SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito: 22.02.2002

Assinatura:

Simulação numérica de escoamentos com superfície livre e com influência de temperatura

Juliana Maria da Silva

Orientador: *Prof. Dr. Armando de Oliveira Fortuna*

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
Fevereiro/2002

A Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Antonio Castelo Filho

Prof. Dr. Alexandre Megiorin Roma

Prof. Dr. Norberto Mangiavacchi

aos meus pais: João e Maria Olga

Agradecimentos

Em primeiro gostaria de agradecer a Deus pela minha vida e aos meus pais, por todo apoio e compreensão nos momentos mais difíceis de minha vida.

Aos professores do grupo de análise, ao meu orientador Armando, e em especial ao professor Castelo e ao professor Norberto, o qual teve grande participação na realização desse trabalho com sugestões, ajuda e boa vontade. E aos colegas do LCAD: Valdemir com suas sugestões ao Fpio(Fernando) que me ajudou bastante no início desse trabalho, e ao colegas Luciane, Fabricio, Ricardo e Maria Luiza, pela amizade. E todos que indiretamente colaboraram na realização desse trabalho.

Resumo

Este trabalho apresenta uma extensão do ambiente de simulação Freeflow-2D para simulação de escoamentos incompressíveis com superfície livre e influência de temperatura. Dois modelos matemáticos foram analisados e implementados: o modelo de Boussinesq; e uma modificação no modelo proposto por V. Casulli (Casulli, 1980). As equações de conservação (momento, massa e energia) e as condições de fronteiras associadas são discretizadas utilizando diferenças finitas sobre malhas deslocadas.

Resultados numéricos obtidos de simulações com os dois modelos são apresentados e discutidos.

Palavras-chaves: Aproximação de Boussinesq; Simulação numérica; escoamentos com superfície livre; Equações de conservação; Dinâmica de fluidos computacional; Escoamentos com influência de temperatura; Freeflow

Abstract

This work presents an extension of the Freeflow-2D environment to support simulation of incompressible non-isothermal free-surface flows. Two mathematical models were analysed and implemented: the Boussinesq approximation, and a modification in the model proposed by V. Casulli (Casulli, 1980). The conservation equation (momentum, mass and energy) and the associated boundary conditions are discretized using finite differences on staggered grids.

Numerical results obtained from simulations with the two models are presented and discussed.

Keywords: Boussinesq approximation; Numerical simulation; Free-surface flows; Conservation equation; Computational fluids dynamics; Non-isothermal flows; Freeflow

Sumário

1	Introdução	1
2	Modelagem Matemática para Escoamento com Influência Térmica	5
2.1	Introdução	5
2.2	Definição de um Fluido	6
2.2.1	Equações de Navier-Stokes	8
2.3	Modelos para Escoamentos com Influência de Temperatura	12
2.3.1	Modelo de Boussinesq	13
2.3.2	Modelo não-Boussinesq	14
2.3.3	Adimensionalização	17
2.4	Sumário	20
3	Método Computacional	21
3.1	Introdução	21
3.2	Método para o Cálculo das Velocidades e Pressão	22
3.3	Ciclo Computacional	26
3.4	Sumário	26
4	Condições de Fronteira, Condições Iniciais e Discretização	27
4.1	Introdução	27
4.2	Definição das Células	28

4.3	Condições Iniciais	29
4.4	Condições de Fronteira na Superfície Livre	29
4.5	Condições de Fronteira na Superfície Rígida	38
4.5.1	Cálculo das Velocidades e Temperatura pelas Condições de Fronteira Rígida	39
4.6	Discretização das Equações que Modelam o Escoamento	42
4.6.1	Discretização das Equações de Conservação da Quantidade de Movimento	42
4.6.2	Discretização da Equação da Energia	44
4.6.3	Discretização dos Termos Convectivos	46
4.6.4	Discretização da Equação Elíptica	51
4.6.5	Controle do Passo no Tempo	54
4.7	Sumário	55
5	Sistema Freeflow-2D para Escoamentos Não-Isotérmicos	57
5.1	Introdução	57
5.2	Ambiente de Simulação Freeflow-2D	57
5.2.1	Modelador	58
5.2.2	Simulador	59
5.2.3	Visualizador	60
5.3	Sumário	61
6	Resultados	63
6.1	Introdução	63
6.2	Modelo de Boussinesq para Convecção Natural em Caixa Fechada	64
6.3	Limite de Validade da Aproximação de Boussinesq	69
6.4	Outros Exemplos Numéricos	82

6.5 Sumário	92
7 Conclusão	95
A Apêndice A	99
B Apêndice B	103
Referências Bibliográficas	111

Lista de Figuras

4.1	Célula da malha deslocada.	28
4.2	Domínio.	29
4.3	Célula S com o lado direito em contato com uma célula V.	32
4.4	Célula S com dois lados em contato com célula V.	34
4.5	Célula S com um lado em contato com célula V.	36
4.6	Célula S com um lado em contato com célula V.	36
4.7	Célula S com dois lados em contato com célula V.	37
4.8	Célula S com três lados em contato com célula V.	38
4.9	Célula F com a face $i + \frac{1}{2}$ em contato com célula C ou S.	40
4.10	Célula F com a face $i + \frac{1}{2}$ e $j + \frac{1}{2}$ em contato com célula C ou S.	41
4.11	Célula F com a face $i + \frac{1}{2}$ em contato com célula C ou S.	41
4.12	Célula adjacente à fronteira rígida.	44
4.13	Interpolação polinomial de $\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}$ no ponto (i,j)	44
4.14	<i>Estêncil</i> usado para calcular ϕ_A e ϕ_B	46
4.15	Posição das velocidades utilizadas para a discretização dos termos convectivos.	50
5.1	Entrada de dados.	58
5.2	Entrada de dados referentes às propriedades térmicas do fluido (para o caso de simulação com influência de temperatura).	59
5.3	Interface gráfica: Visualizador.	60
5.4	Visualização dos campos de temperatura e massa específica.	61

6.1	Modelo do problema: parede vertical aquecida.	64
6.2	Linhas de temperatura.	65
6.3	Curvas de níveis da velocidade horizontal u	66
6.4	Curvas de níveis da velocidade vertical v	66
6.5	Perfil de velocidades v : (a) $Ra = 10^3$, (b) $Ra = 10^4$, (c) $Ra = 10^5$	67
6.6	Perfis de velocidades u em malha 11×11 , 22×22 , 44×44 e 88×88	69
6.7	Região de validade para água.	70
6.8	Região de validade para ar.	71
6.9	Linhas de temperatura.	72
6.10	Perfil de velocidade na direção x em $y = 0,5$	73
6.11	Perfil de velocidade na direção y em $x = 0,5$	73
6.12	Perfil de velocidade na direção x em $y = 0,5$	74
6.13	Perfil de velocidade na direção y em $x = 0,5$	75
6.14	Linhas de temperatura.	75
6.15	Perfil de velocidade na direção x em $y = 0,5$	76
6.16	Perfil de velocidade na direção y em $x = 0,5$	77
6.17	Linhas de temperatura.	77
6.18	Perfil de velocidade na direção x em $y = 0,5$	79
6.19	Perfil de velocidade na direção y em $x = 0,5$	79
6.20	Linhas de temperatura.	80
6.21	Perfil de velocidade na direção x em $y = 0,5$	81
6.22	Perfil de velocidade na direção x em $y = 0,5$	81
6.23	Linhas de temperatura.	82
6.24	Visualização da temperatura.	83
6.25	Modelo de Boussinesq com $\Delta T = 400K$. Visualização da velocidade na direção x	85
6.26	Modelo não-Boussinesq com $\Delta T = 400K$. Visualização da velocidade na direção x	85

6.27	Modelo de Boussinesq com $\Delta T = 400K$. Visualização da velocidade na direção y .	85
6.28	Modelo não-Boussinesq com $\Delta T = 400K$. Visualização da velocidade na direção y .	85
6.29	Temperatura para o modelo não-Boussinesq com $\Delta T = 400K$.	86
6.30	Massa específica para o modelo não-Boussinesq com $\Delta T = 400K$.	86
6.31	Modelo não-Boussinesq com $\Delta T = 0,25K$, para velocidade na direção x .	87
6.32	Modelo não-Boussinesq com $\Delta T = 0,25K$, para velocidade na direção y .	87
6.33	Visualização da temperatura.	88
6.34	Visualização da massa específica.	88
6.35	Visualização da massa específica.	89
6.36	Visualização da distribuição de temperatura.	90
6.37	Fluxo de calor em um ponto central da parede objeto.	91
6.38	Fluxo de calor na parede superior do objeto.	91
6.39	Visualização da temperatura.	92
B.1	Entrada de dados para a criação de um modelo.	104
B.2	Níveis hierárquicos da estrutura de dados.	106

Capítulo 1

Introdução

A modelagem e simulação de muitos problemas em mecânica dos fluidos tornou-se possível devido ao avanço da tecnologia computacional e das técnicas numéricas.

Nas últimas décadas muitos problemas em dinâmica dos fluidos têm sido estudados, como escoamentos com superfície livre. Este possui aplicação na indústria alimentícia (preenchimento de cavidade) e indústria siderúrgica e de plástico (injeção em moldes). Para essa classe de problemas, várias técnicas de resolução das equações que modelam o escoamento foram desenvolvidas.

Harlow e Welch desenvolveram o método MAC (*Marker-and-Cell*) (Welch et al., 1966), uma das primeiras técnicas de resolução de problemas com superfícies livres, o qual utiliza partículas virtuais que representam o fluido.

Logo após, Amsden e Harlow desenvolveram o método SMAC (*Simplified-Marker-and-Cell*) (Amsden and Harlow, 1970), que divide os ciclos de cálculos em duas partes: velocidade e pressão. Não existindo, assim, processo iterativo envolvendo simultaneamente, velocidade e pressão, evitando-se algumas dificuldades encontradas no método MAC. Com base no SMAC, Tomé e McKee (Tomé and McKee, 1994) desenvolveram o método GENSMAC (*Generalized-Simplified-Marker-and-Cell*) para escoamentos bidimensionais de fluidos newtonianos incompressíveis com superfícies livres. Mais tarde Castelo et al. (Castelo Filho et al., 1999) incorporaram tensão superficial no código GENSMAC.

No ICMC (Instituto de Ciências Matemática e de Computação) existe atualmente o projeto SNENS (Solução Numérica das Equações de Navier-Stokes), o qual trata da simulação de escoamentos de fluidos com superfícies livres. Nesse projeto, foi desenvolvido o sistema Freeflow-3D (Castelo Filho et al., 1997), um ambiente integrado de modelagem, simulação e visualização de escoamentos transientes, isotérmicos, newtonianos e com superfícies livres tridimensionais. Nesse sistema, é implementado o método GENSMAC-3D (Tomé et al., 1996), o qual é uma extensão do método GENSMAC. Em seguida, baseado no método GENSMAC e na estrutura de dados do Freeflow-3D, desenvolveu-se o ambiente Freeflow-2D (Oliveira, 1999), para simulações bidimensionais.

A continuação do projeto SNENS é expandir a aplicabilidade do ambiente Freeflow para o tratamento de novos tipos de escoamento bidimensional e tridimensional. Alguns trabalhos já foram concluídos e outros estão em andamento, tais como: Desenvolvimento de um modelador de movimentos para o sistema Freeflow-3D (Paiva, 2000), simulação de escoamentos multifásicos para o sistema Freeflow-2D, simulação de escoamentos turbulentos, simulação de escoamentos não-newtonianos, simulação de escoamentos viscoelásticos, etc.

O presente trabalho consiste em expandir o sistema Freeflow-2D para escoamentos com influência de temperatura, pois é de freqüente interesse a determinação dos efeitos da variação de temperatura no fluido e ou a transferência de calor dentro dele. Um completo entendimento de transferência de calor, campo de temperatura e o campo associado de velocidade é de extrema importância em várias aplicações industriais, tais como processo de conversão e conservação de energia, desenvolvimento de aplicações como meteorologia, oceanografia e climatologia.

Nos últimos anos diferentes modelos numéricos para simulação de escoamentos com influência de temperatura têm sido discutidos na literatura, porém, a maioria deles utilizam a aproximação de Boussinesq (Griebel et al., 1997), (Fortuna, 2000). Tal aproximação simplifica o modelo, mas possui um limite de validade (Gray and Giorgini, 1976). Assim, o objetivo desse trabalho é a implementação no sistema Freeflow-2D de um modelo matemático baseado na aproximação de Boussinesq e de um segundo modelo baseado em

(Casulli, 1980), que possui a massa específica como uma função da temperatura. Esses dois modelos foram analisados e comparados.

Organização do Trabalho

Este trabalho está dividido em 7 capítulos: no capítulo 1 é apresentada a presente introdução. No capítulo 2 é apresentado alguns conceitos de mecânica dos fluidos, as equações de conservação de massa, momento e energia, os dois modelos matemáticos para o tratamento de escoamentos com influência de temperatura e a adimensionalização das equações. O capítulo 3 trata do estudo do método computacional. No capítulo 4 são discutidas as condições de fronteiras e iniciais e também as discretizações por diferenças finitas das equações. No capítulo 5 é feita uma descrição do sistema Freeflow-2D, seus módulos e as modificações feitas para simulações com influência de temperatura. O capítulo 6 é composto por resultados desse trabalho juntamente com uma discussão sobre os dois modelos. Por fim, tem-se no capítulo 7 as conclusões sobre esse trabalho.

Capítulo 2

Modelagem Matemática para Escoamento com Influência Térmica

2.1 Introdução

Muitos tipos de escoamentos e fluidos podem ser tratados com as equações de Navier-Stokes com propriedades uniformes, porém, muitas vezes, é necessário determinar os efeitos da variação de temperatura no fluido ou a transferência de calor dentro dele. Para isso, as equações de Navier-Stokes devem ser ajustadas adequadamente. Portanto, esse capítulo tem por objetivo apresentar os conceitos básicos da mecânica dos fluidos (Fox and McDonald, 1995), equações de Navier-Stokes, (Fortuna, 2000) e (Pontes, 1999), equações dos modelos para simular escoamentos incompressíveis com influência de temperatura e com superfície livre e adimensionalização dessas equações (Tomé and McKee, 1994), (Griebel et al., 1997).

2.2 Definição de um Fluido

Fluido é uma substância que se deforma continuamente sob a aplicação de uma tensão de cisalhamento (tensão tangencial), não importa quão pequena ela possa ser.

Uma força de cisalhamento é a componente tangencial da força que age sobre a superfície. Essa força de cisalhamento, dividida pela área da superfície, dá origem à tensão de cisalhamento média. Tensão de cisalhamento em um ponto é o valor limite da relação entre a força de cisalhamento e a área, quando esta tende a zero.

Os fluidos podem ser classificados em:

- newtonianos: existe uma relação linear entre o valor da tensão de cisalhamento aplicada e a velocidade de deformação resultante;
- não-newtonianos: existe uma relação não-linear entre o valor da tensão de cisalhamento aplicada e a velocidade de deformação angular. O sangue é um exemplo desse tipo de fluido.

Os escoamentos podem ser:

- estacionários ou permanentes: são escoamentos cujas grandezas como velocidade e pressão não variam com o tempo. Caso contrário eles são denominados transientes ou não permanentes;
- internos: são escoamentos em que o fluido está totalmente cercado por paredes, confinado;
- externos: são escoamentos em que o fluido não está confinado por paredes, e pode apresentar ou não superfícies livres;
- incompressíveis: são escoamentos os quais as variações das massas específicas dos fluidos são desprezíveis, caso isso não ocorra, o escoamento é denominado compressível;
- laminares: são escoamentos nos quais camadas muito finas (laminas) de fluido parecem deslizar umas sobre as outras;
- turbulentos: são escoamentos com movimentos desordenados de pequenas massas de fluido, contrariando ao que ocorre no caso do escoamento laminar. O escoamento turbulento está associado a números de Reynolds, pois segundo o experimento de Osborn Reynolds, o escoamento torna-se instável quando o número de Reynolds atinge um determinado valor

crítico.

É interessante lembrar que laminar ou turbulento não são propriedades intrínsecas do fluido, mas um estado em que ele se encontra devido às condições do escoamento.

Viscosidade é a propriedade pela qual um fluido oferece resistência ao cisalhamento. A lei de Newton da viscosidade estabelece que para uma dada velocidade de deformação angular de um fluido, a tensão de cisalhamento é diretamente proporcional à viscosidade.

Mel e óleo lubrificante são exemplos de líquidos muito viscosos, já a água e o ar têm viscosidades menores. A viscosidade μ é freqüentemente chamada de viscosidade *absoluta* ou *dinâmica*, já a viscosidade *cinemática* ν é a relação entre viscosidade e massa específica, $\nu = \frac{\mu}{\rho}$. A viscosidade cinemática aparece em muitas aplicações como, por exemplo, no número adimensional de Reynolds, que expressa a razão entre as forças inerciais e as forças viscosas em um escoamento, $Re = \frac{\rho V L}{\mu}$.

Além do número de Reynolds, têm-se outras grandezas adimensionais:

- Número de Froude: $Fr = \frac{V}{\sqrt{gL}}$;
- Número de Mach: $M = \frac{V}{a}$;
- Número de Prandtl: $Pr = \frac{\nu}{\alpha}$;
- Número de Rayleigh: $Ra = \frac{g|\beta|\Delta T L^3}{\nu^2} Pr$;
- Número de Nusselt: $Nu = \frac{hL}{\kappa}$;
- Número de Grasolf: $Gr = \frac{|g|\beta\Delta T L^3}{\nu^2}$;

em que ρ , μ , L , V , a , β , ΔT , ν , α , h e κ são respectivamente, a massa específica, viscosidade, comprimento, velocidade do escoamento, velocidade do som característica do meio, coeficiente de expansão térmica, variação entre as temperaturas máxima e mínima, viscosidade cinemática, difusividade térmica, coeficiente de transferência de calor e condutividade térmica do fluido.

