

## 5 Método Numérico

A turbulência em escoamentos de fluido é um fenômeno transiente e tridimensional, que possui um espectro contínuo de escalas de comprimento e tempo. As três principais abordagens numéricas de predição dos escoamentos turbulentos são: modelagem estatística clássica; simulação de grandes escalas; e simulação numérica direta (Friedrich et al., 2001). Nesta ordem, eles formam uma certa hierarquia de técnicas, tendo como critério de classificação o seu potencial e nível de informação obtido.

Na abordagem estatística clássica toda a informação espectral é perdida, desde que as quantidades estatísticas são médias sobre as escalas de turbulência. Isto permite eliminar as direções onde o escoamento é homogêneo, reduzindo a exigência de resolução espacial. O problema torna-se, na maioria dos casos, bidimensional e permanente nas quantidades médias. Há uma efetiva redução do custo computacional e este tem sido o seu grande atrativo. O método numérico do volume finito tradicional (Patankar, 1980) tem sido largamente empregado na solução de escoamentos turbulentos com modelagem estatística clássica. Os seus princípios de conservação ajustam-se bem as hipóteses inerentes a esta técnica de modelagem. (Nieckele et al., 1996; Abrunhosa & Nieckele, 1998, 1999, 2000a, b).

A técnica de simulação de grandes escalas (LES) é intermediária entre a modelagem estatística clássica e a simulação numérica direta. A dinâmica das chamadas escalas de malha é resolvida, enquanto o efeito das escalas submalha é modelado. Na simulação de grandes escalas, as equações de transporte filtradas, resolvidas numericamente, são tridimensionais e transientes. Embora somente o movimento das maiores escalas seja resolvido, o intervalo de escalas presente na simulação ainda é muito significativo. A necessidade de prever precisamente flutuações de alto número de onda implica em que esquemas de baixa ordem deveriam ser utilizados com malhas muito refinadas ou malhas mais grossas com esquemas numéricos de alta ordem (Piomelli, 1999; Fedioun et al., 2001). Entretanto, devido à necessidade de se manipular corretamente um largo intervalo de escalas de comprimento, a simulação numérica de grandes escalas exige

modificações na avaliação da precisão da discretização espacial. A ordem do método não é uma medida absoluta de precisão do esquema numérico em LES (Ferziger, 2000). Embora o tamanho da malha  $\Delta_x$  seja capaz de representar modos de Fourier  $e^{ikx}$  com número de onda  $k$  abaixo de  $\pi/\Delta_x$ , um método de segunda ordem calcula as derivadas dos modos de  $k = k_{max}/2 = \pi/(2 \Delta_x)$  com pouca precisão. Assim, o espectro de energia do escoamento não deveria conter significativa energia para comprimentos de onda maiores que  $\pi/(2 \Delta_x)$ . Consequentemente o filtro deveria neste caso ter uma banda máxima de  $2\Delta_x$ . Em outras palavras, o espaçamento da malha deveria ser tal que a energia submalha não fosse significativa nos modos maiores que  $\pi/(2 \Delta_x)$ . Esta exigência obriga os métodos numéricos de segunda ordem a serem empregados juntamente com malhas refinadas. No caso da técnica LES, o erro numérico pode ter significativas conseqüências na predição do escoamento. Ghosal (1996) verificou em seu trabalho que, para esquemas de baixa ordem, o erro de truncamento, devido à incapacidade de representar os gradientes nos maiores comprimentos de onda, é maior que a contribuição submalha, a menos que sejam utilizados filtros de largura várias vezes superiores ao tamanho da malha (Ghosal, 1996, Silvestrini 2000). Isto tem levado alguns autores a realizarem a simulação de grandes escalas sem a adoção de modelos submalha. Neste caso a própria difusão numérica do esquema numérico substitui o efeito do modelo submalha. Estas simulações têm sido chamadas na literatura como simulações pseudodiretas (Lesieur & Metais, 1996).

A necessidade de simular precisamente todo intervalo de escalas de tempo faz com que as técnicas numéricas projetadas para escoamentos permanentes não sejam bem aceitas para simular grandes escalas. A precisão exige um passo de tempo pequeno. Consequentemente, o método numérico deve ser estável, quando empregado com passos de tempo da ordem da escala de tempo das estruturas dissipativas de Kolmogorov (Choi & Moin, 1994; Ferziger, 2000). Normalmente as exigências de precisão temporal garantem estabilidade para os métodos explícitos. Contudo, em escoamentos limitados por fronteiras sólidas, há necessidade de se tratar implicitamente ao menos os termos viscosos, que envolvem derivadas normais à parede. Neste caso, o passo de tempo é imposto pelas condições de estabilidade.

Verifica-se que a escolha de esquemas numéricos para a discretização temporal e espacial das equações de Navier-Stokes filtradas na simulação das grandes escalas é um tema de especial atenção. As exigências numéricas da modelagem estatística clássica são bem mais modestas que aquelas requeridas pela técnica de simulação de grandes escalas. Os esquemas espectrais e de diferenças finitas compactos têm sido mais efetivamente empregados na simulação de grandes escalas (Mahesh, 1998; Fedioun et al., 2001).

