

4

Método Numérico

A modelagem do tensor sub-malha e os erros de comutação constituem apenas uma parcela dos erros encontrados numa metodologia LES. Por serem estes, em geral, de magnitude reduzida, as Simulações de Grandes Escalas requerem um cuidado adicional na implementação numérica, para que erros de discretização e outros erros numéricos não mascarem a modelagem do termo sub-malha. Ao mesmo tempo, e de forma conflitante, a metodologia deve ser geral e flexível o suficiente para lidar com geometrias mais complexas, tais como as encontradas em aplicações de interesse na indústria, envolvendo possivelmente, malhas altamente não-uniformes ou até não-estruturadas. Além disso, deve-se permitir fácil paralelização do código, sem a qual, o tempo de simulação seria extremamente longo.

Dentre as várias possibilidades relacionadas na literatura, tais como Diferenças Finitas, Elementos Finitos, métodos espectrais, e outros, a que mais se adequa ao que se propõe neste trabalho (Jasak, 1996) é o Método dos Volumes Finitos, por oferecer a melhor relação de compromisso entre flexibilidade e acurácia.

Todos os casos simulados no presente trabalho fazem uso de uma biblioteca desenvolvida no Imperial College em linguagem C++, disponível gratuitamente na internet, chamada OpenFOAM (OpenFoam, 2006). Consiste de um conjunto de classes e objetos, com todas as ferramentas necessárias para Simulações Numéricas de Equações Diferenciais Parciais, especialmente adequada para fenômenos de transporte. Tem-se acesso a todo o código, o que permite uma enorme flexibilidade para se modificar classes, operadores, e qualquer código que se verifique necessário. Em particular, sua estrutura baseada em orientação a objeto provou ser bastante adequado para pesquisas de novos modelos de turbulência e esquemas numéricos.

Neste capítulo são apresentados os detalhes do método e esquemas numéricos deste código mais relevantes para este trabalho.

4.1 Discretização do Domínio Computacional

Para que as equações de transporte que governam o movimento do fluido possam ser utilizadas em simulações numéricas, é necessário um processo de discretização do domínio do escoamento e dos operadores derivada que nelas aparecem.

A discretização do domínio resulta numa malha computacional, sobre a qual a versão discretizada das equações de transporte é resolvida. No caso do Método dos Volumes Finitos, o domínio é particionado num certo número de volumes de controle, que definem, não somente as localizações onde se deseja obter a solução para as variáveis de interesse, como também possibilitam a definição das versões discretas dos operadores de derivada espacial necessárias. A topologia dos volumes de controle suportados pelo código OpenFOAM é bem geral, permitindo a utilização de qualquer poliedro, onde cada face plana cercando o volume de controle é compartilhada por apenas um outro volume de controle. Um volume de controle típico é mostrado na Fig. 4.1, onde o ponto A se localiza no centróide do mesmo, e o ponto f, no centróide de cada face. O ponto B caracteriza o centróide de um volume vizinho, que compartilha a face que contém f.

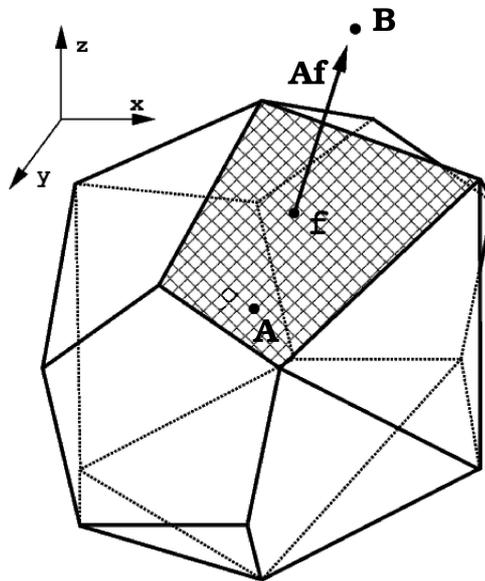


Figura 4.1: Topologia de um volume de controle

Um vetor \mathbf{Af} é definido para cada face, na direção perpendicular à mesma, com módulo igual à sua área. A orientação deste vetor segue o sentido do centróide de menor índice para o de maior índice na lista de volumes de controle. O centróide de menor índice nessa lista é considerado

o "dono" da face "f", ou o "Principal", identificado na Fig. 4.1 por "A", enquanto o adjacente, é chamado simplesmente de "vizinho" e identificado por "B". No caso de faces pertencentes a uma região de fronteira, seu único volume de controle é considerado o principal, e o vetor \mathbf{A}_f aponta para fora do domínio do escoamento.