2.2.1 Equações de Navier-Stokes

Leonard Euler é considerado um dos fundadores da hidrodinâmica devido ao fato de ter sido o primeiro a deduzir as equações de movimento de fluido (equações de Euler). Porém, as descrições matemáticas do comportamento dos fluidos só ganharam força no século XIX com Simeon Poisson e com o inglês George Stokes.

As equações de Navier-Stokes são expressões matemáticas de leis físicas básicas de conservação, (Fortuna, 2000) e (Pontes, 1999):

- **Conservação de massa:**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2.1)$$

em que $\mathbf{u} = (u, v)$ é o vetor velocidade, ρ a massa específica e t é o tempo. Transformando-se a equação (2.1) em coordenadas cartesianas bidimensionais, tem-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0. \quad (2.2)$$

Para o caso de fluidos incompressíveis e com massa específica uniforme, tem-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad \nabla \rho = 0.$$

Assim, para fluidos incompressíveis e com massa específica uniforme, a equação da continuidade (2.2), como é conhecida, torna-se:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0, \quad (2.3)$$

considerando-se $\rho \neq 0$, tem-se:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (2.4)$$

- **Conservação de energia:**

$$\rho \frac{De}{Dt} = \rho \frac{\partial Q}{\partial t} - \nabla \cdot q - p(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \Phi, \quad (2.5)$$

em que:

- $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla$: o operador é definido como derivada material, substancial ou total;
- e : é energia específica total;
- $\frac{\partial Q}{\partial t}$: é a taxa de calor por unidade de massa produzida por agentes externos;
- $q = -\kappa \nabla T$: é o fluxo de calor;
- $\nabla \cdot q = -\kappa \nabla^2 T$: é a transferência de calor por condução por meio das paredes do elemento de fluido, devido à presença de gradiente de temperatura;
- Φ : é a função dissipação, a qual em coordenadas cartesianas e bidimensionais é escrita como:

$$\Phi = 2\mu \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \right] + \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}),$$

em que $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$ é denominado segundo coeficiente de viscosidade¹.

Assim, após uma série de simplificações² a equação (2.5) pode ser escrita como:

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = -\nabla \cdot q, \quad (2.6)$$

ou seja,

$$\rho \frac{DT}{Dt} = \frac{\kappa}{c_p} \nabla^2 T. \quad (2.7)$$

Na forma conservativa a equação (2.7) torna-se:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(Tu)}{\partial x} + \frac{\partial(Tv)}{\partial y} = \frac{\kappa}{\rho c_p} \nabla^2 T, \quad (2.8)$$

¹Deduções detalhadas da equação da energia podem ser encontradas em (Anderson and J.D., 1995), (Pontes, 1999) e em livros de mecânica dos fluidos.

²Ver (Fortuna, 2000).

em que T é a temperatura, κ é o coeficiente de expansão térmica do fluido e c_p é calor específico a pressão constante do fluido.

• **Conservação da quantidade de movimento:**

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \sigma + \rho \mathbf{g}, \quad (2.9)$$

em que $\mathbf{g}$ é a aceleração da gravidade e σ é o tensor de tensões definido da seguinte forma:

$$\sigma = (-p + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} + \tau, \quad (2.10)$$

em que p é a pressão, $\mathbf{I}$ é o tensor identidade, $\tau = 2\mu \mathbf{d}$ é o tensor extra tensão, $\mathbf{d} = \frac{1}{2}[(\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \cdot \mathbf{u})^T]$ é o tensor razão de deformação de um fluido e λ , definido anteriormente, é o segundo coeficiente de viscosidade ($\lambda = \frac{-2}{3}\mu$).

Em coordenadas cartesianas bidimensionais, o desenvolvimento da equação (2.9) é como segue:

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}, \quad (2.11)$$

$$(\nabla \mathbf{u})^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}, \quad (2.12)$$

Assim,

$$\sigma = \begin{bmatrix} -p & 0 \\ 0 & -p \end{bmatrix} + \lambda \begin{bmatrix} \nabla \cdot \mathbf{u} & 0 \\ 0 & \nabla \cdot \mathbf{u} \end{bmatrix} + \mu \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & 2\frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}, \quad (2.13)$$

$$\sigma = \begin{bmatrix} -p + \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u}) + 2\mu\frac{\partial u}{\partial x} & \mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) \\ \mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & -p + \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u}) + 2\mu\frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}. \quad (2.14)$$

Portanto,

$$\nabla \cdot \sigma = \begin{bmatrix} -\frac{\partial p}{\partial x} + \lambda \frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{u})}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \mu \frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{u})}{\partial x} \\ -\frac{\partial p}{\partial y} + \lambda \frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{u})}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \mu \frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{u})}{\partial y} \end{bmatrix}. \quad (2.15)$$

Considerando-se o operador de Laplace em coordenadas cartesianas bidimensionais,

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \quad (2.16)$$

tem-se:

$$\nabla \cdot \sigma = -\nabla p + (\lambda + \mu) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mu \nabla^2 \mathbf{u}. \quad (2.17)$$

Portanto, a partir da equação (2.9), obtêm-se as equações de conservação da quantidade de movimento na forma não-conservativa e em coordenadas cartesianas e bidimensionais:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{1}{\rho} \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + (\lambda + \mu) \frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{u})}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \right) + g_x, \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{1}{\rho} \left(-\frac{\partial p}{\partial y} + (\lambda + \mu) \frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{u})}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \right) + g_y. \quad (2.19)$$

Utilizando-se a *condição de incompressibilidade* dada pela equação (2.4), tem-se:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{1}{\rho} \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \right) + g_x, \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{1}{\rho} \left(-\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \right) + g_y. \quad (2.21)$$

Para se transformar o lado esquerdo das equações (2.20) e (2.21) para a forma conservativa, adiciona-se às respectivas equações os respectivos termos: $u\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right)$ e $v\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right)$ (Fortuna, 2000). Ou seja,

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} + u\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right) = \frac{1}{\rho}\left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)\right) + g_x, \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} + v\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right) = \frac{1}{\rho}\left(-\frac{\partial p}{\partial y} + \mu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right)\right) + g_y. \quad (2.23)$$

Portanto,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial uu}{\partial x} - \frac{\partial uv}{\partial y} - \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial p}{\partial x} + \mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)\right) + g_x, \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial vu}{\partial x} - \frac{\partial vv}{\partial y} - \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial p}{\partial y} + \mu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right)\right) + g_y. \quad (2.25)$$

2.3 Modelos para Escoamentos com Influência de Temperatura

Vários métodos para simulação de escoamentos com influência de temperatura têm sido discutidos nos últimos anos, porém todos eles utilizam a aproximação de Boussinesq. Tal aproximação simplifica o modelo no caso de pequenas gradientes de temperatura. Por essa razão, dois modelos foram analisados e implementados para simulação de escoamentos com superfície livre e com influência térmica: um modelo utilizando a aproximação de Boussinesq, muito popular na literatura, e um modelo que considera a massa específica como uma função da temperatura.

2.3.1 Modelo de Boussinesq

Para incluir a temperatura T no modelo matemático para o escoamento de fluidos, deve haver uma preocupação com as propriedades termodinâmicas desses fluidos. Pelo princípio da conservação de energia dada pela equação (2.8), tem-se:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(uT)}{\partial x} + \frac{\partial(vT)}{\partial y} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right), \quad (2.26)$$

em que $\alpha = \frac{\kappa}{\rho_\infty c_p}$ é o coeficiente de difusividade térmica, κ é o coeficiente de condutividade térmica, ρ_∞ é a massa específica de referência e c_p é o calor específico.

O principal efeito que a temperatura causa no fluido é a variação da massa específica, quando ocorre mudanças na temperatura desse. Quando o fluido é aquecido, seu volume aumenta, tornando-o menos denso. Este resultado ocorre nas forças de empuxo³, as quais dependem da temperatura. Incorporando-se ainda outros efeitos que a variação de temperatura causa no fluido, como viscosidade, a equação para esse tipo de escoamento será de difícil tratamento, por isso algumas simplificações são necessárias. A mais comum é a aproximação de Boussinesq, a qual considera constante todas as propriedades do fluido, exceto a massa específica no termo fonte das equações de conservação da quantidade de movimento.

Na aproximação de Boussinesq é assumida uma aproximação linear entre a massa específica ρ e a temperatura T , isto é,

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

que pode ser definida da forma:

$$\rho(T) = \rho_\infty (1 - \beta(T(\mathbf{x}, t) - T_\infty)), \quad (2.27)$$

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

³Força de empuxo: a diferença entre a massa específica de um elemento de fluido e a massa específica do fluido vizinho faz aparecer uma força no sentido vertical sobre o fluido menos denso.

Assim, as equações de conservação da quantidade de movimento na forma conservativa e dimensional, (2.24) e (2.25), dadas na seção anterior, podem ser reescritas como:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial uu}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad (2.28)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial vu}{\partial x} + \frac{\partial vv}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \rho_\infty (1 - \beta(T(\mathbf{x}, t) - T_\infty))g_y, \quad (2.29)$$

em que $\rho_\infty(1 - \beta(T(\mathbf{x}, t) - T_\infty))g_y$ é denominado termo fonte⁴.

Portanto, para a simulação escoamentos com influência de temperatura com a utilização do modelo de Boussinesq, deve-se resolver o conjunto de equações formado pelas equações (2.26), (2.28) e (2.29), além da equação da continuidade (2.4).

2.3.2 Modelo não-Boussinesq

O modelo alternativo para simulação de escoamentos com influência de temperatura, deriva de modificações feitas neste trabalho no modelo proposto por (Casulli, 1980)⁵. Esse modelo, denominado aqui de modelo não-Boussinesq, possui diferenças significativas em relação ao modelo de Boussinesq.

A forma final desse modelo é resultado de alguns desenvolvimentos algébricos. Inicialmente, tem-se: uma aproximação para a massa específica, a qual é semelhante a equação (2.27); a equação da energia (2.7) e a equação da continuidade (2.2):

$$\rho(T) = \rho_\infty(1 - \beta(T(\mathbf{x}, t) - T_\infty)), \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial(T)}{\partial x} + v \frac{\partial(T)}{\partial y} = \frac{k}{\rho c_p} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right), \quad (2.31)$$

⁴O termo fonte aparece apenas na equação na direção y porque considera-se $\mathbf{g} = (0, -g_y)$.

⁵Maiores detalhes ver apêndice A.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0. \quad (2.32)$$

Assim, têm-se os seguintes passos para obtenção das equações governantes para esse modelo novo:

(i) Substitui-se (2.30) em (2.32):

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho_\infty(1 - \beta(T - T_\infty))] + \frac{\partial}{\partial x}[\rho_\infty(1 - \beta(T - T_\infty))u] + \frac{\partial}{\partial y}[\rho_\infty(1 - \beta(T - T_\infty))v],$$

portanto,

$$(\beta T_\infty + 1) \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = \beta \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \beta \left(T \frac{\partial u}{\partial x} + T \frac{\partial v}{\partial y} \right). \quad (2.33)$$

(ii) Substituindo-se (2.31) em (2.33), obtém-se a seguinte equação :

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{\beta}{1 + \beta(T_\infty - T)} \frac{k}{\rho c_p} \nabla^2 T, \quad (2.34)$$

a qual será a equação da continuidade, na forma dimensional, para esse modelo.

(iii) Tomando-se as equações (2.18) e (2.19),

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{1}{\rho} \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + (\lambda + \mu) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \right) + g_x, \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{1}{\rho} \left(-\frac{\partial p}{\partial y} + (\lambda + \mu) \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \right) + g_y, \quad (2.36)$$

e, substituindo-se (2.34) e $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$ em (2.35) e em (2.36), obtém-se na forma não-conservativa as equações de conservação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{1}{\rho} \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\mu}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\beta}{1 + \beta(T_\infty - T)} \frac{k}{\rho c_p} \nabla^2 T \right) + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \right) + g_x, \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{1}{\rho} \left(-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\mu}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\beta}{1 + \beta(T_\infty - T)} \frac{k}{\rho c_p} \nabla^2 T \right) + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \right) + g_y. \quad (2.38)$$

A transformação do lado esquerdo das equações (2.31), (2.37) e (2.38) para a forma conservativa é feita por meio de um processo semelhante ao utilizado nas equações (2.22) e (2.23). Assim, as equações governantes para o modelo não-Boussinesq na forma conservativa são:

- Equação da continuidade:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{\beta}{1 + \beta(T_\infty - T)} \frac{k}{\rho c_p} \nabla^2 T; \quad (2.39)$$

- Equação da Energia:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial uT}{\partial x} + \frac{\partial vT}{\partial y} = \frac{k}{\rho c_p} \left[\frac{1 + \beta T_\infty}{1 + \beta T_\infty - T} \right] \nabla^2 T; \quad (2.40)$$

- Equação de Conservação da Quantidade de Movimento na Direção x :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial vu}{\partial y} = & \frac{1}{\rho} \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\mu}{3} \frac{k}{c_p} \beta \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{1 + \beta(T_\infty - T)} \frac{1}{\rho} \nabla^2 T \right) + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \right) + \\ & + u \frac{k}{\rho c_p} \frac{\beta}{1 + \beta(T_\infty - T)} \nabla^2 T + g_x; \end{aligned} \quad (2.41)$$

- Equação de Conservação da Quantidade de Movimento na Direção y :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} = & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{1}{Re} \frac{1}{RePr} \frac{\beta}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho^2} \nabla^2 T \right) + \\
& + \frac{1}{\rho} \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\beta}{\rho^2} \frac{1}{RePr} v \nabla^2 T + \frac{1}{Fr^2} g_y;
\end{aligned} \tag{2.42}$$

Assim, em relação ao modelo não-Boussinesq, pode-se dizer que ele é mais consistente que o modelo de Boussinesq, uma vez que se considera a massa específica como função da temperatura em todas as equações, o custo dessa consistência é uma maior complexidade nos termos da equação de conservação de momento. Portanto, espera-se que esse modelo apresente resultados muito semelhantes ao modelo de Boussinesq quando os gradientes de temperatura são “pequenos”.

2.3.3 Adimensionalização

Com o objetivo de tornar esses dois modelos independentes de qualquer sistema de unidades, considera-se uma mudança de variáveis. Definem-se as variáveis adimensionais por meio da transformação :

$$\begin{aligned}
\bar{u} = \frac{u}{U}, \quad \bar{x} = \frac{x}{L}, \quad \bar{t} = \frac{tU}{L}, \quad \bar{p} = \frac{p}{\rho_\infty U^2}, \\
\bar{g} = \frac{g}{g}, \quad \bar{T} = \frac{T - T_\infty}{\Delta T}, \quad \bar{\beta} = \beta \Delta T, \quad \bar{\rho} = \frac{\rho}{\rho_\infty},
\end{aligned}$$

em que L denota a escala de comprimento, U a escala de velocidade, $\Delta T = T_{max} - T_{min}$, T_{min} é a temperatura mínima no escoamento, T_{max} a temperatura máxima do escoamento, T_∞ é a temperatura de referência, a qual é tomada como a temperatura mínima (T_{min}) ⁶ e ρ_∞ denota massa específica de referência. Para o caso do modelo de Boussinesq, pode-se considerar $\rho = \rho_\infty$.

⁶Quando se escolhe $T_\infty = T_{min}$, tem-se $\bar{T} \in [0, 1]$.

• **Modelo de Boussinesq:**

Substituindo-se as transformações acima nas equações (2.4), (2.26), (2.28) e (2.29), tem-se:

- Equação da continuidade:

$$\frac{\partial U\bar{u}}{\partial L\bar{x}} + \frac{\partial U\bar{v}}{\partial L\bar{y}} = 0, \quad (2.43)$$

ou seja,

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{y}} = 0; \quad (2.44)$$

- Equação da energia:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial} \left(\frac{\bar{T}\Delta T + T_\infty}{\frac{L}{U}\bar{t}} \right) + \frac{\partial}{\partial} \left(\frac{U\bar{u}(\bar{T}\Delta T + T_\infty)}{L\bar{x}} \right) + \frac{\partial}{\partial} \left(\frac{U\bar{v}(\bar{T}\Delta T + T_\infty)}{L\bar{y}} \right) = \\ = \alpha \frac{\partial^2}{\partial} \left(\frac{\bar{T}\Delta T + T_\infty}{L^2\bar{x}^2} \right) + \alpha \frac{\partial^2}{\partial} \left(\frac{\bar{T}\Delta T + T_\infty}{L^2\bar{y}^2} \right). \end{aligned}$$

Simplificando-se a equação acima, tem-se:

$$\frac{U\Delta T}{L} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{t}} + \frac{U\Delta T}{L} \frac{\partial \bar{u}\bar{T}}{\partial \bar{x}} + \frac{U\Delta T}{L} \frac{\partial \bar{v}\bar{T}}{\partial \bar{y}} = \alpha \frac{\Delta T}{L^2} \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \bar{x}^2} + \alpha \frac{\Delta T}{L^2} \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \bar{y}^2}, \quad (2.45)$$

Fazendo-se a multiplicação de ambos os lados da equação (2.45) por $\frac{L}{U\Delta T}$, obtém-se:

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{t}} + \frac{\partial \bar{u}\bar{T}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}\bar{T}}{\partial \bar{y}} = \frac{\alpha}{L} \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\alpha}{L} \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \bar{y}^2}, \quad (2.46)$$

Utilizando-se os números adimensionais de Reynolds (Re) e de Prandtl (Pr), tem-se a equação da energia (2.26) na forma adimensional:

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{t}} + \frac{\partial \bar{u}\bar{T}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}\bar{T}}{\partial \bar{y}} = \frac{1}{RePr} \left(\frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \bar{y}^2} \right). \quad (2.47)$$

A adimensionalização das equações de conservação da quantidade de movimento são obtidas de forma análoga.

