

**Editado por**

**Eliana X.L. de Andrade**

Universidade Estadual Paulista - UNESP

São José do Rio Preto, SP, Brasil

**Rubens Sampaio**

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro -

Rio de Janeiro, RJ, Brasil

**Geraldo N. Silva**

Universidade Estadual Paulista - UNESP

São José do Rio Preto, SP, Brasil

A Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional - SBMAC publica, desde as primeiras edições do evento, monografias dos cursos que são ministrados nos CNMAC.

Para a comemoração dos 25 anos da SBMAC, que ocorreu durante o XXVI CNMAC em 2003, foi criada a série **Notas em Matemática Aplicada** para publicar as monografias dos minicursos ministrados nos CNMAC, o que permaneceu até o XXXIII CNMAC em 2010.

A partir de 2011, a série passa a publicar, também, livros nas áreas de interesse da SBMAC. Os autores que submeterem textos à série Notas em Matemática Aplicada devem estar cientes de que poderão ser convidados a ministrarem minicursos nos eventos patrocinados pela SBMAC, em especial nos CNMAC, sobre assunto a que se refere o texto.

O livro deve ser preparado em **Latex (compatível com o Miktex versão 2.7)**, as figuras em eps e deve ter entre **80 e 150 páginas**. O texto deve ser redigido de forma clara, acompanhado de uma excelente revisão bibliográfica e de **exercícios de verificação de aprendizagem** ao final de cada capítulo.

Veja todos os títulos publicados nesta série na página  
<http://www.sbmac.org.br/notas.php>



Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

2012

# MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO NUMÉRICA EM DINÂMICA DOS FLUIDOS

Valdemir G. Ferreira  
*Departamento de Ciências de Computação e Estatística*  
*ICMC/USP - São Carlos*  
*Caixa Postal 668, CEP 13560-970, São Carlos, SP*  
fpvgf@icmc.usp.br

Magda K. Kaibara *Departamento de Matemática*  
*FC/UNESP - Bauru*  
*Av. Luiz Edmundo Carrijo Coube S/N, Vargem Limpa*  
*CEP 17033-360, Bauru, SP*  
kaibara@fc.unesp.br

Hélio A. Navarro  
*Departamento de Estatística, Matemática Aplicada e Computação*  
*IGCE/UNESP - Rio Claro*  
*Caixa Postal 178, CEP 135006-700 Rio Claro, SP*  
helio@rc.unesp.br



Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

São Carlos - SP, Brasil  
2012

Coordenação Editorial: Véra Lucia da Rocha Lopes

Coordenação Editorial da Série: Geraldo Nunes Silva

Editora: SBMAC

Capa: Matheus Botossi Trindade

Patrocínio: SBMAC

Copyright ©2012 by Valdemir G. Ferreira, Magda K. Kaibara e Hélio A. Navarro. Direitos reservados, 2012 pela SBMAC. A publicação nesta série não impede o autor de publicar parte ou a totalidade da obra por outra editora, em qualquer meio, desde que faça citação à edição original.

**Catálogo elaborado pela Biblioteca do IBILCE/UNESP**  
**Bibliotecária: Maria Luiza Fernandes Jardim Froner**

Ferreira, Valdemir G.

Modelagem Matemática e Simulação Numérica em Dinâmica dos Fluidos - São Carlos, SP: SBMAC, 2012, 68 p., 20.5 cm  
- (Notas em Matemática Aplicada; v. 15)

e-ISBN 978-85-86883-82-8

1. Modelagem Matemática. 2. Simulação Numérica.
  3. Dinâmica dos Fluidos. 4. Computação Científica.
  5. Esquemas Upwind. 6. Equações de Navier-Stokes.
- I. Ferreira, Valdemir. G. II. Kaibara, Magda K.  
III. Navarro, Hélio A. V. Título. VI. Série.

CDD - 51

Esta é uma republicação em formato de e-book do livro original do mesmo título publicado em 2005 nesta mesma série pela SBMAC.

## Prefácio

Nos dias de hoje, os horizontes da ciência se ampliam tão rapidamente como os da própria civilização. E o estudante deve enfrentar um duplo desafio: o de assimilar os princípios bem estabelecidos e o de se preparar para o entendimento dos que vierem a ser descobertos.

Particularmente, a dinâmica dos fluidos caracteriza as tendências modernas da ciência tão bem quanto qualquer outra área já consolidada. Com efeito, os problemas nessa área são tão complexos e desafiadores que para serem compreendidos necessita-se de um sólido conhecimento multidisciplinar.

No presente estudo, estaremos preocupados com alguns aspectos relacionados à modelagem matemática e à simulação numérica de problemas em dinâmica dos fluidos. Em momento algum, entretanto, vamos nos preocupar com deduções matemáticas rebuscadas. E, por absoluta falta de oportunidade, o assunto não será esgotado aqui; vários tópicos importantes tais como a modelagem de escoamentos não newtonianos, magnetohidrodinâmica, o fechamento da turbulência, ou uma combinação entre eles, serão superficialmente mencionados.

Os problemas de escoamento de fluidos que serão abordados/discutidos nestas notas são modelados pelas equações de conservação de quantidade de movimento (Navier-Stokes), isto é, a segunda lei de Newton aplicada a sistemas fluidos acopladas com a lei de conservação de massa (continuidade).

O ambiente integrado de simulação Freeflow, uma tecnologia genuinamente brasileira para a simulação numérica de escoamentos incompressíveis com superfícies livres, foi utilizado para a simulação dos problemas descritos no capítulo 4.

O texto oferece uma visão geral de tópicos na área dinâmica dos fluidos e serve como uma referência complementar para estudantes da dinâmica dos fluidos computacional. Os autores estão à disposição para sugestões, discussões e/ou troca de experiências na área.

São Carlos, 31/06/2005

Valdemir G. Ferreira  
Magda K. Kaibara  
Hélio A. Navarro



# Agradecimentos

À comissão organizadora do XXVIII - CNMAC (Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional) pela oportunidade que nos foi dada. À FAPESP pelo apoio financeiro (Proc. No. 05/50443-0). À UNESP, campi Rio Claro (IGCE-DEMAC) e Bauru (FC-Depto. Matemática), pelo apoio ao intercâmbio científico com o ICMC-USP. Todas as simulações bidimensionais e tridimensionais de escoamentos com superfícies livres apresentadas nessas notas contaram indiretamente com a participação dos colegas Antonio Castelo Filho, José Alberto Cuminato e Murilo Francisco Tomé, do Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação da Universidade de São Paulo - São Carlos, SP.





# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Formulação Matemática</b>	<b>6</b>
2.1	Teorema de Transporte de Reynolds . . . . .	8
2.2	Equações Integrais de Campo . . . . .	8
2.3	Equações na Forma Diferencial . . . . .	9
2.4	Fluidos Newtonianos . . . . .	11
2.5	Equações de Navier-Stokes . . . . .	12
2.6	Processo de Adimensionalização . . . . .	13
2.7	Condições Iniciais e de Contorno . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Formulação Numérica</b>	<b>17</b>
3.1	Discretização das Equações . . . . .	19
3.2	Aproximação para as Derivadas . . . . .	20
3.3	Equações Discretizadas . . . . .	21
3.4	Discretização dos Termos Convectivos . . . . .	23
3.4.1	Considerações Iniciais . . . . .	23
3.4.2	Um Breve Histórico de Esquemas “Upwind” . . . . .	27
3.4.3	Equação Modelo . . . . .	28
3.4.4	Esquemas TVD e Variáveis Normalizadas . . . . .	29
3.4.5	Relação entre TVD e Variáveis Normalizadas . . . . .	33
3.4.6	Caso Estacionário . . . . .	36
3.4.7	Caso Transiente . . . . .	39
<b>4</b>	<b>Exemplos e Aplicações</b>	<b>40</b>
4.1	Salto Hidráulico Circular . . . . .	40
4.2	Experimentos de Taylor . . . . .	41
4.3	Jatos Oscilantes . . . . .	41
4.4	Escoamento numa Expansão Brusca . . . . .	42
4.5	Impacto de uma Gota num Fluido em Repouso . . . . .	42
4.6	Preenchimento de Containeres . . . . .	42
4.7	Jato Turbulento num Fluido em Repouso . . . . .	43
4.8	Escoamento num Campo Magnético . . . . .	43

**Bibliografia**

**57**

# Capítulo 1

## Introdução

A modelagem matemática dos mais variados problemas em física e em engenharia é uma atividade de pesquisa que tem auxiliado de maneira decisiva no desenvolvimento de novas tecnologias e de novos processos industriais. A razão para esse sucesso deve-se principalmente ao fato de que a modelagem matemática permite a representação dos conceitos e processos envolvidos, propiciando o entendimento de aspectos do problema que não se revelam facilmente. Uma alternativa à modelagem matemática, utilizada freqüentemente por profissionais de engenharia, é a construção de modelos em escala reduzida, que também cumprem o propósito de revelar propriedades não óbvias do problema por meio de solução empírica. Infelizmente, essa modelagem é muitas vezes cara e não flexível o suficiente para permitir o estudo do problema em vários regimes de parâmetros e dados. Exemplos de modelagem matemática incluem o projeto de um avião de grande porte, a previsão do tempo e a simulação do movimento dos fluidos (dinâmica dos fluidos).

O resultado da modelagem matemática constitui um conjunto de equações que, após uma análise de suas características teóricas, deve ser resolvido em um computador para produzir uma simulação numérica do problema em estudo. A principal vantagem da simulação numérica sobre modelos reduzidos está na sua generalidade: é impossível construir um modelo simplificado do meio ambiente para prever o comportamento do clima, que tenha a versatilidade da simulação numérica em modificar parâmetros; vários regimes e geometrias podem ser simulados numericamente por uma simples modificação dos dados de entrada; e, finalmente, seu baixo custo. A desvantagem reside na falta de conhecimento teórico para a validação do modelo matemático, principalmente quando se trata de equações não-lineares. Nesse caso, o uso de bancadas experimentais tem fornecido informações úteis para as simulações numéricas.

Fluidos em movimento podem ser facilmente observados em nosso cotidiano: o fluxo de sangue através de nossas veias e artérias; o ar respirado para dentro dos nossos pulmões; a água dos rios e canais escoando em direção ao mar; as esteiras dos automóveis nos dias chuvosos; as nuvens cruzando o céu ou, ainda, a fumaça saindo pelas chaminés. Em termos práticos, geólogos estudam movimentos de água, de

areia e de neve para predizer fenômenos realizados em eras passadas por rios, ventos e ondas. Meteorologistas e oceanógrafos estão interessados nos ventos e ondas, nas correntes marinhas e no fenômeno semelhante às correntes de circulação da atmosfera. Todos esses problemas podem ser modelados por equações de conservação em dinâmica dos fluidos.

Do ponto de vista microscópico, um fluido em movimento é constituído de moléculas, que estão individualmente em um estado de movimento ao acaso e possuem a habilidade de transmitir cisalhamento. Essa propriedade introduz o conceito de viscosidade dinâmica, de maneira que, para uma variedade de fluidos, a tensão cisalhante é diretamente proporcional ao gradiente de velocidade, sendo a viscosidade a constante de proporcionalidade. Tais fluidos são denominados newtonianos. Em muitas situações, os escoamentos podem ser classificados em diferentes categorias, segundo duas propriedades importantes: a massa específica e a viscosidade do fluido. No caso dos escoamentos incompressíveis, assumem-se normalmente que as velocidades envolvidas no movimento são muito menores que a velocidade do som ( $Mach \leq 0.3$ ), ou massa específica constante. Por outro lado, nos escoamentos compressíveis, as variações na pressão, de ponto para ponto, são tão intensas que variações da massa específica do fluido devem ser considerada durante o movimento.

Em dinâmica dos fluidos, a modelagem matemática se baseia em princípios fundamentais da física, tais como os princípios da conservação da massa (continuidade), da quantidade de movimento (Navier-Stokes), da energia, entre muitos outros. Esses princípios podem ser expressos em termos de equações matemáticas, que, em suas formas mais gerais, são equações diferenciais à derivadas parciais. Não obstante, sendo essas equações não-lineares, muitas dúvidas persistem ainda sobre existência, unicidade e propriedades das soluções, especialmente no caso tridimensional que é, sem dúvida, o de maior interesse na prática. Apesar dessa dificuldade conceitual, a simulação numérica em dinâmica dos fluidos tem sido largamente utilizada com muito sucesso. Esse sucesso é devido ao avanço, em capacidade de processamento e armazenamento, experimentado recentemente por computadores e principalmente pelo salto na qualidade dos métodos numéricos para a solução dessas equações matemáticas. Entre as muitas classes de problemas em dinâmica dos fluidos que beneficiaram-se desse avanço destaca-se aquela dos problemas de escoamentos com superfícies livres, as quais são modeladas pelas equações de Navier-Stokes e continuidade.

Muitos problemas complexos e de relevância tecnológica podem ser modelados como um problema de movimento dos fluidos com superfície livre, à saber: injeção em moldes, problemas de camada fina no processo de condensação, segurança de centrais nucleares, entre muitos outros. Existe, portanto, grande interesse no desenvolvimento de técnicas de solução para essa classe de problemas. Na verdade, um número considerável de pesquisadores tem atentado para o problema, produzindo as mais variadas técnicas de solução. Por exemplo, método dos elementos finitos, métodos integrais, métodos lagrangeanos e de coordenadas ortogonais. Entretanto, esses métodos não conseguem tratar facilmente superfícies com dobras e aquelas que se fundem em uma única. Mesmo a aplicação a casos em que a superfície apresenta grande deformação não está totalmente esclarecido. Os problemas práticos

envolvendo superfícies livres destacam-se por envolver o escoamento transiente de fluidos em domínios complexos incógnitos. Por exemplo, na indústria alimentícia muitos problemas envolvem o enchimento/esvaziamento de frascos com geometria irregular. Além disso, é de grande interesse industrial o desenvolvimento de ferramentas que possibilitem o desenvolvimento e modelagem de injetores com geometria complexa. A construção de um ambiente capaz de simular esses problemas envolve três etapas distintas: um modelador, para que dados do problema sejam facilmente descritos; um simulador que resolve as equações discretizadas de Navier-Stokes e da continuidade em conjunto com suas condições de fronteira; e um visualizador para a interpretação dos resultados do simulador e modelador. Cada uma dessas etapas envolve conhecimentos de várias áreas em ciências exatas, tais como modelagem geométrica, matemática pura e aplicada, mecânica dos fluidos, física do contínuo e computação.

Como já salientado, uma grande variedade de fenômenos físicos complexos pode ser modelada por meio de Equações Diferenciais à Derivadas Parciais (EDPs). Exemplos típicos são as equações de Maxwell, Schrödinger, Einstein e Navier-Stokes. Quando tais equações envolvem não-linearidades em suas formulações, raras são as vezes em que soluções analíticas podem ser encontradas. Portanto, os métodos numéricos oferecem uma ferramenta indispensável na determinação de soluções aproximadas. De interesse especial no presente estudo são as equações de Navier-Stokes, que estão intimamente relacionadas à hipótese do contínuo e às leis fundamentais de conservação em física e que descrevem o movimento dos fluidos (líquidos e gases). Complicações adicionais aparecem quando perturbações em escoamentos bem comportados (os laminares) estiverem presentes. Se essas perturbações são suficientemente elevadas, então o escoamento laminar poderá se deteriorar rapidamente dando lugar a um estado irregular conhecido como turbulência. A grosso modo, a turbulência apresenta-se como uma distribuição heterogênea de estruturas turbilhonares (redemoinhos) superpostas ao escoamento principal (ou médio) (ver, por exemplo, [71] para moiores detalhes). Escoamentos turbulentos são intrinsecamente dependentes do tempo e portanto alguma espécie de descrição estatística é necessária.

As equações de conservação (continuidade mais Navier-Stokes), em conjunto com as condições iniciais e de contorno apropriadas, permitem, em princípio, obter informações do caráter fundamental da dinâmica dos fluidos. Muitas das soluções encontradas na literatura envolvem simplificações e descartam os termos não-lineares importantes para o modelo. Entretanto, para escoamentos viscosos gerais, a natureza não-linear promove um amplo intervalo de escalas no movimento, excluindo soluções analíticas e favorece a utilização de técnicas numéricas de solução. Geralmente, do ponto de vista numérico, as equações de conservação e as condições iniciais e de fronteira associadas são substituídas por sistemas de equações algébricas, utilizando-se técnicas de discretização. Com o auxílio de algoritmos computacionais eficientes, o sistema resultante da discretização é, então, processado numericamente em um computador para se obter soluções precisas e estáveis.

Fundamentalmente, uma simulação numérica bem sucedida de um problema real requer a escolha de um modelo matemático que descreva o problema físico, um

algoritmo computacional que reduza o problema a um procedimento computacional preferivelmente simples, e um método numérico estável que resolva as equações discretas. Nestas notas, o problema físico considerado é o escoamento de um fluido viscoso, newtoniano e incompressível. O modelo teórico que descreve o escoamento é a equação de Navier-Stokes transiente acoplada à equação de conservação de massa (continuidade). E a técnica numérica considerada é a de diferenças finitas.

Devido às restrições impostas pelo custo computacional, o desenvolvimento de métodos numéricos para simular escoamentos de fluidos concentra-se em problemas de estado estacionário e confinados por paredes rígidas. Entretanto, muitas das situações que ocorrem na prática são inerentemente não-estacionárias. As limitações nos recursos computacionais são particularmente evidentes em simulações de escoamentos incompressíveis não-estacionárias, desde que a cada instante várias iterações são necessárias para impor a conservação da massa. Com a contínua redução em custos computacionais, nos últimos anos, atenção especial tem sido dedicada à simulação de escoamentos incompressíveis em regime transiente [23].

Existem, basicamente, duas maneiras de se determinar soluções numéricas de escoamentos de fluidos incompressíveis. Uma delas é a formulação do problema em variáveis primitivas, ou formulação velocidade–pressão, em que as variáveis  $\mathbf{v}$  e  $p$  são utilizadas e procedimentos especiais são introduzidos para tratar a equação de conservação de massa. Nessa formulação, além da falta de condições de fronteira para  $p$ , a ausência da derivada temporal para a pressão, na equação da conservação de massa, impede uma discretização dessa equação para a determinação de  $p$ , como aquelas levadas a cabo para as equações de quantidade de movimento. Na realidade, a equação da conservação de massa funciona como um vínculo para as equações do movimento. Uma outra alternativa é a formulação do problema nas variáveis de vorticidade. Essa formulação, em contraste com a formulação anterior, envolve, em duas dimensões, somente dois campos escalares desconhecidos: a função de corrente e a vorticidade. A principal desvantagem dessa formulação é que ela não é facilmente estendida para problemas tridimensionais. Por essa razão, as técnicas numéricas mais utilizadas recentemente, para resolver a formulação incompressível, tratam o problema em variáveis primitivas [49].

Nos últimos anos, o tratamento numérico do caso incompressível em variáveis primitivas vem sendo assunto de intensas pesquisas, particularmente nos problemas envolvendo superfícies livres móveis [74]. Uma técnica bastante utilizada é o método da compressibilidade artificial de Chorin [11]-[12]. O princípio básico do método é considerar as equações transientes substituindo a equação de conservação de massa por uma equação perturbada. O objetivo é obter um sistema de equações de evolução temporal, cuja solução, no limite  $t \rightarrow \infty$ , será solução das equações de Navier-Stokes estacionárias. Outros métodos bastante utilizados também empregam a equação da conservação de massa para derivar uma equação de Poisson para a pressão. O algoritmo SIMPLE (Semi Implicit Method for Pressure-Linked Equations) [56], os métodos MAC (Marker-and-Cell) [80], SMAC (Simplified Marker-and-Cell) [30] e GENSMAC (Generalized Simplified Marker-and-Cell) [73] estão na classe de métodos que utilizam a equação de Poisson para a pressão. Em geral, nesses algoritmos, utiliza-se uma previsão para a pressão afim de corrigir um

campo de velocidade intermediário, que satisfaz a equação de conservação da massa.

Nossos objetivos no presente trabalho sobre o movimento dos fluidos são: a) discutir os princípios de conservação de massa e de quantidade de movimento; b) deduzir, no caso incompressível, o modelo fundamental em dinâmica dos fluidos (as equações de Navier-Stokes e continuidade); c) compreender o significado físico de cada termo das equações de Navier-Stokes; d) apresentar o método de diferenças finitas para a integração numérica dessas equações; e) introduzir o algoritmo de cálculo (método da projeção) para a linearização das equações; e, finalmente, f) mostrar uma variedade de simulações numéricas de escoamentos transientes nos casos bidimensional (2D) e tridimensional (3D).

A nossa expectativa é que o conhecimento adquirido nesse texto possa ser útil em uma variedade de situações, particularmente em projetos técnicos de engenharia.

## Capítulo 2

# Formulação Matemática

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

Iniciamos nosso estudo descrevendo a cinemática do movimento de um fluido. Como está bem discutido em [6], o movimento de um fluido pode ser descrito por meio de uma transformação. Formalmente, suponhamos que, em um dado instante de tempo, uma determinada partícula esteja em uma posição  $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ , e, num tempo posterior, a mesma partícula se encontra na posição  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ . Sem perda de generalidade, consideramos o primeiro instante como sendo o tempo  $t = 0$ . Se o tempo posterior for  $t$ , admitimos que  $\mathbf{x}$  é uma função de  $t$  e da posição inicial  $\xi$ , isto é

$$x_i = x_i(\xi_i, t), \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.1)$$

As coordenadas iniciais  $\xi_i$  são as coordenadas materiais (ou lagrangeanas) e as coordenadas  $x_i$  são as coordenadas espaciais (ou eulerianas). Assumimos também que o movimento do fluido é uma função contínua, de maneira que (2.1) pode ser invertida para recuperar as coordenadas materiais da partícula

$$\xi_i = \xi_i(x_i, t), \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.2)$$

Fisicamente, o movimento contínuo do fluido significa que as partículas que estão nas vizinhanças de uma dada partícula permanecem em suas vizinhanças no transcorrer do movimento. A equação (2.1) pode ser vista como uma equação paramétrica de uma curva no espaço tendo  $t$  como parâmetro e é denominada caminho da partícula material.

Qualquer propriedade física local  $\phi$  do fluido pode ser acompanhada ao longo do caminho da partícula. Por exemplo, a massa específica (massa por unidade de volume de uma substância) é uma função  $\rho = \rho(\xi_i, t)$ , e seria esta massa específica



que um observador veria se estivesse “sentado” na partícula material. A descrição lagrangeana da variação de uma propriedade física  $\phi(\xi_i, t)$  pode ser vista na descrição euliana  $\phi(x_i, t)$  segundo a equação

$$\phi(x_i, t) = \phi(\xi_i(x_i, t), t), \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.3)$$

Associadas às descrições anteriores existem duas derivadas a considerar: a derivada com respeito ao tempo mantendo  $x_i$  constante; e a derivada com respeito ao tempo mantendo  $\xi_i$  constante (a derivada total). A segunda derivada é frequentemente utilizada em dinâmica de fluidos e é conhecida como derivada material, substancial, ou derivada de Stokes. Em particular, se  $\phi = x_i$  é a posição da partícula obtém-se

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

Na determinação de taxas de variação necessita-se, com frequência, calcular derivadas de alguma propriedade física  $\phi(\vec{x}, t)$ , na qual informações eulerianas são dadas. A taxa de variação dessa propriedade seguindo um partícula de fluido é

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{\xi} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial t} \Big|_{\xi} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + v_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \frac{d\phi}{dt}. \quad (2.5)$$

(lagrangeana) (euleriana)

As Equações Diferenciais Ordinárias (EDO) (2.4) são a representação lagrangeana do movimento e permitem estabelecer a conexão entre as derivadas anteriores. Assim, no caso de uma propriedade  $\phi$  qualquer, ela pode ser representada também na notação de Einstein (ou inicial) como

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + v_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i}, \quad (2.6)$$

ou, em notação de Gibbs (ou vetorial) como

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \phi, \quad (2.7)$$

em que  $\mathbf{v}$  é o campo de velocidades euleriano.

