre foi utilizado o seguinte procedimento. Considere uma célula de superfície $S_{i,j,k}$ e suponha que o balanço de calor sobre as faces dessa célula adjacentes a células (E) seja nulo. Serão considerados os casos em que a célula (S) contém uma, duas, três, quatro, cinco ou seis de suas faces adjacentes a uma célula (E). Lembrando que a condição de contorno da temperatura na superfície livre é dada pela equação (1.37) e integrando-se sobre a superfície da célula (S) sobre as faces

Figura 3.9: Célula (S) tendo uma face adjacente a uma célula (E).

adjacentes as células (E) obtemos

$$\int_{\Omega_S} -\nabla T \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\Omega_S} \text{Nu}(T_S - T_A) dS \quad (3.43)$$

em que Ω_S denota a superfície livre associada à célula (S).

Agora considera-se alguns casos de modo que possamos obter uma fórmula geral para calcularmos a temperatura na superfície livre. Considerando que a célula (S) possui somente uma célula adjacente (E), como na figura 3.9 e seja $T_{i,j,k} = T_S$ o valor da temperatura a ser obtido na célula (S), T_F o valor da temperatura na célula (F) oposta a célula (E) e T_A o valor de referência para a temperatura no ambiente, então (3.43) pode ser aproximada por

$$-\frac{T_S - T_{Fx}}{\delta x} \delta y \delta z = \text{Nu}(T_S - T_A) \delta y \delta z \quad (3.44)$$

logo

$$T_S = \frac{T_{Fx} + \delta x \text{Nu} T_A}{1 + \delta x \text{Nu}} \quad (3.45)$$

em que T_{Fx} é a temperatura na célula (F) na direção x .

Considerando agora que a célula (S) possui duas células adjacentes (E), como na figura 3.10, então (3.43) pode ser aproximada por

$$-\left(\frac{T_S - T_{Fx}}{\delta x} \delta y \delta z + \frac{T_S - T_{Fy}}{\delta y} \delta x \delta z \right) = \text{Nu}(T_S - T_A) \delta y \delta z + \text{Nu}(T_S - T_A) \delta x \delta z \quad (3.46)$$

logo

$$T_S = \frac{T_{Fx} \frac{\delta y \delta z}{\delta x} + T_{Fy} \frac{\delta x \delta z}{\delta y} + \text{Nu} T_A (\delta y \delta z + \delta x \delta z)}{\frac{\delta y \delta z}{\delta x} + \frac{\delta x \delta z}{\delta y} + \text{Nu} (\delta y \delta z + \delta x \delta z)} \quad (3.47)$$

Figura 3.10: Célula (S) tendo duas faces adjacentes a células (E).

Considerando que $\delta x = \delta y = \delta z = \delta$ a equação (3.47) torna-se

$$T_S = \frac{T_{Fx} + T_{Fy} + 2\delta\text{Nu}T_A}{2 + 2\delta\text{Nu}} \quad (3.48)$$

em que T_{Fx} é a temperatura na célula (F) oposta a célula (E) na direção x e T_{Fy} é a temperatura na célula (F) oposta a célula (E) na direção y . Outros casos poderão ser obtidos de maneira análoga.

Notando o desenvolvimento das equações para o cálculo da temperatura na superfície livre nos casos acima e sendo $\delta x = \delta y = \delta z = \delta$ podemos então usar a seguinte fórmula geral para calcularmos a temperatura na superfície livre

$$T_S = \frac{\sum T_F + \delta\text{Nu}T_A\#C_E}{\#C_F + \delta\text{Nu}\#C_E} \quad (3.49)$$

em que $\sum T_F$ é a soma das temperaturas das células (F) adjacentes as faces da célula (S) e opostas a células (E), $\#C_E$ é o número das células (E) adjacente as faces da célula (S) e $\#C_F$ é o número das células (F) adjacente as faces da célula (S) e opostas as células (E). O fato de considerarmos que $\delta x = \delta y = \delta z = \delta$ não impõe uma restrição adicional ao código, visto que a aproximação das condições de contorno na superfície livre exigem que $\delta x = \delta y = \delta z$.

Figura 3.11: Célula (B) com a face $(i + \frac{1}{2})$ adjacente com uma célula (S) ou (F).

3.7.2 Condições no Contorno Rígido

O método utilizado pra o cálculo das velocidades u , v e w nas faces das células de fronteira é a interpolação linear. Essas células podem ter um, dois ou três lados adjacentes as células de superfície ou as células cheias. Tratando de problemas tridimensionais têm-se 26 casos possíveis (Tomé et al., 1996a). Como exemplo de aplicação do método consideram-se alguns exemplos.

Considere o caso em que uma célula (B) possui a face $(i + \frac{1}{2})$ em contato com uma célula (F) ou (S), como na figura 3.11.

Para calcular a velocidade $u_{i+\frac{1}{2},j,k}$ considera-se $P_0 = (x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_k)$, $P_1 = (x_{i+\frac{3}{2}}, y_j, z_k)$ e $P_b = (x_{ub}, y_j, z_k)$, em que x_{ub} representa a intersecção entre a reta definida por P_0 e P_1 e a superfície da fronteira. O valor de x_{ub} é dado pela intersecção dos planos $y = y_j$, $z = z_k$ com a fronteira local. Portanto a interpolação linear entre P_b e P_1 é

$$u(x) = \frac{x - x_{i+\frac{3}{2}}}{x_{ub} - x_{i+\frac{3}{2}}} u_b + \frac{x - x_{ub}}{x_{i+\frac{3}{2}} - x_{ub}} u_{i+\frac{3}{2},j,k} \quad (3.50)$$

assim $u_{i+\frac{1}{2},j,k}$ pode ser calculado por

$$u_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{ub}}{x_{i+\frac{3}{2}} - x_{ub}} u_{i+\frac{3}{2},j,k} - \frac{\delta x}{x_{ub} - x_{i+\frac{3}{2}}} u_b \quad (3.51)$$

em que u_b é a velocidade da fronteira na direção x ($u_b = 0$ se a condição “no-slip” é aplicada sobre esta fronteira). As outras duas velocidades sobre as faces da célula de fronteira são obtidas de modo análogo e são dadas por