- Equação de conservação da quantidade de movimento na direção x :

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{t}} = -\frac{\partial \bar{u}\bar{u}}{\partial \bar{x}} - \frac{\partial \bar{u}\bar{v}}{\partial \bar{y}} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{x}} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{y}^2} \right); \quad (2.48)$$

- Equação de conservação da quantidade de movimento na direção y :

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{t}} = -\frac{\partial \bar{v}\bar{u}}{\partial \bar{x}} - \frac{\partial \bar{v}\bar{v}}{\partial \bar{y}} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{y}} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{y}^2} \right) + (1 - \beta T) \frac{1}{Fr^2} \bar{g}_y; \quad (2.49)$$

• **Modelo não-Boussinesq:**

- Massa específica:

$$\rho(\bar{T}) = 1 - \bar{\beta}\bar{T};$$

- Equação da continuidade:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{y}} = \frac{\bar{\beta}}{\rho^2} \frac{1}{RePr} \nabla^2 \bar{T}; \quad (2.50)$$

- Equação da energia:

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{t}} + \frac{\partial \bar{u}\bar{T}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}\bar{T}}{\partial \bar{y}} = \frac{1}{\rho^2} \frac{1}{RePr} (1 + \bar{\beta}) \nabla^2 \bar{T}; \quad (2.51)$$

- Equação de conservação da quantidade de movimento na direção x :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{t}} + \frac{\partial \bar{u}^2}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}\bar{u}}{\partial \bar{y}} = & -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{x}} + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{1}{Re} \frac{1}{RePr} \frac{\bar{\beta}}{3} \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \left(\frac{1}{\rho^2} \nabla^2 \bar{T} \right) + \\ & + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{y}^2} \right) + \frac{\bar{\beta}}{\bar{\rho}^2} \frac{1}{RePr} \bar{u} \nabla^2 \bar{T} \end{aligned} \quad (2.52)$$

- Equação de conservação da quantidade de movimento na direção y :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{t}} + \frac{\partial \bar{u}\bar{v}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}^2}{\partial \bar{y}} = & -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{y}} + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{1}{Re} \frac{1}{RePr} \frac{\bar{\beta}}{3} \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \left(\frac{1}{\bar{\rho}^2} \nabla^2 \bar{T} \right) + \\ & + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{y}^2} \right) + \frac{\bar{\beta}}{\bar{\rho}^2} \frac{1}{RePr} \bar{v} \nabla^2 \bar{T} + \frac{1}{Fr^2} \bar{g}_y; \end{aligned} \quad (2.53)$$

Para simplificar a notação, eliminam-se as barras das variáveis e, portanto, nas próximas seções as equações anteriores são utilizadas sem as barras.

2.4 Sumário

Apresentaram-se dois módulos distintos para o cálculo de escoamentos não-isotérmicos: o modelo de Boussinesq, amplamente encontrado na literatura, e um modelo baseado no trabalho de (Casulli, 1980). Este segundo modelo, ao contrário do modelo de Boussinesq, trata de maneira consistente a variação da massa específica com a temperatura, devendo-se propiciar resultados mais adequados quando existirem elevadas diferenças de temperatura no escoamento.

Capítulo 3

Método Computacional

3.1 Introdução

Após o desenvolvimento do método MAC (Marker-and-Cell) (Welch et al., 1966), Harlow e Amsdem subsequente desenvolveram o método SMAC (Simplified MAC) (Amsden and Harlow, 1970), que divide o ciclo de cálculos em duas partes: uma para a velocidade e outra para a pressão.

O método GENSMAC (Generalized-Simplified-Marker-and-Cell) para resolução de escoamentos incompressíveis com superfícies livres, desenvolvido por Tomé e McKee (Tomé and McKee, 1994), deriva de atualizações do método SMAC para escoamentos em superfícies livres em domínios arbitrários quando a condição de não escorregamento (*no-slip*) e de escorregamento livre (*free-slip*) é imposta em fronteiras curvas. Assim, como os Métodos MAC e SMAC, o GENSMAC utiliza partículas marcadoras para definir a posição da superfície livre e a atualização do campo de escoamento é dividida em duas partes, uma para o campo de velocidade e outra para o campo de pressão como no método SMAC.

Nesse capítulo é apresentado o procedimento computacional baseado no método GENSMAC, para o cálculo das velocidades e pressão para escoamento não-isotérmicos.

3.2 Método para o Cálculo das Velocidades e Pressão

Suponha-se que em um tempo dado t_0 , o campo de velocidades $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0)$ é conhecido e as condições de fronteira para a velocidade e pressão são dadas. O campo de velocidade atualizado $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, em que $t = t_0 + \delta t$, é calculado como segue (Paiva, 2000) :

(i) Seja $\tilde{p}(\mathbf{x}, t)$ um campo de pressão que satisfaça a condição de tensão normal correta na superfície livre em $t = t_0$;

(ii) Calcula-se o campo velocidade intermediário, $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{u}, t)$ por meio da expressão

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \nabla \tilde{p} + N(\mathbf{u}), \quad (3.1)$$

com $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_0) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0)$ e $N(\mathbf{u}) = (N_1(\mathbf{u}), N_2(\mathbf{u}))$, em que,

$$N_1(\mathbf{u}) = -\frac{\partial uu}{\partial x} - \frac{\partial uv}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right),$$

$$N_2(\mathbf{u}) = -\frac{\partial vu}{\partial x} - \frac{\partial vv}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + (1 - \beta T) \frac{1}{Fr^2} g_y,$$

para o modelo de Boussinesq. E para o modelo não-Boussinesq, tem-se:

$$N_1(\mathbf{u}) = -\frac{\partial u^2}{\partial x} - \frac{\partial vu}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{1}{Re} \frac{1}{RePr} \frac{\beta}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho^2} \nabla^2 T \right) +$$

$$+ \frac{1}{\rho} \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\beta}{\rho^2} \frac{1}{RePr} u \nabla^2 T + \frac{1}{Fr^2} g_x,$$

$$N_2(\mathbf{u}) = -\frac{\partial uv}{\partial x} - \frac{\partial v^2}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{1}{Re} \frac{1}{RePr} \frac{\beta}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho^2} \nabla^2 T \right) +$$

$$+ \frac{1}{\rho} \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\beta}{\rho^2} \frac{1}{RePr} v \nabla^2 T + \frac{1}{Fr^2} g_y,$$

Observa-se que, conforme escrito no início dessa seção, todos os termos que compõem $N_1(u)$ e $N_2(u)$ são calculados a partir dos valores de u , v , T e ρ no instante $t = t_0$.

Considerando-se o modelo não-Boussinesq e subtraindo-se a equação

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \nabla \tilde{p} + N(\mathbf{u}), \quad (3.2)$$

da equação

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + N(\mathbf{u}), \quad (3.3)$$

tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}) = -\frac{1}{\rho} \nabla(p - \tilde{p}). \quad (3.4)$$

Discretizando-se a equação (3.4) da seguinte forma:

$$\frac{\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0)}{\delta t} - \frac{\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_0)}{\delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla(p - \tilde{p}), \quad (3.5)$$

tendo-se $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ para $t = t_0$, segue-se que,

$$\frac{\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)}{\delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla(p - \tilde{p}), \quad (3.6)$$

ou ainda,

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\rho} \nabla[\delta t(p - \tilde{p})]. \quad (3.7)$$

Definindo-se $\psi = \delta t(p - \tilde{p})$, uma função escalar, tem-se:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\rho} \nabla \psi. \quad (3.8)$$

Aplicando o operador divergente ∇ em ambos os lados de (3.8), obtém-se a equação elíptica para a função ψ :

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)) = -\nabla \cdot \frac{1}{\rho} \nabla \psi. \quad (3.9)$$

Para o caso do modelo de Boussinesq, considera-se $\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0$ e, extrai-se ρ de (3.9).

(iii) As condições de fronteira para ψ são:

- condição de Newmann sobre a fronteira rígida: $\frac{\partial \psi}{\partial n} = 0$ (em que n é a direção normal ao contorno rígido);
- condição de Dirichlet sobre a superfície livre: $\psi = 0$.

(iv) De (3.8), obtém-se o campo de velocidade atualizado para o modelo não-Boussinesq:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\rho} \nabla \psi(\mathbf{x}, t). \quad (3.10)$$

Para considerar o modelo de Boussinesq, basta extrair ρ da equação (3.10).

(v) Calcula-se a pressão por substituição da equação (3.8) em (3.4):

$$p \cong \tilde{p} + \frac{\psi(\mathbf{x}, t)}{\delta t}, \quad (3.11)$$

em que δt é o passo no tempo. Desta forma, pode-se resolver a equação de conservação

da quantidade de movimento e a equação elíptica, para a correção das velocidades e pressão.

(vi) Atualização das posições das partículas marcadoras.

Esse último passo envolve o movimento das partículas marcadoras para a sua nova posição. As partículas marcadoras são utilizadas para representar o fluido; elas são criadas nos injetores e em todo o domínio, permitindo-se a visualização do escoamento e determinação da superfície livre.

As coordenadas das partículas virtuais são armazenadas a cada ciclo de cálculo e, então, atualizadas por meio da resolução das equações

$$\frac{dx}{dt} = u, \quad \frac{dy}{dt} = v,$$

pelo método de Euler:

$$x_p^{n+1} = x_p^n + u_p \delta t^{n+1}, \quad (3.12)$$

$$y_p^{n+1} = y_p^n + v_p \delta t^{n+1}, \quad (3.13)$$

em que (x_p^n, y_p^n) representa a posição corrente da partícula, δt^{n+1} é o passo no tempo atual, (x_p^{n+1}, y_p^{n+1}) é a posição atualizada e u_p e v_p são velocidades calculadas usando uma interpolação bilinear, envolvendo as quatro velocidades u e v mais próximas.

Assim, obtêm-se as novas coordenadas da partícula que determinam se uma partícula se move para uma nova célula ou deixa a região de domínio do fluido através de um ejetor.

3.3 Ciclo Computacional

Para a simulação dos efeitos da temperatura em escoamentos, admite-se que em um dado instante t_0 as variáveis dependentes são conhecidas e as condições de fronteira associadas estão completamente definidas. A seguir, descreve-se os passos do ciclo computacional, o qual atualiza as variáveis u , v , P , T e ρ a partir do tempo inicial t_0 , no tempo $t = t_0 + \delta t$:

- **Passo 1:** Calcula-se o campo de velocidade intermediário $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ por meio da equação (3.1);
- **Passo 2:** Resolve-se a equação elíptica (3.9) para a função ψ ;
- **Passo 3:** Corrige-se o campo de velocidade a partir de (3.10);
- **Passo 4:** Atualiza-se a pressão pela equação (3.11);
- **Passo 5:** Resolve-se a equação da energia (2.47) ou (2.51):

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}\bar{T}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}\bar{T}}{\partial \bar{y}} = \frac{1}{RePr} \left(\frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \bar{y}^2} \right),$$

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}\bar{T}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}\bar{T}}{\partial \bar{y}} = \frac{1}{\rho^2} \frac{1}{RePr} (1 + \bar{\beta}) \nabla^2 \bar{T}.$$

- **Passo 6:** Determinam-se as novas posições das partículas marcadoras virtuais por (3.12) e (3.13);
- **Passo 7:** Atualizam-se as condições de fronteira necessárias para o próximo ciclo.

3.4 Sumário

Apresentou-se neste capítulo uma breve descrição do método numérico atualizado para resolver as equações que representam os dois modelos distintos adotados para escoamentos incompressíveis e não-isotérmicos. Descreve-se, também, as modificações no método GENSMAC para esse tipo de escoamento.

Capítulo 4

Condições de Fronteira, Condições Iniciais e Discretização

4.1 Introdução

As equações apresentadas no capítulo 2 são equações que modelam o escoamento do fluido com influência de temperatura. Para se obter uma solução, admitindo-se que a solução desse sistema de equações diferenciais parciais exista, é necessário aplicar condições de fronteira e condições iniciais. Em mecânica dos fluidos os problemas estão sempre relacionados com um domínio, seja um escoamento interno como o da água no encanamento doméstico, ou externo como o ar ao redor de um jato comercial. O comportamento físico de cada caso depende das condições iniciais e de fronteira apropriadas. a determinação e implementação das condições de fronteiras apropriadas não é, para escoamentos complexos, um procedimento trivial (Fortuna, 2000).

Neste capítulo, são definidas as condições iniciais e de fronteira e suas discretizações, juntamente com a discretização das equações governantes. As discretizações nesse trabalho são feitas pelo método de diferenças finitas em malhas deslocadas, em que os elementos (células) são retangulares de largura δx e altura δy , a velocidade u está definida no centro de cada lado vertical da célula, e a velocidade v está definida no centro de cada lado hor-

izional da célula. A pressão p , a temperatura T e a função ψ estão definidas no centro, como mostra a Figura 4.1.

Figura 4.1: Célula da malha deslocada.

4.2 Definição das Células

Como o fluido está continuamente em movimento, é empregado um procedimento para a identificação da região que contém o fluido e a superfície livre. Para isso, tem-se uma classificação global segundo as características da célula:

- Células de entrada (injetoras) (I): células que definem a entrada do fluido na região do domínio;
- Células de fronteira (F): células que definem o contorno rígido;
- Células vazia (V): células que não contêm fluido;
- Células de superfície (S): células que contêm fluido e que possuem pelo menos uma célula vizinha vazia; elas definem a posição da superfície livre;
- Células cheias (C): células que contêm o fluido e não têm contato com células vazias;
- Células de saída (ejetoras) (E): células que simulam a saída do fluido da região de domínio.

Figura 4.2: Domínio.

Conforme o problema em questão, uma célula C pode se tornar uma célula S e então, V , ou vice-versa.

4.3 Condições Iniciais

A condição inicial apropriada para as equações que modelam o escoamento é que o campo de velocidades $\mathbf{u}$ e a temperatura T sejam especificados em todo o domínio. Em particular, o campo de velocidades deve satisfazer a equação da continuidade.

4.4 Condições de Fronteira na Superfície Livre

Essa seção será iniciada com a discussão das condições de fronteira na superfície livre para o cálculo das velocidades e pressão. O tratamento das condições de fronteira associadas a essa interface é de extrema importância para a qualidade da simulação.

Assim, considerando-se ausente a tensão na superfície, têm-se que as componentes

normal e tangencial de tensão devem ser contínuas sobre a superfície livre (Tomé and McKee, 1994). Considerando-se uma superfície bidimensional com $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$, um vetor unitário externo, e $\mathbf{m} = (m_x, m_y) = (-n_y, n_x)$, um vetor tangente unitário, então as condições de fronteira são:

$$\mathbf{n}^T \cdot (\sigma \cdot \mathbf{n}) = 0, \quad (4.1)$$

$$\mathbf{m}^T \cdot (\sigma \cdot \mathbf{n}) = 0. \quad (4.2)$$

O desenvolvimento das equações (4.1) e (4.2) é dado à seguir:

$$\sigma \cdot \mathbf{n} = \sigma \cdot \begin{bmatrix} n_x \\ n_y \end{bmatrix}, \quad (4.3)$$

$$\sigma = \begin{bmatrix} -p + \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} & \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & -p + \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}, \quad (4.4)$$

$$\sigma \cdot \mathbf{n} = \begin{bmatrix} \left(-p + \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) n_x + \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_y \\ \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_x + \left(-p + \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) n_y \end{bmatrix}, \quad (4.5)$$

Portanto, $\mathbf{n}^T \cdot (\sigma \cdot \mathbf{n}) = 0$ e $\mathbf{m}^T \cdot (\sigma \cdot \mathbf{n}) = 0$ são da seguinte forma:

$$\begin{aligned} & -p(n_x^2 + n_y^2) + \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) (n_x^2 + n_y^2) + 2\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} n_x^2 + \frac{\partial v}{\partial y} n_y^2 \right) + \\ & + 2\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_x n_y = 0, \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$2\mu\left(\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x}\right)(n_x n_y) + \mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)(n_x^2 - n_y^2) = 0, \quad (4.7)$$

com $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$.

Transformando-se essas equações para a forma adimensional, tem-se:

$$\begin{aligned} -p(n_x^2 + n_y^2) + \frac{2}{3} \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) (n_x^2 + n_y^2) + 2 \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial x} n_x^2 + \frac{\partial v}{\partial y} n_y^2 \right) + \\ + \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_x n_y = 0, \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right) (n_x n_y) + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (n_x^2 - n_y^2) = 0. \quad (4.9)$$

Como já foi visto no capítulo anterior, têm-se duas formas para a equação da continuidade:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{\beta}{\rho^2} \frac{1}{RePr} \nabla^2 T.$$

Assim, a forma da equação (4.8) dependerá do modelo para escoamentos não-isotérmicos adotado:

- equações de condição de fronteira para o modelo de Boussinesq,

$$-p(n_x^2 + n_y^2) + \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial x} n_x^2 + \frac{\partial v}{\partial y} n_y^2 \right) + \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_x n_y = 0, \quad (4.10)$$

$$2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right) (n_x n_y) + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (n_x^2 - n_y^2) = 0. \quad (4.11)$$

- equações de condição de fronteira para o modelo não-Boussinesq,

$$\begin{aligned}
& -p(n_x^2 + n_y^2) + \frac{2}{3} \frac{1}{Re} \left(\frac{\beta}{\rho^2} \frac{1}{Re Pr} \nabla^2 T \right) (n_x^2 + n_y^2) + 2 \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial x} n_x^2 + \frac{\partial v}{\partial y} n_y^2 \right) + \\
& + \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_x n_y = 0,
\end{aligned} \tag{4.12}$$

$$2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right) (n_x n_y) + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (n_x^2 - n_y^2) = 0. \tag{4.13}$$

Para não tornar os cálculos repetitivos, são utilizadas daqui por diante, as equações (4.12) e (4.13).