O primeiro termo do lado direito da equação (2.7) é a variação local em  $\phi$  e exprime a contribuição devida à não permanência do escoamento. O segundo é a aceleração convectiva, que relaciona os efeitos do gradiente de velocidade transportado pelo escoamento. Do ponto de vista matemático, a variação convectiva em  $\phi$  representa a não-linearidade do modelo. Fazendo  $\phi = \mathbf{v}$ , a equação (2.7) define a taxa de variação da velocidade (ou aceleração) das partículas de fluido,

$$\frac{\partial^2 \mathbf{x}(\xi, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = \frac{d\mathbf{v}}{dt}. \quad (2.8)$$

## 2.1 Teorema de Transporte de Reynolds

As leis físicas de conservação são formuladas na descrição lagrangeana, das quais precisamos na descrição euleriana. A transformação relacionando as duas formulações é feita por meio de um teorema cinemático importante, derivado da identidade de Euler [1] e conhecido como teorema de transporte de Reynolds [6].

Seja  $F = F(x_i, t)$  uma função escalar, vetorial ou tensorial, representando alguma grandeza física do fluido. Se  $V = V(t)$  é um volume fechado contendo partículas materiais e movimentando com o fluido, a função

$$G = G(t) = \int_{V(t)} F(x_i, t) dV \quad (2.9)$$

depende do tempo, e sua derivada material resulta em

$$\frac{dG(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{V(t)} F(x_i, t) dV = \int_{V(t)} \left( \frac{dF(x_i, t)}{dt} + F(x_i, t)(\nabla \cdot \mathbf{v}) \right) dV. \quad (2.10)$$

Utilizando-se (2.7) e o teorema de Green, obtém-se da equação (2.10) o teorema de transporte de Reynolds em sua forma usual [6]

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} F(x_i, t) dV = \int_{V(t)} \frac{\partial F(x_i, t)}{\partial t} dV + \int_{S(t)} F(x_i, t)(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS, \quad (2.11)$$

em que  $S(t)$  é a superfície móvel envolvendo o volume  $V(t)$  e  $\mathbf{n}$  é o vetor normal exterior a  $S(t)$ . Fisicamente, a Eq. (2.11) mostra que a taxa de variação da integral de  $F$ , num volume material móvel, corresponde à integral da variação local de  $F$ , mais o fluxo da propriedade  $F$  através do contorno  $S(t)$  limitando  $V(t)$ .

## 2.2 Equações Integrais de Campo

A equação de campo generalizada na forma integral para um sistema material pode ser escrita como

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \psi dV = - \int_{S(t)} \Pi \cdot \mathbf{n} dS + \int_{V(t)} \rho \phi dV, \quad (2.12)$$

em que  $\psi$  é uma propriedade intensiva (ver [55]) derivada de uma propriedade extensiva  $\psi dm = \psi \rho dV$ . O primeiro termo do segundo membro representa a interação de contato na fronteira do sistema, caracterizado por  $\Pi$ . O segundo termo representa a ação de uma fonte volumétrica que age em cada partícula, como a ação da gravidade ou a geração distribuída de calor no sistema. Essa equação é expressa em termos das coordenadas lagrangeanas, isto é, essa equação se aplica a um sistema que evolue no tempo e no espaço. Tal sistema de coordenadas pode não ser prático,

pois em muitas aplicações é mais fácil realizar medidas em um ponto fixo. Para tanto, aplica-se o teorema de transporte de Reynolds (equação. (2.11)) no primeiro membro da equação equação (2.12)

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho\psi dV = \int_{V(t)} \frac{\partial(\rho\psi)}{\partial t} dV + \int_{S(t)} \rho\psi \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} dS, \quad (2.13)$$

onde  $\mathbf{V}$  é a velocidade da partícula de fluido na fronteira do sistema. Agora, se ao invés de acompanharmos um dado sistema pelo espaço, nos fixamos em uma região do espaço, então em cada instante um sistema “diferente” ocupará aquela região. Essa região é denominada de Volume de Controle ( $VC$ ). Nesse caso, massa cruza a fronteira denominada de Superfície de Controle ( $SC$ ). A velocidade da partícula de fluido da equação (2.13) refere-se ao sistema e pode ser escrita como  $\mathbf{V} = \mathbf{V}_{VC} + \mathbf{V}_r$ , onde  $\mathbf{V}_{VC}$  é a velocidade de deslocamento da superfície de controle e  $\mathbf{V}_r$  é a velocidade relativa. Introduzindo a velocidade da partícula na equação (2.13) e substituindo essa na equação (2.12) resulta em

$$\int_{V(t)} \frac{\partial}{\partial t} (\rho\psi) dV + \int_{S(t)} \rho\psi \mathbf{V}_{VC} \cdot \mathbf{n} dS + \int_{S(t)} \rho\psi \mathbf{V}_r \cdot \mathbf{n} dS = - \int_{S(t)} \Pi \cdot \mathbf{n} dS + \int_{V(t)} \rho\phi dV. \quad (2.14)$$

Como o volume de controle não é um sistema, uma vez que massa pode cruzar a sua fronteira, o teorema de Leibniz do cálculo permite expressar

$$\frac{d}{dt} \int_{VC(t)} \rho\psi dV = \int_{VC(t)} \frac{\partial}{\partial t} (\rho\psi) dV + \int_{SC(t)} \rho\psi \mathbf{V}_{VC} \cdot \mathbf{n} dS. \quad (2.15)$$

Fazendo a substituição da equação (2.15) na equação (2.14) obtém-se uma equação generalizada em coordenadas eulerianas

$$\frac{d}{dt} \int_{VC(t)} \rho\psi dV + \int_{SC(t)} \rho\psi \mathbf{V}_r \cdot \mathbf{n} dS = - \int_{SC(t)} \Pi \cdot \mathbf{n} dS + \int_{VC(t)} \rho\phi dV. \quad (2.16)$$

## 2.3 Equações na Forma Diferencial

A partir da descrição lagrangeana do movimento surge naturalmente um campo de vetores definido pela equação (2.4). O escoamento é chamado estacionário (ou não-transiente) se as componentes do campo de velocidades independem do tempo. As trajetórias do campo representam as linhas de corrente e são soluções das EDO (2.4).

A descrição lagrangeana do movimento é usualmente muito difícil e é raramente empregada em mecânica do contínuo. Entretanto, se empregarmos a velocidade como variável dependente, em vez da posição, podemos, em geral, determinar o

escoamento do fluido. A representação euleriana é muito mais útil, pois as leis físicas escritas nesta forma não contêm o vetor posição, e a velocidade aparece naturalmente como a principal variável dependente.

Assumindo-se no teorema de transporte de Reynolds que o volume material  $V(t)$  é arbitrário e que a propriedade  $F$  é adequadamente escolhida, as leis gerais de conservação, em forma diferencial, da mecânica do contínuo podem ser escritas em forma conservativa (ou divergente) como [6], [55], [81]:

- Conservação de massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (2.17)$$

- Conservação de quantidade de movimento

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \sigma, \quad (2.18)$$

- Conservação de momento angular

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x} \times \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho(\mathbf{x} \times \mathbf{v}) \mathbf{v}] = \rho(\mathbf{x} \times \mathbf{g}) + \mathbf{x} \times (\nabla \cdot \sigma), \quad (2.19)$$

- Conservação de energia

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{v}) = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (\sigma \cdot \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho Q, \quad (2.20)$$

- Desigualdade entrópica

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho s \mathbf{v}) \geq \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T}\right) + \frac{\rho Q}{T}, \quad (2.21)$$

em que

- $\rho$  é a massa específica do fluido,
- $\mathbf{x}$  é o vetor posição,
- $\mathbf{g}$  é o vetor forças externas,
- $\sigma$  é o tensor de tensões,
- $e$  é a energia específica total,
- $Q$  é geração de energia por unidade de volume,
- $s$  é a entropia específica,
- $T$  é a temperatura,
- $\mathbf{q}$  é o fluxo de calor.

As leis físicas de conservação (2.17)-(2.21) são válidas para qualquer meio contínuo. O número de incógnitas no sistema é maior que o número de equações, tornando-o não fechado. Para o fechamento, devemos fornecer informações adicionais como as leis constitutivas.

## 2.4 Fluidos Newtonianos

Para fechar o sistema de equações (2.17)-(2.21) é necessário introduzir relações adicionais que dependem das propriedades do meio contínuo em questão. No caso de fluidos newtonianos, as seguintes relações constitutivas são freqüentemente utilizadas:

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

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

- A energia total calculada como a soma da energia cinética  $e_c$  e energia interna

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

- A equação de estado representada por

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

- A lei de Fourier para condução de calor

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

- A lei de viscosidade de Newton

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

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

- Equação da continuidade

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

- Equações de Navier-Stokes

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

- Conservação de energia

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{v}) = -\nabla \cdot (p \mathbf{v}) - \nabla \cdot \left( \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{v} \right)$$

$$+\nabla \cdot \left[ \mu \left( \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t \right) \cdot \mathbf{v} \right] + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \rho Q + \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v},$$

- Desigualdade entrópica

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

em que os coeficientes de transporte  $\lambda$  e  $\mu$  são funções das variáveis do estado termodinâmico

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

As equações de transporte para as energias interna e cinética podem ser derivadas [55], e têm as seguintes formas:

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

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

## 2.5 Equações de Navier-Stokes

Para o caso em que o fluido é considerado um meio incompressível e homogêneo, a massa específica  $\rho(x_i, t) = \rho_0$  das partículas não varia durante o seu movimento e as propriedades de transporte são constantes, as equações matemáticas das leis físicas de conservação podem ser simplificadas como

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{v}) + \mathbf{g}, \quad (2.22)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2.23)$$

em que  $\nu = \mu/\rho_0 > 0$  é a viscosidade cinemática molecular (constante) do fluido e  $p$  a pressão cinemática (pressão dividida pela massa específica), e todas as outras equações no sistema ficam desacopladas.

As equações (2.22) e (2.23) são, respectivamente, conhecidas como equações de Navier-Stokes e equação da continuidade, e constituem um sistema fechado de EDPs não-lineares, as quais descrevem qualquer escoamento homogêneo, viscoso, isoentrópico, incompressível e isotérmico. É importante observar que a validade de (2.22) está restrita às situações em que as forças externas atuando sobre o fluido sejam conservativas e o referencial inercial. As equações sob um referencial arbitrário

podem ser encontradas em [66]. No presente estudo, assumimos que a única força externa agindo sobre as partículas de fluido é a força gravitacional conservativa.

Uma vez que a escolha das variáveis dependentes está fortemente sujeita ao domínio e às condições de contorno do problema, a discussão sobre a formulação matemática mais adequada para a simulação de escoamentos em geometrias arbitrárias está ainda em aberto. Geralmente, existem três formulações diferentes para os escoamentos bidimensionais: função de corrente e vorticidade [45]; variáveis primitivas, velocidade e pressão [26] e velocidade e vorticidade [16]. Nos problemas tridimensionais, embora haja uma analogia da função de corrente, chamada vetor potencial, o desenvolvimento da implementação numérica dessa formulação está, ainda, na sua infância. Em contraste, as outras duas formulações podem ser generalizadas naturalmente para situações tridimensionais.

Recentemente, ao lado da formulação em variáveis primitivas amplamente utilizada, bastante atenção é voltada à formulação vorticidade e velocidade, cuja dificuldade maior é garantir divergências nulas dos campos de velocidade e vorticidade, segundo a precisão da máquina. Uma ótima discussão sobre as três formulações pode ser encontrada em [27], [18] e [28]. No presente trabalho, o conjunto de EPDs (2.22)-(2.23) será resolvido numericamente utilizando-se a formulação em variáveis primitivas  $(\mathbf{v}, p)$ .

## 2.6 Processo de Adimensionalização

Em dinâmica dos fluidos computacional é freqüentemente desejável empregar formas adimensionais das equações de conservação, com o objetivo de mostrar os efeitos físicos contidos nas equações e formular o modelo independente de qualquer sistema de unidades. Para esses fins, consideramos uma mudança de variáveis. Se o fluido é definido por uma viscosidade molecular  $\nu$  e o escoamento caracterizado por uma escala característica de comprimento  $L$  e uma escala de velocidade  $U$ , definimos as variáveis adimensionais segundo a transformação

$$v_i = v_i^* U, \quad x_i = x_i^* L, \quad t = t^* L/U, \quad p = p^* U^2, \quad g_i = g_i^* |g|. \quad (2.24)$$

Substituindo as relações (2.24) em (2.22) obtemos

$$\frac{U^2}{L} \frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + \frac{U^2}{L} \nabla \cdot (\mathbf{v}^* \mathbf{v}^*) = -\frac{U^2}{L} \nabla p^* + \frac{\nu U}{L^2} \nabla^2 \mathbf{v}^* + |\mathbf{g}| \mathbf{g}^*.$$

Dividindo a equação anterior por  $\frac{U^2}{L}$  obtemos

$$\frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + \nabla \cdot (\mathbf{v}^* \mathbf{v}^*) = -\nabla p^* + \frac{\nu}{LU} \nabla^2 \mathbf{v}^* + \frac{|\mathbf{g}|L}{U^2} \mathbf{g}^*.$$

Desprezando-se nessa última equação e na equação da continuidade ( $\nabla \cdot \mathbf{v}^* = 0$ ) o símbolo “\*” para simplificar, e definindo-se  $Re = LU/\nu$  e  $F_r = U/(L|\mathbf{g}|)^{1/2}$  como sendo o número de Reynolds e o número de Froude, respectivamente, o modelo (2.22)-(2.23) pode ser representado em forma adimensional conservativa (ou divergente) como

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{v}) = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}, \quad (2.25)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (2.26)$$

Os números de Reynolds e Froude são os parâmetros adimensionais fundamentais em escoamentos incompressíveis envolvendo superfícies livres. O significado físico do número de Reynolds é que ele pode ser interpretado como a razão das forças de inércia, que são responsáveis pelo movimento do fluido, e as forças viscosas, que são responsáveis pela dissipação devido à viscosidade molecular, e, em muitas circunstâncias, ele serve para caracterizar o regime do escoamento. O número de Froude relaciona as forças de inércia e a força gravitacional na superfície da terra, e não deve ser desprezado em escoamentos envolvendo superfícies livres.

Um conceito muito importante na modelagem de problemas em dinâmica dos fluidos é o de semelhança. Para exemplificar, consideremos um determinado escoamento em que estão envolvidas apenas quatro variáveis, digamos: a escala geométrica  $L$ ; a velocidade relativa do problema  $V$ ; a força exercida pelo fluido em um determinado contorno  $F$ ; e a massa específica do fluido  $\rho$ . Então, essas quatro variáveis podem ser combinadas para produzir um coeficiente adimensional conhecido como número de Euler  $E = L^{-2} \rho^{-1} V^{-2}$ . Isto significa afirmar que dois escoamentos semelhantes, dependentes apenas dessas quatro variáveis, são dinamicamente semelhantes, independentemente da escala e do fluido. Convém observar que este conceito é freqüentemente utilizado em experimentos físicos e numéricos.

As equações (2.25) e (2.26) podem ser representadas também em notação de indicial como

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial(v_i v_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j^2} + \frac{1}{Fr^2} g_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.28)$$

em que  $x_i$ ,  $v_i$  e  $g_i$  são, respectivamente, as coordenadas cartesianas, as componentes do campo de velocidade  $\mathbf{v}$  e as componentes do campo gravitacional  $\mathbf{g}$ . No caso tridimensional, a forma expandida das equações de conservação torna-se

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} + \frac{\partial(wu)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left[ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right] + \frac{1}{Fr^2} g_x \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} + \frac{\partial(wv)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left[ \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right] + \frac{1}{Fr^2} g_y, \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial(uw)}{\partial x} + \frac{\partial(vw)}{\partial y} + \frac{\partial(ww)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{Re} \left[ \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right] + \frac{1}{Fr^2} g_z \quad (2.31)$$

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

A solução numérica das EDPs não-lineares (2.29)-(2.32), em conjunto com condições iniciais e de fronteira fisicamente apropriadas e com a utilização da metodologia diferenças finitas, será o tema dos próximos capítulos.



## 2.7 Condições Iniciais e de Contorno

As equações-modelo discutidas anteriormente requerem condições subsidiárias e fisicamente apropriadas para definir problemas específicos. Essas condições, chamadas condições iniciais e de fronteira, são fundamentais para se obter uma solução numérica de boa qualidade. Para as condições iniciais do escoamento devemos conhecer, em  $t = 0$ , a distribuição espacial das variáveis dependentes. Para as condições de fronteira devemos ter alguma informação física, para todo tempo  $t$ , das variáveis dependentes no contorno da região limitando o escoamento. Mais precisamente, as equações (2.25) e (2.26), suplementadas adequadamente com um campo de velocidade inicial em um domínio e uma condição sobre a fronteira do domínio, constituem um Problema de Valor Inicial e de Fronteira (PVIF) bem posto, no sentido de Hadamard [13]. A pressão nesse caso fica determinada unicamente (a menos de uma constante aditiva) em função de  $\mathbf{v}$  [27], [29]. É muito importante que o campo inicial respeite a restrição de incompressibilidade (2.28), pois, caso contrário, o problema contínuo pode não possuir solução clássica [33].

Formalmente, se  $\Omega$  é um domínio limitado no  $R^n$ ,  $n=2,3$ ,  $\partial\Omega$  é a fronteira limitando  $\Omega$ ,  $\mathbf{a}$  e  $\mathbf{b}$  são, respectivamente, funções conhecidas sobre  $\Omega$  e  $\partial\Omega$ , e  $T \in R^+$  é suficientemente grande, as condições iniciais e de fronteira típicas para (2.25) e (2.26) têm as seguintes formas:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{a}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.33)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{b}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad t \in (0, T], \quad (2.34)$$

com  $\mathbf{a}$  e  $\mathbf{b}$  satisfazendo

$$\nabla \cdot \mathbf{a} = 0, \quad \int_{\partial\Omega} (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n}) dA = 0, \quad \mathbf{a}(\mathbf{x}) = \mathbf{b}(\mathbf{x}, 0),$$

em que  $\mathbf{n}$  é o vetor normal exterior à  $\partial\Omega$ .

Sobre existência e unicidade de solução do PVIF (2.25)-(2.26) e (2.33)-(2.34), é interessante lembrar que para o caso bidimensional a teoria matemática está bem estabelecida. Porém, no caso tridimensional ela ainda se encontra incompleta. Uma discussão resumida dos resultados principais de existência e unicidade de solução pode ser encontrada em [17]. No presente trabalho, nós assumiremos que os PVIFs têm soluções únicas.

No contexto de variáveis primitivas, uma das dificuldades principais em se resolver numericamente o PVIF (2.25)-(2.26) e (2.33)-(2.34) é a maneira de se tratar a pressão. Diferentemente da variável velocidade, não há uma equação de evolução para o campo de pressão;  $p$  deve ser determinada por meio da equação da continuidade. Tradicionalmente, existem duas técnicas utilizadas freqüentemente para tratar essa questão: i) utilizar o método da compressibilidade artificial de Chorin [11]; e ii) formular uma equação de Poisson [30]. No caso a), a equação da continuidade é perturbada para se obter uma equação de evolução para  $p$ . Essa nova equação mais as equações do movimento podem, então, ser resolvidas utilizando-se

métodos numéricos para escoamentos compressíveis. No segundo caso, aplica-se a divergência em ambos os lados de (2.25) para se obter a equação de Poisson para  $p$ . A solução dessa equação elíptica e o campo de velocidade são, então, atualizados até a massa ser conservada. No presente estudo, utilizamos a formulação da equação de Poisson de Harlow e Welch, em que as condições de Neumann e/ou Dirichlet sobre a fronteira  $\partial\Omega$  são impostas para se obter um problema de valor de fronteira bem posto.

No problemas que estamos interessados, existem quatro tipos de condições de fronteira bem aceitas em escoamentos viscosos: a) condição sobre uma superfície sólida impermeável e sem deslizamento de fluido; b) condição sobre uma superfície impermeável e com deslizamento; c) condição sobre uma superfície livre; e d) condições de entrada e saída de fluido do domínio de solução. A condição do tipo a) significa que o fluido deve ser “colado” à superfície, a qual é frequentemente conhecida como condição de aderência completa (“no-slip”); a condição b) permite o fluido deslizar livremente sobre a superfície e, muitas vezes, é interpretada como superfície de simetria (“free-slip”); a condição c) representa uma interface (“free-surface”) entre o fluido e uma atmosfera, e a condição d) requer o conhecimento do escoamento nos contornos de entrada (“inflow”) e saída (“outflow”) da região de interesse.

Resumindo, as condições de contorno mais usuais em escoamentos incompressíveis aparecem como segue:

- Sobre superfícies rígidas impermeáveis

$$\mathbf{v} = \mathbf{a}, \quad (2.35)$$

- Sobre superfícies livres

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t}, \quad (2.36)$$

- Nos contornos de entrada de fluido

$$\mathbf{v} = \mathbf{b}, \quad (2.37)$$

- Nos contornos de saída de fluido

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{0}, \quad (2.38)$$

onde  $\mathbf{a}$  e  $\mathbf{b}$  são vetores dados, normalmente constantes,  $\mathbf{t}$  é a tensão na superfície livre do fluido.

## Capítulo 3

# Formulação Numérica

Neste capítulo apresentamos as técnicas para a solução numérica das equações de Navier-Stokes. Essas técnicas consistem na linearização das equações e aproximações das derivadas por diferenças finitas.

O método de solução empregado é uma variante do método da projeção de Chorin [12], proposto originalmente por Harlow e Welch [30], e bem discutido por Peyret e Taylor [57]. No método particular de cálculo de Harlow e Welch, a solução numérica das equações é avançada no tempo em dois estágios: no primeiro, um campo de velocidades tentativo é obtido a partir das equações do movimento. Uma vez que esse campo, em geral, não satisfaz a equação da continuidade, um passo corretor é necessário; no segundo, o campo de velocidades, obtido no estágio anterior, mais o campo de pressão são corrigidos, de maneira que a restrição de incompressibilidade (2.26) seja satisfeita. Esse segundo estágio dá origem a uma equação de Poisson para um campo projetor  $\psi$ , com condições de contorno do tipo Neumann [29]. O método de solução apresentado neste trabalho é inteiramente análogo ao de Harlow e Welch (método da projeção) e, formalmente, ele é descrito como segue.