Figura 3.12: Célula (B) com as faces $(i + \frac{1}{2})$ e $(j + \frac{1}{2})$ adjacentes a células (S) ou (F).

$$v_{i,j+\frac{1}{2},k} = \frac{x_i - x_{vb}}{x_{i+1} - x_{vb}} v_{i+1,j+\frac{1}{2},k} - \frac{\delta x}{x_{vb} - x_{i+1}} v_b \quad (3.52)$$

$$w_{i,j,k+\frac{1}{2}} = \frac{x_i - x_{wb}}{x_{i+1} - x_{wb}} w_{i+1,j,k+\frac{1}{2}} - \frac{\delta x}{x_{wb} - x_{i+1}} w_b \quad (3.53)$$

em que x_{vb} e x_{wb} são dados pela intersecção dos planos $y = y_{j+\frac{1}{2}}$, $z = z_k$ com a fronteira local e $y = y_j$, $z = z_{k+\frac{1}{2}}$ com a fronteira local respectivamente e v_b e w_b são as velocidades da fronteira nas direções y e z respectivamente. Outras configurações de células de fronteira tendo uma face adjacente em contato com uma célula (S) ou (F) são tratadas de modo semelhante.

Considere o caso que a célula (B) com as faces $(i + \frac{1}{2})$ e $(j + \frac{1}{2})$ está em contato com células (S) ou (F), como mostra a figura 3.12.

Calcula-se a velocidade $u_{i+\frac{1}{2},j,k}$ por interpolação linear que pode ser feita na direção x usando $u_{i+\frac{3}{2},j,k}$ e u_b ou na direção z usando $u_{i+\frac{1}{2},j,k+1}$ e u_b . Para fazer a interpolação deve-se determinar qual direção é mais apropriada como será descrito a seguir. Considera-se $P_0 = (x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_k)$, $P_{1x} = (x_{i+\frac{3}{2}}, y_j, z_k)$, $P_{bx} = (x_{ub}, y_j, z_k)$, $P_{1z} = (x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_{k+1})$ e $P_{bz} = (x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_{ub})$, em que x_{ub} representa a intersecção entre a reta definida por P_0 e P_{1x} e a superfície da fronteira e z_{ub} representa a intersecção entre a reta definida por P_0 e P_{1z} e a superfície da fronteira. Os valores de x_{ub} e z_{ub} são dados pela intersecção dos planos $y = y_j$, $z = z_k$ com a fronteira local e $x = x_{i+\frac{1}{2}}$, $y = y_j$ com a fronteira local

respectivamente. Com x_{ub} e z_{ub} obtidos nós calculamos as distâncias

$$d_{xu} = |x_{ub} - x_{i+\frac{1}{2}}| \quad \text{e} \quad d_{zu} = |z_{ub} - z_k|.$$

Para escolher a direção para interpolarmos toma-se o ponto mais próximo de P_0 . Por exemplo se $d_{xu} < d_{zu}$ toma-se P_{bx} e interpola-se entre P_{bx} e P_{1x} . Neste caso $u_{i+\frac{1}{2},j,k}$ é dada por

$$u_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{ub}}{x_{i+\frac{3}{2}} - x_{ub}} u_{i+\frac{3}{2},j,k} - \frac{\delta x}{x_{ub} - x_{i+\frac{3}{2}}} u_b \quad (3.54)$$

Mas se $d_{xu} > d_{zu}$ então toma-se P_{bz} e interpola-se entre P_{bz} e P_{1z} . Neste caso $u_{i+\frac{1}{2},j,k}$ é dada por

$$u_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{z_k - z_{ub}}{z_{k+1} - z_{ub}} u_{i+\frac{1}{2},j,k+1} - \frac{\delta z}{z_{ub} - z_{k+1}} u_b. \quad (3.55)$$

As outras duas velocidades $v_{i,j+\frac{1}{2},k}$ e $w_{i,j,k+\frac{1}{2}}$ são obtidas analogamente aplicando o mesmo critério. Outras configurações de células de fronteira tendo duas faces adjacentes em contato com células (S) ou (F) são tratadas de modo semelhante.

Considere o caso que a célula (B) com as faces $(i + \frac{1}{2})$, $(j + \frac{1}{2})$ e $(k + \frac{1}{2})$ está em contato com células (S) ou (F), como mostra a figura 3.13.

Para o cálculo da velocidade $u_{i+\frac{1}{2},j,k}$ a interpolação linear pode ser feita na direção x usando $u_{i+\frac{3}{2},j,k}$ e u_b ou na direção y usando $u_{i+\frac{1}{2},j-1,k}$ e u_b ou na direção z usando $u_{i+\frac{1}{2},j,k+1}$ e u_b . Para fazer a interpolação adota-se o mesmo critério no caso de termos configurações de células de fronteira tendo duas faces adjacentes em contato com células (S) ou (F) visto anteriormente. Considera-se $P_0 = (x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_k)$, $P_{1x} = (x_{i+\frac{3}{2}}, y_j, z_k)$, $P_{bx} = (x_{ub}, y_j, z_k)$, $P_{1y} = (x_{i+\frac{1}{2}}, y_{j-1}, z_k)$, $P_{by} = (x_{i+\frac{1}{2}}, y_{ub}, z_k)$, $P_{1z} = (x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_{k+1})$ e $P_{bz} = (x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_{ub})$, em que x_{ub} representa a intersecção entre a reta definida por P_0 e P_{1x} e a superfície da fronteira, em que y_{ub} representa a intersecção entre a reta definida por P_0 e P_{1y} e a superfície da fronteira e z_{ub} representa a intersecção entre a reta definida por P_0 e P_{1z} e a superfície da fronteira. Os valores de x_{ub} , y_{ub} e z_{ub} são dados pela intersecção dos planos $y = y_j$, $z = z_k$ com a fronteira local, $x = x_{i+\frac{1}{2}}$, $z = z_k$ com a fronteira local e $x = x_{i+\frac{1}{2}}$, $y = y_j$ com a fronteira local respectivamente. Com x_{ub} , y_{ub} e z_{ub} obtidos calculam-se as