Considerem-se três tipos de orientação para a superfície livre: horizontal, vertical e inclinada à 45 graus. Supondo-se que o espaçamento da malha seja suficientemente pequeno para que a superfície livre intercepte uma célula em dois lados, têm-se os casos:

(i) Célula S com um lado em comum com uma célula V. Nesse caso, assume-se que a superfície será horizontal ou vertical.

Considerando-se a Figura 4.3, em que a célula S está com o lado direito em contato com célula V e, portanto, $\mathbf{n} = (1, 0)$ e $\mathbf{m} = (0, 1)$.

Figura 4.3: Célula S com o lado direito em contato com uma célula V.

Substituindo-se $\mathbf{n}$ e $\mathbf{m}$ nas equações (4.8) e (4.9), obtém-se:

$$-p + \frac{2}{3} \frac{1}{Re} \left(\frac{\beta}{\rho^2} \frac{1}{RePr} \nabla^2 T \right) + \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) = 0, \quad (4.14)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} = 0. \quad (4.15)$$

Aproximando-se por diferenças finitas em malha deslocada¹ as equações (4.14) e (4.15), obtém-se:

$$\begin{aligned} p_{i,j} = \frac{2}{3} \frac{\beta}{\rho^2 Re^2 Pr} \left(\frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\delta x} + \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\delta y} \right) + \\ + \frac{2}{Re} \left(\frac{u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j}}{\delta x} \right), \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$\frac{u_{i+1/2,j+1} - u_{i+1/2,j}}{\delta y} + \frac{v_{i+1,j+1/2} - v_{i,j+1/2}}{\delta x} = 0. \quad (4.17)$$

Analogamente, são tratados os outros casos de célula S com uma célula vizinha V.

(ii) Células S com dois lados em contato com uma célula V. Nesse caso, assume-se que o vetor normal seja inclinado de 45 graus entre os lados voltados para as células vazias.

Considerando-se a Figura 4.4, em que a célula S está o com lado direito e superior em contato com célula V e, portanto, $\mathbf{n} = \left(\pm \frac{\sqrt{2}}{2}, \pm \frac{\sqrt{2}}{2} \right)$.

¹Veja seção 4.1.

Figura 4.4: Célula S com dois lados em contato com célula V.

$$-p + \frac{5}{3} \frac{\beta}{\rho^2 Re^2 Pr} \nabla^2 T \pm \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) = 0, \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (4.19)$$

Aproximando-se por diferenças finitas as equações (4.18) e (4.19), obtém-se:

$$p_{i,j} = \frac{5}{3} \frac{\beta}{\rho^2 Re^2 Pr} \left(\frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\delta x} + \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\delta y} \right) \pm \frac{1}{Re} \left(\frac{u_{i+1/2,j+1} - u_{i+1/2,j}}{\delta y} + \frac{v_{i+1,j+1/2} - v_{i,j+1/2}}{\delta x} \right), \quad (4.20)$$

$$\frac{u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j}}{\delta x} - \frac{v_{i,j+1/2} - v_{i,j-1/2}}{\delta y} = 0. \quad (4.21)$$

O sinal do termo $\pm \frac{1}{Re}$ pertencente a equação (4.20) é escolhido de acordo com a posição do vetor normal.

De forma análoga, trata-se os outros casos de células de superfícies com duas células vizinhas vazias.

(iii) Células S com três lados em contato com células V ou lados opostos em contato com células V.

Para estas células, a pressão é tomada nula e as velocidades são ajustadas a fim satisfaçam a equação da continuidade na célula S.

As equações dadas acima definem as velocidades e pressão na superfície livre. Para o cálculo da temperatura na superfície livre, utilizou-se a condição de fronteira de Robin, em que o fluxo de calor $\dot{q} = -k(\nabla T) \cdot \mathbf{n}$ é proporcional a diferença de temperatura entre a superfície e o fluido:

$$-\kappa(\nabla T) \cdot \mathbf{n} = h(T - T_{superficie}), \quad (4.22)$$

em que κ , h e $T_{superficie}$ são definidos como condutividade térmica, coeficiente de transferência de calor, temperatura de referência para a superfície livre, respectivamente.

Na forma adimensional, tem-se:

$$-(\nabla \bar{T}) \cdot \bar{\mathbf{n}} = Nu(\bar{T} - \bar{T}_{superficie}), \quad (4.23)$$

Novamente, para simplificar a notação, as barras das variáveis são omitidas.

O método utilizado consiste em percorrer todas as células de superfície S e analisar as células vizinhas², e então calcular a temperatura pela equação (4.23). Para o caso bidimensional, deve-se considerar quinze casos, que se agrupam em três conjuntos:

(i) células S tendo apenas uma face em contato com células V:

- célula S tendo a face $i + \frac{1}{2}$ em contato com células V;
- célula S tendo a face $i - \frac{1}{2}$ em contato com células V;
- célula S tendo a face $j + \frac{1}{2}$ em contato com células V;
- célula S tendo a face $j - \frac{1}{2}$ em contato com células V;

Para ilustrar, dois dos casos acima são considerados, o primeiro e o terceiro, pois os outros são análogos. Seja a Figura 4.5, em que a célula S está com o lado direito em

²Esse procedimento também é utilizado para o cálculo da pressão nas células de superfície.

contato com célula V e, portanto, $\mathbf{n} = (1, 0)$.

Figura 4.5: Célula S com um lado em contato com célula V.

Assim, a equação 4.3 é escrita como:

$$-\frac{\partial T}{\partial x} = Nu(T - T_{superficie}) \quad \text{ou} \quad -\frac{T_{i,j} - T_{i-1,j}}{\delta x} = Nu(T_{i,j} - T_{superficie}).$$

Considerando-se agora a Figura 4.6, em que a célula S está com o lado superior em contato com célula V, e com $\mathbf{n} = (0, 1)$, temos:

Figura 4.6: Célula S com um lado em contato com célula V.

$$-\frac{\partial T}{\partial y} = Nu(T - T_{superficie}) \quad \text{ou} \quad -\frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{\delta y} = Nu(T_{i,j} - T_{superficie}).$$

(ii) células S com duas faces em contato com células V:

- célula S tendo a face $i + \frac{1}{2}$ e $j + \frac{1}{2}$ em contato com células V;
- célula S tendo a face $i - \frac{1}{2}$ e $j + \frac{1}{2}$ em contato com células V;
- célula S tendo a face $i + \frac{1}{2}$ e $j - \frac{1}{2}$ em contato com células V;
- célula S tendo a face $i - \frac{1}{2}$ e $j - \frac{1}{2}$ em contato com células V;

Seja a Figura 4.7, em que $\mathbf{n} = (\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2})$. Portanto,

Figura 4.7: Célula S com dois lados em contato com célula V.

$$-\left(\frac{\partial T}{\partial x} \frac{\sqrt{2}}{2} + \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\sqrt{2}}{2}\right) = Nu(T - T_{superficie})$$

ou

$$-\left(\frac{T_{i,j} - T_{i-1,j}}{\delta x} + \frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{\delta y}\right) \frac{\sqrt{2}}{2} = Nu(T_{i,j} - T_{superficie}).$$

(iii) células S com dois lados opostos ou com três faces em contato com células V:

- célula S tendo a face $i + \frac{1}{2}$ e $i - \frac{1}{2}$ em contato com células V;
- célula S tendo a face $j + \frac{1}{2}$ e $j - \frac{1}{2}$ em contato com células V;
- célula S tendo a face $i + \frac{1}{2}$, $i - \frac{1}{2}$ e $j + \frac{1}{2}$ em contato com células V;
- célula S tendo a face $i + \frac{1}{2}$, $j + \frac{1}{2}$ e $j - \frac{1}{2}$ em contato com células V;
- célula S tendo a face $i + \frac{1}{2}$, $i - \frac{1}{2}$ e $j + \frac{1}{2}$ em contato com células V;
- célula S tendo a face $i + \frac{1}{2}$, $i - \frac{1}{2}$ e $j - \frac{1}{2}$ em contato com células V;

Seja a Figura 4.8:

Figura 4.8: Célula S com três lados em contato com célula V.

Nesse caso, considera-se $\mathbf{n} = (0, 1)$ e obtêm-se:

$$-\frac{\partial T}{\partial y} = Nu(T - T_{superficie}) \quad \text{ou} \quad -\frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{\delta y} = Nu(T_{i,j} - T_{superficie}).$$

4.5 Condições de Fronteira na Superfície Rígida

Na superfície rígida é aplicada a condição de aderência molecular (*no-slip*), ou seja, a velocidade tangencial u é nula. Considerando-se, também, a parede como impermeável, tem-se que a velocidade normal v é nula na superfície da parede.

Para o caso da temperatura, implementa-se as condições de Dirichlet:

$$T = T_{parede}$$

e a condição adiabática:

$$-k \frac{\partial T}{\partial n} = 0$$

4.5.1 Cálculo das Velocidades e Temperatura pelas Condições de Fronteira Rígida

As velocidades u e v nas faces das células de fronteira são calculadas por interpolação linear. Essas células podem ter um ou dois lados adjacentes as células de superfície ou células cheias. Para problemas bidimensionais, obtêm-se oito casos de condições de contorno na fronteira rígida (Oliveira, 1999):

(i) Células F com uma face em contato com células S ou células C:

- células F com a face $i + \frac{1}{2}$ em contato com células S ou C;
- células F com a face $i - \frac{1}{2}$ em contato com células S ou C;
- células F com a face $j + \frac{1}{2}$ em contato com células S ou C;
- células F com a face $j - \frac{1}{2}$ em contato com células S ou C.

(ii) Células F com duas faces em contato com células S ou C:

- células F com as faces $i + \frac{1}{2}$ e $j + \frac{1}{2}$ em contato com células S ou C;
- células F com as faces $i - \frac{1}{2}$ e $j + \frac{1}{2}$ em contato com células S ou C;
- células F com as faces $i + \frac{1}{2}$ e $j - \frac{1}{2}$ em contato com células S ou C;
- células F com as faces $i - \frac{1}{2}$ e $j - \frac{1}{2}$ em contato com células S ou C.

Para ilustrar os casos acima, dois exemplos são considerados. Considera-se primeiro o caso em que uma célula F possui face $i + \frac{1}{2}$ em contato com uma célula C ou S, como indica a Figura 4.9.

Figura 4.9: Célula F com a face $i + \frac{1}{2}$ em contato com célula C ou S.

Para calcular a velocidade $u_{i+\frac{1}{2},j}$, considera-se $P_0 = (x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$, $P_1 = (x_{i+\frac{3}{2}}, y_j)$ e $P_b = (x_{ub}, y_j)$, em que x_{ub} representa a intersecção entre a linha definida por P_0 e P_1 com a superfície da fronteira. Calcula-se $u_{i+\frac{1}{2},j}$ por meio de uma interpolação linear entre P_b e P_1 (Oliveira, 1999):

$$u_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{ub}}{x_{i+\frac{3}{2}} - x_{ub}} \times u_{i-\frac{3}{2},j} + \frac{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i+\frac{3}{2}}}{x_{ub} - x_{i+\frac{3}{2}}} \times u_b$$

O cálculo da velocidade v é análogo ao cálculo de u .

O segundo exemplo é para o caso em que se têm células F com duas faces em contato com células S ou C como mostra a Figura 4.10. Então, considera-se o caso em que uma célula F com as faces $i + \frac{1}{2}$ e $j + \frac{1}{2}$ está em contato com células S ou C, como mostra a Figura 4.10:

 Figura 4.10: Célula F com a face $i + \frac{1}{2}$ e $j + \frac{1}{2}$ em contato com célula C ou S.

A interpolação para a velocidade v pode ser feita na direção x ou y . Portanto, deve-se escolher a direção em que $|x_{b1} - x_y|$ ou $|y_{b2} - x_y|$ for menor. Determinada a direção, pode-se calcular v seguindo os cálculos feitos anteriormente.

Para o cálculo de u , se a superfície da fronteira não intercepta a linha L , tem-se apenas uma opção para efetuar a interpolação e, portanto, a resolução segue de forma análoga ao primeiro exemplo. Caso contrário, o cálculo de u será análogo ao cálculo de v .

Os outros casos para o cálculo das velocidades u e v são semelhantes ao que foi feito acima.

Para o cálculo da temperatura nas faces das células de fronteira, o procedimento é semelhante ao que foi feito para as velocidades. Calcula-se $T_{i+1/2,j}$ por interpolação linear entre os pontos P_b e P_l :

 Figura 4.11: Célula F com a face $i + \frac{1}{2}$ em contato com célula C ou S.

$$T_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{Tb}}{x_{i+1} - x_{Tb}} \times T_{i-1,j} + \frac{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i+1}}{x_{Tb} - x_{i+1}} \times T_b,$$

$$T_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{y_{j+\frac{1}{2}} - y_{Tb}}{y_{j+1} - y_{Tb}} \times T_{i,j+1} + \frac{y_{j+\frac{1}{2}} - y_{j+1}}{y_{Tb} - y_{j+1}} \times T_b.$$

4.6 Discretização das Equações que Modelam o Escoamento

Um método numérico para resolução das equações (2.44), (2.47), (2.48), (2.49), (2.50), (2.51), (2.52) e (2.53) consiste em primeiro discretizar o domínio, ou seja, distribuir um certo número de pontos discretos no espaço em que a solução é conhecida; e segundo, discretizar as equações transformando o sistema de equações diferenciais em um sistema de equações algébricas. Nessa seção é definido a discretização das equações de conservação da quantidade de movimento, equação da continuidade, equação da energia e equação elíptica para a função ψ .

Como já foi comentado anteriormente, a discretização é feita pelo método de diferenças finitas em malha deslocada, e portanto, tem-se que a equação de conservação da quantidade de movimento na direção x é discretizada sobre a posição $(i+1/2, j)$. Na direção y ela é discretizada sobre a posição $(i, j+1/2)$. As equações da continuidade, elíptica e da energia são discretizadas na posição (i, j) .

4.6.1 Discretização das Equações de Conservação da Quantidade de Movimento

• Derivadas Temporais

As aproximações para as derivadas temporais são feitas utilizando-se diferenças avançadas (Euler explícito) de primeira ordem,

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

$$\left. \frac{\partial \tilde{v}}{\partial t} \right|_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} - \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}^n}{\delta t},$$

em que δt é o passo no tempo.

• Gradientes de Pressão

Os gradientes de pressão, bem como a equação da continuidade e os outros termos das equações de conservação da quantidade de movimento, com exceção dos termos convectivos, são aproximados usando-se diferenças centrais de segunda ordem.

$$\left. \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\tilde{p}_{i+1,j} - \tilde{p}_{i,j}}{\delta x},$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{i+1/2,j} = \frac{u_{i-1/2,j} - 2u_{i+1/2,j} + u_{i+3/2,j}}{dx^2},$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right|_{i-1/2,j} = \frac{u_{i-1/2,j-1} - 2u_{i+1/2,j} + u_{i+1/2,j-1}}{dy^2},$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) \right|_{i+1/2,j} = \frac{1}{dx^3} \left[\frac{1}{\rho_{i-1,j}^2} \left(T_{i+2,j} - 2T_{i+1,j} + T_{i,j} \right) + \right. \\ \left. - \frac{1}{\rho_{i,j}^2} \left(T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j} \right) \right],$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \right|_{i+1/2,j} = \frac{1}{dxdy^2} \left[\frac{1}{\rho_{i+1,j}^2} \left(T_{i+1,j+1} - 2T_{i+1,j} + T_{i+1,j-1} \right) + \right. \\ \left. - \frac{1}{\rho_{i,j}^2} \left(T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1} \right) \right].$$

Para os termos da equação de conservação da quantidade de movimento na direção y , o procedimento é análogo.

4.6.2 Discretização da Equação da Energia

Da mesma forma como foi feito para as equações de conservação da quantidade de movimento, a derivada temporal da equação da energia é, também, aproximada por diferenças avançadas de primeira ordem, e o termo viscoso por diferenças centrais de segunda ordem:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{i,j} = \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\delta t}, \quad \left. \nabla^2 T \right|_{i,j} = \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{dx^2} + \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{dy^2}.$$

Na discretização do termo viscoso na equação da energia por diferenças centrais, ocorre quando a discretização é feita em células adjacentes às células F, a expressão anterior exige a especificação de valores para a temperatura fora do domínio computacional.

Para resolver esse problema, utiliza-se uma discretização não-centrada de primeira ordem (Fortuna, 2000). Essa discretização pode ser construída a partir das temperaturas $T_{i,j+1}$, $T_{i,j}$ e $T_{i,j-1/2}$, com o uso de diversas técnicas, porém, nesse trabalho, foi empregado a técnica de interpolação polinomial. Veja Figuras 4.12 e 4.13.

Figura 4.12: Célula adjacente à fronteira rígida.

Figura 4.13: Interpolação polinomial de $\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}$ no ponto (i,j) .

Assim, pode-se construir uma aproximação não-centrada para $\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}$ partindo-se de uma função do tipo $T(y) = ay^2 + by + c$ (a , b e c constantes) para calcular $T(dy)$, $T(0)$ e $T\left(-\frac{1}{2}dy\right)$:

$$T(dy) = ady^2 - bdy + c = T_{i,j+1},$$

$$T(0) = c = T_{i,j},$$

$$T\left(-\frac{1}{2}dy\right) = \frac{a}{4}dy^2 - \frac{b}{2}dy + c = T_{i,j-1/2},$$

Após resolver o sistema, obtém-se:

$$a = \frac{T_{i,j-1/2} + \frac{1}{2}T_{i,j+1} - \frac{3}{2}T_{i,j}}{\frac{3}{4}dy^2},$$

$$b = \frac{T_{i,j+1} + 4T_{i,j-1/2} - 3T_{i,j}}{3dy},$$

$$c = T_{i,j}.$$

Portanto, para $\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}$, tem-se:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 2a = \frac{2T_{i,j-1/2} + T_{i,j+1} - 3T_{i,j}}{\frac{3}{4}dy^2},$$

em que $T_{i,j-1/2}$ é a temperatura conhecida na parede rígida.