Embora o presente estudo tenha se limitado à utilização de malhas estruturadas, de elementos hexaédricos, a capacidade de lidar com formas mais gerais (poliedros) permite enorme flexibilidade e adaptabilidade na geração da malha, e garante que as metodologias aqui estudadas (incluindo o modelo proposto) sejam extensíveis a qualquer topologia não-estruturada, possibilitando melhor representação de geometrias complexas em futuros trabalhos.

4.2

Discretização da Equação Geral de Transporte

Em geral, a equação de transporte a ser discretizada, é da forma

$$\underbrace{\frac{\partial (\rho \phi)}{\partial t}}_{\text{termo transiente}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi)}_{\text{termo advectivo}} = \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi)}_{\text{termo difusivo}} + \underbrace{Sc + Sp \phi}_{\text{termo fonte}}, \quad (4-1)$$

onde ϕ é a variável dependente, Γ é o coeficiente de difusão associado a ϕ e Sc e Sp são as parcelas constante e o coeficiente do termo de geração de ϕ .

Por se tratar de uma equação de segunda ordem, é recomendável que os erros de discretização também sejam, pelo menos, de ordem 2.

Uma maneira fácil de se discretizar a Eq. 4-1 é através da filtragem temporal e espacial de cada um de seus termos, por meio de integrais definidas. De fato, uma integral é um operador suavizador, que filtra informações, e no caso de FVM, é definida como

$$\bar{a}(i, n) = \frac{1}{\Delta t V_i} \int_{t_n}^{t_n + \Delta t} \int_{V_i} a(\mathbf{x}', t') d\mathbf{x}' dt', \quad (4-2)$$

onde a primeira integral a ser realizada é uma integral espacial, sobre o i -ésimo volume de controle (V_i), e a segunda, uma integral temporal entre o instante de tempo t_n , e o instante seguinte, $t_n + \Delta t$, sendo Δt o passo de tempo. Como resultado dessa operação de filtragem, a integral da função contínua $a(\mathbf{x}, t)$ retorna uma única variável, $\bar{a}(i, n)$, para cada par "volume de controle \times instante de tempo". Isto feito, parte das informações

originais contidas na variável contínua são perdidas, sendo a parcela restante sinteticamente representada por um conjunto discreto de variáveis $\bar{a}(i, n)$, "armazenadas" nos centróides dos volumes de controle.

Note-se que esse processo de discretização (ou filtragem) pode ser feito em duas etapas: a integral espacial, seguida pela integral no tempo. A aplicação da discretização espacial à Eq. 4-1 é detalhada separadamente a seguir, para cada um de seus termos transiente, advectivo, difusivo, e fonte. Posteriormente a seção (4.2.2), tratará do processo de discretização temporal.

4.2.1

Discretização Espacial

A discretização espacial dos termos da equação de transporte fundamenta-se no Teorema de Gauss Generalizado, o qual permite que integrais sobre volumes sejam escritas como integrais sobre as fronteiras dos volumes (∂V). Faz-se uso, nesta seção, das seguintes identidades matemáticas:

$$\int_{V_i} \nabla \cdot \mathbf{a} dV = \oint_{\partial V_i} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{A}, \quad (4-3a)$$

$$\int_{V_i} \nabla \phi dV = \oint_{\partial V_i} \phi d\mathbf{A}, \quad (4-3b)$$

$$\int_{V_i} \nabla \mathbf{a} dV = \oint_{\partial V_i} \mathbf{a} d\mathbf{A}, \quad (4-3c)$$

onde o vetor $d\mathbf{A}$ tem módulo igual à área infinitesimal, é normal a superfície ∂V_i , e aponta para fora da mesma.

Além disso, as funções sobre as quais os operadores atuam são aproximadas por diferenças centrais, ou seja, expansões em série de Taylor de segunda ordem, em torno do centróide i ,

$$\phi(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}_i) + (\nabla \phi)_i \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) + \dots + O((\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)^2), \quad (4-4a)$$

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}) = \mathbf{a}(\mathbf{x}_i) + (\nabla \mathbf{a})_i \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) + \dots + O((\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)^2). \quad (4-4b)$$

O subscrito i indica que a função ou o operador derivada é avaliado no centróide do volume de controle, cuja posição é, por sua vez, dada por:

$$\mathbf{x}_i = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \mathbf{x} dV. \quad (4-5)$$

A aplicação destas expressões em operadores contínuos envolvendo derivadas espaciais resulta nos operadores discretos apresentados a seguir. Primeiramente são mostrados operadores básicos, como o operador linear, o divergente, e o gradiente. A partir destes, constroem-se termos mais complexos, como os termos advectivo, difusivo, e termo fonte, presentes nas equações de transporte, que serão posteriormente introduzidos.

Termo Fonte

De acordo com a Eq. 4-1, o termo fonte de uma variável ϕ genérica pode ser linearizado em relação a ϕ , sendo Sc a parte constante da fonte e Sp seu coeficiente angular, o qual de acordo com Patankar, (1980) deve ser sempre negativo para garantir um esquema numérico estável ($Sp \leq 0$).