Figura 3.13: Célula (B) com as faces $(i + \frac{1}{2})$, $(j + \frac{1}{2})$ e $(k + \frac{1}{2})$ adjacentes a células (S) ou (F).

distâncias

$$d_{xu} = |x_{ub} - x_{i+\frac{1}{2}}|, \quad d_{yu} = |y_{ub} - y_j| \quad \text{e} \quad d_{zu} = |z_{ub} - z_k|.$$

Para escolher a direção para interpolarmos toma-se o ponto mais próximo de P_0 , isto é, seja

$$d_{min} = \min\{d_{xu}, d_{yu}, d_{zu}\}.$$

Por exemplo se $d_{min} = d_{xu}$ interpola-se entre P_{bx} e P_{1x} . Neste caso $u_{i+\frac{1}{2},j,k}$ é dada por

$$u_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{ub}}{x_{i+\frac{3}{2}} - x_{ub}} u_{i+\frac{3}{2},j,k} - \frac{\delta x}{x_{ub} - x_{i+\frac{3}{2}}} u_b. \quad (3.56)$$

Mas se $d_{min} = d_{yu}$ então interpola-se entre P_{by} e P_{1z} . Neste caso $u_{i+\frac{1}{2},j,k}$ é dada por

$$u_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{y_j - y_{ub}}{y_{j-1} - y_{ub}} u_{i+\frac{1}{2},j-1,k} - \frac{\delta y}{y_{ub} - y_{j+1}} u_b. \quad (3.57)$$

Mas se $d_{min} = d_{zu}$ então interpola-se entre P_{bz} e P_{1z} . Neste caso $u_{i+\frac{1}{2},j,k}$ é dada por

$$u_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{z_k - z_{ub}}{z_{k+1} - z_{ub}} u_{i+\frac{1}{2},j,k+1} - \frac{\delta z}{z_{ub} - z_{k+1}} u_b \quad (3.58)$$

Figura 3.14: Célula (B) com a face $(i + \frac{1}{2})$ adjacente a célula (S) ou (F).

As outras duas velocidades $v_{i,j+\frac{1}{2},k}$ e $w_{i,j,k+\frac{1}{2}}$ são obtidas analogamente aplicando o mesmo critério. Outras configurações de células de fronteira tendo três faces adjacentes em contato com células (S) ou (F) são tratadas de modo semelhante. Detalhes de cada caso pode ser visto em (Tomé et al., 1996a).

O procedimento para o cálculo da temperatura nas células de fronteira é semelhante ao que foi feito para as velocidades sendo que a temperatura é calculada no centro das células de fronteira. Como exemplo considera-se o caso em que temos uma célula (B) com a face $(i + \frac{1}{2})$ em contato com uma célula (S) ou (F) como na figura 3.14.

Para o cálculo da temperatura $T_{i,j,k}$ considera-se $P_0 = (x_i, y_j, z_k)$, $P_1 = (x_{i+1}, y_j, z_k)$ e $P_b = (x_{Tb}, y_j, z_k)$, em que x_{Tb} representa a intersecção entre a reta definida por P_0 e P_1 e a superfície da fronteira. O valor de x_{Tb} é dado pela intersecção dos planos $y = y_j$, $z = z_k$ com a fronteira local. Portanto o valor de $T_{i,j,k}$ dado pela interpolação linear entre P_b e P_1 é

$$T_{i,j,k} = \frac{x_i - x_{Tb}}{x_{i+1} - x_{Tb}} T_{i+1,j,k} - \frac{\delta x}{x_{Tb} - x_{i+1}} T_b \quad (3.59)$$

em que T_b é a temperatura da fronteira na direção x . Outras configurações de células (B) tendo uma, duas ou três faces adjacentes em contato com células (S) ou (F) são tratadas de forma semelhante.

Quando utilizada a condição de fronteira adiabática a temperatura nas células de fronteira (B) é calculada usando o seguinte procedimento. Seja A o conjunto dos índices das células adjacentes às faces da célula (i, j, k) que são classificadas como (F) ou (S) e n o número de elementos em A. A temperatura na célula de fronteira (B) $T_{i,j,k}$ é dada por

$$T_{i,j,k} = \frac{1}{n} \sum_{\lambda \in \Lambda} T_{\lambda}. \quad (3.60)$$

3.8 Controle do Passo no Tempo

O tamanho do passo no tempo é obtido sujeito as seguintes restrições de estabilidade:

- nenhuma partícula cruzará mais de uma célula em um dado intervalo de tempo, isto é,

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

sendo suficiente que

$$\delta t < \frac{\delta x}{|u_{max}|}, \quad \delta t < \frac{\delta y}{|v_{max}|}, \quad \text{e} \quad \delta t < \frac{\delta z}{|w_{max}|}$$

em que u_{max} , v_{max} e w_{max} são os valores máximos de u , v e w .

- devido a discretização explícita das equações de conservação de quantidade de movimento adota-se a restrição de estabilidade (Tomé et al., 1996b)

$$\delta t < \frac{\text{Re}}{2\nu(T)} \frac{\delta x^2 \delta y^2 \delta z^2}{\delta x^2 + \delta y^2 + \delta z^2}$$

sendo suficiente que

$$\delta t < \frac{\text{Re}}{2\nu_{max}} \frac{\delta x^2 \delta y^2 \delta z^2}{\delta x^2 + \delta y^2 + \delta z^2}.$$

- a equação da energia requer uma restrição de estabilidade que complementa às restrições acima e é análoga ao item anterior (Griebel et al., 1997)

$$\delta t < \frac{\text{RePr}}{2} \frac{\delta x^2 \delta y^2 \delta z^2}{\delta x^2 + \delta y^2 + \delta z^2}.$$

Capítulo 4

O Ambiente de Simulação

FreeFlow-3D para Escoamentos

Não-Isotérmicos

Este capítulo apresenta de forma resumida o sistema FreeFlow-3D (Castelo Filho et al., 1999), e as modificações feitas em seus módulos para que o mesmo possa simular escoamentos não-isotérmicos.