Suponhamos que no tempo  $t = t_0$  conhecemos a configuração do escoamento, isto é, sabemos as posições das partículas marcadoras representando o fluido no domínio de solução. Admitimos também que, nesse mesmo instante de tempo,  $\tilde{p}$ , uma pseudo-pressão arbitrária satisfazendo a condição sobre superfícies livres, é conhecida. Este campo de pressão é construído empregando-se as condições corretas na superfície livre e é escolhido de forma arbitrária (mas fixada, por exemplo  $\tilde{p} = 0$ ) no interior do domínio. Considera-se ainda conhecido  $\tilde{\mathbf{v}}$ , um campo de velocidades aproximado não necessariamente satisfazendo a restrição de incompressibilidade. Definimos a partir das equações de Navier-Stokes

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{v}) - \nabla \tilde{p} + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{1}{Fr_r^2} \mathbf{g}. \quad (3.1)$$

Desde que no tempo  $t = t_0$ ,  $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$  e  $p(\mathbf{x}, t)$  também satisfazem essas equações,

teremos, nesse tempo, após subtrair (3.1) de (2.25)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{v} - \tilde{\mathbf{v}}) = -\nabla(p - \tilde{p}). \quad (3.2)$$

A aplicação do rotacional em ambos os lados de (3.2) nos leva a

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

Aproximando a derivada anterior por diferenças avançadas (que veremos mais adiante na seção 3.2) e lembrando que em  $t = t_0$   $\mathbf{v} = \tilde{\mathbf{v}}$ , temos num tempo posterior  $t$

$$\nabla \times (\mathbf{v} - \tilde{\mathbf{v}}) \approx 0. \quad (3.4)$$

O significado físico de (3.4) é que as vorticidades associadas a  $\mathbf{v}$  e  $\tilde{\mathbf{v}}$ , no tempo  $t$ , são muito próximas. Ainda mais, o escoamento com respeito ao campo  $(\mathbf{v} - \tilde{\mathbf{v}})$  é praticamente irrotacional. Isso nos leva à admitir a existência de uma função escalar  $\psi$ , chamada potencial de velocidades [4], de maneira que no tempo  $t$

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

Aplicando a divergência em ambos os lados de (3.5) e impondo conservação de massa, obtemos a equação de Poisson no tempo  $t$  para o potencial auxiliar  $\psi$

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

Acontece que no tempo atual  $t$  não conhecemos a configuração do fluido no domínio de solução. O que fazer então? Uma alternativa é resolver a equação de Poisson no tempo  $t = t_0$ , argumentando que o tamanho de passo  $\delta t$  é muito pequeno, e portanto as configurações do fluido em  $t_0$  e  $t$  diferem muito pouco.

Para a simulação de escoamentos de fluidos, nós admitimos que, num dado instante de tempo, digamos  $t_0$ , as variáveis dependentes são conhecidas e as condições de fronteira associadas estão completamente especificadas. Em particular, neste trabalho, assumimos quatro tipos diferentes de condições de contorno, a saber: a) em contornos rígidos, aplicamos a condição de não escorregamento ( $\mathbf{v} = 0$ ); b) em superfícies livres, aplicamos tração nula (atmosfera passiva); c) em entradas de fluido, aplicamos a condição homogênea de Dirichlet; e d) em saídas de fluido, aplicamos a condição homogênea de Neumann para as variáveis. As equações de Navier-Stokes são resolvidas de uma maneira explícita. Mais precisamente, um ciclo computacional consiste em atualizar as variáveis discretas, a partir do tempo inicial  $t_0$ , no tempo  $t = t_0 + \delta t$ , utilizando-se os passos descritos a seguir:

- **PASSO 1:** No tempo inicial, ou num ciclo prévio, computar um campo de velocidade tentativo  $\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t)$  em  $t_0 + \delta t$ , com as mesmas condições iniciais e de contorno de  $\mathbf{v}$ , utilizando-se (3.1);

- **PASSO 2:** Resolver a equação de Poisson para o potencial auxiliar  $\psi$ , a partir de (3.6), com as seguintes condições de fronteira: em contornos rígidos Neumann homogênea; e em fronteiras livres Dirichlet homogênea. No caso dos contornos rígidos, toma-se a condição  $\nabla\psi = 0$  de modo a satisfazer a condição (3.5), fornecendo assim os valores corretos para  $\mathbf{v}$  nestas fronteiras;

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

- **PASSO 4:** Atualizar a pressão da seguinte forma: aproximando a derivada temporal em (3.2) por diferença progressiva (ver seção 3.2), lembrando que em  $t = t_0$ ,  $\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{v}$  e utilizando (3.5), obtemos

$$p(x_i, t) = \tilde{p}(x_i, t) + \frac{\psi(x_i, t)}{\delta t};$$

- **PASSO 5:** Determinar, no caso de problemas com superfícies livres, as novas posições das partículas marcadoras virtuais pela representação lagrangeana do movimento (2.4);

- **PASSO 6:** Atualizar as condições de fronteira necessárias para o próximo ciclo e retornar ao **PASSO 1**.

### 3.1 Discretização das Equações

O propósito de qualquer técnica de discretização é transformar as equações diferenciais parciais (2.29)-(2.32) em um sistema de equações algébricas correspondente, representando o balanço local das forças envolvidas. Sob condições favoráveis, a solução desse sistema produz um conjunto de valores que está associado à solução das equações originais em alguma região preestabelecida. Geralmente, o processo de discretização é dividido em duas etapas: discretização do domínio  $\Omega$  e discretização das equações. A primeira etapa fornece uma descrição numérica do domínio, incluindo as posições dos pontos (malha computacional) onde se deseja avaliar a solução. O domínio é dividido em um número finito de regiões discretas, chamadas volumes de controle ou células computacionais. No caso dos problemas transientes, o intervalo de tempo  $(0, T]$  é também particionado em subintervalos de tamanho  $\delta t$ , caracterizando o valor do passo temporal. Na segunda etapa, a discretização das equações fornece equações de diferenças relacionando as variáveis dependentes nos pontos do domínio discretizado. Ilustramos esse processo na figura 3.1, onde apresentamos um exemplo do preenchimento de um container e sua malha computacional. Nesta figura, as células são dos tipos: B - contorno rígido; E - vazias; F - cheias de fluido; I - injetor; e S - superfície livre.

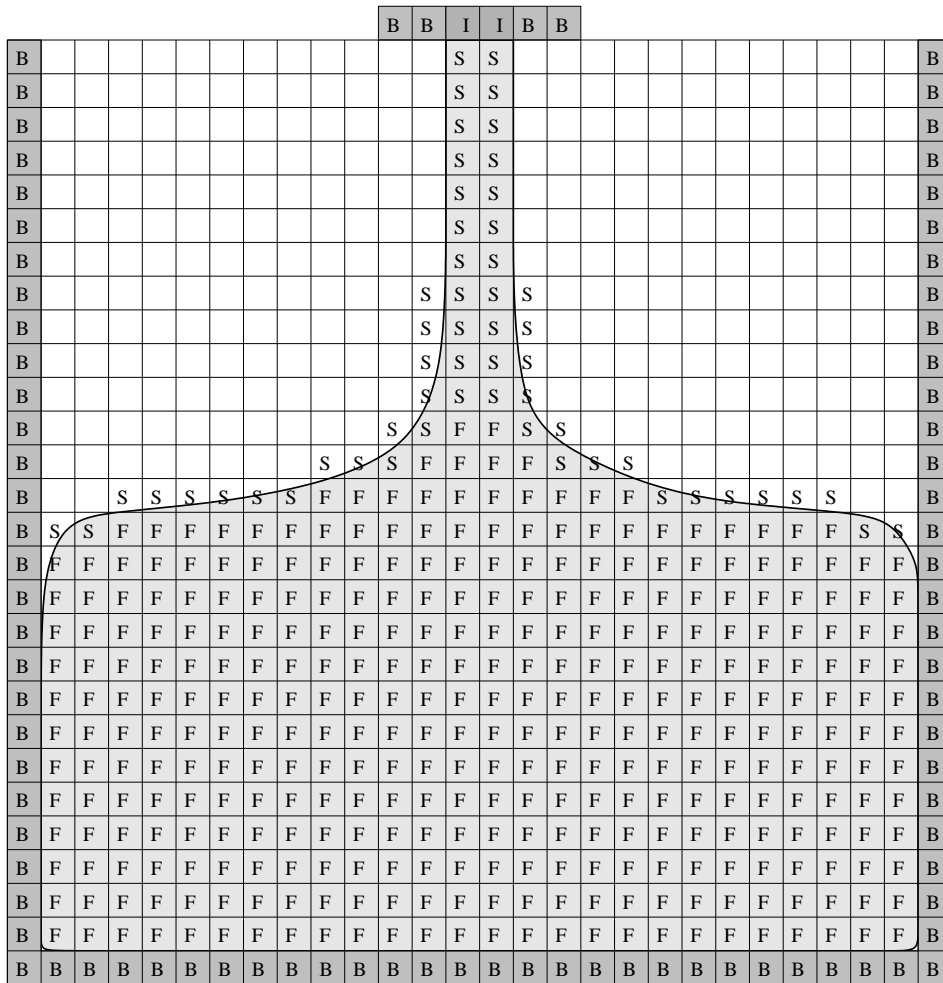


Figura 3.1: Domínio Discretizado

### 3.2 Aproximação para as Derivadas

As equações de Navier-Stokes envolvem derivadas das funções incógnitas com respeito às variáveis temporal e espaciais. Para ilustrar como essas derivadas são aproximadas, a seguir apresentamos alguns exemplos de aproximação de derivadas por diferenças finitas. Seja  $\phi$  uma função de uma variável real, então:

- Diferença progressiva ou avançada (para a primeira derivada):

$$\phi'(x) = \frac{\phi(x+h) - \phi(x)}{h} - \frac{h}{2}\phi''(\xi), \quad x < \xi < x+h.$$

- Diferença central (para a primeira derivada):

$$\phi'(x) = \frac{\phi(x+h) - \phi(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6}\phi'''(\xi), \quad x-h < \xi < x+h.$$

- Diferença central (para a segunda derivada):

$$\phi''(x) = \frac{\phi(x+h) - 2\phi(x) + \phi(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12}\phi^{(4)}(\xi), \quad x-h < \xi < x+h.$$

O último termo nas igualdades acima é denominado erro de truncamento local associado. Um estudo mais completo sobre aproximações para derivadas pode ser encontrado em [5].

Além dos termos lineares, as equações de Navier-Stokes incluem também termos não-lineares, tais como  $\frac{\partial(uu)}{\partial x}$ , no termo  $\nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{v})$  em (3.1), que devem ser discretizados. Para aproximar esses termos, quando o número de Reynolds é pequeno, utilizamos diferenças centrais e médias. Por exemplo:

$$\frac{\partial(uu)}{\partial x}(x_{i+1/2}, y_j, z_k) \approx \frac{(uu)(x_{i+1}, y_j, z_k) - (uu)(x_i, y_j, z_k)}{\delta x}.$$

Os termos  $(uu)(x_{i+1}, y_j, z_k)$  e  $(uu)(x_i, y_j, z_k)$  precisam agora ser aproximados em termos de valores de  $u$  nos pontos  $(i+1/2, j, k)$  e  $(i-1/2, j, k)$ . Obtemos essas aproximações fazendo médias de valores vizinhos. Assim,

$$\begin{aligned} (uu)(x_{i+1}, y_j, z_k) &\approx \frac{(uu)(x_{i+3/2}, y_j, z_k) + (uu)(x_{i+1/2}, y_j, z_k)}{2} \quad \text{e} \\ (uu)(x_i, y_j, z_k) &\approx \frac{(uu)(x_{i+1/2}, y_j, z_k) + (uu)(x_{i-1/2}, y_j, z_k)}{2}. \end{aligned}$$

Os outros termos não lineares são tratados analogamente.

A técnica de discretização para resolver o conjunto de EDPs (2.29)-(2.32) segue essa mesma estratégia de aproximar derivadas por diferenças, obtendo o que é conhecido como o método de diferenças finitas, sobre malhas diferenciadas. Nessas malhas, a pressão é avaliada no centro das células computacionais, e as velocidades são calculadas nos centros das faces. A disposição das variáveis dependentes em uma célula típica é ilustrada na figura 3.2.

### 3.3 Equações Discretizadas

Avaliando as equações (2.29)-(2.32) em pontos apropriados e aproximando as derivadas por diferenças finitas, obtemos as seguintes equações de Navier-Stokes discretas:

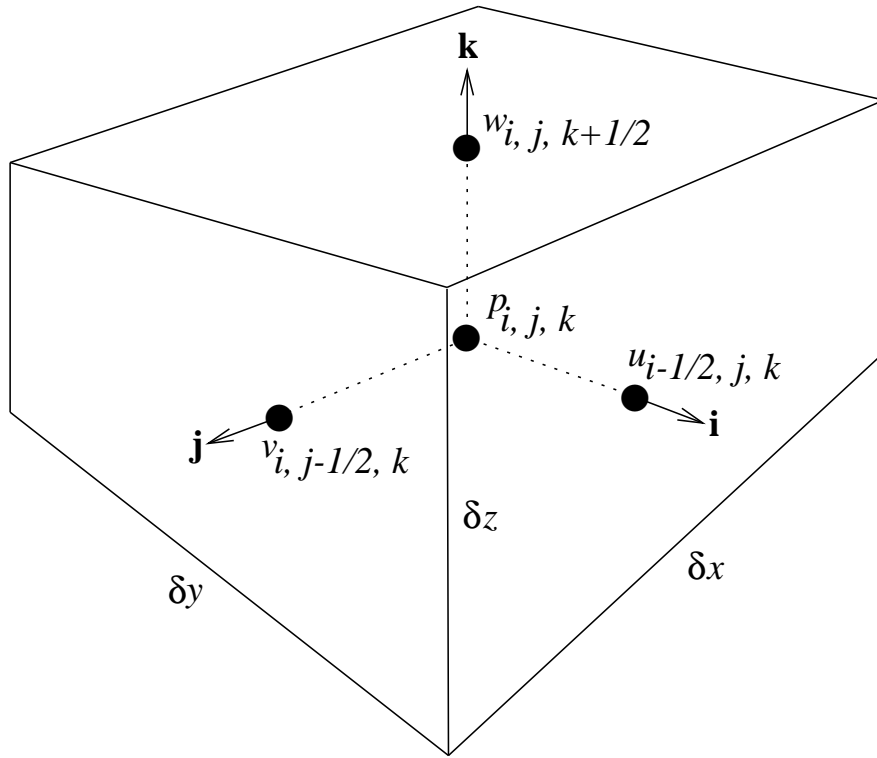


Figura 3.2: Célula computacional típica mostrando onde as variáveis são discretizadas.

$$\begin{aligned}
 \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j,k} = & u_{i+\frac{1}{2},j,k} - \delta t \left[ CONV(u)_{i+\frac{1}{2},j,k} + \frac{\tilde{p}_{i+1,j,k} - \tilde{p}_{i,j,k}}{\delta x} + \frac{1}{Fr^2} g_x \right. \\
 & + \frac{1}{Re} \left( \frac{u_{i-\frac{1}{2},j,k} - 2u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i+\frac{3}{2},j,k}}{\delta x^2} + \frac{u_{i+\frac{1}{2},j-1,k} - 2u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i+\frac{1}{2},j+1,k}}{\delta y^2} \right. \\
 & \left. \left. + \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k-1} - 2u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i+\frac{1}{2},j,k+1}}{\delta z^2} \right) \right], \quad (3.7)
 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2},k} = & v_{i,j+\frac{1}{2},k} - \delta t \left[ CONV(v)_{i,j+\frac{1}{2},k} + \frac{\tilde{p}_{i,j+1,k} - \tilde{p}_{i,j,k}}{\delta y} + \frac{1}{Fr^2} g_y \right. \\ & + \frac{1}{Re} \left( \frac{v_{i-1,j+\frac{1}{2},k} - 2v_{i,j+\frac{1}{2},k} + v_{i+1,j+\frac{1}{2},k}}{\delta x^2} + \frac{v_{i,j-\frac{1}{2},k} - 2v_{i,j+\frac{1}{2},k} + v_{i,j+\frac{3}{2},k}}{\delta y^2} \right. \\ & \left. \left. + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2},k-1} - 2v_{i,j+\frac{1}{2},k} + v_{i,j+\frac{1}{2},k+1}}{\delta z^2} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} \tilde{w}_{i,j,k+\frac{1}{2}} = & w_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \delta t \left[ CONV(w)_{i,j,k+\frac{1}{2}} + \frac{\tilde{p}_{i,j,k+1} - \tilde{p}_{i,j,k}}{\delta z} + \frac{1}{Fr^2} g_z \right. \\ & \left. + \frac{1}{Re} \left( \frac{w_{i-1,j,k+\frac{1}{2}} - 2w_{i,j,k+\frac{1}{2}} + w_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}}{\delta x^2} + \frac{w_{i,j-1,k+\frac{1}{2}} - 2w_{i,j,k+\frac{1}{2}} + w_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}}{\delta y^2} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{w_{i,j,k-\frac{1}{2}} - 2w_{i,j,k+\frac{1}{2}} + w_{i,j,k+\frac{3}{2}}}{\delta z^2} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\psi_{i+1,j,k} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i-1,j,k}}{\delta x^2} + \frac{\psi_{i,j+1,k} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i,j-1,k}}{\delta y^2} \\ & + \frac{\psi_{i,j,k+1} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i,j,k-1}}{\delta z^2} = \frac{\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j,k} - \tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\delta x} \\ & + \frac{\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2},k} - \tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\delta y} + \frac{\tilde{w}_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \tilde{w}_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta z}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

em que  $\tilde{\mathbf{v}} = (\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w})$  e  $\tilde{p}$  são, respectivamente, um campo de velocidade tentativo, satisfazendo a equação de conservação de massa, e uma pressão qualquer.  $\psi$  é uma função potencial auxiliar e  $CONV(\phi) = \phi = u, v, w$ , corresponde aos termos não-lineares (convectivos), os quais são aproximados neste trabalho por técnicas “upwind”, apresentadas na seção seguinte.

## 3.4 Discretização dos Termos Convectivos

Nesta seção apresentam-se técnicas “upwind” para aproximar os termos convectivos de problemas envolvendo escoamento de fluidos. Descrevem-se duas abordagens: as restrições TVD e a formulação em variáveis normalizadas. Esquemas recentes para problemas estacionários e transientes são também apresentados.

### 3.4.1 Considerações Iniciais

Em dinâmica dos fluidos computacional a maneira pela qual as derivadas convectivas nas equações de conservação são aproximadas requer atenção especial, porque

esses termos são os responsáveis por muitos fenômenos complexos nos escoamentos e os principais causadores de dificuldades numéricas nas simulações. Por essas razões, nos últimos dez anos o estado da arte na modelagem numérica dessas não-linearidades, utilizando-se a metodologia de diferenças finitas ou volumes finitos, tem sido dominado principalmente pelos esquemas “upwind” de primeira ordem, tais como FOU (“First Order Upwind”), HYBRID e PLDS (“Power-Law Differencing Scheme”) [56].

Muito embora os esquemas “upwind” de primeira ordem imitem o método das características [23] e assegurem a estabilidade do esquema numérico, vários pesquisadores alertam para o fato da introdução de viscosidade numérica, intrínseca a esses esquemas. Via de regra, a viscosidade artificial adicional introduzida pelo processo de discretização é muito maior do que a viscosidade molecular do fluido, e, como consequência, o resultado numérico obtido pode estar associado à solução de um problema com características completamente diferentes do problema físico.

Os esquemas FOU, HYBRID e PLDS têm suas origens no comportamento do fluido em que convecção é o mecanismo predominante no transporte de propriedades físicas. Atualmente eles continuam, ainda, sendo utilizados para superar os problemas das oscilações não-físicas e/ou instabilidades numéricas associados aos métodos clássicos CD (“Central Difference”) e SOU (“Second Order Upwind”).

Com o objetivo de minimizar a introdução excessiva de viscosidade numérica e, ao mesmo tempo, derivar técnicas de alta ordem de consistência, diversos esquemas surgiram na década de setenta. Dentre os mais populares podemos destacar os algoritmos SUDS (“Skew-Upwind Differencing Schemes”) e QUICK (“Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics”). Entretanto, o mesmo que acontece com os esquemas CD e SOU, nas vizinhanças de regiões onde gradientes elevados aparecem, a natureza dispersiva desses esquemas pode induzir oscilações espúrias (“wiggles”) na solução, as quais são suficientes para causar instabilidade numérica e, em decorrência, deteriorar completamente a precisão do método numérico.

As dificuldades em superar oscilações/instabilidades na solução numérica levaram ao desenvolvimento de esquemas localmente limitados, e muitas tentativas foram feitas para encontrar um compromisso aceitável entre precisão, estabilidade e simplicidade de implementação. Hoje em dia, uma das metodologias mais bem aceitas em escoamentos incompressíveis proporciona a alta ordem do esquema QUICK e as boas propriedades de estabilidade do esquema FOU, resultando em esquemas incondicionalmente estáveis e de ordem de consistência razoável.

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

Sem considerar erros de ponto flutuante da máquina, os erros associados à modelagem dos termos convectivos em EDP de transporte são principalmente de dois tipos: i) erros de truncamento local, ou erros de consistência, que podem ser reduzidos por um simples refinamento da malha computacional; e ii) erros devidos às

oscilações espúrias (não-físicas), que não diminuem com o refinamento da malha e estão fortemente relacionados ao caráter hiperbólico das equações. Ambos os erros são observados no domínio físico de solução e devem ser interpretados do ponto de vista de propagação de ondas nos fluidos em movimento.

O erro de truncamento local em um esquema numérico está intimamente associado às aproximações por diferenças finitas dos termos convectivos e difusivos nas equações de transporte. No caso das equações de Navier-Stokes envolvendo números de Reynolds baixos, esses termos podem ser aproximados pelo esquema clássico CD sem maiores problemas, porque a viscosidade molecular do fluido domina as possíveis perturbações. Mas a números de Reynolds elevados, convecção domina, usualmente, a difusão, e a aplicação desse algoritmo pode gerar oscilações/instabilidades quando o número de Péclet ( $Pe$ ) exceder um determinado valor crítico. A restrição aceitável sobre  $Pe$  pode ser obtida se utilizarmos a equação modelo de Burgers discretizada por diferenças avançadas no tempo e diferenças centradas no espaço. Nesse caso particular, uma análise de estabilidade de von Neumann demonstra que  $Pe$  deve satisfazer

$$2\nu \leq Pe \leq 2/\nu,$$

em que  $\nu$  é o número de Courant definido por  $\nu = u\delta t/\delta x$ .

Como apresentado e bem discutido em vários livros clássicos da literatura, por exemplo [57], entre muitos outros, a difusão numérica se desenvolve devido à discretização imprecisa das derivadas convectivas contidas nas equações que transportam propriedades físicas. Ela é um fenômeno multidimensional e é função de alguns parâmetros, dos quais o mais importante é a orientação das linhas de corrente com a malha. O segundo parâmetro de importância é o próprio tamanho da malha utilizada. Assim, se um esquema de diferenças finitas é proposto de maneira que as linhas de corrente resultem orientadas com a malha, o método numérico estará, teoricamente, livre da difusão numérica. É possível criar um tal esquema utilizando-se a formulação lagrangeana. Nesse caso os pontos da malha transladam com velocidades locais removendo a difusão numérica.