Neste trabalho foram realizadas simulações numéricas utilizando tanto a modelagem estatística clássica como a técnica de simulação de grandes escalas. O método numérico do volume finito com malhas estruturadas (Patankar, 1980) foi empregado em ambas as técnicas de simulação de escoamentos turbulentos. A seguir faz-se um resumo do método, destacando-se as diferenças empregadas em cada uma das técnicas de simulação utilizadas.

## 5.1. A Equação Diferencial Geral

As equações diferenciais de conservação dos princípios físicos, como por exemplo, da quantidade de movimento linear, da energia, da energia cinética turbulenta e da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, entre outras, podem ser colocadas na seguinte forma geral (Patankar, 1980):

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right] + S \quad (5.1)$$

onde  $S$  é chamado termo fonte e armazena todos os outros termos não representados explicitamente,  $\phi$  é a variável dependente,  $\Gamma$  é o coeficiente de difusão de  $\phi$ ,  $\rho$  é a massa específica e  $u_j$  é o componente da velocidade.

Com auxílio da equação de conservação de massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (5.2)$$

A eq. (5.1) pode ser escrita na chamada forma conservativa da equação

diferencial de transporte (Patankar, 1980):

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right] + S \quad (5.3)$$

Nesta equação, a variável dependente  $\phi$  pode representar diferentes grandezas de interesse em fenômenos de transporte, como velocidade, temperatura, energia cinética turbulenta, taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, entre outras.

## 5.2. Fluxo Total - Difusão mais Advecção

Por simplicidade de apresentação, é utilizado um escoamento em coordenadas cartesianas. Deste modo, a eq. (5.3) pode ser colocada na seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho u \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \rho v \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \\ \frac{\partial}{\partial z} \left( \rho w \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) = S \end{aligned} \quad (5.4)$$

Definindo então os fluxos totais  $J_x$ ,  $J_y$  e  $J_z$  (convectivo mais difusivo) nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente, como :

$$J_x = \rho u \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad ; \quad J_y = \rho v \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \quad ; \quad J_z = \rho w \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \quad (5.5)$$

A equação geral reduz-se a:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} = S \quad (5.6)$$

Para o caso da equação da quantidade de movimento do lado direito ainda aparece explicitamente o termo do gradiente de pressão.

### 5.3. Geometria e Volumes de Controle Finitos

Para resolver as equações diferenciais de transporte (eq. 5.6), a técnica distribui, por todo o domínio físico de interesse, volumes de controle finitos, colocando no centro destes um ponto nodal. A fig. (5.1) mostra uma visão bidimensional da malha assim gerada, destacando um volume de controle típico.  $\Delta_x$   $\Delta_y$   $\Delta_z$  são as respectivas dimensões do volume de controle, que podem ser uniforme ou não em cada direção. As distâncias entre os pontos nodais, colocados ao centro dos volumes de controle, são representadas em cada direção por  $\delta_{xe}$  e  $\delta_{xw}$ ,  $\delta_{yn}$  e  $\delta_{ys}$  e  $\delta_{zt}$  e  $\delta_{zb}$ . Se a malha é uniforme em uma direção as distância entre os pontos são iguais, por exemplo,  $\delta_{yn} = \delta_{ys}$ .

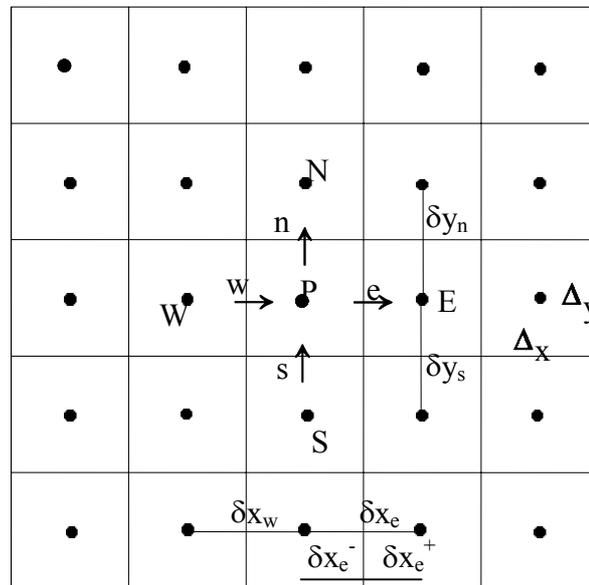


Figura 5.1 - Volume de controle finito típico.

As equações diferenciais de transporte devem agora ser integradas em cada volume de controle. O método representa o balanço da propriedade conservada em cada volume de controle. Como o princípio é aplicado a todos os volumes de controle, resulta em um sistema de equações que conserva a propriedade ao nível de qualquer célula. As equações do volume de controle são, conseqüentemente, as equações discretas para a conservação dos princípios físicos. Como o transporte convectivo da quantidade de movimento, energia ou qualquer outro escalar é realizado pelo escoamento de massa, para garantir a conservação de qualquer propriedade é requerido a conservação de massa. Deste modo, o método é robusto

durante o procedimento de solução. A possibilidade de checar os princípios de conservação em malhas mais grossas é uma característica positiva do método.