4.1 O Ambiente de Simulação FreeFlow-3D

O ambiente de simulação tridimensional para escoamentos incompressíveis com superfícies livres é constituído por quatro módulos, os quais são:

- Modflow-3D (modelador de moldes e escoamentos): trata-se de um módulo interativo para a especificação inicial de dados que caracterizam o escoamento a ser simulado e possibilita que elementos no domínio do escoamento sejam definidos. Este módulo inclui elementos tais como recipientes, injetores, e fluidos;
- Simflow-3D (simulador de escoamentos): este módulo é a parte central do FreeFlow-3D onde são resolvidas as equações governantes do escoamento juntamente com as condições de contorno;
- Visflow-3D (visualizador de escoamentos): este módulo interativo permite ao usuário

visualizar a saída do Simflow-3D em imagens nos tempos de impressão pré-estabelecidos no modelador;

- Resimflow-3D (reiniciador de escoamentos): este módulo permite ao usuário reiniciar a simulação do ponto em que foi interrompida.

A implementação dos quatro módulos foi feita em linguagem de programação C sobre o sistema operacional *Unix*. A comunicação dos módulos do sistema é efetuada através de arquivos de dados.

4.2 Estrutura de Dados

Os dados no sistema FreeFlow-3D estão divididos em duas classes: dados diretos e indiretos (Paiva, 2000). O conjunto de dados diretos contém dados referentes ao domínio, velocidade, pressão, células, parâmetros usados pelo simulador e a representação dos objetos geométricos do modelo. Este dados estão subdivididos em:

- dados estáticos (não são modificados durante a simulação): definição do domínio, espaçamento da malha, parâmetros de adimensionalização entre outros;
- dados dinâmicos (que se modificam durante a simulação): campo de velocidades, pressão, configuração dos tipos de células, posição da superfície livre entre outros.

Os dados indiretos são representados por três estruturas:

- recipientes: representam os recipientes e é composta por dados geométricos, tipos de condições de contorno, as células que o definem e atributos específicos do recipiente representado;
- injetor: representa os injetores e é composta por dados geométricos, informações sobre o recipiente e o fluido que relacionam-se com esse injetor, as células que o definem e atributos específicos;
- ejetor: representam os ejetores e é composta por dados geométricos, tipos de condições de contorno, informações sobre o recipiente que o contém, as células que o definem e atributos específicos.

Dados como velocidades e pressão são representados por matrizes, assim como os identificadores das células (F, S, I, O e B), que são armazenados em uma matriz chamada “*CELL*”, os quais são atualizados em cada passo no tempo, enquanto que cada grupo de células (F, S, I, O e B) é representado por uma estrutura de dados do tipo árvore, contendo informações e configurações destas células. Os objetos geométricos são representados por uma estrutura de dados do tipo *B-Rep* (“*Boundary Representation*”), que armazena objetos pela sua fronteira (sólidos, faces, arestas, vértices e suas estruturas de incidência e adjacência). A estrutura de dados utilizada é denominada “*half-edge*” e esta dividida em seis níveis hierárquicos. Cada nível da estrutura “*half-edge*” esta representado na figura 4.1. Cada nível é representado por listas duplamente encadeadas, sendo que a lista de semi-arestas é circular.

Figura 4.1: Níveis hierárquicos da estrutura de dados “*half-edge*”.

4.3 O Ambiente de Simulação FreeFlow-3D para Escoamentos Não-Isotérmicos

O ambiente de simulação FreeFlow-3D para escoamentos não-isotérmicos foi construído a partir de modificações nos módulos do sistema FreeFlow-3D. Com as modificações realizadas, o novo sistema é capaz de simular escoamentos não-isotérmicos com a viscosidade variando em função da temperatura ou com a viscosidade constante dependendo da escolha do usuário. A seguir será apresentada as modificações nos módulos do sistema.

4.3.1 O Modelador

É o módulo responsável pela inicialização dos dados para a simulação do escoamento. Este módulo possui uma interface gráfica para a introdução dos dados referentes ao escoamento, como a modelagem do domínio, recipientes, injetores e fluidos que fazem parte da simulação e também os dados que configuram o domínio da simulação, como tamanho da malha, parâmetros de escala entre outros.

Para escoamentos não-isotérmicos além de especificar os dados do escoamento, o usuário deverá escolher se deseja fazer uma simulação com ou sem a influência da temperatura como mostra a figura 4.2.

Figura 4.2: Entrada de dados.

Se a opção for por uma simulação com influência da temperatura, então os dados

das propriedades térmicas do fluido terão de ser especificados, além da temperatura do ambiente e as temperaturas máxima e mínima utilizadas na simulação. Também pode-se escolher o modelo da viscosidade variando com a temperatura, isto é, entre um modelo para fluidos líquidos ou gasosos ou se a viscosidade não irá variar com a temperatura. Se for escolhido um modelo da viscosidade variando com a temperatura então as constantes utilizadas no respectivo modelo deverão ser especificadas, conforme secção 1.4.2, como mostra a figura 4.3.

Figura 4.3: Entrada dados para simulação de escoamentos não-isotérmicos.

O próximo passo é a inserção de objetos geométricos que representem os recipientes, fluidos e/ou injetores envolvidos na simulação. No caso de uma simulação com a influência da temperatura quando for inserido um recipiente deverá ser especificada a temperatura do recipiente e também a condição de contorno para a temperatura que pode ser do tipo Dirichlet ou adiabática. Se um injetor foi inserido, então deverá ser especificada a temperatura do fluido a ser injetado, e no caso da inserção de um fluido deverá ser especificada a temperatura do fluido. A figura 4.4 mostra a janela principal do módulo Modflow-3D para escoamentos não-isotérmicos com o modelo para a simulação de uma injeção de um líquido em uma caixa aberta e também a janela de entrada dados para a inserção do recipiente do tipo “open box”.