A figura 3.3 ilustra os efeitos da difusão numérica na simulação de uma descontinuidade. Nessa figura, (a) mostra a solução exata, (b) representa uma solução numérica típica obtida por esquemas de primeira ordem, que são dissipativos, e como consequência “suavizam” gradientes, e (c) corresponde à solução numérica típica de esquemas de segunda ordem, os quais são dispersivos e, conseqüentemente, geram oscilações não-físicas na solução.

De modo geral, a análise numérica da difusão para o caso das equações de conservação é um problema extremamente difícil, em virtude da natureza não-linear das equações. Por esse motivo e para compreender as conseqüências do fenômeno, nós utilizamos um modelo linear bem simples na análise e extrapolamos essas idéias para as equações de conservação.

Consideremos o protótipo utilizado freqüentemente no estudo de métodos numéricos para as equações de transporte e que ilustra claramente a difusão numérica, ou seja, a EDP hiperbólica linear e unidimensional, descrevendo o transporte de

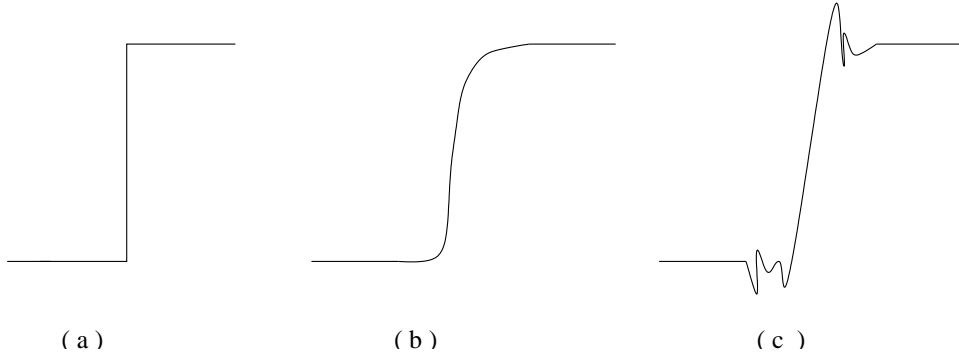


Figura 3.3: Efeitos da difusão numérica, mostrando: (a) A solução exata; (b) O erro de dissipação; (c) O erro de dispersão.

uma função escalar  $\phi$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + a \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0, \quad (3.11)$$

em que  $a > 0$  é a velocidade constante de convecção.

Ao se aproximar em (3.11) a derivada temporal pelo método de Euler explícito e a derivada espacial por diferenças atrasadas, obtém-se a equação de diferenças finitas

$$(\phi_i^{n+1} - \phi_i^n) + \nu(\phi_i^n - \phi_{i-1}^n) = 0, \quad (3.12)$$

em que  $\nu = a\delta t/\delta x$ , com  $\delta x$  e  $\delta t$  representando respectivamente os passos temporal e espacial, é o número de Courant. Utilizando-se a análise feita em [78], não é difícil derivar a equação que está sendo, de fato, resolvida, quando substituirmos a EDP original (3.11) pelo esquema numérico (3.12). O resultado final é a seguinte equação modificada [5]

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + a \frac{\partial \phi}{\partial x} = C_1 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - C_2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} + O(\delta x^3, \delta x^2 \delta t, \delta x \delta t^2, \delta t^3), \quad (3.13)$$

em que  $C_1$  e  $C_2$  são, respectivamente, os coeficientes de dissipação e dispersão numérica artificiais associados à equação modificada (3.13), e definidos por

$$C_1 = \frac{1}{2}u\delta x(1 - \nu), \quad C_2 = -\frac{1}{6}u\delta x^2(2\nu^2 - 3\nu + 1). \quad (3.14)$$

O lado direito da equação (3.13) corresponde à diferença entre a EDP original (3.11) e a equação de diferenças finitas (3.12), e é definido geralmente como erro de truncamento local associado. Por conseguinte, o termo de ordem mais baixa caracteriza a ordem de precisão local do método numérico. No caso do método (3.12) a ordem é  $O(\delta x, \delta t)$ .

Embora a equação original (3.11) não contenha agentes dissipativos e dispersivos em sua formulação, a equação modificada (3.13) exhibe termos dessas naturezas ( $C_1$ ,

$C_2$ ), os quais foram artificialmente introduzidos na equação de diferenças (3.12) durante o processo de discretização. Do ponto de vista matemático os termos  $C_1$  e  $C_2$  em (3.14) desempenham funções análogas àquelas do problema físico correspondente, isto é, quando derivadas de ordem par e ímpar são acrescentadas ao modelo (3.11).

Então da análise feita aqui fica claro que na equação modificada (3.13) se  $\nu \neq 1$ , as aproximações de primeira ordem empregadas para a criação do modelo discreto (3.12) introduzem na solução numérica erros de truncamento significativos. E são esses erros que produzem um aumento dos efeitos de difusão e promovem resultados irrealísticos.

No caso específico das equações de Navier-Stokes, a discretização de primeira ordem dos termos convectivos produz um erro de truncamento local na forma de um termo viscoso, que atua como uma dissipação numérica adicional e acumula-se diretamente no termo viscoso da equação (laplaciano). Nas situações em que o fluido possui viscosidade molecular muito pequena, ou número de Reynolds elevado, a viscosidade artificial introduzida pela discretização de primeira ordem pode dominar a viscosidade verdadeira, acarretando uma solução numérica muito mais suave do que a solução física.

Em contraste, a presença inerente de termos envolvendo derivadas espaciais de ordem ímpar no erro de truncamento local pode amplificar erros de dispersão em regiões onde os gradientes exorbitantes aparecem. Esses erros podem ocasionar instabilidades/oscilações na solução numérica. Com efeito, ondas de comprimento de onda pequeno nos fluidos em movimento são originadas da mudança súbita nos gradientes, e são esses agentes físicos propagando-se em velocidades diferentes por todo o campo de escoamento que excitam as oscilações. Exemplos representativos de algoritmos que apresentam erros consideráveis de dispersão são os esquemas CD e QUICK, quando  $Pe$  for maior que um determinado valor limite. Segundo Gaskell e Lau [25],  $Pe \approx 2$  para o esquema CD e  $Pe \approx 5$  para o esquema QUICK.

Com o objetivo de completar a discretização das equações de conservação apresentadas na seção 3.3, nesta e nas próximas seções discutimos as aproximações para as derivadas convectivas.

### 3.4.2 Um Breve Histórico de Esquemas “Upwind”

Como foi discutido na seção anterior, os esquemas clássicos de primeira ordem são incondicionalmente estáveis. Entretanto, eles introduzem uma grande quantidade de viscosidade artificial que suaviza a solução numérica. Esquemas de alta-ordem melhoram a precisão dos cálculos em detrimento da perda de limitação; isto significa que as soluções podem apresentar oscilações espúrias na presença de descontinuidades ou valores altos dos gradientes.

Muitos esforços têm sido dirigidos nos últimos anos com o objetivo de se construir esquemas de alta-ordem e limitados. Para problemas estacionários, o esquema SHARP (“Simple High-Accuracy Resolution Program”), proposto por Leonard [37] em 1988, é um exemplo de esquema que apresenta bom desempenho em problemas lineares. Outro bom exemplo é o esquema linear por partes SMART (“Sharp and

Monotonic Algorithm for Realistic Transport”) desenvolvido por Gaskell e Lau [25]. Ambos os esquemas SHARP e SMART podem atingir a precisão de ordem três do QUICK, mas em alguns problemas, como o tubo de choque (ver [44]) por exemplo, eles não oferecem soluções estáveis. Além do mais, testes numéricos realizados em [84] mostraram que tais esquemas necessitam de um tratamento especial (“underrelaxation”) em cada face do volume de controle, a fim de superar o comportamento oscilatório; para superar essa dificuldade, a que se aumentar a capacidade de armazenamento, especialmente em se tratando de problemas tridimensionais. Zhu [83] em 1990 propôs o esquema composto HLP (‘‘Hybrid Linear/Parabolic Approximation Scheme’’), o qual alcança segunda ordem de precisão.

Atualmente, dois conceitos muito importantes têm sido utilizados (com sucesso) na construção de esquemas de alta-ordem e estáveis: as restrições TVD (‘‘Total Variation Diminishing’’) [32]–[68] e a formulação NVD (‘‘Normalized Variabel Diagram’’) de Gaskell/Lau e Leonard [25]–[37]. As soluções numéricas obtidas por esquemas TVD (que satisfazem as restrições TVD) são bem resolvidas, livres de oscilação e convergentes. Usualmente, esquemas TVD são utilizados no contexto de escoamentos compressíveis, em que as variáveis convectadas sofrem mudanças bruscas nos gradientes e/ou ocorre o surgimento de descontinuidades na solução. Esquemas que satisfazem essa condição são sempre limitados, e bom exemplo é um esquema bem conhecido tipo MUSCL (‘‘Monotonic Upstream Scheme for Conservation Laws’’).

A abordagem em variáveis normalizadas NVD foi introduzida no desenvolvimento de esquemas para a solução de problemas de escoamentos estacionários e, em seguida, estendido por Leonard [38] para problemas transientes. Nesta formulação, a variação de sinal, de direção do fluxo e a da escala são normalizados.

Usando as ferramentas NVD e TVD, Song e seus colaboradores [67] propuseram o esquema WACEB (‘‘Weighted-Average Coefficient Ensuring Boundedness’’), que pode atingir terceira ordem e é limitado. Testes numéricos em geometrias específicas demonstraram que este esquema tem a habilidade do esquema QUICK em reduzir a difusão numérica sem introduzir oscilação na solução. Entretanto, ele possui problemas de convergência para alguns escoamentos viscoelásticos, como constatado por Alves et al. [2]. Para superar este problema Alves e seus colaboradores propuseram o esquema CUBISTA (‘‘Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for Treatment of Advection’’), cuja construção se baseia nas restrições TVD no número de Courant.

A seguir, descrevemos os esquemas discutidos acima.

### 3.4.3 Equação Modelo

Nesta seção consideramos a equação

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial f(\phi)}{\partial x} = 0, \quad (3.15)$$

onde  $f(\phi) = a\phi$  é a função fluxo. A solução aproximada desta equação é obtida pelo esquema numérico na forma conservativa

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \nu (\phi_{i+1/2} - \phi_{i-1/2}) \quad (3.16)$$

onde  $\phi_{i+1/2}$  é uma aproximação para a função fluxo na fronteira da célula  $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$  cujo centro é  $x_i$ . Denotamos o valor do fluxo numérico  $\phi_{i-1/2}$  por  $\phi_\ell$  e  $\phi_{i+1/2}$  por  $\phi_f$ . Estes pontos e os correspondentes valores de  $\phi$  são mostrados na Figura 3.4.

Utilizando esta notação os esquemas FOU e de Lax-Wendroff são dados, respecti-

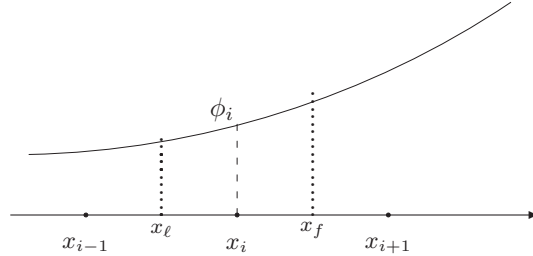


Figura 3.4: Estêncil de interpolação

vamente, pelas equações

$$\phi_f = \frac{\phi_{i+1} + \phi_i}{2} - \frac{1}{2} \text{sgn}(a)(\phi_{i+1} - \phi_i). \quad (3.17)$$

$$\phi_f = \phi_i + \frac{1}{2}(1 - \nu)(\phi_{i+1} - \phi_i). \quad (3.18)$$

Na Figura 3.5 mostramos os gráficos da solução numérica de (3.15), com uma dada condição inicial  $\phi_0(x)$  e de modo que as fronteiras não interfiram na solução numérica (ver [34]), usando os esquemas FOU e Lax-Wendroff. Observemos que, de fato, a solução é dissipativa para o esquema de primeira ordem, e para o esquema de segunda ordem ela apresenta oscilações. É fato que o esquema de Lax-Wendroff não é TVD [40], porém, conforme observado por Sweby [68], o fluxo associado a este esquema pode ser composto de um fluxo de primeira ordem mais um antidifusivo para se obter um esquema TVD.

### 3.4.4 Esquemas TVD e Variáveis Normalizadas

A solução numérica obtida usando um esquema limitado não deve ultrapassar os valores máximo e mínimo inerentemente determinados pelo processo físico. Se a solução numérica apresentar oscilações, então estas geralmente ocorrem em regiões onde os gradientes são mais acentuados. A limitação em um esquema numérico é imposta para prevenir que oscilações não-físicas apareçam em regiões de gradientes pronunciados. Esta propriedade é de suma importância para se obter soluções numéricas fisicamente aceitáveis.

Um dos resultados mais significativos nessa direção é dado pelas restrições TVD. Considera-se conhecida uma seqüência de aproximações da solução exata  $\phi$ . Dize-

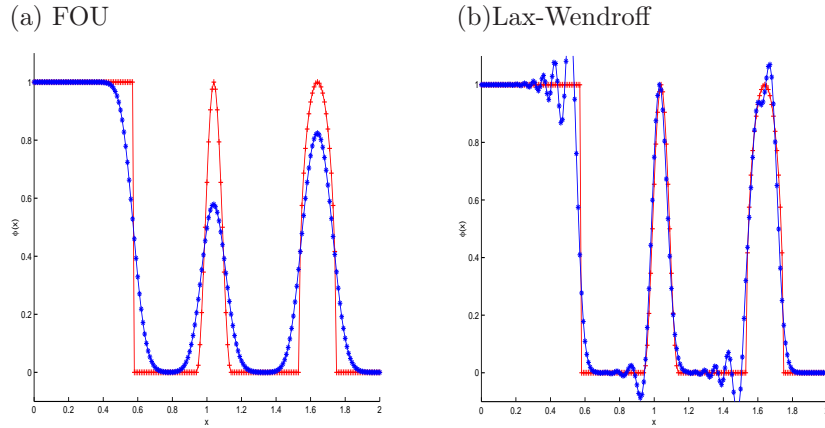


Figura 3.5: Soluções exata (linha vermelha) e numéricas usando os esquemas FOU e Lax-Wendroff

mos que o esquema numérico (3.16) é TVD se

$$\sum_i |\phi_{i+1}^{n+1} - \phi_i^{n+1}| \leq \sum_i |\phi_{i+1}^n - \phi_i^n|.$$

A propriedade TVD garante que oscilações não físicas sejam removidas da solução numérica da lei de conservação. O esquema de Lax-Wendroff, conforme mencionado, não é TVD. Podemos modificá-lo a fim de torná-lo um esquema limitado. O fluxo passa a ser então escrito como

$$\phi_f = \phi_i + \frac{1}{2}(1 - \nu) \varphi_{i+1/2}(\phi_{i+1} - \phi_i), \quad (3.19)$$

em que o limitador  $\varphi_{i+1/2}$  é uma função da razão de dois gradientes consecutivos

$$\varphi_{i+1/2} = \varphi(r_{i+1/2}), \text{ com } r_{i+1/2} = \begin{cases} \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i+1} - \phi_i}, & \text{se } a > 0 \\ \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\phi_{i+1} - \phi_i}, & \text{se } a < 0. \end{cases} \quad (3.20)$$

Com estas considerações em mente e usando um critério de Harten [31], que fornece condições suficientes para que um esquema seja TVD, Sweby deduziu condições suficientes para que o esquema (3.16) com fluxo numérico (3.19) seja TVD.



**Teorema 3.1** *Suponha que a função  $\varphi$  satisfaça a equação*

$$\begin{cases} \varphi(r) = 0, & \text{se } r \leq 0 \\ 0 \leq \varphi(r) \leq \min\{2, 2r\}, & \text{se } r > 0, \end{cases} \quad (3.21)$$

então o esquema (3.16) com fluxo numérico (3.19) é TVD sob a condição CFL (Courant-Friedrichs-Lewy)  $|\nu| \leq 1$ .

A condição (3.21) diz que o gráfico de  $\varphi$  deve estar contido na região hachurada da Figura 3.6 (região TVD).

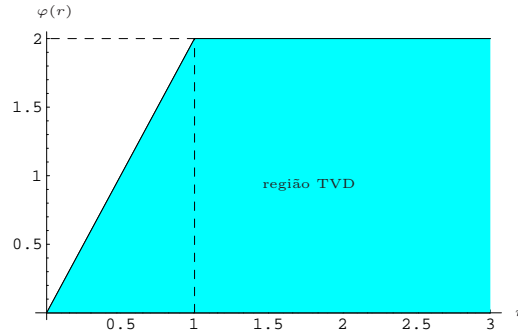


Figura 3.6: Diagrama de Sweby

Outro conceito bastante útil é o de variáveis normalizadas introduzido por Gaskell/Lau [25] e Leonard [37], [38]. O valor na face  $\phi_f$  pode ser determinado por dois nós que dependem da direção do fluxo na face  $f$ , isto é, do sinal de  $a$ , ou seja,  $\phi_f = \phi_f(\phi_D^n, \phi_U^n, \phi_R^n, \nu)$ . As letras  $D$ ,  $U$  and  $R$  nesta equação indicam, respectivamente, as posições “downstream”, “upstream” e “remote-upstream”. O valor de  $\phi$  em  $x_i = U$  é denotado por  $\phi_U$ . A localização dos valores  $\phi_f$ ,  $\phi_D$ ,  $\phi_U$  e  $\phi_R$  está ilustrada na Figura 3.7.

Variações no sinal, na direção/sentido do escoamento e na escala em termos da variável original podem ser normalizadas como

$$\hat{\phi}(x, t) = \frac{\phi(x, t) - \phi_R^n}{\phi_D^n - \phi_R^n}. \quad (3.22)$$

o que implica

$$\hat{\phi}_R^n = 0, \quad \hat{\phi}_D^n = 1.$$

e

$$\hat{\phi}_f = \phi_f(\hat{\phi}_U^n, \nu). \quad (3.23)$$

No caso em que  $a > 0$ , representamos na Figura 3.8 os valores de  $\phi$  em termos da variável original e da variável normalizada.

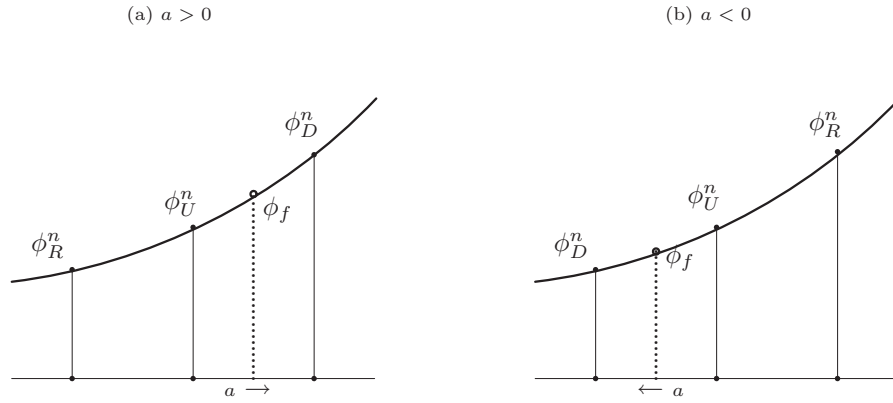


Figura 3.7: Localização de  $\phi_R$ ,  $\phi_U$ ,  $\phi_D$  e  $\phi_f$

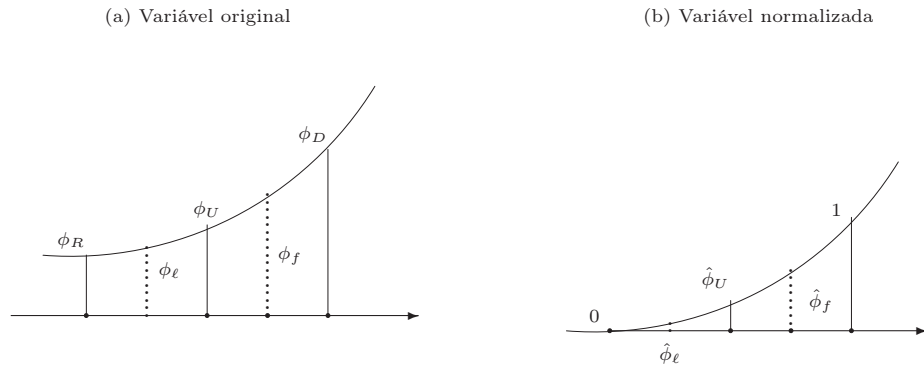


Figura 3.8: Representação de  $\phi$  em termos da variável original e da variável normalizada

### 3.4.5 Relação entre TVD e Variáveis Normalizadas

Gaskell e Lau [25] propuseram o critério CBC (“Convection Boundedness Criterion”) para que um esquema convectivo possua limitação. Este critério é utilizado principalmente em escoamentos incompressíveis. Ou seja, uma função contínua ou contínua por partes,  $\hat{\phi}_f = \hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U^n)$ , possui a característica de tornar o esquema convectivo limitado se forem satisfeitas as condições:

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_f &= \hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U) = \hat{\phi}_U \text{ para } \hat{\phi}_U \leq 0, \\ \hat{\phi}_f &= \hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U) = \hat{\phi}_U \text{ para } \hat{\phi}_U \geq 1, \\ \hat{\phi}_U &\leq \hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U) \leq 1 \text{ para } 0 < \hat{\phi}_U < 1. \end{aligned} \quad (3.24)$$

A região definida pelas equações (3.24) é mostrada na Figura 3.9. Eles afirmaram

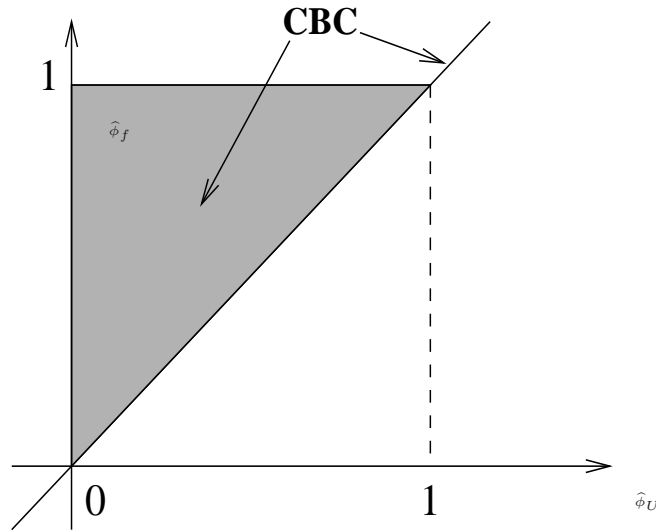


Figura 3.9: região CBC no plano  $\hat{\phi}_f - \hat{\phi}_U$

que o gráfico que define o esquema limitado  $\hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U)$  deve estar localizado dentro desta região e reciprocamente. Entretanto, recentemente, Ping-Li et al. em [58] baseados na formulação em variáveis normalizadas revelaram a fragilidade deste critério por meio de exemplos numéricos. O critério CBC garante apenas limitação sem nenhuma consideração quanto a suavidade. Para superar esta dificuldade Ping-Li et al. propuseram uma nova região ECBC (“Extended” CBC) que garante além de limitação, alta-ordem de precisão. No esquema proposto a função que define o

fluxo  $\hat{\phi}_f = \hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U^n)$  deve satisfazer as seguintes condições

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_U \in (-\infty, 0), & \quad \hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U) \in [\hat{\phi}_U, 0.5\hat{\phi}_U], \\ \hat{\phi}_U \in [0, 0.5), & \quad \hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U) \in [1.5\hat{\phi}_U, 0.5(1 + \hat{\phi}_U)], \\ \hat{\phi}_U \in [0.5, 2/3), & \quad \hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U) \in [0.5(1 + \hat{\phi}_U), 1.5\hat{\phi}_U], \\ \hat{\phi}_U \in [2/3, 1], & \quad \hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U) \in (0.5(1 + \hat{\phi}_U), 1], \\ \hat{\phi}_U \in (1, +\infty), & \quad \hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U) \in (0.5(1 + \hat{\phi}_U), \hat{\phi}_U]. \end{aligned}$$

A região correspondente no diagrama em variáveis normalizadas é mostrado na Figura 3.10. Para que o esquema seja limitado e de alta-ordem, a função que define

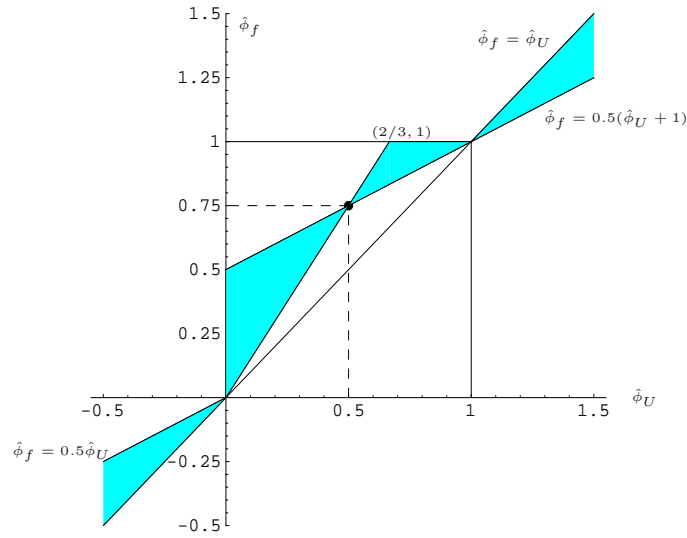


Figura 3.10: região ECBC no plano  $\hat{\phi}_f - \hat{\phi}_U$

o fluxo deve pertencer a região hachurada da Figura 3.10 e vice-versa.