#### 5.4. Integração das Equações nos Volumes de Controle

A equação de conservação é integrada em cada volume de controle, resultando na equação de conservação global da variável  $\phi$ , para cada um destes volumes, da forma:

$$\left[ \int_{\Delta t} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dt \right]_{VC} \Delta \nabla + \int_{\Delta t} (J_e - J_w + J_n - J_s + J_t - J_b) dt = \int_{\Delta t} (\bar{S} \Delta \nabla) dt \quad (5.7)$$

onde:  $J_e, J_w, J_n, J_s, J_t$  e  $J_b$  representam as taxas de transferência totais através das respectivas faces de cada volume de controle (fluxo multiplicado pela área da face);  $\Delta \nabla$  é o volume ocupado pelo volume de controle finito; e  $\bar{S}$  é o valor médio do termo fonte  $S$  no volume de controle. O valor médio do termo fonte,  $\bar{S}$ , pode ser linearizado como:

$$\bar{S} = S_c + S_p \phi_P \quad \text{onde } S_p \leq 0 \quad (5.8)$$

De acordo com Patankar (1980), a restrição  $S_p \leq 0$  é fundamental, para estabilidade numérica e obtenção de soluções fisicamente realistas. Na integração espacial do termo de acúmulo assumiu-se que a derivada temporal do ponto nodal é uniforme sobre todo o volume de controle.

No caso da equação de conservação da quantidade de movimento, o termo do gradiente de pressão integrado no volume de controle deve ser acrescentado do lado direito da eq. (5.7), como é mostrado no Apêndice B, quando se tratou do acoplamento pressão velocidade.

Na integração da eq. (5.6), as integrais de superfície foram aproximadas pela regra do ponto médio, a qual é equivalente ao produto do integrando no centro da face com a própria área da face. Por exemplo, na direção  $x$  tem-se:

$$I = \iiint_{\Delta z \Delta y \Delta x} J_x dx dy dz = \iint_{\Delta z \Delta y} (J_{xe} - J_{xw}) dy dz = (J_{xe} - J_{xw}) \Delta y \Delta z \quad (5.9)$$

ou, incorporando a área no fluxo, tem-se que:

$$I = (J_e - J_w) \quad (5.10)$$

Esta aproximação é de segunda ordem de precisão no espaço, se o valor de  $J_x$  for conhecido no ponto médio da face. Se o valor das funções estiver armazenado nos pontos nodais, a definição dos fluxos totais terá que ser obtida por interpolação. Para a modelagem com média de Reynolds, na qual as exigências numéricas são mais modestas, utilizou-se o esquema de interpolação ‘Power-law’ (Patankar, 1980), enquanto para a técnica de simulação de grandes escalas foram utilizados os esquemas Quick (Leonard, 1979) e o CDS-4 (Breuer, 1998).

Na modelagem com média de Reynolds, todos os problemas simulados eram em regime permanente nas propriedades médias. Por outro lado, toda simulação de grandes escalas é transiente. Conseqüentemente, para avançar no tempo nesta técnica foram utilizadas as seguintes propostas:

- i) Esquema totalmente implícito para todos os termos;
- ii) Esquema Crank-Nicolson para todos os termos, exceto para a pressão que foi tratada de modo implícito;
- iii) Esquema Crank-Nicolson para todos os termos;
- iv) Esquema Simpson para todos os termos, exceto para a pressão que foi tratada de modo implícito;
- v) Esquema Simpson para todos os termos.

O acoplamento pressão-velocidade foi resolvido neste trabalho através dos algoritmos ‘SIMPLE’ (Patankar, 1980) e ‘SIMPLEC’ (Van Doormaan & Raithby 1984). As equações de discretização para a modelagem clássica e para a simulação de grandes escalas e os algoritmos de solução do acoplamento pressão-velocidade são discutidos no Apêndice B.

## 5.5. Método para Solução do Sistema Algébrico

O conjunto de sistemas algébricos associados a cada equação diferencial foi resolvido seqüencialmente como mostrado na seqüência geral dos algoritmos ‘SIMPLEC’ e ‘SIMPLE’.

Na solução do sistema de equações algébricas da modelagem com média de Reynolds foi usado o algoritmo TDMA linha por linha (Patankar, 1980), que é uma combinação do método de Gauss-Seidel e do algoritmo direto de Thomas para matrizes tridiagonais. Para aumentar a velocidade de convergência utiliza-se o algoritmo de correção por blocos (Settari & Aziz, 1973).

Já nos problemas homogêneos, resolvidos com a técnica de simulação de grandes escalas, nos quais utilizou-se a condição de contorno periódica na direção homogênea, o sistema algébrico foi resolvido com o algoritmo TDMA periódico (Patankar & Sparrow, 1977). Mais uma vez, o algoritmo de correção por blocos foi utilizado para aumentar a velocidade de convergência.