4.3.2 O Simulador

Este é o principal módulo do ambiente de simulação FreeFlow-3D para escoamentos não-isotérmicos. Nesse módulo são resolvidas as equações que modelam o escoamento de fluidos com influência da temperatura. Este módulo não possui uma interface gráfica e

Figura 4.4: Interface do módulo Modflow-3D para escoamentos não-isotérmicos, com o modelo para a simulação de uma injeção de um líquido e a janela de entrada dados do objeto do tipo “*open box*”.

sua execução depende de uma sintaxe dada em linha de comando, o que permite que o programa seja executado em segundo plano. Para fazer uma simulação, o Simflow-3D executa os seguinte passos:

- leitura dos dados de entrada que são arquivos feitos pelo modelador;
- cálculo dos passos descritos no capítulo 2.

O módulo produz três tipos de saídas: uma normal em que a simulação poderá ou não continuar a partir destes dados, uma de segurança que pode ser usada para recuperar uma simulação interrompida antes de seu término e uma saída gráfica que pode ser interpretada pelo módulo visualizador.

4.3.3 O Visualizador

O Visflow-3D é o módulo responsável pela visualização dos dados gerados pelo simulador. Neste módulo estão implementadas técnicas de visualização de imagens tridimensionais, com recursos de iluminação e transparência.

Pode-se visualizar os campos de velocidade em cada direção, pressão, temperatura, viscosidade através de uma escala de cores, de modo facilitar a interpretação de tais resultados. A figura 4.5 mostra a visualização de um escoamento não-isotérmico. A figura 4.6 mostra alguns recursos de visualização do módulo.

Figura 4.5: Visualização de um escoamento não-isotérmico: “rendering” tridimensional com recurso de iluminação (esquerda) e visualização da temperatura (direita).

Figura 4.6: Alguns recursos de visualização do módulo Visflow-3D.

Capítulo 5

Resultados Numéricos

Os resultados publicados na literatura sobre escoamentos não-isotérmicos são em modo geral de escoamentos confinados com paredes aquecidas (convecção natural)¹, em que a aproximação de Boussinesq é utilizada. Os casos mais freqüentes são os problemas de fluidos confinados por paredes, em que as paredes laterais são mantidas a uma temperatura constante enquanto que as outras estão termicamente isoladas.

Por essa razão e pela dificuldade de se encontrar resultados na literatura com superfícies livres, na primeira secção desse capítulo comparam-se os resultados do modelo de Boussinesq com os resultados obtidos por (Trick et al., 2000) para o caso da convecção natural no cubo fechado, com o objetivo de validar o simulador para escoamentos não-isotérmicos. Logo após faz-se uma comparação do resultado obtido em uma simulação da convecção natural no cubo fechado utilizando-se a aproximação de Boussinesq com uma simulação da convecção natural no cubo fechado utilizando-se a aproximação de Boussinesq e a viscosidade variando com a temperatura. Por fim apresentam-se algumas simulações de escoamentos não-isotérmicos.

5.1 Convecção Natural no Cubo Fechado

Esse problema, freqüentemente citado na literatura, consiste em um cubo fechado com a temperatura mantida constante nas faces esquerda e direita, e termicamente isoladas

¹Quando o campo de velocidades é totalmente determinado pela temperatura, dá-se o nome de convecção natural (Pontes, 1999).

nas outras faces, ver figura 5.1.

Figura 5.1: Modelo do problema da convecção natural.

Os dados para esta simulação são: difusão térmica $\alpha = 2.08 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}$; coeficiente de expansão térmica $\beta = 3.40 \times 10^{-3} K^{-1}$; viscosidade cinemática $\nu = 1.5 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}$; temperatura inicial do fluido $293K$; parâmetros adimensionais $Re = 1.4$, $Pr = 0.72$. Para a adimensionalização utilizou-se $U = \frac{\alpha}{L} = 0.00052 \frac{m}{s}$ e $L = 0.04m$ em que U é a velocidade de referência e L o comprimento de referência. Esse problema foi simulado em uma malha de $26 \times 26 \times 26$ células.

A tabela 5.1 compara os resultados numéricos obtidos pela simulação do modelo de Boussinesq com os resultados obtidos por (Trick et al., 2000). Como pode se observar, pela tabela 5.1 a análise dos resultados mostram pequenas diferenças em relação aos resultados obtidos por (Trick et al., 2000). Para os números de Rayleigh 10^3 , 10^4 e 10^5 apresentam-se figuras ilustrativas da temperatura (ver figura 5.2), linhas de temperatura (ver figura 5.3) e curvas de níveis das velocidades (ver figuras 5.4 e 5.5) ambas para o plano xz médio, as quais se comparam satisfatoriamente com as figuras encontradas na literatura, como por exemplo em (Silva, 2002; De Vahl, 1983).

A seguir é feita uma comparação do resultado mostrado anteriormente na simulação da convecção natural no cubo fechado com uma simulação da convecção natural no cubo fechado utilizando-se a aproximação de Boussinesq e a viscosidade variando em função da temperatura, para isso utiliza-se a mesma modelagem da figura 5.1. A figura 5.6 mostra

	Ra = 10 ³		Ra = 10 ⁴		Ra = 10 ⁵	
	SO	Ref.	SO	Ref.	SO	Ref.
u_{max}	3.521	3.543	17.327	16.719	45.908	43.900
v_{max}	0.143	0.173	2.348	2.156	8.477	9.690
w_{max}	3.630	3.544	20.040	18.983	70.396	71.060

Tabela 5.1: Comparação das velocidades máximas para os números Rayleigh 10³, 10⁴ e 10⁵. SO: Solução Obtida. Ref.: Referência (Trick et al., 2000).