O critério CBC e o critério ECBC não funcionam bem para qualquer tipo de problema, conforme exposto por Alves et. al em [2]. Acreditamos, então, ser mais interessante e útil trabalhar com esquemas que sejam TVD mesmo para escoamentos incompressíveis, pois por menor que seja a evolução temporal de uma solução, ela ainda evolui no tempo para poder alcançar estabilidade. Assim, concentramos nossa atenção na relação entre o diagrama de Sweby e o diagrama em variáveis normalizadas.

As equações (3.19) e (3.20) em variáveis normalizadas, apresentadas em [38] e [44] respectivamente, são então dadas por

$$\hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U + \frac{1}{2}(1 - \nu) \varphi_{i+1/2}(1 - \hat{\phi}_U). \quad (3.25)$$

$$r_{i+1/2} = \frac{\hat{\phi}_U}{1 - \hat{\phi}_U}. \quad (3.26)$$

A partir de (3.21) e (3.26), a relação entre  $\hat{\phi}_f$  e  $\hat{\phi}_U$  que satisfaz as restrições TVD pode ser expressa por

$$\begin{cases} \hat{\phi}_U \leq \hat{\phi}_f \leq \min\{1 - \nu + \nu\hat{\phi}_U, (2 - \nu)\hat{\phi}_U\}, & \text{for } 0 < \hat{\phi}_U < 1 \\ \hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U, & \text{for } \hat{\phi}_U \leq 0 \text{ or } \hat{\phi}_U \geq 1 \end{cases} \quad (3.27)$$

Esta região é mostrada na Figura 3.11(a) para  $\nu = 0.25$ .

Para cada valor de  $\nu \in [0, 1]$ , a região correspondente a este valor de  $\nu$  deve estar contida na região TVD global apresentada na Figura 3.11(b), que é definida pelas desigualdades

$$\begin{cases} \hat{\phi}_U \leq \hat{\phi}_f \leq \min\{1, 2\hat{\phi}_U\}, & \text{para } 0 < \hat{\phi}_U < 1 \\ \hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U, & \text{para } \hat{\phi}_U \leq 0 \text{ ou } \hat{\phi}_U \geq 1 \end{cases}$$

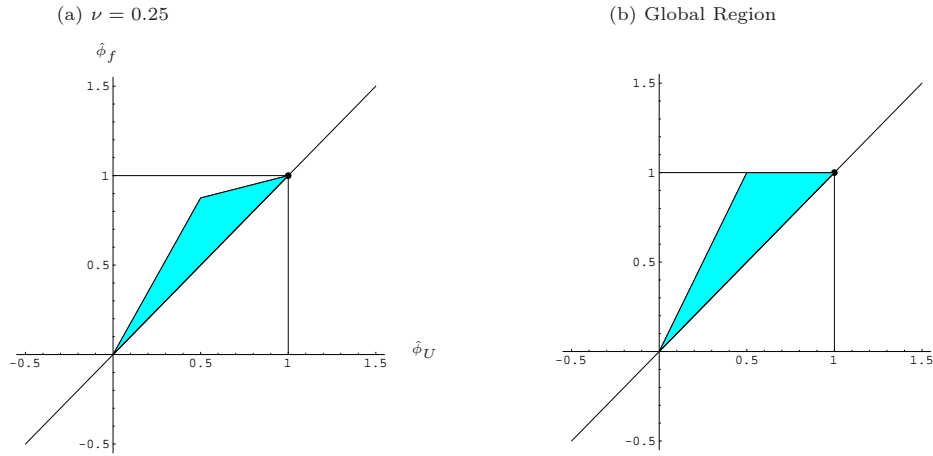


Figura 3.11: Região TVD em variáveis normalizadas

Apresentamos a seguir alguns esquemas numéricos interessantes para ambos os casos estacionário e transiente.

### 3.4.6 Caso Estacionário

Neste caso,  $\hat{\phi}_f$  depende somente de  $\hat{\phi}_U$ . Na Tabela 3.1 apresentamos as expressões de  $\hat{\phi}_f$  e  $\hat{\phi}_f$  para esquemas bem conhecidos. As Figuras 3.12 e 3.13 mostram as linhas que definem os fluxos numéricos de esquemas em variáveis normalizadas.

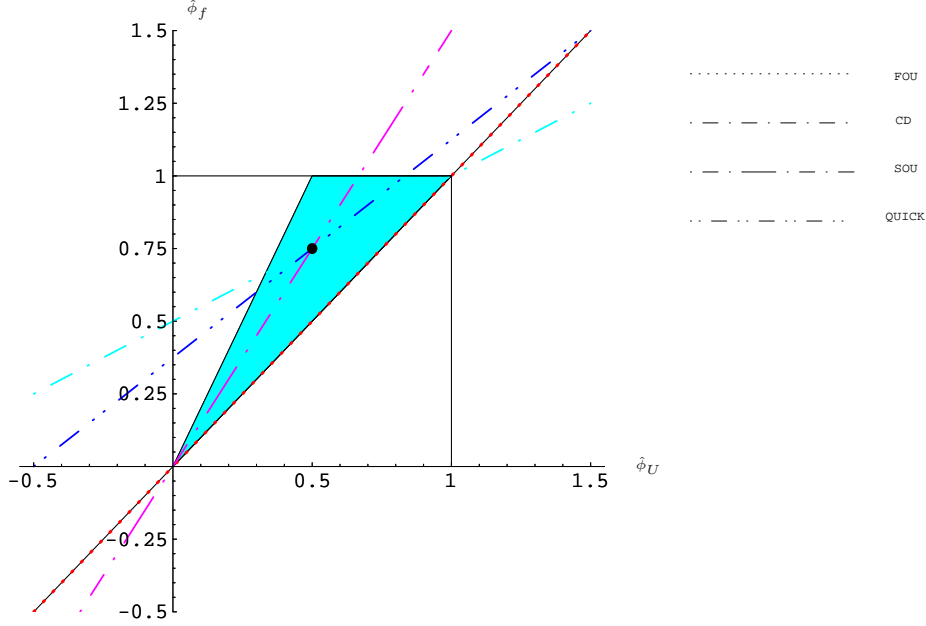


Figura 3.12: Exemplos de esquemas em variáveis normalizadas

Note que para todos os esquemas das Figuras 3.12 e 3.13, exceto o esquema FOU, as gráficos que os definem passam pelo ponto  $Q(0.5, 0.75)$ . Isso ocorre pois, conforme Leonard [37], passar por este ponto  $Q$  é uma condição necessária e suficiente para alcançar precisão de ordem dois.

Um esquema recente proposto Song et al. [67] (veja também [43]) para a resolução de problemas estacionários é o esquema WACEB, que é limitado e pode alcançar a terceira-ordem de precisão do QUICK. O fluxo numérico, em variáveis normalizadas, desse esquema é dado por

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} 2\hat{\phi}_U, & 0 < \hat{\phi}_U < 0.3, \\ \frac{3}{4}\hat{\phi}_U + \frac{3}{8}, & 0.3 \leq \hat{\phi}_U \leq \frac{5}{6}, \\ 1, & \frac{5}{6} < \hat{\phi}_U < 1, \\ \hat{\phi}_U, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.28)$$

Scheme	$\phi_f$	$\hat{\phi}_f$
FOU	$\phi_U$	$\hat{\phi}_U$
CD	$\frac{1}{2}(\phi_D + \phi_U)$	$\frac{3}{4} + \frac{1}{2}(\hat{\phi}_U - \frac{1}{2})$
SOU	$\frac{3}{2}\phi_U - \frac{1}{2}\phi_R$	$\frac{3}{2}\hat{\phi}_U$
QUICK	$\frac{1}{8}(3\phi_D + 6\phi_U - \phi_R)$	$\frac{3}{4}\hat{\phi}_U + \frac{3}{8}$
SMART	$\begin{cases} \phi_U, \\ 3\phi_U - 2\phi_R, \\ \frac{1}{8}(3\phi_D + 6\phi_U - \phi_R), \\ \phi_D. \end{cases}$	$\begin{cases} \hat{\phi}_U & \text{if } \hat{\phi}_U \notin [0, 1], \\ 3\hat{\phi}_U & \text{if } \hat{\phi}_U \in [0, 1/6), \\ \frac{3}{4}\hat{\phi}_U + \frac{3}{8} & \text{if } \hat{\phi}_U \in [1/6, 5/6), \\ 1 & \text{if } \hat{\phi}_U \in [5/6, 1). \end{cases}$
VONOS	$\begin{cases} \phi_U, \\ 10\phi_U - 9\phi_R, \\ \frac{1}{8}(3\phi_D + 6\phi_U - \phi_R), \\ 1, 5\phi_U - 0.5\phi_R, \\ \phi_D. \end{cases}$	$\begin{cases} \hat{\phi}_U & \text{if } \hat{\phi}_U \notin [0, 1], \\ 10\hat{\phi}_U & \text{if } \hat{\phi}_U \in [0, 3/74), \\ \frac{3}{8}(1 + 2\hat{\phi}_U) & \text{if } \hat{\phi}_U \in [3/74, 1/2), \\ 1, 5\hat{\phi}_U & \text{if } \hat{\phi}_U \in [1/2, 2/3), \\ 1 & \text{if } \hat{\phi}_U \in [2/3, 1]. \end{cases}$
HLP	$\begin{cases} \phi_U \\ \phi_U + (\phi_D - \phi_U)\hat{\phi}_U. \end{cases}$	$\begin{cases} \hat{\phi}_U & \text{if } \hat{\phi}_U \notin [0, 1], \\ (2 - \hat{\phi}_U)\hat{\phi}_U & \text{if } \hat{\phi}_U \in [0, 1]. \end{cases}$
SHARP	$A \pm \sqrt{(\phi_D - A)(\phi_R - A)}$ where $A = \frac{\phi_D\phi_R - \phi_U^2}{\phi_D - 2\phi_U + \phi_R}$	$\begin{cases} \frac{[\hat{\phi}_U(1-\hat{\phi}_U)^3]^{1/2} - \hat{\phi}_U^2}{1-2\hat{\phi}_U} & \text{if } \hat{\phi}_U \in [0, 0.35] \cup [0.65, 1], \\ \frac{3}{4}\hat{\phi}_U + \frac{3}{8} & \text{if } \hat{\phi}_U \in [0.35, 0.65] \cup (-\infty, -1] \cup [1.5, +\infty), \\ \frac{3}{8}\hat{\phi}_U & \text{if } \hat{\phi}_U \in [-1, 0], \\ \hat{\phi}_U & \text{if } \hat{\phi}_U \in [1, 1.5]. \end{cases}$

Tabela 3.1: Expressão de  $\phi_f$  e de  $\hat{\phi}_f$

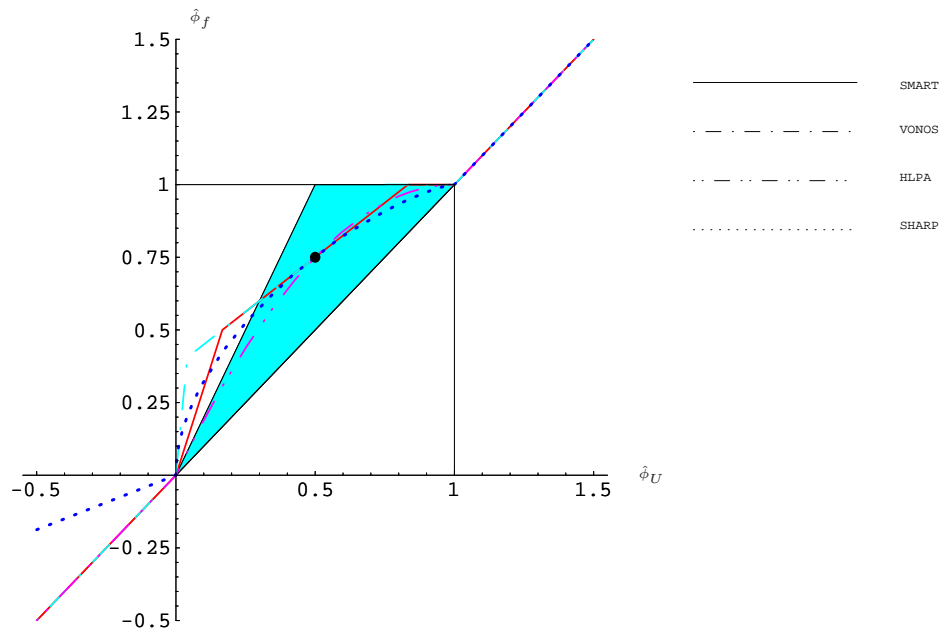


Figura 3.13: Exemplos de esquemas em variáveis normalizadas

e o seu gráfico é mostrado na Figura 3.14.

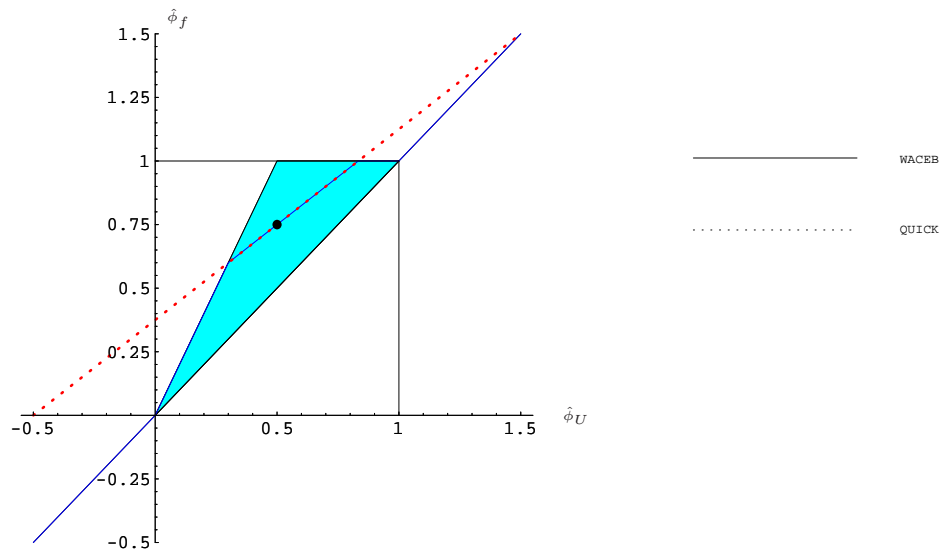


Figura 3.14: QUICK and WACEB schemes



### 3.4.7 Caso Transiente

Exemplos de modelos desenvolvidos para problemas transientes em condições severas de convecção são o próprio FOU e o esquema de Lax-Wendroff. Um outro esquema desenvolvido recentemente é o esquema CUBISTA (“Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for Treatment of Advection”). Este esquema foi desenvolvido por Alves et al. em [2], e sua formulação está baseada nas restrições TVD e no número de Courant. O esquema é formalmente de ordem três em que a solução é suave em quase todo o domínio. Ele pode ser visto como uma generalização do WACEB, mas muito superior conforme demonstrado por Alves et al. O fluxo numérico em variáveis normalizadas do CUBISTA é dado por

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \frac{7}{4}\hat{\phi}_U, & 0 < \hat{\phi}_U < \frac{3}{8} \\ \frac{3}{4}\hat{\phi}_U + \frac{3}{8}, & \frac{3}{8} \leq \hat{\phi}_U \leq \frac{3}{4} \\ \frac{1}{4}\hat{\phi}_U + \frac{3}{4}, & \frac{3}{4} < \hat{\phi}_U < 1 \\ \hat{\phi}_U, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.29)$$

A Figura 3.15 mostra a característica que define o esquema CUBISTA.

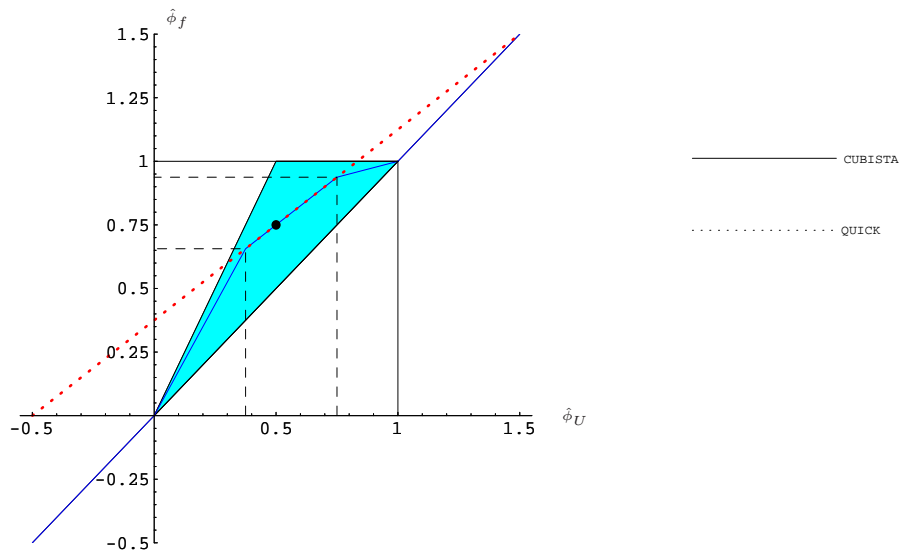


Figura 3.15: Esquemas QUICK e CUBISTA

## Capítulo 4

# Exemplos e Aplicações

Finalizamos estas notas apresentando algumas simulações numéricas de problemas de escoamentos incompressíveis transientes (na sua maioria tridimensionais) utilizando-se da metodologia GENSMAC [73] e o ambiente de simulação Freeflow [10], ambos desenvolvidos e atualizados no LCAD (Laboratório de Computação de Alto Desempenho) do ICMC (Instituto de Ciência Matemáticas e de Computação) da Universidade de São Paulo em São Carlos, SP.

### 4.1 Salto Hidráulico Circular

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

Escoamentos radiais em camadas finas formam uma classe especial de películas. Esses tipos de películas podem ser observados quando jatos circulares de fluido incidem sobre superfícies sólidas planas e impermeáveis. Nessas condições, os jatos espalham radialmente pelas superfícies a partir do ponto de estagnação (velocidade

nula). Os efeitos de inércia, gravidade, viscosidade e tensão superficial governam tais problemas. Segundo a literatura especializada, durante o espalhamento a espessura de fluido decresce e, então, a uma certa distância cresce repentinamente sob a ação de um gradiente de pressão adverso. Esse gradiente de pressão pode causar separação da película em alguma distância radial, levando à formação de um fenômeno interessante conhecido como ressalto hidráulico circular. As visualizações, experimental (a) e das simulações numéricas (b)-(e), mostradas na figura 4.1 ilustram muito bem esse tipo de fenômeno. Em particular, a figura 4.1 (d) mostra o fluido espalhando nas direções radiais sobre o contorno rígido e fluindo em direção ao contorno de saída posicionado sob o contorno rígido. Note ainda, nesta mesma figura, a presença do obstáculo sobre o contorno de saída. Isto foi feito para antecipar o salto hidráulico.

## 4.2 Experimentos de Taylor

Comparações qualitativas das simulações numéricas com os experimentos de Taylor [69] são apresentadas nesta seção. O problema de escoamento em questão é o de um jato incidindo perpendicularmente em um corpo de mesmo fluido em repouso. A figura 4.2 (à esquerda simulação numérica com simetria radial e à direita o experimento) ilustra duas comparações: uma para número de Reynolds 10 (figuras (a) e (b)) e outra para Reynolds 200 (figuras (c) e (d)). Em particular, note-se as estruturas toroidais na comparação (c) e (d). Observa-se também a partir dessas figuras que há uma concordância bastante satisfatória entre as simulações numéricas e os experimentos.

## 4.3 Jatos Oscilantes

Instabilidades físicas associadas aos jatos de fluido a baixos valores do número de Reynolds podem ser observadas facilmente no cotidiano. Por exemplo, durante o banho diário, o jato de shampoo caindo na mão, ou ainda o mel de abelha escorrendo de uma colher. Esses problemas de escoamento tornam-se instáveis quando o injetor situa-se a uma certa distância de uma superfície sólida (ver, por exemplo, [14]). Sob certas condições específicas, como foi mostrado experimentalmente por Cruickshank [14] e verificado numericamente por Tomé et al. [73], alguns fluidos com alto coeficiente de viscosidade afinam devido ao efeito da tensão superficial e à presença do campo gravitacional. Ao aderirem a superfícies rígidas, esses fluidos formam dobras ou espirais, e, por essa razão, são denominados freqüentemente de jatos oscilantes. Taylor [70] foi talvez um dos pioneiros em estudar tal fenômeno e, recentemente, o assunto não tem merecido muito destaque na literatura.