4.6.3 Discretização dos Termos Convectivos

Em escoamentos nos quais a convecção tem papel importante (por exemplo, aqueles com altos números de Reynolds), a discretização adequada dos termos convectivos é de extrema importância para a qualidade da solução numérica. A escolha incorreta do tipo de discretização pode originar instabilidades numéricas ou soluções oscilatórias. O exemplo mais comum é a difusão numérica ou artificial introduzida pela aproximação “Upwind”. Por isso, um dos maiores desafios na DFC³, é encontrar aproximações para os termos convectivos que não introduzam distorções na solução numérica. E por essa razão, várias técnicas de discretização têm sido desenvolvidas (Ferreira et al., 2001).

Para ilustrar alguns dos esquemas mais utilizados em DFC, considera-se a Figura 4.14 e a derivada parcial $\frac{\partial \phi}{\partial s}$ de uma variável genérica ϕ em um ponto P_0 , em que s é um dos eixos coordenados.

Figura 4.14: *Estêncil* usado para calcular ϕ_A e ϕ_B .

Então, pode-se aproximar a derivada da seguinte forma:

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

em que ϕ_A e ϕ_B são valores de variáveis genéricas nos pontos P_A e P_B , respectivamente, e podem ser obtidos em termos dos valores vizinhos na malha, por meio dos seguintes esquemas (Ferreira et al., 2001):

- *Upwind* de primeira ordem:

³Dinâmica dos Fluidos Computacional.

$$\phi_B = \begin{cases} \phi_0, & \text{se } V_B \geq 0, \\ \phi_1, & \text{se } V_B < 0. \end{cases}, \quad \phi_A = \begin{cases} \phi_{-1}, & \text{se } V_A \geq 0, \\ \phi_0, & \text{se } V_A < 0. \end{cases} \quad (4.24)$$

- 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*):

$$\phi_B = \begin{cases} \frac{3}{8}\phi_1 + \frac{6}{8}\phi_0 - \frac{1}{8}\phi_{-1}, & \text{se } V_B \geq 0, \\ \frac{3}{8}\phi_0 + \frac{6}{8}\phi_1 - \frac{1}{8}\phi_2, & \text{se } V_B < 0 \end{cases} \quad (4.25)$$

$$\phi_A = \begin{cases} \frac{3}{8}\phi_0 + \frac{6}{8}\phi_{-1} - \frac{1}{8}\phi_{-2}, & \text{se } V_A \geq 0, \\ \frac{3}{8}\phi_{-1} + \frac{6}{8}\phi_0 - \frac{1}{8}\phi_1, & \text{se } V_A < 0 \end{cases} \quad (4.26)$$

- HPLA (*Hybrid Linear Parabolic Approximation*):

$$\text{se } 0 \leq V_B \quad \phi_B = \begin{cases} \phi_0, & \text{se } \hat{\phi}_0 \notin [0, 1], \\ \phi_0 + (\phi_1 - \phi_0)\hat{\phi}_0, & \text{se } \hat{\phi}_0 \in [0, 1] \end{cases} \quad (4.27)$$

$$\text{se } V_B < 0 \quad \phi_B = \begin{cases} \phi_1, & \text{se } \hat{\phi}_1 \notin [0, 1], \\ \phi_1 + (\phi_0 - \phi_1)\hat{\phi}_1, & \text{se } \hat{\phi}_1 \in [0, 1] \end{cases} \quad (4.28)$$

$$\text{se } 0 \leq V_A \quad \phi_A = \begin{cases} \phi_{-1}, & \text{se } \hat{\phi}_{-1} \notin [0, 1], \\ \phi_{-1} + (\phi_0 - \phi_{-1})\hat{\phi}_{-1}, & \text{se } \hat{\phi}_{-1} \in [0, 1] \end{cases} \quad (4.29)$$

$$\text{se } V_A < 0 \quad \phi_A = \begin{cases} \phi_0, & \text{se } \hat{\phi}_0 \notin [0, 1], \\ \phi_0 + (\phi_{-1} - \phi_0)\hat{\phi}_0, & \text{se } \hat{\phi}_0 \in [0, 1] \end{cases} \quad (4.30)$$

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

$$\text{se } 0 \leq V_B, \quad \phi_B = \begin{cases} \phi_0 & \text{se } \hat{\phi}_0 \notin [0, 1], \\ 10\phi_0 - 9\phi_{-1} & \text{se } 0 \leq \hat{\phi}_0 < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3\phi_1 + 6\phi_0 - \phi_{-1}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\phi}_0 < 1/2, \\ 1.5\phi_0 - 0.5\phi_{-1} & \text{se } 1/2 \leq \hat{\phi}_0 < 2/3, \\ \phi_1 & \text{se } 2/3 \leq \hat{\phi}_0 \leq 1. \end{cases} \quad (4.31)$$

$$\text{se } V_B < 0, \quad \phi_B = \begin{cases} \phi_1 & \text{se } \hat{\phi}_1 \notin [0, 1], \\ 10\phi_1 - 9\phi_2 & \text{se } 0 \leq \hat{\phi}_1 < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3\phi_0 + 6\phi_1 - \phi_2) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\phi}_1 < 1/2, \\ 1.5\phi_1 - 0.5\phi_2 & \text{se } 1/2 \leq \hat{\phi}_1 < 2/3, \\ \phi_0 & \text{se } 2/3 \leq \hat{\phi}_1 \leq 1. \end{cases} \quad (4.32)$$

$$\text{se } 0 \leq V_A, \quad \phi_A = \begin{cases} \phi_{-1} & \text{se } \hat{\phi}_{-1} \notin [0, 1], \\ 10\phi_{-1} - 9\phi_{-2} & \text{se } 0 \leq \hat{\phi}_{-1} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3\phi_0 + 6\phi_{-1} - \phi_{-2}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\phi}_{-1} < 1/2, \\ 1.5\phi_{-1} - 0.5\phi_{-2} & \text{se } 1/2 \leq \hat{\phi}_{-1} < 2/3, \\ \phi_0 & \text{se } 2/3 \leq \hat{\phi}_{-1} \leq 1. \end{cases} \quad (4.33)$$

$$\text{se } V_A < 0, \quad \phi_A = \begin{cases} \phi_0 & \text{se } \hat{\phi}_0 \notin [0, 1], \\ 10\phi_0 - 9\phi_1 & \text{se } 0 \leq \hat{\phi}_0 < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3\phi_{-1} + 6\phi_0 - \phi_1) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\phi}_0 < 1/2, \\ 1.5\phi_0 - 0.5\phi_1 & \text{se } 1/2 \leq \hat{\phi}_0 < 2/3, \\ \phi_{-1} & \text{se } 2/3 \leq \hat{\phi}_0 \leq 1. \end{cases} \quad (4.34)$$

em que $\hat{\phi}_U$ ($U = -1, 0, 1$) são definidas em função das velocidades, de acordo com o sentido da

velocidade do escoamento:

$$\hat{\phi}_U = \frac{\phi_U - \phi_R}{\phi_D - \phi_R}$$

em que $\hat{\phi}_U$, $\hat{\phi}_D$ e $\hat{\phi}_R$ são os valores de ϕ nas posições *upstream*, *downstream* e *remote-upstream*, respectivamente, em relação ao pontos P_B e P_A .

Para o cálculo dos termos convectivos das equações de conservação da quantidade de movimento e da equação da energia, utilizou-se o esquema VONOS, o qual introduz pouca difusão numérica, e permite simulações numéricas com altos números de Reynolds (Ferreira et al., 2001).

Para exemplificar a filosofia do esquema VONOS no cálculo dos termos convectivos, utiliza-se a derivada parcial $\left. \frac{\partial u^2}{\partial x} \right|_{i+1,j}$ da equação de conservação da quantidade de movimento na direção x . Aproximando-se a derivada por diferenças centrais, no ponto $(i + \frac{1}{2}, j)$, tem-se:

$$\left. \frac{\partial u^2}{\partial x} \right|_{i+1,j} = \frac{\bar{u}_{i+1,j} u_{i+1,j} - \bar{u}_{i,j} u_{i,j}}{\delta x},$$

em que $\bar{u}_{i,j}$ e $\bar{u}_{i+1,j}$ representam as velocidades de convecção, as quais, devido a sua localização espacial, são normalmente definidas como a média aritmética das velocidades u adjacentes:

$$\bar{u}_{i,j} = \frac{u_{i-1/2,j} + u_{i+1/2,j}}{2}, \quad \bar{u}_{i+1,j} = \frac{u_{i+1/2,j} + u_{i+3/2,j}}{2}.$$

As velocidades transportadas são aproximadas pelo esquema VONOS, veja a Fig.4.15:

Figura 4.15: Posição das velocidades utilizadas para a discretização dos termos convectivos.

Então:

- se $\bar{u}_{i+1,j} \geq 0$:

$$\hat{\phi}_{i+1/2,j} = \frac{u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j}}{u_{i+3/2,j} - u_{i-1/2,j}},$$

$$u_{i+1,j} = \begin{cases} u_{i+1/2,j} & \text{se } \hat{\phi}_{i+1/2,j} \notin [0, 1], \\ 10u_{i+1/2,j} - 9u_{i-1/2,j} & \text{se } 0 \leq \hat{\phi}_{i+1/2,j} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3u_{i+3/2} + 6u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\phi}_{i+1/2,j} < 1/2, \\ 1.5u_{i+1/2} - 0.5u_{i-1/2,j} & \text{se } 1/2 \leq \hat{\phi}_{i+1/2,j} < 2/3, \\ u_{i+3/2,j} & \text{se } 2/3 \leq \hat{\phi}_{i+1/2,j} \leq 1. \end{cases} \quad (4.35)$$

- se $\bar{u}_{i+1,j} < 0$:

$$\hat{\phi}_{i+3/2,j} = \frac{u_{i+3/2,j} - u_{i+5/2,j}}{u_{i-1/2,j} - u_{i+5/2,j}},$$

$$u_{i+1,j} = \begin{cases} u_{i+3/2,j} & \text{se } \hat{\phi}_{i+3/2,j} \notin [0, 1], \\ 10u_{i+3/2,j} - 9u_{i+5/2,j} & \text{se } 0 \leq \hat{\phi}_{i+3/2,j} < 3/74, \\ \frac{1}{8}(3u_{i+1/2,j} + 6u_{i+3/2,j} - u_{i+5/2,j}) & \text{se } 3/74 \leq \hat{\phi}_{i+3/2,j} < 1/2, \\ 1.5u_{i+3/2,j} - 0.5\phi_{i+5/2,j} & \text{se } 1/2 \leq \hat{\phi}_{i+3/2,j} < 2/3, \\ u_{i+1/2,j} & \text{se } 2/3 \leq \hat{\phi}_{i+3/2,j} \leq 1. \end{cases} \quad (4.36)$$

Analogamente, obtém-se a aproximação para $u_{i,j}$ e para os outros termos convectivos das equações de conservação da quantidade de movimento e da equação da energia.

4.6.4 Discretização da Equação Elíptica

Nesse trabalho, têm-se duas funções elípticas, pois, como já mencionado, dois modelos matemáticos estão sendo utilizados para representar os efeitos da temperatura sobre o escoamento do fluido.

• Equação elíptica para o modelo de Boussinesq

$$\nabla^2 \psi = \nabla \cdot \tilde{u}. \quad (4.37)$$

Em coordenadas cartesianas a equação (4.37) é da forma:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y}.$$

A aproximação é feita por diferenças centrais de segunda ordem:

$$\left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right|_{i,j} = \frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{dx^2},$$

$$\left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right|_{i,j} = \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{dy^2},$$

$$\nabla \cdot \tilde{u} = \frac{\tilde{u}_{i+1/2,j} - \tilde{u}_{i-1/2,j}}{\delta x} + \frac{\tilde{v}_{i,j+1/2} - \tilde{v}_{i,j-1/2}}{\delta y}.$$

Portanto, a equação (4.37) discretizada é dada por:

$$\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j}(1+h) + \psi_{i-1,j} + h\psi_{i,j+1} + h\psi_{i,j-1} = \delta x^2 \nabla \cdot \tilde{u}, \quad (4.38)$$

em que $h = \left(\frac{\delta x}{\delta y}\right)^2$.

• **Equação elíptica para o modelo não-Boussinesq**

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho} \nabla \psi = \nabla \cdot \tilde{u} - \gamma \nabla^2 T, \quad (4.39)$$

em que $\gamma = \frac{\beta}{\rho^2 Re Pr}$.

Em coordenadas cartesianas sua forma é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} - \gamma \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right). \quad (4.40)$$

A aproximação é feita utilizando-se diferenças centrais:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \Big|_{i,j} = \frac{\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \Big|_{i+1/2,j} - \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \Big|_{i-1/2,j}}{\delta x},$$

em que

$$\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \Big|_{i+1/2,j} = \frac{1}{\rho_{i+1/2,j}} \left(\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{\delta x} \right),$$

$$\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \Big|_{i-1/2,j} = \frac{1}{\rho_{i-1/2,j}} \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{\delta x} \right).$$

Portanto,

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right|_{i,j} = \frac{1}{dx^2} \left[\frac{1}{\rho_{i+1/2,j}} (\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}) - \frac{1}{\rho_{i-1/2,j}} (\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}) \right].$$

Analogamente, obtém-se a aproximação para o termo $\left. \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \right|_{i,j}$:

$$\left. \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \right|_{i,j} = \frac{1}{dy^2} \left[\frac{1}{\rho_{i,j+1/2}} (\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}) - \frac{1}{\rho_{i,j-1/2}} (\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}) \right].$$

Assim, a equação (4.39) na forma discretizada é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\psi_{i+1,j}}{\rho_{i+1/2,j}} - \psi \left(\frac{1}{\rho_{i+1/2,j}} + \frac{1}{\rho_{i-1/2,j}} + \frac{h}{\rho_{i,j+1/2}} + \frac{h}{\rho_{i,j-1/2}} \right) + \frac{\psi_{i-1,j}}{\rho_{i-1/2,j}} + \\ + h \frac{\psi_{i,j+1}}{\rho_{i,j+1/2}} + h \frac{\psi_{i,j-1}}{\rho_{i,j-1/2}} = \nabla \cdot \tilde{u} - \gamma \nabla^2 T, \end{aligned} \quad (4.41)$$

em que $h = \left(\frac{dx}{dy} \right)^2$

Como ρ está definido apenas no centro da célula, faz-se uma média aritmética dos valores vizinhos conhecidos, para se obter os valores de ρ na face da célula:

$$\rho_{i+1/2,j} = \frac{\rho_{i+1,j} + \rho_{i,j}}{2}, \quad \rho_{i-1/2,j} = \frac{\rho_{i-1,j} + \rho_{i,j}}{2}, \quad (4.42)$$

$$\rho_{i,j+1/2} = \frac{\rho_{i,j+1} + \rho_{i,j}}{2}, \quad \rho_{i,j-1/2} = \frac{\rho_{i,j-1} + \rho_{i,j}}{2}.$$

Solução da Equação Elíptica

Após discretizar a equação elíptica

$$\nabla^2 \psi(x, t) = \nabla \cdot \tilde{u}(x, t) \quad \text{ou} \quad \nabla \cdot \frac{1}{\rho} \nabla \psi = \nabla \cdot \tilde{u} - \gamma \nabla^2 T,$$

em que $\gamma = \frac{\beta}{\rho^2 Re Pr}$, tem-se um sistema linear que pode ser representado por

$$AX = D,$$

em que A é uma matriz simétrica esparsa e definida positiva de ordem n , com n representando o número de células C .

Para se resolver esse sistema emprega-se o método de gradientes conjugados. Aplica-se a equação elíptica discretizada em cada célula C da malha e monta-se a matriz A .

4.6.5 Controle do Passo no Tempo

A forma explícita do cálculo de $\tilde{u}$, $\tilde{v}$ e T impõe restrições severas aos valores permitidos de δt . A cada ciclo, o tamanho do passo no tempo é obtido segundo as restrições :

(i) O fluido não pode percorrer uma distância maior que o comprimento de uma célula a cada passo no tempo. Esse critério nada mais é que a condição CFL. Assim, o valor de δt deve satisfazer às restrições, (Tomé and McKee, 1994):

$$\delta t < \frac{\delta x}{|U_{max}|} \quad \text{e} \quad \delta t < \frac{\delta y}{|V_{max}|} \quad (4.43)$$

em que U_{max} e V_{max} são os valores máximos de u e v , respectivamente.

(ii) A discretização explícita do termo viscoso nas equações de conservação de quantidade de movimento, exige que, (Tomé and McKee, 1994):

$$\delta t < \frac{Re}{2} \frac{\delta x^2 \delta y^2}{\delta x^2 + \delta y^2}. \quad (4.44)$$

(iii) A discretização da equação da energia (2.3.3) requer uma condição de estabilidade que complementa às restrições acima e é análoga à (4.44). Portanto, o passo no tempo deve ser (Griebel et al., 1997):

$$\delta t < \frac{RePr}{2} \frac{\delta x^2 \delta y^2}{\delta x^2 + \delta y^2}. \quad (4.45)$$

Na implementação desse trabalho, utilizou-se as restrição acima na forma (Griebel et al., 1997):

$$\delta t < \min \left(\frac{\delta x}{|U_{max}|}, \frac{\delta y}{|V_{max}|}, \frac{Re}{2} \frac{\delta x^2 \delta y^2}{\delta x^2 + \delta y^2}, \frac{RePr}{2} \frac{\delta x^2 \delta y^2}{\delta x^2 + \delta y^2} \right). \quad (4.46)$$

4.7 Sumário

Este capítulo descreve as condições auxiliares (iniciais e de fronteira) implemetadas, as quais influenciam o comportamento do escoamento. A implementação dessas condições não é trivial, uma vez que muitas delas dependem da orientação da superfície livre do fluido.