Figura 5.2: Visualização da temperatura. (a) Ra = 10³; (b) Ra = 10⁴; (c) Ra = 10⁵.

Figura 5.3: Linhas de temperatura. (a) Ra = 10³; (b) Ra = 10⁴; (c) Ra = 10⁵.

o gráfico de um conjunto de dados conhecidos da viscosidade em função da temperatura e a curva que ajusta esses dados, para o cálculo da viscosidade utilizou-se o modelo (1.18) apresentado no capítulo 1. Pode se observar pela tabela 5.2 que com o crescimento da viscosidade em função da temperatura (ver figura 5.6) as velocidades máximas da simulação utilizando o modelo de Boussinesq com a viscosidade variando em função da temperatura

Figura 5.4: Curvas de níveis da velocidade u . (a) $Ra = 10^3$; (b) $Ra = 10^4$; (c) $Ra = 10^5$.

Figura 5.5: Curvas de níveis da velocidade z . (a) $Ra = 10^3$; (b) $Ra = 10^4$; (c) $Ra = 10^5$.

Figura 5.6: Ajuste de um conjunto de dados pelo método dos mínimos quadrados utilizando-se o modelo (1.18) para o cálculo da viscosidade.

ficaram menores do que as velocidades máximas obtidas na simulação utilizando o modelo de Boussinesq com a viscosidade mantida constante. A figura 5.7 mostra as linhas de temperatura para o modelo de Boussinesq onde a viscosidade é constante e também onde a viscosidade varia com a temperatura.

	(a)	(b)
u_{max}	17.327	13.633
v_{max}	2.348	1.132
w_{max}	20.040	14.442

Tabela 5.2: Comparação das velocidades máximas para o número Rayleigh 10^4 . (a) Modelo de Boussinesq com a viscosidade constante; (b) Modelo de Boussinesq com a viscosidade variando em função da temperatura.

Figura 5.7: Linhas de temperatura, $Ra = 10^4$. (a) Modelo de Boussinesq com a viscosidade constante; (b) Modelo de Boussinesq com a viscosidade variando em função da temperatura.

Para se ter evidências de que o método numérico é convergente com o refinamento da malha foram realizadas simulações do problema da convecção natural, para os números de Rayleigh 10^3 , 10^4 e 10^5 , em três malhas diferentes: $10 \times 10 \times 10$, $20 \times 20 \times 20$ e $40 \times 40 \times 40$ células de fluido. As tabelas 5.3, 5.4 e 5.5 mostram os resultados obtidos.

Com respeito à estimativa da taxa de convergência, foram realizadas simulações do problema da convecção natural para o número de Rayleigh 10^4 em malhas com espaçamentos diferentes. Como não se conhece a solução analítica deste problema, utilizam-se os dados da malha mais fina como solução analítica e calcula-se na norma $\|\cdot\|_\infty$ os erros

Malha	10^3	20^3	40^3
u_{max}	3.870	3.633	3.536
v_{max}	0.163	0.162	0.158
w_{max}	3.915	3.737	3.599

Tabela 5.3: Comparação das velocidades máximas para o número de Rayleigh 10^3 .

Malha	10^3	20^3	40^3
u_{max}	17.295	16.735	16.800
v_{max}	1.830	2.175	2.221
w_{max}	18.243	19.537	19.438

Tabela 5.4: Comparação das velocidades máximas para o número de Rayleigh 10^4 .

Malha	10^3	20^3	40^3
u_{max}	59.519	46.242	44.388
v_{max}	7.136	8.467	9.166
w_{max}	77.370	70.276	71.321

Tabela 5.5: Comparação das velocidades máximas para o número de Rayleigh 10^5 .

entre essa malha e as outras, para as componentes da velocidade. Os espaçamentos utilizados nas simulações com as 5 malhas foram: malha 1 ($\delta = 0.002$), malha 2 ($\delta = 0.0025$), malha 3 ($\delta = 0.00133$), malha 4 ($\delta = 0.001$) e malha 5 ($\delta = 0.00066$). Para se obter a estimativa da taxa de convergência, fez-se um ajuste por mínimos quadrados utilizando os dados obtidos juntamente com o espaçamento das malhas. A taxa de convergência é então estimada pela inclinação da linha ajustada. A figura 5.8 mostra a convêrgencia do método. A inclinação para as normas da componente da velocidade u é 1.3 e para as normas da componente da velocidade w é 2.1.

Assim, os resultados obtidos indicam que o método apresentado converge com ordem ao menos 1.

Figura 5.8: Normas $\|\cdot\|_\infty$ dos erros das componentes de velocidade para cada malha, em escala logarítmica.

5.2 Outros Exemplos Numéricos

Nessa secção são apresentados alguns exemplos de escoamentos não-isotérmicos.

Exemplo 1

Essa simulação consiste em uma caixa retangular fechada com razão 2:1:1 (comprimento:largura:altura) em que a temperatura é mantida constante nas faces inferior e superior e termicamente isolada nas outras faces, diferentemente das simulações anteriores no cubo fechado em que se tinha as faces esquerda e direita mantidas a uma temperatura constante e as outras faces termicamente isoladas. A figura final dessa simulação (ver figura 5.9) se compara satisfatoriamente com a figura encontrada em (Silva, 2002). Os dados utilizados para essa simulação extraídos de (Silva, 2002) são: difusão térmica $\alpha = 2.08 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}$; coeficiente de expansão térmica $\beta = 3.40 \times 10^{-3} K^{-1}$; viscosidade cinemática $\nu = 1.5 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}$; temperatura inicial do fluido $293K$; $Re = 1.4$; $Pr = 0.72$; $Ra = 3 \times 10^4$; escala de comprimento $L = 0.04m$; velocidade de referência $U = \frac{\alpha}{L} = 0.00052 \frac{m}{s}$. Esse problema foi simulado em uma malha de $26 \times 16 \times 16$ células.