Sem levar em conta os efeitos da tensão superficial e respeitando-se as condições propostas por Cruickshank, na presente seção apresentam-se duas simulações para mostrar que o esquema de alta ordem VONOS (“Variable-Order Non-Oscillatory Scheme”) [76], embora proposto para simular problemas estacionários a altos valores do número de Reynolds, pode ser utilizado também, com sucesso, na simulação

de escoamentos a baixos números de Reynolds. As figuras 4.3 e 4.4 mostram respectivamente simulações numéricas tridimensionais não estacionárias de jatos cilíndrico e planar sobre uma superfície impermeável. Em particular, a figura 4.3 (a) mostra um experimento para o caso cilíndrico e a figura 4.3 (b) a visão frontal da simulação numérica. Observa-se neste caso a grande semelhança entre o experimento e a simulação numérica.

## 4.4 Escoamento numa Expansão Brusca

Escoamentos em expansões bruscas (em inglês, “backward-facing step”) desempenham papel fundamental na validação de procedimentos numéricos. Nesses problemas, o comprimento da recirculação na região do “step” é, usualmente, o parâmetro mais importante para comparação. Isto porque, além de outras propriedades, há na literatura uma vasta variedade de dados experimentais/numéricos informando o valor desse comprimento. A figura 4.5 (a), (b) e (c) mostra, respectivamente, os campos de velocidade na direção  $x$  obtidos com os esquemas de convecção VONOS, WACEB e CUBISTA. A figura 4.5 (d) ilustra o campo de pressão da simulação utilizando o esquema CUBISTA. Nestas simulações o número de Reynolds utilizado foi  $Re = 800$ . Observa-se neste caso a presença de uma segunda zona de recirculação no topo do canal. E isto está bastante consistente com a literatura.

## 4.5 Impacto de uma Gota num Fluido em Repouso

Além de ser um fenômeno interessante e muito bonito, o impacto de uma porção de líquido é de importância prática em muitos processos naturais e industriais. Por exemplo, o impacto de uma gota de chuva sobre uma poça aumenta a erosão do solo e produz gotas secundárias que atuam como carregadores de esporos e bactérias. As figuras 4.6 e 4.7 mostram, respectivamente, as visualizações tridimensionais das soluções numéricas do problema do “splashing” nos domínios tipo circular e tipo cubo. É bom observar que, diferentemente da simulação apresentada na figura 4.6, na simulação da figura 4.7 não houve nenhuma hipótese de simetria.

## 4.6 Preenchimento de Containers

A injeção de moldes é um dos processos mais importantes envolvendo fluidos não newtonianos. Durante o preenchimento do molde vários fenômenos peculiares acontecem, especialmente próximo a frente do escoamento que é uma superfície livre no problema. Há várias aplicações desse processo, entre elas podemos citar a injeção de pára-choques e painéis de automóveis, entre outras. A figura 4.8 ilustra em três dimensões a processo de preenchimento de um molde trapezoidal por um fluido newtoniano.

## 4.7 Jato Turbulento num Fluido em Repouso

As Figuras 4.9, 4.10 e 4.11 mostram, respectivamente, os campos de pressão e das componentes  $u$  e  $v$  da velocidade no intervalo de tempo  $[0,18;5,28]$  segundos para o problema de um jato plano turbulento num fluido em repouso. O modelo clássico de turbulência  $\kappa - \varepsilon$  foi utilizado nesta simulação (ver, para mais detalhes, [21]). Pode-se observar a partir dessas figuras que inicialmente há o desenvolvimento de uma camada limite entre o jato penetrante e o fluido estacionário e, subsequente, a formação de um par de vórtices principal com orientações contrárias. Este par de vórtices migra, então, em direção à superfície livre do fluido em repouso e, aproximadamente, no tempo  $t = 1,68$  s sua trajetória torna-se paralela à superfície livre, causando a formação de fortes ondulações na mesma. Ao mesmo tempo, na região próxima a entrada do jato, outras estruturas sofrem interações causando a formação de estruturas maiores. No tempo final de simulação ( $t = 5,28$  s), nota-se a presença de estruturas turbilhonares por todo o campo do escoamento, caracterizando a turbulência no fluido.

Essa simulação fornece resultados consistentes com simulações similares encontradas na literatura (ver, por exemplo, [77]), e acredita-se que elas podem ser consideradas como realísticas. É importante observar que o escoamento obtido nesta simulação é um escoamento transiente apresentando pequenas e grandes estruturas turbilhonares, cujos efeitos sobre a superfície livre são intensos. Muito embora esta simulação seja feita em duas dimensões, pode-se considerar que ela assemelha-se fortemente à uma simulação LES (“Large-Eddy Simulation”), uma modelagem da turbulência para as grandes estruturas turbilhonares.

## 4.8 Escoamento num Campo Magnético

Atualmente, os avanços científicos e tecnológicos em aparelhos óticos, circuitos de microondas, antenas, radares de aeronaves e telecomunicações em navios despertaram o emprego de métodos numéricos inovadores na resolução das equações de Maxwell, as quais modelam a propagação e o espalhamento de ondas eletromagnéticas (ver a modelagem, por exemplo, em [51]). No últimos dez anos, os problemas que envolvem o acoplamento de escoamento de fluidos e ondas eletromagnéticas têm sido estudados utilizando-se a tecnologia MHD (“Magnetohydrodynamic”) (ver, por exemplo, [42] ou [53]). Há várias aplicações dessa tecnologia: a qualidade do aço tem sido melhorada em função de pesquisas nessa área; pode-se remover por meio de campos eletromagnéticos as inclusões não metálicas e bolhas de gás nos interstícios de metais. As figuras 4.12 e 4.13 apresentam, respectivamente, os resultados das simulações numéricas do escoamento turbulentos de um metal líquido com superfície livre e na presença de um e/ou dois magnetos com campos magnéticos alternantes. Nota-se nesse problema a forte influência do campo magnético no escoamento.

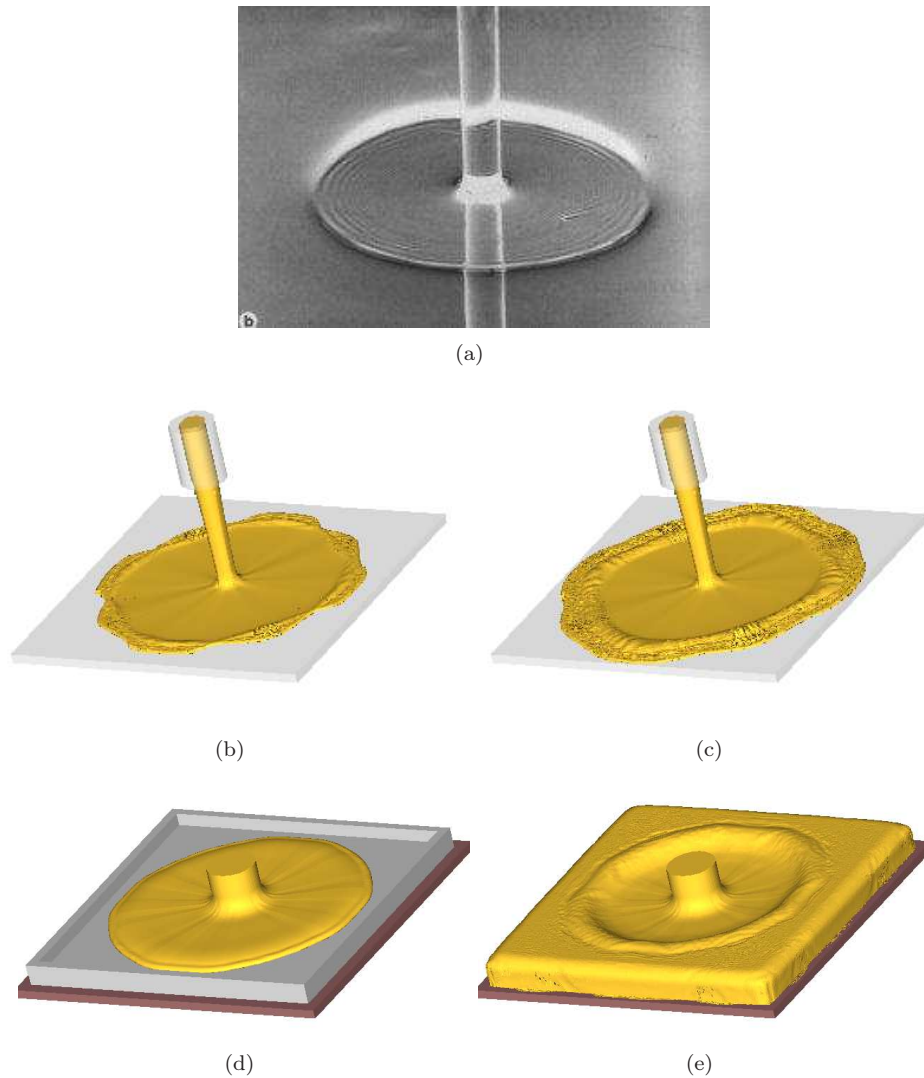


Figura 4.1: Visualizações em três dimensões do ressalto hidráulico circular. (a) Experimento; (b) Simulação numérica; (c) Simulação numérica num tempo posterior ao de (b); (d) Simulação numérica mostrando as superfícies sólidas e o contorno de saída; (e) Simulação numérica num tempo posterior ao de (d).

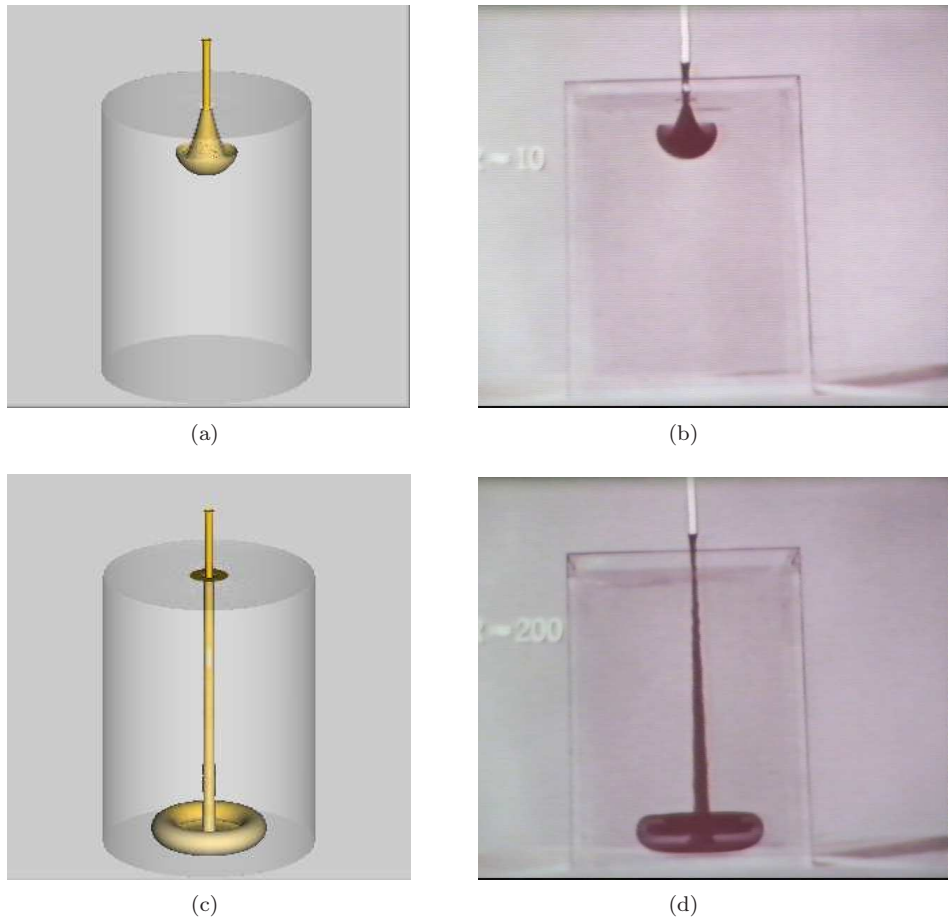


Figura 4.2: Visualizações (experimental e simulação numérica) em três dimensões dos experimentos de Taylor utilizando-se números de Reynolds 10 e 200. (a) Simulação numérica utilizando-se Reynolds 10; (b) Experimento de Taylor com Reynolds 10; (c) Simulação numérica utilizando-se Reynolds 20; (d) Experimento de Taylor com Reynolds 200.

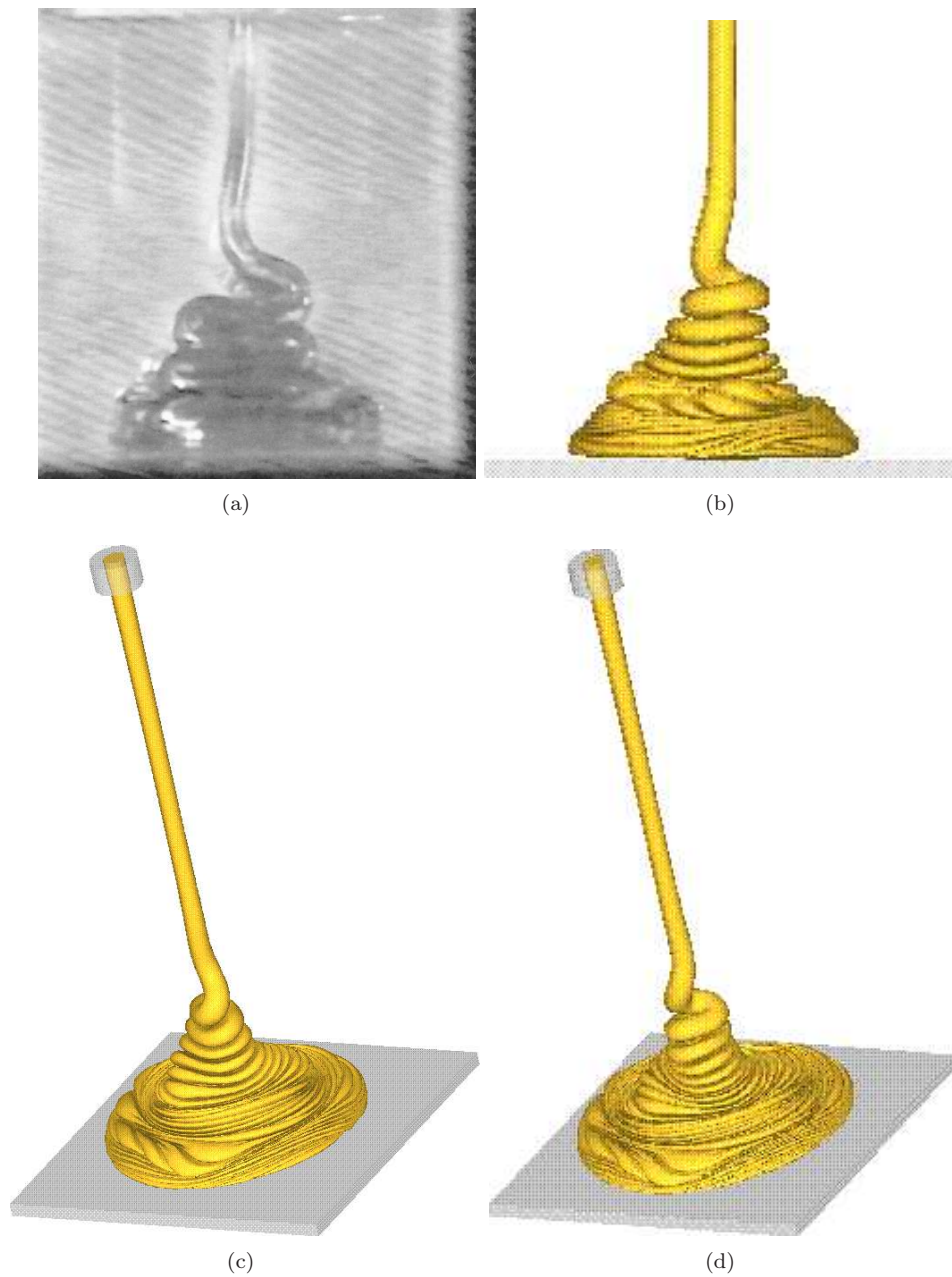


Figura 4.3: Visualizações do experimento e da solução numérica tridimensional de um jato oscilante cilíndrico sobre uma superfície impermeável. (a) Visualização do experimento; (b) Visão frontal da simulação numérica tridimensional; (c) Visão tridimensional da simulação numérica; (d) Visão tridimensional da simulação numérica num tempo posterior ao de (c).



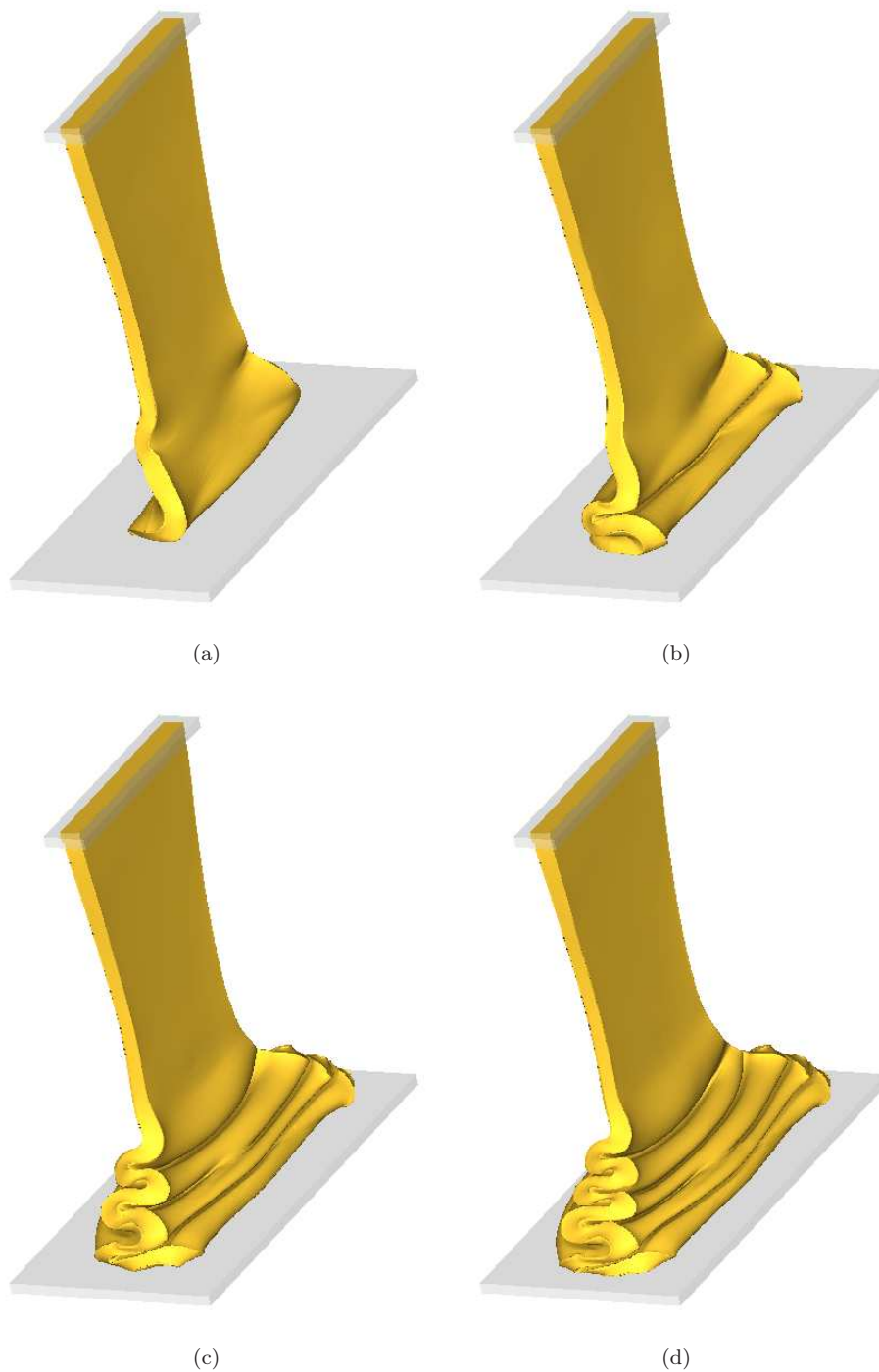


Figura 4.4: Visualizações da solução numérica tridimensional de um jato planar oscilante sobre uma superfície impermeável. (a) Visão tridimensional da simulação numérica tridimensional; (b) Visão tridimensional da simulação numérica num tempo posterior ao de (a); (c) Visão tridimensional da simulação numérica num tempo posterior ao de (b); (d) Visão tridimensional da simulação numérica num tempo posterior ao de (c).

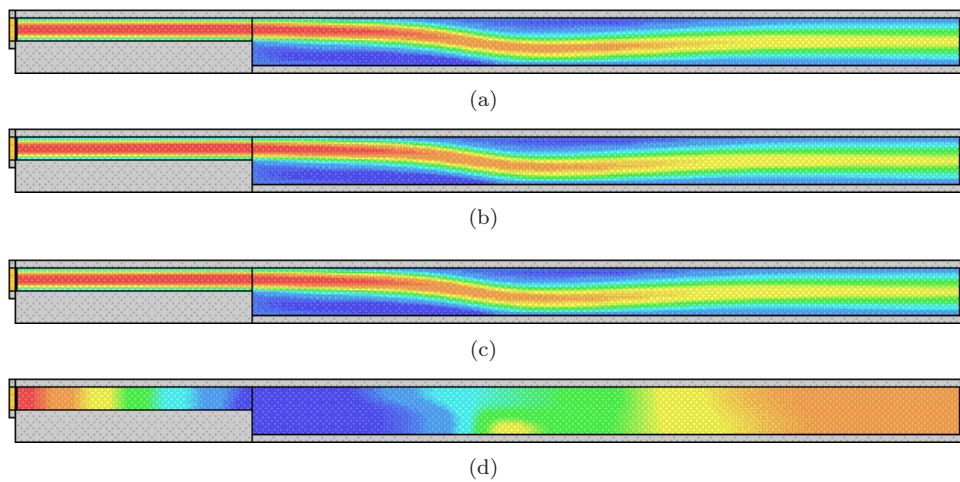


Figura 4.5: Visualizações da solução numérica bidimensional do problema do escoamento de fluido sobre um degrau. (a) Simulação numérica utilizando-se o esquema de convecção VONOS; (b) Simulação numérica utilizando-se o esquema de convecção WACEB; (c) Simulação numérica utilizando-se o esquema de convecção CUBISTA; (d) Visualização do campo de pressão no domínio utilizando-se o esquema CUBISTA.