Como a maioria dos métodos de cálculo explícito, o GENSMAC apresenta uma restrição nos valores máximos de δt entre instantes consecutivos. Esse valor é calculado obedecendo às diferentes restrições impostas pela condição CFL.

Capítulo 5

Sistema Freeflow-2D para Escoamentos Não-Isotérmicos

5.1 Introdução

Nesse capítulo é feita uma descrição das alterações feitas no ambiente Freeflow-2D (Oliveira, 1999) para simulação de escoamentos com influência de temperatura com superfície livre em duas dimensões. Esse sistema possui três módulos: módulo de modelagem, módulo de simulação e módulo de visualização, os quais foram alterados para a realização desse trabalho.

5.2 Ambiente de Simulação Freeflow-2D

O Freeflow-2D é um ambiente integrado para modelagem, simulação e visualização de escoamentos newtonianos isotérmicos bidimensionais incompressíveis com superfícies livres. O sistema possui quatro módulos denominados Modflow-2D, Simflow-2D, Visflow-2D e Resimflow-2D, os quais se comunicam por meio de arquivos¹. A implementação dos módulos foi feita em *linguagem C* sobre o sistema operacional UNIX.

¹Ver apêndice B.

5.2.1 Modelador

Módulo iterativo para especificação de um modelo de escoamento. Esse módulo consiste de uma interface gráfica para a introdução de dados referentes ao escoamento, como domínio, viscosidade, velocidade e comprimento de referência, parâmetros e tolerâncias utilizados pelo simulador, e os objetos geométricos, os quais são pré-definidos, mas o usuário poderá escolher o formato, tamanho, posição e orientação.

Para o caso de escoamentos com trocas de calor, ao entrar na interface principal, além de especificar os dados do escoamento, como já mencionado acima, o usuário deverá escolher se deseja fazer uma simulação com ou sem influência de temperatura, ou seja, ele deverá escolher entre a opção “Isothermal” ou “Non-Isothermal”.

DOMAIN

Name-Domain: NONAME

X min: 0.000000 X max: 1.000000 I max: 10

Y min: 0.000000 Y max: 1.000000 J max: 10

Start-Simulation-Time: 0.000000 Stop-Simulation-Time: 1.000000

Start-Simulation-Cycle: 0 Stop-Simulation-Cycle: 10000

Printing Time-Step: 0.050000 Saving Time-Step: 0.250000

Length-Scale: 1.000000 Velocity-Scale: 1.000000 Gravity Gx: 0.000000

Gy: -1.000000 Viscosity: 1.000000 Surface Tension: 0.000000

Initial Time-Step: 0.000001 Poisson Equation Tolerance: 0.000001

Time-Step Factor: 0.500000 Time-Step Factor 1: 0.800000 Factor 2: 0.800000

Velocity Solver Type: ☒ Explicit ☐ Implicit

Flow Type: ☒ Newtonian ☐ Cross-Model ☐ Power-Law

Simulation Type: ☒ Isothermal ☐ Non-Isothermal

Execute

Figura 5.1: Entrada de dados.

Se a opção for por uma simulação com influência térmica, então os dados das propriedades térmica do fluido terão que ser especificados, como difusividade térmica, coeficiente de expansão térmica, além de temperatura inicial do fluido, do ambiente e do recipiente. Também se pode escolher o modelo a ser utilizado, modelo de Boussinesq ou modelo não-Boussinesq, as condições de fronteira rígida, Dirichlet ou adiabática, e o tipo de discretização para o termo convectivo da equação da energia.

DATA

Nusselt Number : 0.000000

Coefficient of Thermal Expansion: 0.000000

Thermal Diffusivity: 0.000000

T-Fluid: 0.000000 T-Air: 0.000000

T-Container Lower : 0.000000 Boundary Condition : ☒ Dirichlet ☐ Adiabatic

T-Container Higher : 0.000000 Boundary Condition : ☒ Dirichlet ☐ Adiabatic

T-Container Right : 0.000000 Boundary Condition : ☒ Dirichlet ☐ Adiabatic

T-Container Left : 0.000000 Boundary Condition : ☒ Dirichlet ☐ Adiabatic

Temperature Solver Type : ☒ Model Boussinesq ☐ Model non-Boussinesq

Discretization : ☒ Upwind ☐ HPLA ☐ Vonos

Execute

Figura 5.2: Entrada de dados referentes às propriedades térmicas do fluido (para o caso de simulação com influência de temperatura).

5.2.2 Simulador

O Simflow-2D é um módulo para simular os escoamentos transientes de fluidos newtonianos incompressíveis com superfície livre. Esse módulo é a parte central do Freeflow-2D, pois nele está implementada as equações de Navier-Stokes, utilizando-se o método GENSMAC como base, juntamente com suas condições de fronteira. Nesse trabalho, as equações de Navier-Stokes implementadas no simulador foram ajustadas para escoamentos com influência térmica, e implementou-se também a equação da energia e as condições de fronteira para a temperatura. Portanto, é nesse módulo em que se encontra a parte principal do desenvolvimento desse projeto.

Para se fazer uma simulação, o Simflow-2D executa os seguintes passos:

- Leitura dos arquivos de entrada;
- Cálculo dos passos dados no capítulo 3.

5.2.3 Visualizador

O módulo de visualização, Visflow-2D, é responsável por apresentar a visualização dos resultados gerados pelo simulador (Simflow-2D). Nele, pode-se visualizar os campos de velocidades e pressão, e para escoamentos com influência de temperatura, pode-se também visualizar os campos de temperatura e massa específica.

Figura 5.3: Interface gráfica: Visualizador.

Para a visualização dessas propriedades, utiliza-se uma escala de cores de acordo com os valores assumido dessas propriedades em cada ponto. Para facilitar o entendimento da figura gerada no visualizador, utiliza-se uma faixa, a qual relaciona os valores da propriedade com as cores utilizadas, mostrando-se a variação total da propriedade visualizada.

Temperatura

Massa Específica

Figura 5.4: Visualização dos campos de temperatura e massa específica.

5.3 Sumário

Neste capítulo foi feita uma breve descrição das alterações feitas no ambiente de simulação Freeflow-2D. Este foi extensamente modificado para incorporar as condições de fronteiras e equações apropriadas na simulação de escoamentos não-isotérmicos. Além disso, a interface com o usuário foi alterada para permitir a fácil atribuição de temperatura no escoamento.

Capítulo 6

Resultados

6.1 Introdução

Os resultados publicados na literatura sobre escoamentos sob influência de temperatura são de modo geral para os casos de movimento de fluidos em regiões confinadas por paredes aquecidas (convecção natural), em que na maioria das vezes, são utilizadas a aproximação de Boussinesq. Convecção natural¹ em regiões confinadas tem recebido considerável atenção nos últimos anos; numerosos experimentos e estudos numéricos computacionais tratando de convecção natural são encontrados na literatura tais como (Ismail and V.L., 2000), (Kim, 1984), (De Vahl Davis, 1983). Os casos mais freqüentes que estudados são os problemas de fluidos confinados por paredes, em que as paredes laterais são mantidas a uma temperatura constante, enquanto que as paredes inferior e superior estão termicamente isoladas.

Por essa razão e pela dificuldade em se encontrar resultados na literatura com superfícies livres, na primeira seção desse capítulo se compara os resultados do modelo de Boussinesq com os resultados obtidos por (De Vahl Davis, 1983) para o caso de convecção natural. Esta etapa tem por objetivo validar o simulador. Logo após, apresenta-se o limite de validade da aproximação de Boussinesq (Gray and Giorgini, 1976) por meio de comparações entre os modelos de Boussinesq e não-Boussinesq também para o caso de convecção natural em região confinada, e

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

em seguida, comparam-se novamente os dois modelos para o caso de escoamentos com superfícies livres. Por fim, apresentam-se alguns exemplos de simulações para escoamentos com influência de temperatura.

6.2 Modelo de Boussinesq para Convecção Natural em Caixa Fechada

Esse problema, freqüentemente citado na literatura, consiste em uma caixa fechada quadrada com temperatura mantida constante nas paredes verticais, e termicamente isolada nas paredes inferior e superior. Veja Figura 6.1:

Figura 6.1: Modelo do problema: parede vertical aquecida.

Para essa simulação, utilizou-se os seguintes dados:

- Dimensão do domínio: $0,0462m \times 0,0462m$;
- Malha: 22×22 células;
- Escala de velocidade: $U = 4,5 \times 10^{-4} m/s$;
- Escala de comprimento: $L = 0,0462 m$;
- Viscosidade cinemática: $\nu = 1,5 \times 10^{-5} m^2/s$;
- Massa específica: $\rho = 1,205 kg/m^3$;
- Difusão térmica: $\alpha = 2,08 \times 10^{-5} m^2/s$;
- Coeficiente de expansão térmica: $\beta = 3,40 \times 10^{-3} K^{-1}$;
- Número de Reynolds: 1,4;

- Número de Prandtl: 0,72;
- Temperatura inicial do fluido: 293 K;

A Tabela 6.1 mostra os resultados numéricos obtidos pela simulação do modelo de Boussinesq comparados com os resultados de (De Vahl Davis, 1983).

	$Ra = 10^3$		$Ra = 10^4$		$Ra = 10^5$	
	sol. obtida	Vahl Davis	sol. obtida	Vahl Davis	sol. obtida	Vahl Davis
u_{max} ($x = 0,5$)	3,627	3,649	16,054	16,178	34,863	34,73
y	0,818	0,813	0,84	0,823	0,84	0,855
<i>Erro</i> (%)	0,6		0,76		0,383	
v_{max} ($y = 0,5$)	3,690	3,697	19,41	19,617	70,047	68,59
x	0,181	0,178	0,84	0,823	0,068	0,066
<i>Erro</i> (%)	0,05		1,05		2,12	

Tabela 6.1: Comparação de resultados para $Ra = 10^3$, $Ra = 10^4$ e $Ra = 10^5$.

Como se pode observar pela Tabela 6.1, a análise dos resultados mostram pequenas diferenças em relação aos resultados de Vahl Davis, com excessão para $Ra = 10^5$ em que existe um erro de 2,12%.

A seguir são apresentadas figuras ilustrativas das linhas de temperatura e curvas de níveis das velocidades, as quais se comparam satisfatoriamente com as figuras de (De Vahl Davis, 1983).

Figura 6.2: Linhas de temperatura.

Pode-se observar pela Figura 6.2 que, com o aumento do número de Rayleigh, as isotermas se aproximam da parede e, observa-se também o aumento da convecção, isso pode ser visto também nas curvas de níveis que são mostradas nas Figuras 6.3 e 6.4.

Figura 6.3: Curvas de níveis da velocidade horizontal u .

Figura 6.4: Curvas de níveis da velocidade vertical v .

Pelos gráficos do perfil de velocidade para as velocidades u e v em $x = 0,5$ e $y = 0,5$, respectivamente, dados na Figura 6.5, pode-se observar melhor as direções das velocidades.

(a)

(b)

(c)

Figura 6.5: Perfil de velocidades v : (a) $Ra = 10^3$, (b) $Ra = 10^4$, (c) $Ra = 10^5$.

Os gráficos da Figura 6.6 foram feitos utilizando o mesmo tipo de modelagem das simulações anteriores, com $Ra = 10^3$, $Ra = 10^4$ e $Ra = 10^5$ e $Pr = 0.72$, mas com malhas diversificadas: 11×11 , 22×22 , 44×44 e 88×88 . Podendo-se observar assim a convergência dos resultados para as velocidades na direção u . Note-se o excelente acordo da solução em diferentes malhas.

Figura 6.6: Perfis de velocidades u em malha 11×11 , 22×22 , 44×44 e 88×88 .

6.3 Limite de Validade da Aproximação de Boussinesq

No capítulo 3 foi descrito que na aproximação de Boussinesq, as propriedades materiais do fluido são consideradas constantes com exceção da massa específica, a qual varia com a temperatura no termo de gravidade das equações de conservação da quantidade de movimento. Porém, essas são simplificações bastante fortes cuja a validade deve ser verificada antes de se empregar a aproximação de Boussinesq em um problema de escoamento não-isotérmico.

Donald D. Gray e Aldo Giorgini (Gray and Giorgini, 1976) impuseram os seguintes critérios para a validade da aproximação de Boussinesq para líquidos e gases:

$$\begin{aligned}
 \left| \frac{\beta |g| L T_\infty}{c_p} \Theta \right| &\leq 0,1; & \left| \frac{\beta |g| L}{c_p} Pr \right| &\leq 0,1; & |\beta \Theta| = \left| \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \Theta \right| &\leq 0,1; & \left| \frac{1}{\mu} \frac{\partial \mu}{\partial T} \Theta \right| &\leq 0,1; \\
 \left| \frac{1}{c_p} \frac{\partial c_p}{\partial T} \Theta \right| &\leq 0,1; & \left| \frac{1}{\kappa} \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Theta \right| &\leq 0,1; & \left| \frac{1}{\beta} \frac{\partial \beta}{\partial T} \Theta \right| &\leq 0,1; & \left| \rho g L \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial P} \right| &\leq 0,1; \\
 \left| \rho g L \frac{1}{\mu} \frac{\partial \mu}{\partial P} \right| &\leq 0,1; & \left| \rho g L \frac{1}{c_p} \frac{\partial c_p}{\partial P} \right| &\leq 0,1; & \left| \rho g L \frac{1}{K} \frac{\partial K}{\partial P} \right| &\leq 0,1; & \left| \rho g L \frac{1}{\beta} \frac{\partial \beta}{\partial P} \right| &\leq 0,1.
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

em que $\Theta = \frac{\Delta T}{2}$, ΔT é a diferença entre as temperaturas mínima e máxima, L é a escala de comprimento e T_∞ é a temperatura de referência.

Como exemplo concreto de seus resultados, eles consideraram os fluidos água e ar com uma temperatura de referência $T_\infty = 288K$. Tomando-se as propriedades referentes a esses fluidos de (Batchelor, 1967), e substituindo-se nos termos das equações (6.1), obtêm-se as seguintes restrições para a aproximação de Boussinesq (Gray and Giorgini, 1976):

• **Água:**

$$\Theta \leq 1,25 \text{ K} , \quad L \leq 2,4 \times 10^3 m \quad \text{e} \quad \frac{L}{\Theta} \leq 9,9 \times 10^2 \frac{m}{K};$$

Figura 6.7: Região de validade para água.

• **Ar:**

$$\Theta \leq 28,6 \text{ K} , \quad L \leq 8,3 \times 10^2 m \quad \text{e} \quad \frac{L}{\Theta} \leq 10,20 \frac{m}{K};$$

Figura 6.8: Região de validade para ar.

Deve-se notar a pequena variação de Θ permitida pelas restrições.

Assim, para analisar o limite de validade imposto por Donald D. Gray e Aldo Giorgini, utilizou-se os limites da água e do ar, dados acima, e os modelos de Boussinesq e não-Boussinesq. Essa análise é feita com a comparação dos resultados numéricos dos dois modelos quando se têm valores de Θ que pertençam ao intervalo de validade e valores que não pertençam a esse intervalo. Para isso, utiliza-se a mesma modelagem da Figura 6.1.

Água

Utiliza-se $\Theta = 0,125K$, $\Theta = 5K$ e $\Theta = 10K$ e os seguintes dados:

- Dimensão do domínio: $0,011m \times 0,011m$;
- Malha: 22×22 ;
- Escala de velocidade: $U = 1,27 \times 10^{-5} m/s$;
- Escala de comprimento: $L = 0,011 m$;
- Viscosidade cinemática: $\nu = 11,37 \times 10^{-7} m^2/s$;
- Massa específica: $\rho = 999,1 kg/m^3$;
- Difusão térmica: $\alpha = 1,4 \times 10^{-7} m^2/s$;
- Coeficiente de expansão térmica: $\beta = 1,5 \times 10^{-4} K^{-1}$;
- Número de Reynolds: 0,123;
- Número de Prandtl: 8,13;
- Temperatura inicial do fluido: 288 K;

(i) $\Theta = 0,125K$.

Nesse caso, tem-se um valor de Θ pertencente ao intervalo de validade, pode-se observar pela Tabela 6.2 que as velocidades máximas do dois modelos possuem valores bastante semelhantes como esperado. Isso ocorre devido ao fato que, para pequenas variações de temperatura, a variação da massa específica em relação a massa específica inicial é praticamente desprezível.

Pelas Figuras 6.9, 6.10 e 6.11, pode-se analisar melhor os resultados dos dois modelos:

$\Theta = 0,125K$	modelo de Boussinesq	modelo não-Boussinesq
$u_{max}(x = 0,5)$	9,347	9,343
y	0,81	0,81
$v_{max}(y = 0,5)$	9,743	9,74
x	0,22	0,22

Tabela 6.2: Comparação entre as velocidades máximas.

Figura 6.9: Linhas de temperatura.

Figura 6.10: Perfil de velocidade na direção x em $y = 0,5$.

Figura 6.11: Perfil de velocidade na direção y em $x = 0,5$.

(ii) $\Theta = 5 K$.