Figura 5.9: Visualização da temperatura em um recipiente com razão 2:1:1.

Exemplo 2

O objetivo dessa simulação é mostrar um fluido sendo injetado a uma certa temperatura no mesmo fluido contido dentro de um recipiente com uma temperatura menor e verificar o comportamento do fluido quando ele entrar em contato com o fluido no recipiente, ver figura 5.10.

A temperatura do ambiente é a mesma do fluido sendo injetado e a temperatura do recipiente é a mesma do fluido contido no recipiente. Nesse exemplo utilizou-se um número de Nusselt relativamente alto para observar-se melhor as trocas de calor entre o ambiente e o fluido contido no recipiente. Para essa simulação utilizaram-se os seguintes dados: dimensão do domínio $0.01 \times 0.01 \times 0.01m$; escala de velocidade $U := 1.0 \frac{m}{s}$; escala de comprimento $L = 1 \times 10^{-3}m$; viscosidade cinemática $\nu = 1 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s}$; difusão térmica $\alpha = 2 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}$; $Re = 10$; $Pr = 5$; $Nu = 1 \times 10^3$; temperatura inicial do fluido $293K$; temperatura do ambiente $293K$; temperatura do recipiente $243K$; temperatura do fluido

Figura 5.10: Visualização do modelo.

contido no recipiente $243K$. Esse problema foi simulado em uma malha de $40 \times 40 \times 40$ células. Pelas figuras 5.11 e 5.12 pode se observar que o fluido injetado está sendo resfriado pelo fluido que está contido no recipiente. Esse exemplo ilustra a capacidade do sistema FreeFlow-3D para escoamentos não-isotérmicos em lidar com diferentes temperaturas simultaneamente.

Exemplo 3

Esse exemplo apresenta a injeção de um fluido em um recipiente em que a temperatura no fundo do recipiente foi fixada pelo parabolóide representado na figura 5.13 dado pela expressão

$$T(x, y) = T_R \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \frac{(y - y_0)(y - y_2)}{(y_1 - y_0)(y_1 - y_2)}$$

em que x_i e y_i , $i = 0, 1, 2$ são definidos como na figura 5.14 e T_R é a temperatura no recipiente, as paredes laterais do recipiente estão termicamente isoladas.

Para essa simulação utilizaram-se os seguintes dados: dimensão do domínio $0.052 \times 0.052 \times 0.052m$; escala de velocidade $U = 1.0 \frac{m}{s}$; escala de comprimento $L = 4 \times 10^{-2}m$; viscosidade cinemática $\nu = 4 \times 10^{-3} \frac{m^2}{s}$; difusão térmica $\alpha = 2 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}$; $Re = 10$; $Pr = 200$; temperatura inicial do fluido $243K$; temperatura do ambiente $243K$; temperatura do recipiente $293K$. Esse problema foi simulado em uma malha de $26 \times 26 \times 26$ células do fluido. Pelas figuras 5.15 e 5.16 pode se observar claramente o fluido sendo aquecido pelo recipiente segundo o perfil parabólico imposto na parede do fundo. Esse exemplo ilustra a capacidade do sistema FreeFlow-3D para escoamentos não-isotérmicos em lidar com

Figura 5.11: Visualização tridimensional da temperatura.

Figura 5.12: Visualização bidimensional da temperatura no plano xz referente a figura 5.11.

Figura 5.13: Representação do perfil de temperatura imposto no fundo do recipiente.

Figura 5.14: Representação do fundo do recipiente mostrando x_i , y_i , $i = 0, 1, 2$.

diferentes condições de contorno e temperaturas simultaneamente.

Figura 5.15: Visualização da temperatura.

Figura 5.16: Visualização da temperatura, $t = 0.75$ s, por vários ângulos.

Exemplo 4

Esse exemplo apresenta a injeção em um recipiente em que a temperatura do recipiente é menor que a temperatura do fluido e tem por objetivo verificar o comportamento do fluido ao entrar em contato com o recipiente. Nesse exemplo a viscosidade varia em função da temperatura, sendo que a viscosidade do fluido cresce a medida que a temperatura decresce. A figura 5.17 mostra o conjunto de dados conhecidos da viscosidade em função da temperatura e a curva que ajusta esses dados, para o cálculo da viscosidade utilizou-se o modelo (1.19) apresentado no capítulo 1. Para essa simulação utilizaram-se os seguintes

Figura 5.17: Ajuste de um conjunto de dados pelo método dos mínimos quadrados utilizando-se o modelo (1.19) para o cálculo da viscosidade.

dados: dimensão do domínio $0.001 \times 0.001 \times 0.001m$; escala de velocidade $U = 0.1 \frac{m}{s}$; escala de comprimento $L = 1 \times 10^{-4}m$; viscosidade cinemática $\nu = 10.04 \times 10^{-7} \frac{m^2}{s}$;

difusão térmica $\alpha = 1.4 \times 10^{-7} \frac{m^2}{s}$; $Re = 9.96$; $Pr = 7.07$; temperatura inicial do fluido $293K$; temperatura do ambiente $293K$; temperatura do recipiente $273K$. Esse problema foi simulado em uma malha de $20 \times 20 \times 20$ células. Pela figura 5.18 pode se observar o fluido sendo resfriado pelo recipiente, causando uma variação da viscosidade como pode ser visto na figura 5.19.

Figura 5.18: Visualização da temperatura.

Figura 5.19: Visualização da viscosidade.

Capítulo 6

Conclusão

Esse projeto teve como objetivo a simulação numérica de escoamentos com superfícies livres não-isotérmicos utilizando-se o modelo de Boussinesq e a viscosidade calculada como função da temperatura ou mantida constante dependendo da escolha do usuário do sistema. Isso implicou na extensão do sistema FreeFlow-3D, o qual anteriormente simulava escoamentos isotérmicos, assim no modelador de escoamentos tridimensionais foi feita modificações permitindo a inserção das propriedades térmicas do fluido e a escolha das condições de contorno apropriadas à temperatura nas fronteiras do escoamento; no simulador foi incorporada a equação da energia e feito o ajuste das equações de Navier-Stokes para se poder simular escoamentos não-isotérmicos, ou seja, adaptou-se o método GENSMAC-3D, ver capítulo 2, para esse tipo de problema e implementaram-se as condições de fronteira apropriadas, ver capítulo 3; no visualizador acrescentou-se a opção de visualização dos campos de temperatura e viscosidade.