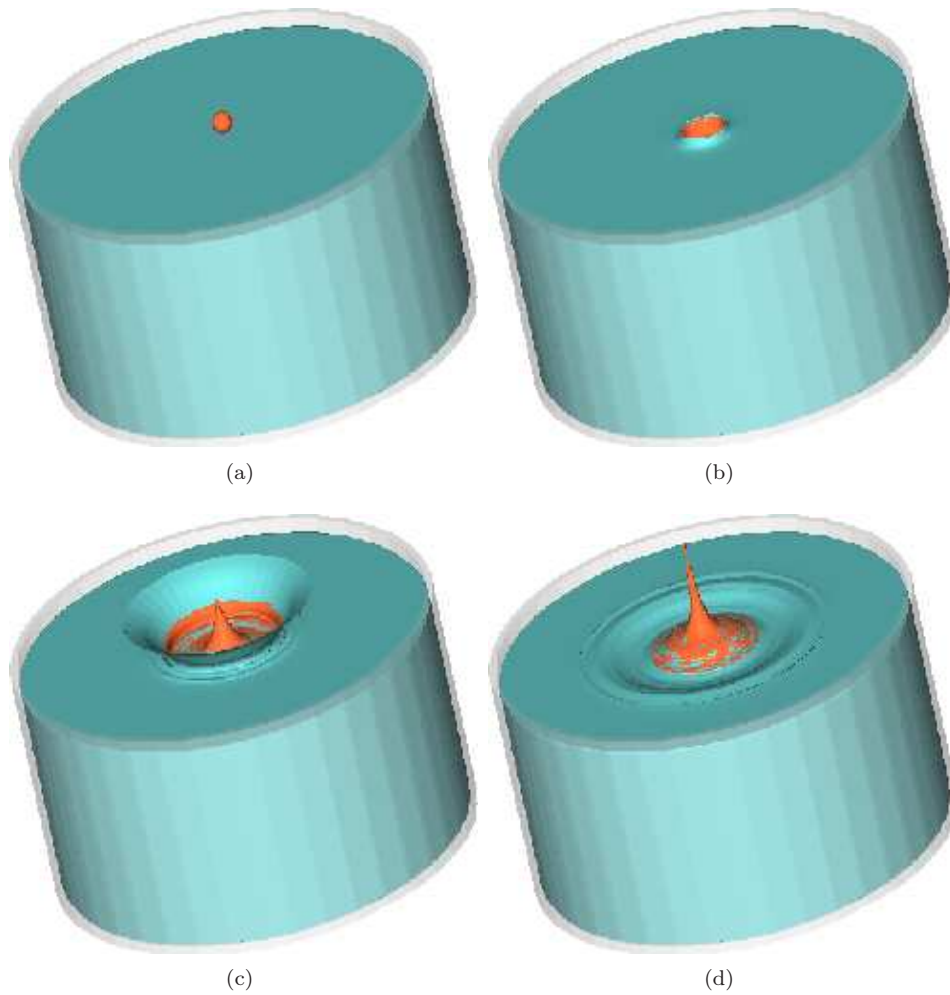


Figura 4.6: Visualização da solução numérica com simetria radial do problema do “splashing” num domínio do tipo circular. (a) Visualização da solução numérica no tempo  $t = 0$  da simulação; (b) Visualização da solução numérica num tempo posterior ao de (a); (c) Visualização da solução numérica num tempo posterior ao de (b); (d) Visualização da solução numérica num tempo posterior ao de (c).

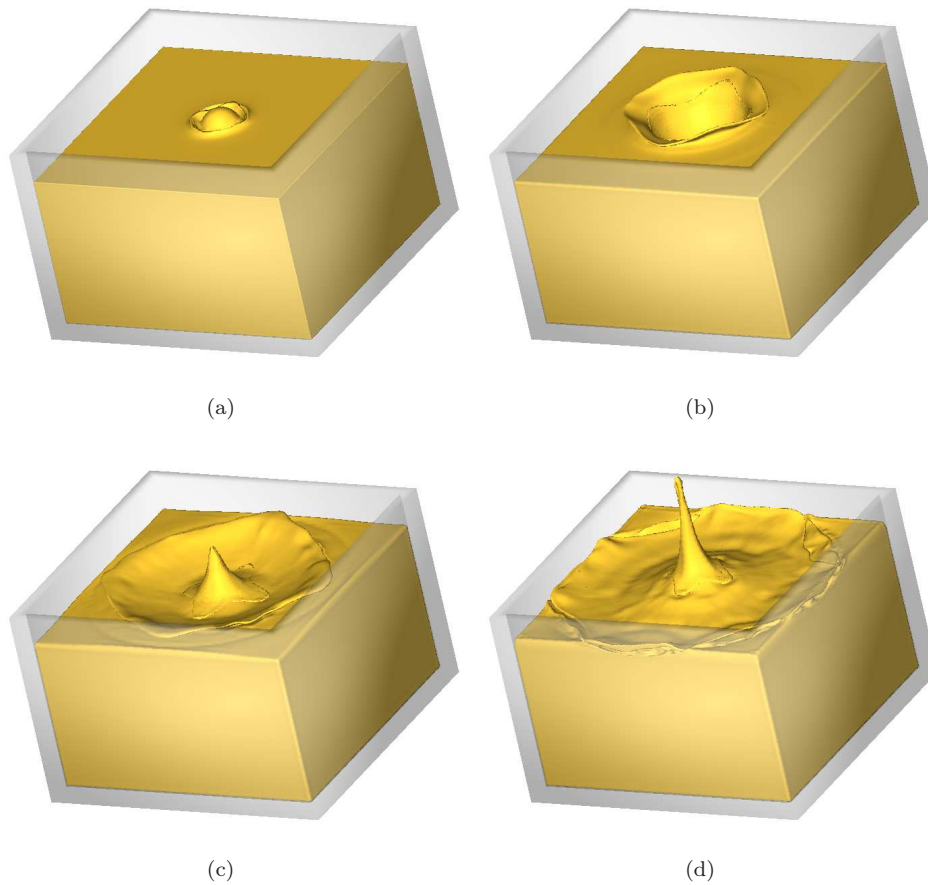


Figura 4.7: Visualização da solução numérica em três dimensões do problema do splashing num domínio do tipo cubo. (a) Visualização da solução numérica no início da simulação; (b) Visualização da solução numérica num tempo posterior ao de (a); (c) Visualização da solução numérica num tempo posterior ao de (b); (d) Visualização da solução numérica num tempo posterior ao de (c).

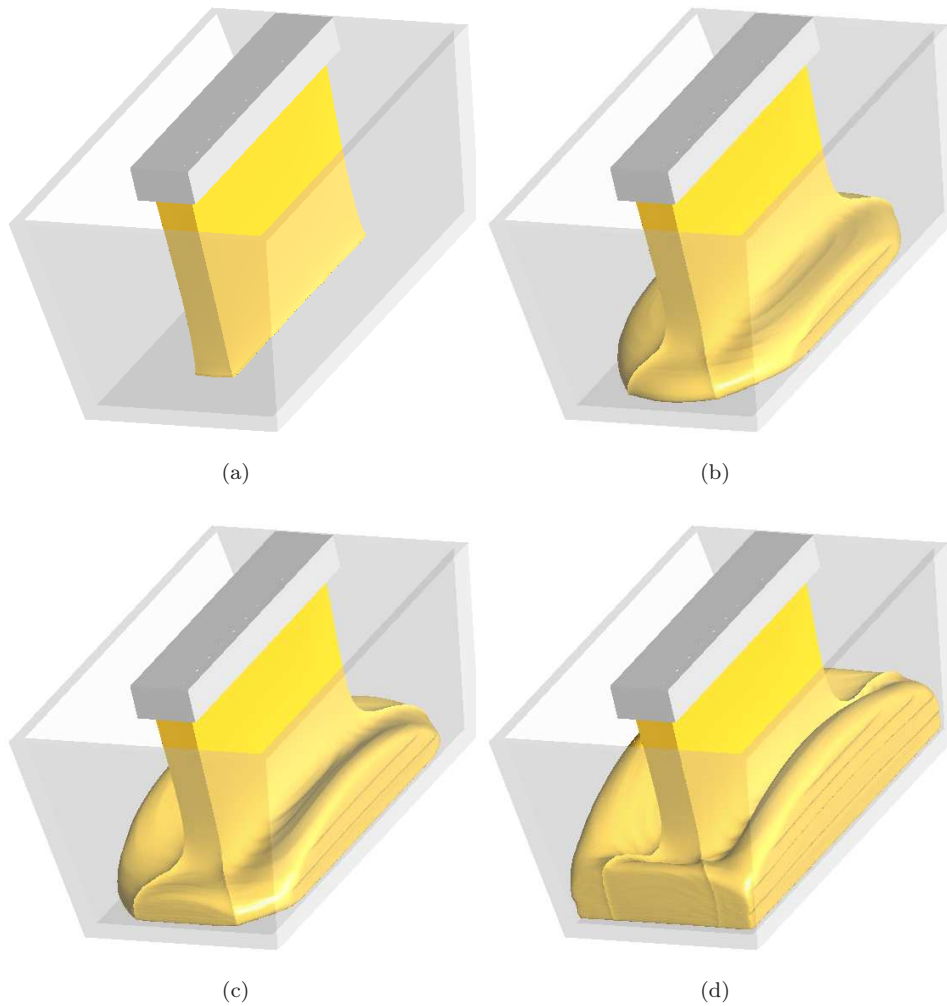


Figura 4.8: Visualização da solução numérica em três dimensões do problema do preenchimento de um container tipo trapezoidal. (a) Visualização da solução numérica no início da simulação; (b) Visualização da solução numérica num tempo posterior ao de (a); (c) Visualização da solução numérica num tempo posterior ao de (b); (d) Visualização da solução numérica num tempo posterior ao de (c).

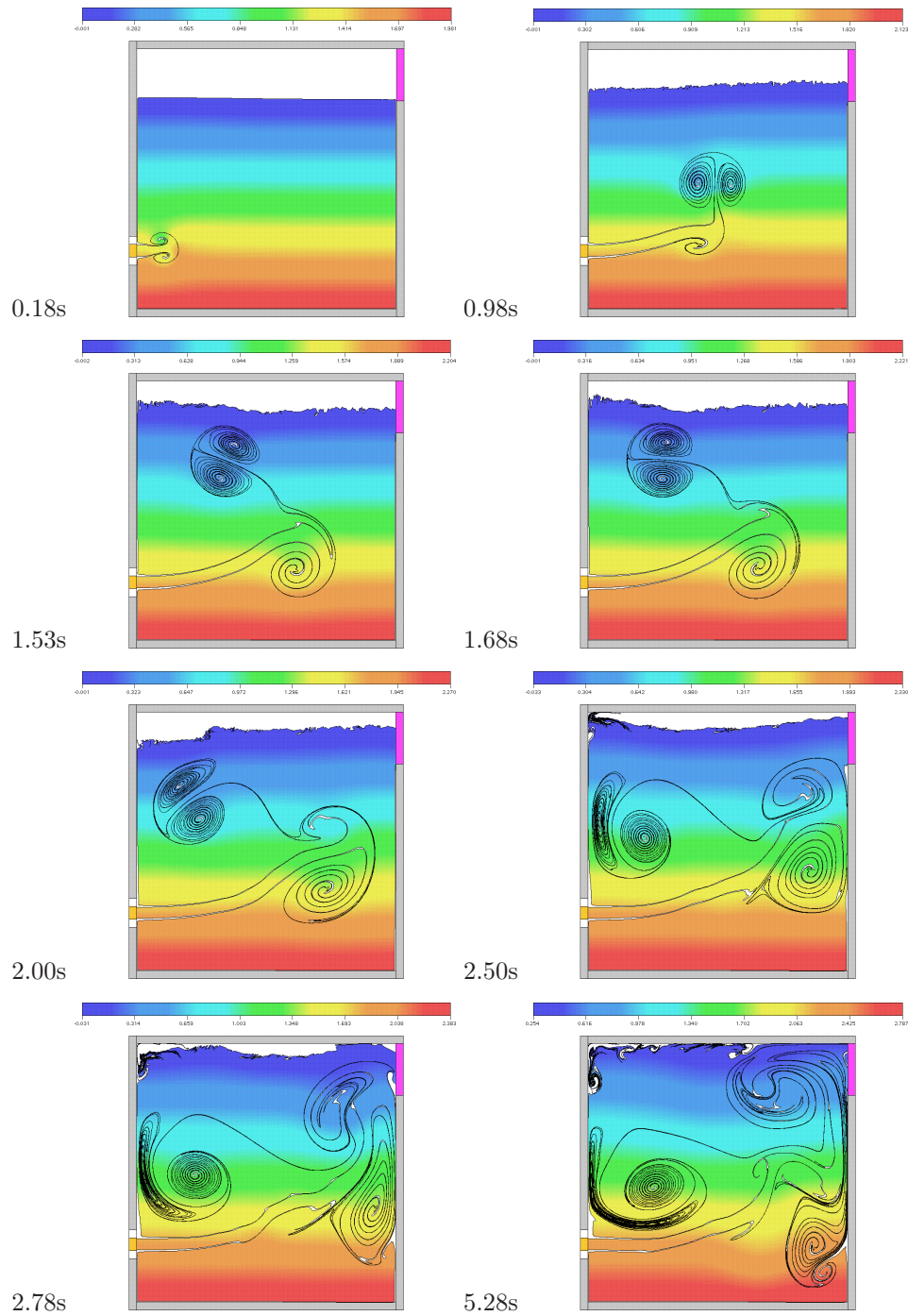


Figura 4.9: Evolução dos contornos de pressão de um jato em uma porção de fluido.

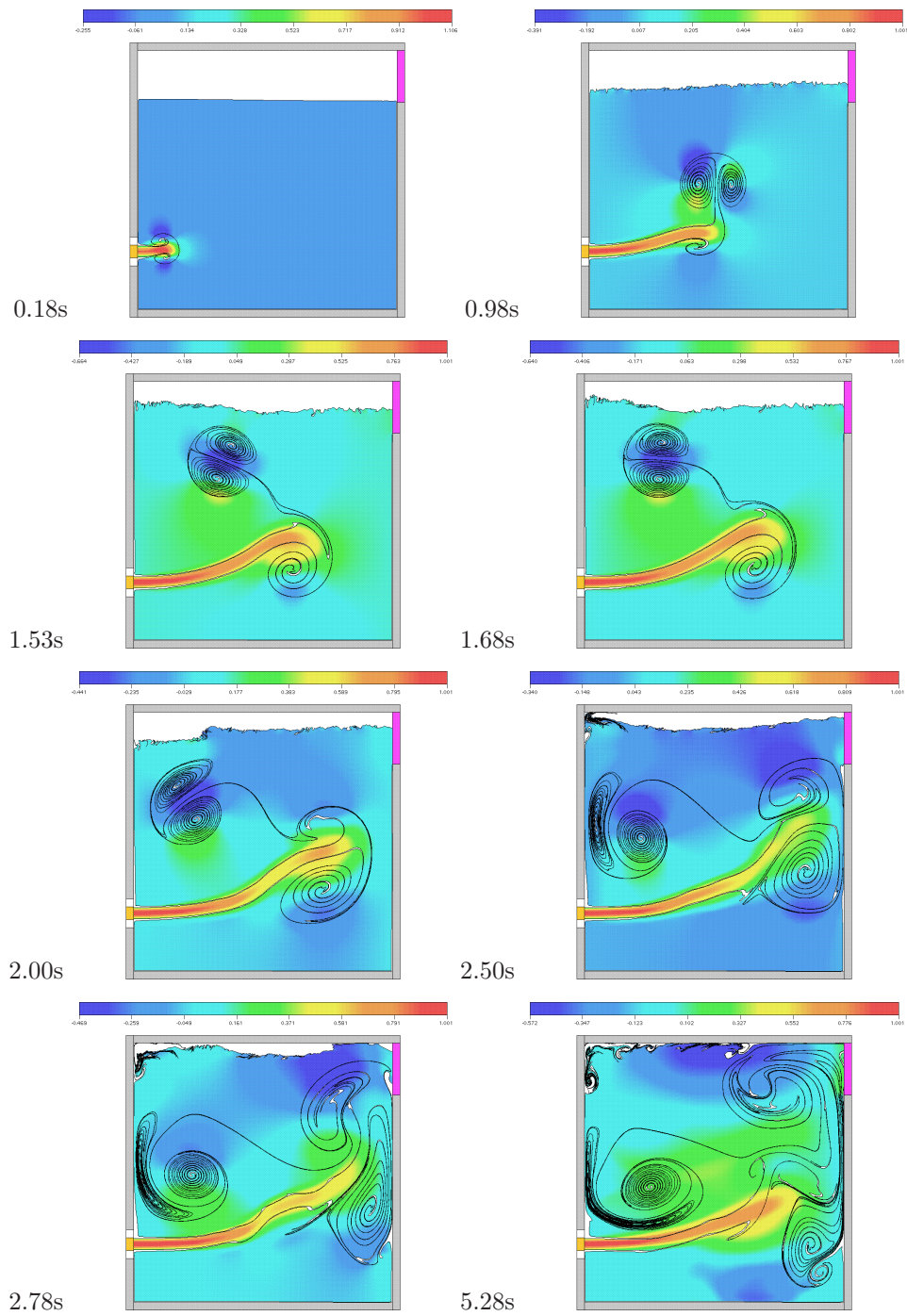


Figura 4.10: Evolução dos contornos de velocidade  $u$  de um jato em uma porção de fluido.

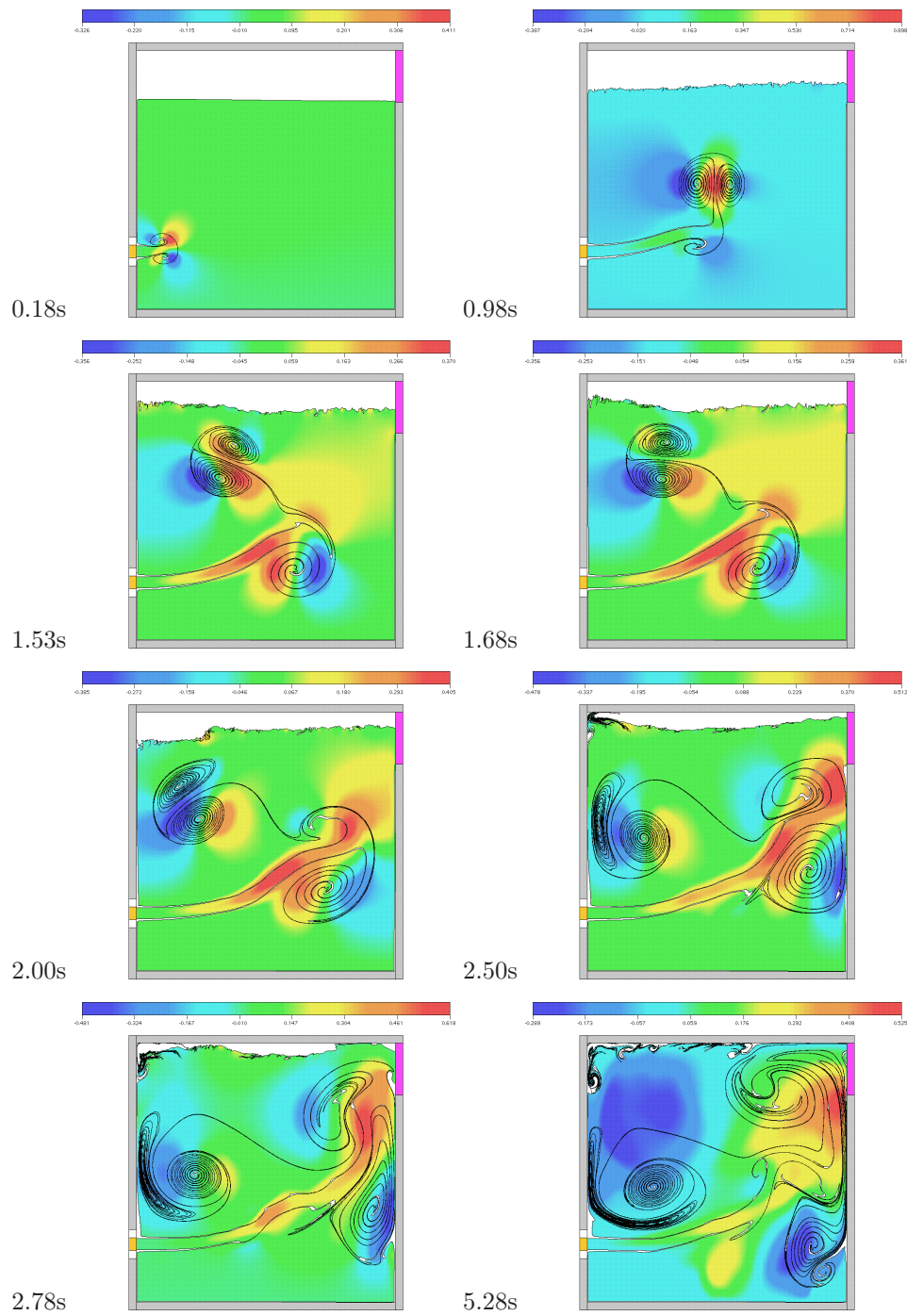


Figura 4.11: Evolução dos contornos de velocidade  $v$  de um jato em uma porção de fluido.



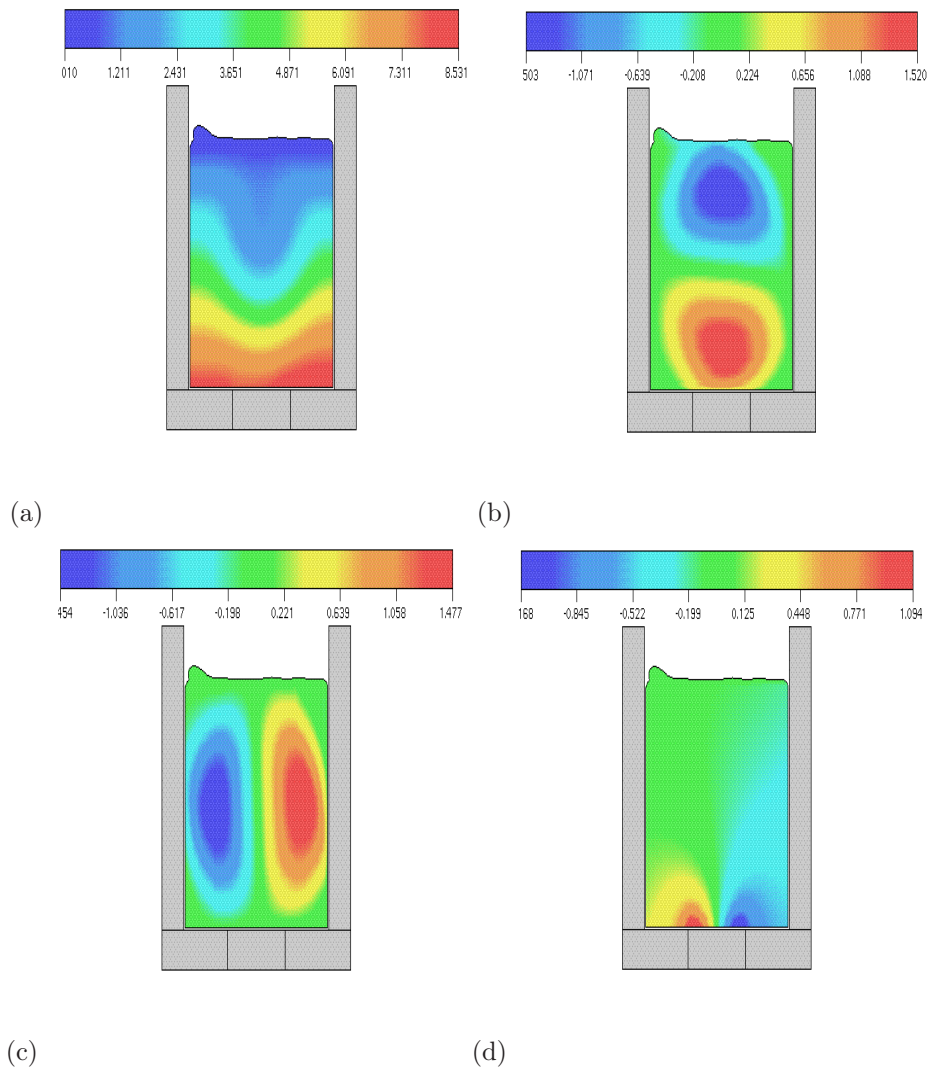


Figura 4.12: Um magneto no fundo ( $t = 6.5$ ): (a) pressão; (b) velocidade  $u$ ; (c) velocidade  $v$ ; (d) parte real do campo magnético.