Para esse valor de Θ , fora do intervalo de validade sugerido, observa-se claramente pela Tabela 6.3 a diferença entre os valores das velocidades máximas dos dois modelos. Isso ocorreu porque, para esse caso, a massa específica apresentou uma pequena variação ($\rho_{max} = 1$ e $\rho_{min} = 0,99$) o que foi suficiente para causar uma diferença nas velocidades do modelo não-Boussinesq, quando comparado com as velocidades do modelo de Boussinesq. Isso pode ser melhor observado no item (iii) o qual considera uma diferença de temperatura ainda maior.

$\Theta = 5K$	modelo de Boussinesq	modelo não-Boussinesq
$u_{max}(x = 0,5)$	43,043	44,017
y	0,86	0,86
$v_{max}(y = 0,5)$	80,104	81,646
x	0,136	0,136

Tabela 6.3: Comparação das velocidades máximas.

As Figuras 6.12 e 6.13 ilustram melhor os resultados da Tabela 6.3:

Figura 6.12: Perfil de velocidade na direção x em $y = 0,5$.

Figura 6.13: Perfil de velocidade na direção y em $x = 0,5$.

Figura 6.14: Linhas de temperatura.

(iii) $\Theta = 10K$.

Nesse caso, observa-se pela Tabela 6.4 uma diferença maior entre os resultados das velocidades, mostrando-se o efeito causado quando se tem uma variação da massa específica um pouco maior ($\rho_{max} = 1$ e $\rho_{min} = 0,98$).

$\Theta = 10K$	modelo de Boussinesq	modelo não-Boussinesq
$u_{max}(x = 0, 5)$	57,5	59,516
y	0,86	0,86
$v_{max}(y = 0, 5)$	115,543083	117,187527
x	0,045	0,045

Tabela 6.4: Comparação das velocidades máximas.

Pelas Figuras 6.15, 6.16 e 6.17, pode-se observar os resultados da Tabela 6.4:

Figura 6.15: Perfil de velocidade na direcção x em $y = 0, 5$.

Figura 6.16: Perfil de velocidade na direção y em $x = 0,5$.

Figura 6.17: Linhas de temperatura.

Uma análise semelhante a análise do limite de validade para a água é feita a seguir para o ar.

Ar

Utiliza-se $\Theta = 2,86K$ e $\Theta = 28,7K$ e os seguintes dados:

- Dimensão do domínio: $0,011m \times 0,011m$;
- Malha: 22×22 ;
- Escala de velocidade: $U = 1,83 \times 10^{-3}m/s$;
- Escala de comprimento: $L = 0,011 m$;
- Viscosidade cinemática: $\nu = (1,45) \times 10^{-5}m^2/s$;
- Massa específica: $\rho = 1,2kg/m^3$;
- Difusão térmica: $\alpha = 2,0 \times 10^{-5}m^2/s$;
- Coeficiente de expansão térmica: $\beta = 3,5 \times 10^{-3}K^{-1}$;
- Número de Reynolds: 1,38;
- Número de Prandtl: 0,72;
- Temperatura inicial do fluido: 288 K;

(i) $\Theta = 2,86K$.

Como para o caso da água, novamente tem-se um valor de Θ pertencente ao intervalo de validade, e, pode-se observar pela Tabela 6.5 que as velocidades máximas do dois modelos possuem valores bastante semelhantes:

$\Theta = 2.86$	modelo de Boussinesq	modelo não-Boussinesq
$u_{max}(x = 0,5)$	1,69	1,693
y	0,81	0,81
$v_{max}(y = 0,5)$	1,048	1,045
x	0,22	0,22

Tabela 6.5: Comparação entre as velocidades máximas.

As Figuras 6.18 e 6.19 mostram a proximidades dos resultados dos dois modelos:

Figura 6.18: Perfil de velocidade na direção x em $y = 0,5$.

Figura 6.19: Perfil de velocidade na direção y em $x = 0,5$.

Figura 6.20: Linhas de temperatura.

(ii) $\Theta = 28,7K$.

Para esse valor de Θ a massa específica do ar possui uma variação de 20% ($\rho_{max} = 1$ e $\rho_{min} = 0,8$), implicando uma diferença considerável nos resultados, os quais podem ser observados pela Tabela 6.6 e pelas Figuras 6.21, 6.22 e 6.23.

$\Theta = 28,7$	modelo Boussinesq	modelo não-Boussinesq
$u_{max}(x = 0,5)$	14,871	16,889
y	0,81	0,81
$v_{max}(y = 0,5)$	18,287	19,876
x	0,18	0,18

Tabela 6.6: Comparação das velocidades máximas.

Figura 6.21: Perfil de velocidade na direção x em $y = 0,5$.

Figura 6.22: Perfil de velocidade na direção x em $y = 0,5$.

Figura 6.23: Linhas de temperatura.

Pela análise feita nessa seção por meio de comparação entre os modelos de Boussinesq e não-Boussinesq, verifica-se que a aproximação de Boussinesq é adequada para problemas com pequenas variações de temperatura, em que não há variação significativa na massa específica. Os limites de validade para a água e o ar sugeridos por (Gray and Giorgini, 1976) estão coerentes com os exemplos estudados.

6.4 Outros Exemplos Numéricos

A seguir são apresentados alguns exemplos de simulações e também algumas comparações entre os modelos de Boussinesq e não-Boussinesq:

Exemplo 1

Em contraste com as simulações anteriores de caixa fechada em que se tinha duas paredes laterais com temperaturas constantes e as paredes superior e inferior termicamente isoladas, essa simulação consiste em uma caixa retangular fechada com temperaturas mantidas constantes nas paredes inferior e superior, e termicamente isolada nas paredes verticais. A figura final dessa simulação mostrou-se ser bastante semelhante à figura de (Griebel et al., 1997). Utilizou-se o modelo de Boussinesq.

Os dados utilizados são:

- Dimensão do domínio: $0,0462m \times 0,0462m$;
- Malha: 56×22 ;
- Escala de velocidade: $U = 4,5 \times 10^{-4}m/s$;
- Escala de comprimento: $L = 0,0462m$;
- Viscosidade cinemática: $\nu = 1,5 \times 10^{-5}m^2/s$;
- Massa específica: $\rho_{\infty} = 1,205kg/m^3$;
- Difusão térmica: $\alpha = 2,08 \times 10^{-5}m^2/s$;
- Coeficiente de expansão térmica: $\beta = 3,4 \times 10^{-3}K^{-1}$;
- Número de Reynolds: 1,4;
- Número de Prandtl: 3,0;
- Número de Froude: 6×10^{-4} ;
- Número de Rayleigh: 3×10^4 ;
- Temperatura inicial do fluido: 293 K;
- Temperatura do : 295 K;

Figura 6.24: Visualização da temperatura.

Exemplo 2

O objetivo desse exemplo é mostrar um fluido sendo injetado a uma certa temperatura em um recipiente a temperatura maior que o fluido, e verificar o comportamento do fluido ao entrar em contato com o recipiente. Para isso, necessita-se que os números de Reynolds, Froude e Grashof sejam apropriados para esse tipo de simulação. Segundo o gráfico dado por (Holman, 1983) o número de Reynolds deve ser aproximadamente $10 < Re < 25$ e o número de Grashof, $10^2 < Gr < 10^4$, pois um número de Reynolds grande implica uma velocidade grande de escoamento forçado, e portanto uma influência muito pequena das correntes de convecção natural. Já para o número de Grashof muito baixos existem pequenas correntes de convecção natural e o calor é transferido somente por condução por meio da camada de fluido. Quanto maior o valor do número de Grashof maiores serão os efeitos de convecção natural (Holman, 1983). Portanto, para essa simulação, utilizou-se os seguintes dados:

- Dimensão do domínio: $0,00162m \times 0,00162m$;
- Malha: 45×45 ;
- Escala de velocidade: $U = 2,7 \times 10^{-2}m/s$;
- Escala de comprimento: $L = 1,8 \times 10^{-4}m$;
- Viscosidade cinemática: $\nu = 4,75 \times 10^{-7}m^2/s$;
- Massa específica: $\rho_{\infty} = 983,2kg/m^3$;
- Difusão térmica: $\alpha = 1,6 \times 10^{-7}m^2/s$;
- Coeficiente de expansão térmica: $\beta = 1,8 \times 10^{-3}K^{-1}$;
- Número de Reynolds: 10,0;
- Número de Prandtl: 3,0;
- Número de Froude: 0,643;
- Número de Grashof: 182,385;
- Número de Rayleigh: 547,155;
- Temperatura inicial do fluido: 333 K;
- Temperatura do ambiente: 333 K;
- Temperatura do recipiente: 733 K;

Figura 6.25: Modelo de Boussinesq com $\Delta T = 400K$. Visualização da velocidade na direção x .

Figura 6.26: Modelo não-Boussinesq com $\Delta T = 400K$. Visualização da velocidade na direção x .

Figura 6.27: Modelo de Boussinesq com $\Delta T = 400K$. Visualização da velocidade na direção y .

Figura 6.28: Modelo não-Boussinesq com $\Delta T = 400K$. Visualização da velocidade na direção y .

Acoplada à velocidade do escoamento forçado existe uma velocidade de convecção gerada pelas forças de empuxo resultantes da redução da massa específica do fluido junto à superfície aquecida. Como no modelo não-Boussinesq a variação da massa específica exerce influência sobre os resultados, percebe-se uma diferença entre os valores das velocidades entre os dois modelos, pois para um $\Delta T = 400K$, a massa específica atingiu uma variação razoavelmente grande, o que causa uma maior força de empuxo e conseqüentemente uma velocidade maior na direção y nas regiões do fluido próximas ao recipiente.

Figura 6.29: Temperatura para o modelo não-Boussinesq com $\Delta T = 400K$.

Figura 6.30: Massa específica para o modelo não-Boussinesq com $\Delta T = 400K$.

A seguir, simula-se o mesmo problema para o caso do modelo não-Boussinesq, porém para $\Delta T = 0,25K$. Pelas Figuras 6.32 e 6.33, percebe-se uma diferença nos valores das velocidades, quando comparadas com as velocidades do modelo não-Boussinesq para $\Delta T = 400K$, pois para essa simulação o número de Grashof é muito pequeno, aproximadamente 0.114 e, a massa específica não possui uma variação significativa.

Figura 6.31: Modelo não-Boussinesq com $\Delta T = 0,25K$, para velocidade na direção x .

Figura 6.32: Modelo não-Boussinesq com $\Delta T = 0,25K$, para velocidade na direção y .

Exemplo 3

Esse exemplo representa a injeção de fluido em um recipiente, em que se tem três temperaturas diferentes, ou seja, uma temperatura para o fluido, uma temperatura para o recipiente e uma temperatura para o ambiente. Nesse exemplo é utilizado um número de Nusselt relativamente alto para melhor visualizar as trocas de calor entre o ambiente e o fluido. O modelo utilizado é o modelo não-Boussinesq.

- Dimensão do domínio: $0,00102m \times 0,00102m$;
- Malha: 51×51 ;
- Escala de velocidade: $U = 0,1m/s$;
- Escala de comprimento: $L = 10^{-4}m$;
- Viscosidade cinemática: $\nu = 10,04 \times 10^{-7}m^2/s$;
- Massa específica : $\rho_{\infty} = 998,2kg/m^3$;
- Difusão térmica: $\alpha = 1,4 \times 10^{-7}m^2/s$;
- Coeficiente de expansão térmica: $\hat{\rho} = 2,1 \times 10^{-4}K^{-1}$;
- Número de Reynolds: 9,96;
- Número de Prandtl: 7,07;

- Número de Froude: 3,2;
- Número de Grashof: 0,1;
- Número de Rayleigh: 0,707;
- Número de Nusselt: 10^3 ;
- Temperatura inicial do fluido: 293 K;
- Temperatura do ambiente: 268 K;
- Temperatura do ambiente: 318 K;

Figura 6.33: Visualização da temperatura.

Figura 6.34: Visualização da massa específica.

Figura 6.35: Visualização da massa específica.

Pela Figura 6.39 dada acima, pode-se observar claramente o fluido sendo resfriado pelo ambiente, e sendo aquecido pelo recipiente, causando uma pequena variação na massa específica como pode ser observado pela Figura 6.40. Esse exemplo ilustra, também a flexibilidade do sistema Freeflow-2D, para escoamentos não-isotérmicos, em lidar com diferentes temperaturas e condições de fronteira simultaneamente.

Exemplo 4

Nesse exemplo é mostrado um fluido sendo injetado em um recipiente o qual contém um objeto em seu interior. Utilizou-se o modelo não-Boussinesq.

- Dimensão do domínio: $0,00102m \times 0,00102m$;
- Malha: 51×51 ;
- Escala de velocidade: $U = 0,1m/s$;
- Escala de comprimento: $L = 10^{-4}m$;
- Viscosidade cinemática: $\nu = 10,04 \times 10^{-7}m^2/s$;
- Massa específica: $\rho_{\infty} = 998,2kg/m^3$;
- Difusão térmica: $\alpha = 1,4 \times 10^{-7}m^2/s$;
- Coeficiente de expansão térmica: $\beta = 2,1 \times 10^{-4}K^{-1}$;
- Número de Reynolds: 10,0;
- Número de Prandtl: 7,14;
- Número de Froude: 3,2;
- Número de Grashof: 0,1;

- Número de Rayleigh: 0,714;
- Temperatura inicial do fluido: 293 K;
- Temperatura do ambiente: 293 K;
- Temperatura das paredes laterais do recipiente e do objeto: 243 K;
- Temperatura da parede inferior do recipiente e superior do objeto: 343 K;

Figura 6.36: Visualização da distribuição de temperatura.

A Figura 6.35 mostra o fluido sendo aquecido e resfriado conforme ele se aproxima das paredes quentes ou frias, respectivamente.

A Figura 6.36 mostra o gráfico do fluxo de calor em um ponto central da parede superior do objeto que esta dentro do recipiente, e a Figura 6.37 mostra o gráfico do fluxo de calor por toda a parede superior do objeto, não apenas em um ponto.

Figura 6.37: Fluxo de calor em um ponto central da parede objeto.

Figura 6.38: Fluxo de calor na parede superior do objeto.

Esse exemplo ilustra o tipo de resultado que pode ser extraído do simulador.

Exemplo 5

Esse exemplo mostra um fluido sendo injetado em um recipiente contendo alguns objetos, os quais estão com uma temperatura maior que o fluido. O modelo utilizado é o modelo não-Boussinesq.

- Dimensão do domínio: $0,051m \times 0,025m$;
- Malha: 141×80 ;
- Escala de velocidade: $U = 0,5m/s$;
- Escala de comprimento: $L = 5 \times 10^{-3}m$;
- Viscosidade cinemática: $\nu = 1,186 \times 10^{-3}m^2/s$;
- Massa específica: $\rho_{\infty} = 1264,02kg/m^3$;
- Difusão térmica: $\alpha = 9,5 \times 10^{-8}m^2/s$;
- Coeficiente de expansão térmica: $\beta = 5 \times 10^{-4}K^{-1}$;
- Número de Reynolds: 2,1;
- Número de Prandtl: 12500;
- Número de Froude: 2,3;
- Número de Grashof: 0,044;
- Número de Rayleigh: 544,31;

- Temperatura inicial do fluido: 293 K;
- Temperatura do ambiente: 293 K;
- Temperatura do recipiente e dos objetos: 393 K;

Figura 6.39: Visualização da temperatura.

Pode-se perceber que não é possível visualizar o aquecimento do fluido quando entra em contato com o recipiente, isso ocorre porque a difusividade térmica é muito baixa.

Esse tipo de exemplo, ilustra os tipos de simulações que podem ser feitas no Freeflow-2D não-isotérmico.

6.5 Sumário

Neste capítulo, comparou-se os resultados de dois modelos matemáticos distintos aplicados a problemas de transferência de calor. Quando o gradiente de temperatura é pequeno, o modelo de Boussinesq é perfeitamente aceitável, caso contrário, sugere-se o uso do modelo não-Boussinesq. Além das comparações entre os modelos, ilustrou-se os tipos de simulações que

podem ser feitas no Freeflow-2D não-isotérmico.

Capítulo 7

Conclusão

Esse projeto de mestrado teve como objetivo a simulação numérica de escoamentos com superfície livre não-isotérmico, para isso, utilizou-se dois modelos matemáticos, modelo de Boussinesq e modelo não-Boussinesq, os quais foram definidos no capítulo 2 desse trabalho. Esses dois modelos distintos foram implementados no sistema Freeflow-2D (Oliveira, 1999), o qual recebeu algumas modificações em seus três módulos¹: no modelador, inseriu-se os dados das propriedades térmicas dos fluidos; no simulador, implementou-se a equação da energia também definida no capítulo 2, e ajustou-se as equações de conservação da quantidade de movimento e equação da continuidade para o caso de escoamentos com influência de temperatura, adaptou-se o método GENSMAC para esse tipo de simulação e implementou-se e as condições de fronteiras definidas no capítulo 4; no visualizador, acrescentou-se a opção de visualização dos campos de temperatura e massa específica.

No capítulo 6, analisou-se alguns resultados e foram mostrados exemplos da flexibilidade do sistema. Em primeiro, comparou-se os resultados do modelo de Boussinesq com (De Vahl Davis, 1983) para o caso de convecção natural em uma caixa fechada, usando o ar como fluido a números de Rayleigh 10^3 , 10^4 e 10^5 , pois esse tipo de simulação é muito comum na literatura. A presente solução apresentou bons resultados com pequenas diferenças em relação a solução de (De Vahl Davis, 1983), portanto, para esse tipo de simulação, verificou-se que o modelo de Boussinesq produz resultados razoáveis.

¹Ver capítulo 5.