No capítulo 5, compararam-se os resultados obtidos pelo modelo de Boussinesq com os resultados obtidos por (Trick et al., 2000) para o caso da convecção natural no cubo fechado usando o ar como fluido para os números de Rayleigh 10^3 , 10^4 e 10^5 , pois esse tipo de simulação é muito citada na literatura. A solução numérica obtida apresentou resultados satisfatórios, indicando que o simulador pode produzir resultados numéricos satisfatórios em outras situações como pode ser visto nos outros exemplos apresentados. Portanto pode se concluir que o resultado deste trabalho atingiu o objetivo esperado, ou seja, permitindo que o sistema FreeFlow-3D seja capaz de modelar, simular e visualizar escoamentos não-isotérmicos.

O sistema FreeFlow-3D possui uma estrutura que permite sua extensão, assim como proposta de futuros trabalhos é a implementação de outros tipos de escoamentos, como por exemplo a implementação de fluidos viscoelásticos com influência da temperatura.

Referências Bibliográficas

- Amsden, A. e Harlow, F. H. (1970). The SMAC Method: A Numerical Technique for Calculating Incompressible Fluid Flows. *Los Alamos Scientific Lab. Report LA-4370*.
- Castelo Filho, A., Cuminato, J. A., Oliveira, M. C., Santi, R. D., Tomé, M. F., e César, C. N. L. (1997). FreeFlow-3D: Um Sistema Integrado para Simulação de escoamentos Incompressíveis com Superfícies Livres. Relatório Técnico, ICMC/USP.
- Castelo Filho, A., Tomé, M. F., César, C. N. L., McKee, S., e Cuminato, J. A. (1999). FreeFlow: An Integrated Simulation System for Three-Dimensional Free Surface Flows. *Journal of Computing and Visualization in Science*, 103:77–92.
- De Vahl, D. G. (1983). A Natural Convection of Air in a Square Cavity: A Bench Mark Solution. *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, 3:249–264.
- Ferreira, V. G., Tomé, M. F., Mangiavacchi, N., Castelo, A., Cuminato, J. A., Fortuna, A. O., e McKee, S. (2002). High Order Upwinding and the Hydraulic Jump. *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, 39:549–583.
- Ferreira, V. L., Mello, O. D., Oliveira, J. N., e Fortuna, A. O. (1999). Tópicos Teóricos e Computacionais em Escoamentos de Fluidos. Notas do ICMC/USP.
- Fletcher, C. A. J. (1988). *Computational Techniques for Fluid Dynamics: Vol. I and Vol. II*. Springer Verlag.
- Fortuna, A. O. (2000). *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*. Edusp.
- Fox, R. W. e McDonald, A. T. (1995). *Introdução à Dinâmica dos Fluidos*. Livros Técnicos e Científicos.

- Griebel, M., Thomas, D., e Neunhoeffler, T. (1997). *Numerical Simulation in Fluid Dynamics. A Practical Introduction*. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Harlow, F. H. e Welch, J. E. (1965). Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface. *The Physic of Fluids*, 8(1):2182–2189.
- Oliveira, J. (1999). Desenvolvimento de um Sistema de Simulação de Escoamentos de Fluidos com Superfícies Livres Bidimensionais. Dissertação de mestrado, ICMC/USP.
- Paiva, L. S. (2000). Desenvolvimento de um Modelador de Movimentos para o Sistema FreeFlow-3D. Dissertação de mestrado, ICMC/USP.
- Peyret, R. e Taylor, T. D. (1983). *Computational Methods for Fluid Flow*. Springer-Verlag.
- Pontes, J. (1999). Fenômenos de Transferência. Technical Report, COPPE/UFRJ.
- Schmidt, F. W., Henderson, R. W., e Wolgemuth, C. H. (1996). *Introdução às Ciências Térmicas. Termodinâmica, Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor*. Edgard Blücher Ltda.
- Shewchuck, J. R. (1994). An Introduction to the Conjugate Gradient Method without Agonizing Pain. School of Computer Science, Carnegie Mellon University.
- Silva, J. M. (2002). Simulação Numérica de Escoamentos com Superfícies Livres e com Influência da Temperatura. Dissertação de mestrado, ICMC/USP.
- Souza, F. S. (2002). Simulação Numérica de Escoamentos Multifásicos usando o Sistema FreeFlow-3D. Dissertação de mestrado, ICMC/USP.
- Tomé, M. F., Castelo Filho, A., Cuminato, J. A., Mangiavacchi, N., e McKee, S. (2001). GENSMAC3D: A Numerical Method for Solving Unsteady Three-Dimensional Free Surface Flows. *International Journal For Numerical Methods in Fluids*, 37:747–796.
- Tomé, M. F., Castelo Filho, A., Cuminato, J. A., e McKee, S. (1996a). GENSMAC-3D: Implementation of the Navier-Stokes Equation for 3D Free Surface Flows. Notas do ICMSC/USP.

- Tomé, M. F., Duffy, B., e McKee, S. (1996b). A Numerical Method for Solving Unsteady Non-Newtonian Free Surface Flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 62:9–34.
- Tomé, M. F. e McKee, S. (1994). GENSMAC: A Computational Marker-and-Cell Method for Free Surface Flows in General Domains. *Journal of Computational Physics*, 110(1):171–189.
- Trick, E., Labrosse, G., e Betrouni, M. (2000). A First Incursion into the 3D Structure of Natural Convection of Air in a Differentially Heated Cubic Cavity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43:4043–4056.