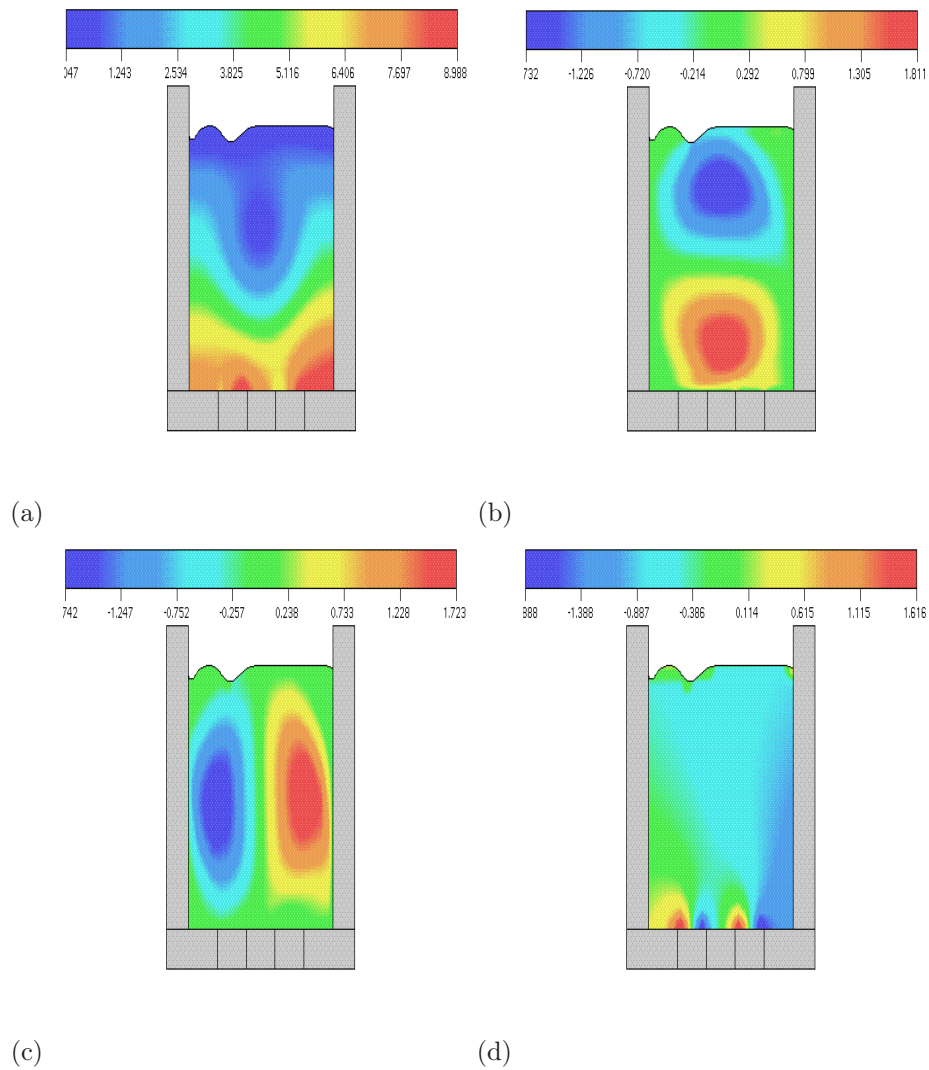


Figura 4.13: Dois magnetos no fundo ( $t = 6.5$ ): (a) pressão; (b) velocidade  $u$ ; (c) velocidade  $v$ ; (d) parte real do campo magnético.

# Bibliografia

- [1] Acheson, D.J., *Elementary Fluid Dynamics*, Claradon Press, Oxford, 1990.
- [2] Alves, M.A., Oliveria, P.J. & Pinho, T., A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **41** (2003), 47-75.
- [3] Ames, W.F., *Nonlinear Partial Differential Equations in Engineering*, Vol. I, Academic Press, New York, 1965.
- [4] Ames, W.F., *Nonlinear Partial Differential Equations in Engineering*, Vol. II, Academic Press, New York, 1972.
- [5] Anderson, D.A., Tannehill, J.C. & Pletcher, R.H., *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, Hemisphere Publishing Corporation, Nova York, 1984.
- [6] Aris, R., *Vectors, Tensors, and the Basic Equation of Fluid Mechanics*, Dover, New York, 1962.
- [7] Boris, J.P., & Book, D.L., Flux-corrected I. SHASTA, a fluid transport algorithm that works, *J. Comput. Phys.*, **11** (1973), 38-69.
- [8] Boussinesq, J., Memoires presentes par divers savants sciences mathematique at physiques theorie de l'ecoulement tourbillant. *Academie des Sciences, Paris*, **23** (1877), 46.
- [9] Bradshaw, P, *Turbulence*, Topics in Applied Physics, V. 12, Springer-Verlag, Berlin, 1976.
- [10] Castelo, A., Tomé, M.F., César, C.N.L., McKee, S. & Cuminato, J.A., Free-flow: An integrated simulation system for three-dimensional free surface flows. *Comp. Vis. Science*, **2** (2000), 199-210.
- [11] Chorin, A.J., A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *J. Comput. Phys.*, **2** (1967), 12-26.
- [12] Chorin, A.J., Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Math. Comp.*, **22** (1968), 745-762.

- [13] Courant, R. & Hilbert, D., *Methods of Mathematical Physics*, V. 2, Wiley, New York, 1962.
- [14] Cruickshank, J.O., Low-Reynolds-number instabilities in stagnating jet flows. *J. Fluid Mech.*, **193** (1988), 111-127.
- [15] Deardorff, J.W., A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds Numbers. *J. Fluid Mech.*, **41** (1970), 453-480.
- [16] Dennis, C.R., Ingham, D.B. & Cook, R.N., Finite-difference methods for calculating flows in three dimensions. *J. Comput. Phys.*, **33** (1979), 325-339.
- [17] Dubois, T., Jauberteau, F. & Teman, R., *Dynamic multilevel methods and the numerical simulation of turbulence*. University Press, Cambridge, 1999.
- [18] Ern, A. & Smooke, M. Vorticity-velocity formulation for three-dimensional steady compressible flows. *J. Comput. Phys.*, **105** (1993), 58-71.
- [19] Anais da II Escola brasileira de primavera transição e turbulência (A. Silveira Neto, ed.), Uberlândia, 2000.
- [20] Ferreira, V.G., Tomé, M.F., Mangiavacchi, N., Castelo, A., Cuminato, J.A., Fortuna, A.O.F. & McKee, S., High order upwinding and the hydraulic jump, *Cadernos de Computação do ICMC-USP*, **01** (2000), 201-231.
- [21] Ferreira, V.G., "Análise e implementação de esquemas de convecção e modelos de turbulência para simulação de escoamentos incompressíveis envolvendo superfícies livres", Tese de Doutorado, 177 p., ICMC-USP, São Carlos, SP, 2001.
- [22] Ferziger, J.H., Simulation of incompressible turbulent flows. *J. Comput. Phys.*, **69** (1987), 1-48.
- [23] Ferziger, J.H., Simulation of turbulence techniques and possibilities. in "Brazil Spring School on Turbulence and Transition", (A. Silveira Neto, ed.), A Short Course, Uberlândia, MG, 2000.
- [24] Frisch, U., "Turbulence" Cambridge University Press, Nova York, 1995.
- [25] Gaskell, P.H. & Lau, A.K., Curvature-compensated convective transport: SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm. *Int. J. Numer. Meths. Fluids*, **8** (1988), 617-641.
- [26] Goda, K., A multistep technique with implicit difference schemes for calculating two-or three-dimensional cavity flows. *J. Comput. Phys.*, **30** (1979), 76-95.
- [27] Gresho, P.M., Incompressible fluid dynamics: some fundamental formulation issues. *An. Rev. Fluid Mech.*, **23** (1991), 413-453.

- [28] Guj, G. & Stella, F., A vorticity-velocity method for the numerical solution of 3D incompressible flows. *J. Comput. Phys.*, **106** (1993), 286-298.
- [29] Gresho, P.M. & Sani, R.L., On pressure boundary conditions for the incompressible Navier-Stokes equations. *Int. J. Numer. Meths. Fluids*, **7** (1987), 1111-1145.
- [30] Harlow, F.H., & Welch, J.E., Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids*, **8** (1965), 2182-2189.
- [31] Harten, A., High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, **49** (1983), 357-393.
- [32] Harten, A., On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes, *SIAM Journal of Numerical Analysis*, **21(1)** (1984), 1-23.
- [33] Heywood, J.G. & Rannacher, R., Finite element approximation of the nonstationary Navier-Stokes, Part II: stability of solutions and error estimates uniform in time. *SIAM J. Numer. Anal.*, **23** (1986), 750-777.
- [34] Kaibara, M.K., Ferreira, V.G. & Navarro, H.A., Upwinding finite-difference schemes for convection dominated problems, Part I: Theoretical results, *Notas do ICMC*, No. 80 (2004).
- [35] Hinze, J., "Turbulence", McGraw-Hill, 1975.
- [36] Lakshminarayana, B., Turbulence modeling for complex shear flows. *AIAA J.*, **24** (1986), 1900-1917.
- [37] Leonard, B.P., Simple high-accuracy resolution program for convective modeling of discontinuities. *Int. J. Numer. Meths. Fluids.*, **8** (1988), 1291-1318.
- [38] Leonard, B.P., The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **88** (1991), 17-74.
- [39] Leonard, B.P. & Drummond, J.E., Why you should not use "hybrid", "power-law" or related exponential schemes for convective modeling - there are much better alternatives. *Int. J. Numer. Meths. Fluids*, **20** (1995), 421-442.
- [40] LeVeque, R.J., Numerical methods for conservation laws. Lectures in Mathematics, Birkhauser Verlag, Basel, 1990.
- [41] Li, A., Ahmidi, G., Bayer, R. & Gaynes, M., Aerosol particle deposition in an obstructed turbulent duct flow. *J. Aerosol. Sci.*, **25** (1994), 91-102.
- [42] Li, T, Sassa, K. & Asai, S., Surface quality improvement of continuously cast metals by imposing intermittent high-frequency magnetic field and synchronizing the field with mod oscillation. *ISIJ International*, **36** (1996), 410-416.

- [43] Lin, C-H, & Lin, C.A., Simple high-order bounded convection scheme to model discontinuities. *AIAA Journal*, **35(3)** (1997), 563-565.
- [44] Lin, H., & Chieng, C.C., Characteristic-based flux limiter of an essentially 3rd-order flux-splitting for hyperbolic conservatin laws. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **13(3)** (1991), 287-301.
- [45] Mallison, G. & Davis, V., Three-dimensional natural convection in a box: a numerical study. *J. Fluid Mech.*, **83** (1977), 1-31.
- [46] Mellor, G.L. & Herring, H.J., A survey of the mean turbulent field closure models. *AIAA J.*, **11** (1973), 590-599.
- [47] Meneveau, C. & Katz, J., Scale-invariance and turbulence models for large-eddy simulation. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **32** (2000), 1-32.
- [48] McComb, W.D., "The physics of fluid turbulence", Oxford University Press, New York, 1990.
- [49] Marx, P.Y.J., Time integration schemes for the unsteady incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, **3** (1994), 112-120.
- [50] Moin, P. & Kim, J. Numerical investigation of turbulent channel flow. *J. Fluid Mech.*, **118** (1982), 341-347.
- [51] Navarro, H.A., Ferreira, V.G., Federson, F.M., Cuminato, J.A., Tomé, M.F. & Castelo, A., Numerical simulation of incompressible magnetohydrodynamic flows. *Proc. 17th International Congress of Mechanical Engineering*, São Paulo, 2003.
- [52] Na, Y. & Moin, P., Direct numerical simulation of a separated turbulent boundary layer. *J. Fluid Mech.*, **370** (1998), 175-201.
- [53] Negrini, F., Fabri, M., Zuccarini, M., Takeuchi, E. & Tani, M., Electromagnetic control of the meniscus shape during casting in a high frequency magnetic field. *Energy Conversion and Management*, **41** (2000), 1687-1701.
- [54] Orszag, S.A. & Patterson, G.S., Numerical simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence, *Phys. Rev. Lett.* , **28** (1972), 76-79.
- [55] Panton, R.L., "Incompressible flow", John Wiley & Sons, New York, 1984.
- [56] Patankar, S.V., "Numerical heat transfer and fluid flows" Hemisphere Publishing Co., New York, 1980.
- [57] Peyret, R. & Taylor, T.D., "Computational methods for fluid flow", Springer-Verlag, New York, 1983.
- [58] Ping-Li, H., Wen-Quan, T., & Mao-Zheng, T., Refinement of the convective boundedness criterion of Gaskell and Lau. *Engineering Computations*, **20(8)**, (2003), 1023-1043.

- [59] Pulliam, T.H., Artificial dissipation for the Euler equations. *AIAA J.*, **12** (1986), 1931-1940.
- [60] Raithby, G.D., A critical evaluation of upstream differencing applied to problems involving fluid flow. *Comp. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, **9** (1976), 75-86.
- [61] Roe, P.L., Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes. *J. Comput. Phys.*, **43** (1981), 357-372.
- [62] Rogers, M.M. & P. Moin, P. The structure of the vorticity field in homogeneous turbulent flows. *J. Fluid Mech.*, **176** (1987), 33-66.
- [63] Silveira Neto, A., Simulação de Grandes Escalas de Escoamentos Turbulentos. *Transição e Turbulência*, I Escola de Primavera, Rio de Janeiro, 1998.
- [64] Silveira Neto, A., Turbulência nos fluidos. Módulo B: cinemática de turbulência homogênea. em "Curso apresentado no ICMC-USP", São Carlos, 1998.
- [65] Smagorinsky, J., General circulation experiments with the primitive equations. I. the basic experiment. *Mon. Weather Rev.*, **91** (1963), 99-164.
- [66] Speziale, C.G., On the advantages of the vorticity-velocity formulation of the equations of fluid dynamics. *J. Comput. Phys.*, **73** (1987), 476-480.
- [67] Song, B., Liu, G.R., Lam, K.Y. & Amano, R.S., On a higher-order discretization scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **3** (2000), 881-897.
- [68] Sweby, P.K., High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws, *SIAM Journal of Numerical Analysis* **21(5)** (1984), 995-1011.
- [69] Taylor, G.I., "Film Notes for Low-Reynolds Number Flows", Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1965.
- [70] Taylor, G.I., "Instability of jets, threads and sheets of viscous fluid", Proc. Intl. Congr. Appl. Mech. Springer, UK, 1968.
- [71] Tennekes, H. & Lumley, L. "A first course in turbulence", Massachusetts Institute of Technology, USA, 1972.
- [72] Shapiro, A.H., Preface by, "Illustrated experiments in fluid mechanics", Educational Development Center, Inc., Cambridge, 1974.
- [73] Tomé, M.F. & McKee, S., GENSMAC: A Computational marker-and-cell method for free surface flows in general domains. *J. Comput. Phys.*, **116** (1994), 171-186.
- [74] Tomé, M.F., Castelo A., Murakami, J., Cuminato, J.A., Minghim, R., Oliveira, C.F., Mangiavacchi, N. & McKee, S., Numerical simulation of axisymmetric free surface flows, *J. Comput. Phys.*, **157** (2000), 441-472.

- [75] van Leer, B., Flux-vector splitting for Euler equations. *Lecture Notes in Physics.*, **170** (1982), 507-512.
- [76] Varonos, A. & Bergeles, G., Development and assessment of a variable-order non-oscillatory scheme for convection term discretization. *Int. J. Numer. Meths. Fluids*, **26** (1998), 1-16.
- [77] Walker, D.T., Leighton, R.I. & L.O. Garza-Rios, L.O., Shear-free turbulence near a flat free surface, *Journal of Fluid Mechanics*, **320** (1996), 19-51.
- [78] Warming, R.F. & Hyett, B.J., The modified equation approach to the stability and accuracy analysis of finite-difference methods. *J. Comput. Phys.*, **14** (1974), 159-179.
- [79] Watson, E.G., The radial spread of a liquid jet over a horizontal plane. *J. Fluid Mech.*, **20** (1964), 481-499.
- [80] Welch, J.E., Harlow, F.H., Shannon, J.P. & Daly, B.J., "The MAC Method: A computing technique for solving viscous, incompressible, transient fluid-flow problems involving free surfaces", Los Alamos Scientific Laboratory, Tec. Report LA-3425, 1966.
- [81] White, F.M., "Viscous fluid flow", McGraw-Hill, New York, 1991.
- [82] Wilcox, D.C., "Turbulence modeling for CFD", DCW Industries, Inc, California, 1993.
- [83] Zhu, J., A low-diffusive and oscillation-free convection scheme. *Communications in Applied Numerical Methods*, **7** (1991), 225-232.
- [84] Zhu, J., On the higher-order bounded discretization schemes for finite volume computations of incompressible flows. *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, **98** (1992), 345-360.



# Índice

- “downstream”, 31
- “remote-upstream“, 31
- “upstream”, 31
  
- adimensionalização, 13
- antidifusivo, 29
- aproximação de derivadas, 20
- aproximações para derivadas, 21
  
- campo de velocidade tentativo, 18
- campo magnético, 43
- caso estacionário, 36
- caso transiente, 39
- CBC, 33
- CD, 24, 27
- CFL, 31
- condições iniciais e de contorno, 3, 15
- conservação da mass, 2
- conservação de energia, 11
- conservativa, 13
- continuidade, 2
- coordenadas espaciais, 6
- coordenadas materiais, 6
- critério CBC, 33
- critério de Harten, 30
- critérios CBC e ECBC, 34
- CUBISTA, 28, 39
  
- derivada materia, 7
- derivada temporal, 19
- derivadas convectivas, 23, 27
- diferenças finitas, 21
- diferença progressiva, 19
- diferenças atrasadas, 26
- diferenças avançadas, 18
- diferenças finitas, 14
  
- difusão numérica, 25
- dinâmica dos fluidos, 2
- Dirichlet, 16, 19
- discretização dos termos convectivos, 23
- divergência, 18
  
- ECBC, 33
- equação da continuidade, 11
- equação de Poisson, 4, 16, 18, 19
- equação modificada, 26
- equações de Navier-Stokes, 11, 12
- equações de Navier-Stokes discretas, 21
- erro de truncamento local, 26
- escalas características, 13
- escoamentos semelhantes, 14
- escoamentos viscosos, 16
- esquema limitado, 29, 33
- esquemas “upwind” de primeira ordem, 24
- esquemas dispersivos, 25
- estado estacionário, 4
- expansão brusca, 42
- experimentos de Taylor, 41
  
- fluidos em movimento, 1
- fluidos newtonianos, 2, 11
- forma conservativa, 28
- FOU, 24, 29
- Freeflow, 40
  
- GENSMAC, 4, 40
  
- HLP, 28
  
- impacto de uma gota, 42
  
- jato turbulento, 43

- jetos oscilantes, 41
- laminares, 3
- laplaciano, 27
- Lax-Wendroff, 29
- LCAD, 40
- leis físicas de conservação, 10
- método da projeção, 17
- método de Euler explícito, 26
- MAC, 4
- malhas diferenciadas, 21
- MHD, 43
- MUSCL, 28
- número de Euler, 14
- número de Courant, 26
- número de Froude, 13
- número de Péclet, 25
- número de Reynolds, 13
- não-estacionária, 4
- Navier-Stokes, 2
- Neumann, 16
- notação de indicial, 14
- NVD, 28
- oscilações espúrias, 24
- oscilações não-física, 25
- partículas marcadoras virtuais, 19
- potencial de velocidades, 18
- precisão local, 26
- preenchimento de containeres, 42
- problema bem posto, 15
- processo de discretização, 19
- quantidade de movimento, 2
- QUICK, 24, 27, 36
- região TVD, 31
- relações constitutiva, 11
- salto hidráulico circular, 40
- SHARP, 27
- SIMPLE, 4
- SMAC, 4
- SMART, 27
- SUDS, 24
- superfície livre, 2
- superfícies livres, 14
- Sweby, 29
- técnicas “upwind”, 23
- teorema de transporte de Reynolds, 8
- termo viscoso, 27
- termos convectivos, 23, 27
- termos não-lineares, 21
- turbulência, 3
- TVD, 28, 30, 35
- variáveis normalizada, 28
- variáveis normalizadas, 31, 34
- variável normalizada, 31
- variáveis primitivas, 13
- viscosidade artificial, 24
- viscosidade dinâmica, 2
- viscosidade molecular, 24
- viscosidade numérica, 24
- VONOS, 41
- WACEB, 28, 36

# NOTAS EM MATEMÁTICA APLICADA

1. Restauração de Imagens com Aplicações em Biologia e Engenharia  
Geraldo Cidade, Antônio Silva Neto e Nilson Costa Roberty
2. Fundamentos, Potencialidades e Aplicações de Algoritmos Evolutivos  
Leandro dos Santos Coelho
3. Modelos Matemáticos e Métodos Numéricos em Águas Subterrâneas  
Edson Wendlander
4. Métodos Numéricos para Equações Diferenciais Parciais  
Maria Cristina de Castro Cunha e Maria Amélia Novais Schleicher
5. Modelagem em Biomatemática  
Joyce da Silva Bevilacqua, Marat Rafikov e Cláudia de Lello Courtoque Guedes
6. Métodos de Otimização Randômica: algoritmos genéticos e “simulated annealing”  
Sezimária F. Pereira Saramago
7. “Matemática Aplicada à Fisiologia e Epidemiologia”  
H.M. Yang, R. Sampaio e A. Sri Ranga
8. Uma Introdução à Computação Quântica  
Renato Portugal, Carlile Campos Lavor, Luiz Mariano Carvalho e Nelson Maculan
9. Aplicações de Análise Fatorial de Correspondências para Análise de Dados  
Dr. Homero Chaib Filho, Embrapa
10. Modelos Matemáticos baseados em autômatos celulares para Geoprocessamento  
Marilton Sanchotene de Aguiar, Fábila Amorim da Costa, Graçaliz Pereira  
Dimuro e Antônio Carlos da Rocha Costa

11. Computabilidade: os limites da Computação  
Regivan H. N. Santiago e Benjamín R. C. Bedregal
12. Modelagem Multiescala em Materiais e Estruturas  
Fernando Rochinha e Alexandre Madureira
13. Modelagem em Biomatemática (Coraci Malta ed.)
  - 1 - “Modelagem matemática do comportamento elétrico de neurônios e algumas aplicações”  
Reynaldo D. Pinto
  - 2 - “Redes complexas e aplicações nas Ciências”  
José Carlos M. Mombach
  - 3 - “Possíveis níveis de complexidade na modelagem de sistemas biológicos”  
Henrique L. Lenzi, Waldemiro de Souza Romanha e Marcelo Pelajo-Machado
14. A lógica na construção dos argumentos  
Angela Cruz e José Eduardo de Almeida Moura