Logo após, analisou-se o limite de validade da aproximação de Boussinesq por meio de comparações feitas entre os modelos de Boussinesq e não-Boussinesq para o caso da água e do ar. Com essa análise verificou-se que o limite de validade da água e do ar (Gray and Giorgini, 1976) estão coerentes, em relação aos resultados das simulações feitas nesse trabalho, pois, observou-se que para gradientes de temperatura pertencentes ao intervalo de validade, os dois modelos produziram resultados numéricos semelhantes, visto que não ocorreu significativas variações da massa específica, enquanto que para gradientes de temperatura não pertencentes ao intervalo de validade, a ocorrência de uma pequena variação da massa específica causou uma diferença entre os resultados dos dois modelos. Com essa análise, conclui-se que ambos os modelos fornecem resultados semelhantes quando as diferenças de temperatura não causam variações significativas da massa específica do fluido. Quando essas diferenças de temperatura são maiores, porém, os resultados fornecidos pelos modelos para os problemas apresentados, passam a diferir entre si. A causa dessa diferença está no modo como a massa específica é tratada nos dois modelos. Enquanto que a aproximação de Boussinesq é, diga-se, grosseira, o modelo não-Boussinesq introduz uma função mais consistente para a massa específica nas equações que modelam o escoamento. Ele é, porém de solução mais trabalhosa que o modelo de Boussinesq, uma vez que mais termos nas equações de conservação da quantidade de movimento devem ser calculados. Portanto, quando for aplicável o uso do modelo de Boussinesq, o mesmo deve ser empregado; já o modelo não-Boussinesq deve ser empregado quando se espera variações significativas da massa específica.

Após a análise do limite de validade da aproximação de Boussinesq, mostrou-se uma comparação entre os dois modelos para o caso de simulação com superfície livre, em que o fluido é injetado em um recipiente com temperatura elevada, podendo-se observar que o efeito da variação da massa específica aumentou os valores das velocidades no modelo não-Boussinesq quando comparado com o modelo de Boussinesq. Após essa última comparação, foram mostrados alguns exemplos de aplicações do sistema Freeflow-2D para escoamentos não-isotérmicos, mostrando-se que o sistema atingiu o objetivo de modelar, simular e visualizar escoamentos não-isotérmicos por meio de dois modelos matemáticos distintos. Portanto, pode-se concluir que os resultados desse trabalho atingiram os objetivos esperados.

Observa-se que, em ambos os modelos as variáveis μ , κ , β e c_p são consideradas constantes. Como proposta de trabalhos futuros, sugere-se incluir essas variáveis como função da temperatura

ao sistema Freeflow-2D não-isotérmico por meio de alterações das equações implementadas, de modo que torne os modelos de Boussinesq e não-Boussinesq mais completo. Sugere-se também a implementação dos dois modelos no sistema Freeflow-3D. Essa última já está em andamento, sendo uma dissertação de mestrado.

Apêndice A

Modelo Proposto por Vincenzo Casulli

Nesse apêndice é apresentado o modelo original proposto por (Casulli, 1980), e as alterações que foram feitas nesse trabalho.

As equações governantes para escoamentos com influência de temperatura em fluidos não-homogêneos (Casulli, 1980) são derivadas do princípio de conservação de massa, momento, energia e componentes químicos. Essas equações (YIH, 1980) são:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\mu}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \mu \nabla^2 u + \rho g_x, \quad (\text{A-1})$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\mu}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \mu \nabla^2 v + \rho g_y, \quad (\text{A-2})$$

em que ρ é a massa específica, u e v são as velocidades, P é a pressão, $\mathbf{g} = (g_x, g_y)$ é a aceleração da gravidade e μ é a viscosidade, a qual é assumida constante.

A equação de conservação de energia é dada por:

$$\frac{DT}{Dt} + T \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = \alpha \nabla^2 T, \quad (\text{A-3})$$

em que α é a difusividade térmica.

A equação de difusão para cada componente químico é dado por:

$$\frac{Dc^k}{Dt} + c^k \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = \alpha'_k \nabla^2 c^k, \quad (\text{A-4})$$

em que c^k é a concentração do k^{th} componente, e α'_k é a difusividade de massa.

A equação da continuidade para esse modelo é dada por:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = \sum_k \alpha'_k \nabla^2 c^k. \quad (\text{A-5})$$

A equação que relaciona massa específica com a temperatura e componentes químicos é:

$$\rho = \rho_0 [1 - \beta(T - T_0)] + \sum_k (c^k - c_0^k), \quad (\text{A-6})$$

em que β é o coeficiente de expansão térmica, e ρ_0 é a massa específica inicial.

De (A-4) e (A-5), tem-se:

$$\frac{D}{Dt} \left(\rho - \sum_k c^k \right) + \left(\rho - \sum_k c^k \right) \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0. \quad (\text{A-7})$$

Substituindo (A-6) em (A-7), obtém-se:

$$\rho_0 \beta \left(\frac{DT}{Dt} + T \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right) = \rho_0 \left(1 + \beta T_0 - \frac{1}{\rho_0} \sum_k c_0^k \right) \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right). \quad (\text{A-8})$$

Utilizando (A-3) na equação (A-8), tem-se:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{\beta \alpha}{1 + \beta T_0 - \frac{1}{\rho_0} \sum_k c_0^k} \nabla^2 T. \quad (\text{A-9})$$

Portanto, a equação da continuidade (A-5) é substituída pela equação (A-9), e as equações (A-1), (A-2), (A-3), (A-4), (A-6) e (A-9) podem da forma:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\mu \gamma}{3} \frac{\partial}{\partial x} (\nabla^2 T) + \mu \nabla^2 u + \rho g_x, \quad (\text{A-10})$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\mu \gamma}{3} \frac{\partial}{\partial y} (\nabla^2 T) + \mu \nabla^2 v + \rho g_y, \quad (\text{A-11})$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = (\alpha - \gamma T) \nabla^2 T, \quad (\text{A-12})$$

$$\frac{\partial c^k}{\partial t} + u \frac{\partial c^k}{\partial x} + v \frac{\partial c^k}{\partial y} = -\gamma c^k \nabla^2 T + \alpha'_k \nabla^2 c^k, \quad (\text{A-13})$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = \gamma \nabla^2 T, \quad (\text{A-14})$$

$$\rho = \rho_0[1 - \beta(T - T_0)] + \sum_k (c^k - c_0^k), \quad (\text{A-15})$$

em que $\gamma = \frac{\beta\alpha}{1+\beta T_0 - \frac{1}{\rho_0} \sum_k c_0^k}$.

Em relação ao modelo não-Boussinesq desenvolvido nesse trabalho, o modelo de (?) sofreu algumas importantes alterações, a princípio foi retirado do conjunto das equações que modelam o escoamento, a equação (A-4), pois nesse trabalho não se considera os componentes químicos do fluido o qual esta sendo trabalhado. Uma segunda alteração feita, foi a utilização da equação :

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{\kappa}{\rho c_p} \nabla^2 T, \quad (\text{A-16})$$

ao em vez de:

$$\frac{DT}{Dt} + T \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = \alpha \nabla^2 T, \quad (\text{A-17})$$

Podendo-se assim, considerar a variação da massa específica, ao contrário da equação (A-17), em que se considera a massa específica como uma constante. O resultado dessas alterações, pode-se ser visto no capítulo 2.

Apêndice B

Sistema Freeflow-2D

Essa seção apresenta de uma forma resumida o sistema Freeflow-2D (Oliveira, 1999). O Freeflow-2D é um sistema integrado para modelagem, simulação e visualização de escoamentos bidimensionais com superfícies livres. Esse sistema é composto por quatro módulos: Modflow-2D, um modelador de moldes e escoamentos; Simflow-2D, um simulador de escoamentos; Visflow-2D, um visualizador de escoamentos; Resimflow-2D, um reiniciador de escoamentos. A comunicação entre os módulos é feita por arquivos e os objetos geométricos (fluidos, contêineres, injetores e ejetores) são representados pela estrutura B-Rep (*Boundary Representation*).

B.1 Modelador

O Modflow-2D é o módulo responsável pela introdução de dados que caracterizam o escoamento a ser simulado e possibilita a definição de elementos no domínio do escoamento.

O simulador requer a introdução de informações do domínio e da configuração do escoamento para a sua execução. Os dados que configuram o escoamento são: domínio, células, dimensão das células, tempo inicial e final, ciclo inicial e final, espaçamento de tempo para impressão e para gravação automática, escala de comprimento e velocidade, força de gravidade (nos eixos x e y), viscosidade, incremento de tempo inicial, tolerância para a solução de Poisson e fatores de controle do passo.

The screenshot shows a window titled "SIMDOMAIN" with a standard Windows interface (minimize, maximize, close buttons). The window contains a form for entering simulation parameters. The parameters are as follows:

Name-Domain : NONAME		
X min: 0.000000	X max: 1.000000	I max: 10
Y min: 0.000000	Y max: 1.000000	J max: 10
Start-Simulation-Time : 0.000000		Stop-Simulation-Time : 1.000000
Start-Simulation-Cycle : 0		Stop-Simulation-Cycle : 10000
Printing Time-Step : 0.050000		Saving Time-Step : 0.250000
Length-Scale : 1.000000		Velocity-Scale : 1.000000
Gravity Gx : 0.000000		Gy : -1.000000
Viscosity : 1.000000		Surface Tension : 0.000000
Initial Time-Step : 0.000001		Poisson Equation Tolerance : 0.000001
Time-Step Factor : 0.500000		Time-Step Factor 1 : 0.800000
		Factor 2 : 0.800000
Velocity Solver Type : ☒ Explicit ☐ Implicit		
Flow Type : ☒ Newtonian ☐ Cross-Model ☐ Power-Law		
<input type="button" value="Execute"/>		

Figura B.1: Entrada de dados para a criação de um modelo.

B.2 Simulador

O simulador consiste de um conjunto de programas baseado no método GENSMAC, cuja finalidade é resolver problemas de escoamentos transientes de fluidos newtonianos incompressíveis com superfícies livres (Oliveira, 1999).

Para se fazer uma simulação, o Simflow-2D executa os seguintes passos:

- leitura dos arquivos de entrada;
- cálculo das velocidades u e v pelas condições de contorno na superfície livre;
- cálculo das velocidades tangenciais u e v das células S com as células V;
- cálculo das velocidades u e v pelas condições de contorno no contorno rígido;
- cálculo das velocidades tangenciais u e v nos injetores;
- cálculo da pressão p nas condições de contorno na superfície livre;
- cálculo das velocidades intermediárias $\tilde{u}$;
- resolução da equação de Poisson;
- cálculo das velocidades finais u e v ;
- cálculo das velocidades u e v pelas condições de contorno na superfície livre;
- cálculo das velocidades tangenciais u e v das células S com as células V;

- cálculo das velocidade u e v pelas condições de contorno no contorno rígido;
- cálculo das velocidades tangenciais u e v nos injetores;
- movimento da superfície livre;
- inserção de partículas virtuais no injetor;
- eliminação das partículas virtuais;
- inserção das partículas virtuais;
- redefinição das células após o movimento das partículas virtuais.

B.3 Visualizador

Os resultados da simulação podem ser visualizados graficamente por meio do módulo de visualização Visflow-2D. Nele, pode-se visualizar o campos de velocidades e pressão. Para a visualização dessas propriedades, utiliza-se uma escala de cores de acordo com os valores dessas propriedades em cada ponto.

B.4 Reiniciador

O módulo Resimflow-2D é o módulo responsável em reiniciar a simulação do ponto que parou ou realizar modificações em algum campo para simular novamente. O reiniciador é importante também quando ocorre interrupção da execução do programa por algum motivo, como por exemplo, queda de energia elétrica.

B.5 Estrutura de Dados

A estrutura de dados utilizada no Freeflow-2D oferece acesso fácil às informações e possui independência dos dados de forma a simplificar a manutenção e extensão do código. Foi baseada na estrutura de dados do Freeflow-3D para que no futuro os ambientes de simulação bi e tridimensionais sejam integrados.

Os objetos geométricos são curvas fechadas com orientação anti-horária e são representados por um tipo de estrutura de dados B-Rep (*Boundary-Representation*) para representar objetos geométricos de sua fronteira (faces, vértices e relações topológicas).

A estrutura de dados utilizada no Freeflow-2D foi denominada de *halfedge-2d*. A estrutura *halfedge-2d* é uma variação da estrutura de dados *half-edge* utilizada no Freeflow-3D. Os níveis hierárquicos da estrutura *halfedge-2d* estão representados na Figura B.1.

Figura B.2: Níveis hierárquicos da estrutura de dados.

As listas fatia, faces e vértices são abertas. E a lista semi-aresta é fechada. Cada elemento fatia aponta para as listas de faces e vértices. Cada elemento face aponta para a fatia e para a lista de semi-aresta. Cada semi-aresta aponta para uma face e para um vértice, e finalmente cada vértice aponta para uma semi-aresta (Oliveira, 1999).

Os dados no Freeflow-2D, estão divididos em:

- Dados diretos: contêm dados referentes a domínio, velocidade, pressão, célula, parâmetros utilizados pelo simulador e representação dos objetos geométricos do modelo. Esses dados estão subdivididos em:

- dados estáticos: dados que não são modificados durante a simulação, como domínio, discretização, parâmetros de adimensionalização e algumas propriedades do escoamento do fluido;
 - dados dinâmicos: dados que se modificam durante a simulação, como velocidade, pressão, configuração do conjunto de células e representação dos objetos geométricos.
- Dados indiretos: esses dados são compostos por três estruturas.
 - contêiner: representa os contêineres (recipientes), é composta de dados geométricos *Boundary-Representation* do contêiner, dados geométricos do ejetor (no caso deste existir), tipos de condição de contorno e uma árvore que armazena informações sobre as células que definem este contêiner e atributos específicos do contêiner representado;
 - injetor: representa os injetores, é composta de dados geométricos *Boundary-Representation*, características do injetor, informações sobre o contêiner e fluido relacionados ao injetor, uma árvore que armazena informações sobre as células que o definem e atributos específicos;

Referências Bibliográficas

- Amsden, A. and Harlow, F. (1970). The smac method: A numerical technique for calculating incompressible fluid flows. Report LA-4370, Los Alamos.
- Anderson, J. and J.D. (1995). *Computational Fluid Dynamics*. Mcgrall-Hill, Nova York.
- Batchelor, G. (1967). *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, Loondon.
- Batcherlor, G. (1967). *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, London.
- Bejan, A. (1993). *Heat Transfer*. John Wiley & Sons,Inc.,.
- Castelo Filho, A., Cuminato, J., Oliveira, M., Santi, R., Tomé, M., and César, C. (1997). Freeflow-3d: Um sistema integrado para simulação de escoamentos incompressíveis com superfícies livres. Relatório técnico, ICMC-USP.
- Castelo Filho, A., Mangiavacchi, N., Cuminato, J., Fortuna, A., Tomé, M., and Mackee, S. (1999). Surface tension implementation for gensmac2d code. *COBEM99*.
- Casulli, V. (1980). Numerical simulation of free-surface thermally flows for nonhomogeneous fluids. *Applied Mathematics and Computational.*, 8:261–280.
- De Vahl Davis, G. (1983). Natural convection of air in a square cavity: A bench mark solution. *Int.J.Numer. Fluids*, 3:249–264.
- De Vahl Davis, G. and Jones, I. (1983). Natural convection in a square cavity: A comparison exercise. *Int.J.Numer. Fluids*, 3:227–248.

- Ferreira, V., Tomé, M., Mangiavacchi, N., Castelo, A., Cuminato, J., and Fortuna, A. (2001). High order upwind and the hydraulic jump,. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*.
- Fletcher, C. (1991). *Computational Techniques for Fluid Dynamics*, volume I e II. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Fortuna, A. O. (2000). *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*. Edusp.
- Fox, R. and McDonald, A. (1995). *Introdução à Mecânica dos Fluidos*. Livros Técnicos e Científicos.
- Gray, D. and Giorgini, A. (1976). The validity of the boussinesq approximation for liquids and gases. *nt. J. Heat Mass Transfer*, 19:541-551.
- Griebel, M., Dornseifer, T., and Neunhoeffler, T. (1997). *Numerical Simulation in Fluid Dynamics*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia.
- Holman, J. (1983). *Transferência de Calor*. Mcgrall-Hill, São Paulo.
- Ismail, K. and V.L., S. (2000). A finite element free convection model for the side wall heated cavity. *Int.J.Heat Mass Transfer*, 43:1373-1389.
- Kessler, R. (1987). Nonlinear transition in three dimensional convection. *J.Fluid Mech.*, 174:357-379.
- Kim, D.M. nad Viskanta, R. (1984). Study of the effects of wall conductance on natural convection in differently oriented square cavities. *J.Fluid Mech.*, 144:153-176.
- Maliska, C. (1995). *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. Editora LTC.
- Oliveira, J. (1999). Desenvolvimento de um sistema de simulação de escoamentos de fluidos com superfícies livres bidimensionais. Master's thesis, ICMC-USP, São Carlos.
- Paiva, L. (2000). Desenvolvimento de um modelador de movimento para o sistema freeflow-3d. Master's thesis, ICMC-USP, São Carlos.
- Pontes, J. (1999). Fenômenos de transferência. Technical report, Escola de Engenharia/COPPE - UFRJ.

- Shames, I. (1973). *Mecânica dos Fluidos*. Edgard Blücher Ltda.
- Tomé, M., Castelo Filho, A., Cuminato, J., and McKee, S. (1996). Gensmac-3d: implementation of the navier-stokes equation for 3d free surface flows. Notas didáticas, ICMC-USP.
- Tomé, M. F. and McKee, S. (1994). Gensmac: A computational marker and cell method for free surface flows in general domains. *Jornal Computational Physics*, 110(1):171–186.
- Welch, J. E., Harlow, F. H., Shannon, J. P., and Daly, B. J. (1966). The mac method. Technical Report LA-3425, Los Alamos Scientific Laboratory - NM.
- YIH, C.-S. (1980). *Stratified Flows*. ACADEMIC PRESS.