Para discretizar o termo de fonte, considera-se que a fonte é constante dentro do volume de controle, logo é igual ao valor no ponto nodal i , de acordo com a Eq. 4-4a. O termo de fonte discretizado espacialmente é:

$$Sc + Sp \phi \xrightarrow{\text{discr}} \frac{1}{V_i} \int_{V_i} [Sc + Sp \phi(\mathbf{x})] dV = Sc + Sp \phi_i. \quad (4-6)$$

Divergente

Para o operador divergente, $\nabla \cdot ()$, tal qual o encontrado no termo difusivo e no advectivo da equação de transporte, a discretização resulta num simples somatório sobre as faces do volume de controle (V_i), uma vez que essas últimas são planas e de número limitado. Assim, aplicando-se a identidade 4-3a, tem-se:

$$\nabla \cdot \mathbf{a} \xrightarrow{\text{discr}} \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \nabla \cdot \mathbf{a} dV = \frac{1}{V_i} \oint_{\partial V_i} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{A} = \frac{1}{V_i} \sum_{f=1}^{N_i} \mathbf{a}_f \cdot \mathbf{A}_f, \quad (4-7)$$

sendo \mathbf{a}_f o valor de \mathbf{a} sobre a face, normalmente obtido por interpolação linear, N_i é o número de faces do volume de controle i , e o vetor \mathbf{A}_f é o vetor área da face f do volume de controle i , orientado sempre “para fora” do volume de controle.

Como o vetor \mathbf{A}_f aponta para fora do volume somente quando o volume é o “dono” da face, para escrever a 4-7 em termos de \mathbf{A}_f , deve-

se, então, separar as faces no somatório, da seguinte forma:

$$\nabla \cdot \mathbf{a} \xrightarrow{\text{discr}} \frac{1}{V_i} \sum_{f=1}^{N_i} \mathbf{a}_f \cdot \mathbf{A}_f = \frac{1}{V_i} \left[\sum_{f_A=1}^{N_A} \mathbf{a}_{f_A} \cdot \mathbf{A}_{f_A} - \sum_{f_B=1}^{N_B} \mathbf{a}_{f_B} \cdot \mathbf{A}_{f_B} \right], \quad (4-8)$$

onde o subscrito f_A e f_B indicam, respectivamente, as faces para as quais o volume em questão é o principal e as faces para as quais é o volume vizinho. O sinal "–" se encarrega de inverter o sentido do vetor \mathbf{A}_f quando o volume de controle em questão (V_i) não é o dono daquela face.

Gradiente

Apesar de existirem outras alternativas disponíveis no código OpenFoam, apresenta-se aqui apenas aquela que corresponde às diferenças centradas do Método das Diferenças Finitas.

Na discretização espacial do gradiente, utiliza-se a identidade 4-3b:

$$\nabla \phi \xrightarrow{\text{discr}} \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \nabla \phi dV = \frac{1}{V_i} \oint_{\partial V_i} \phi d\mathbf{A} = \frac{1}{V_i} \sum_{f=1}^{N_i} \phi_f \mathbf{A}_f, \quad (4-9)$$

onde ϕ_f representa o valor de ϕ avaliado, ou interpolado, na face f .

Analogamente ao caso anterior, reescreve-se o somatório como:

$$\nabla \phi \xrightarrow{\text{discr}} \frac{1}{V_i} \sum_{f=1}^{N_i} \phi_f \mathbf{A}_f = \frac{1}{V_i} \left[\sum_{f_A=1}^{N_A} \phi_{f_A} \mathbf{A}_{f_A} - \sum_{f_B=1}^{N_B} \phi_{f_B} \mathbf{A}_{f_B} \right]. \quad (4-10)$$

Para obter o valor de ϕ na face (ϕ_f), adota-se neste trabalho um esquema de interpolação linear entre o valor disponível nos centróides "dono" e "vizinho" da mesma, ponderado pelas distâncias, de acordo com o esquema de diferenças centradas. Assim,

$$\phi_f = w \phi_A + (1 - w) \phi_B, \quad \text{com } w = \frac{|Bf|}{|AB|}, \quad (4-11)$$

onde $|AB|$ e $|Bf|$ são os módulos dos segmentos de reta unindo os respectivos pontos. A extensão da interpolação linear para casos vetoriais é imediata.

Gradiente na Face

Caso seja necessário avaliar o gradiente numa face, e a direção de interesse seja apenas a do segmento de reta que une os dois centróides vizinhos (A e B), existe uma alternativa mais eficiente do que a simples interpolação dos gradientes calculados de acordo com o ítem 4.2.1.

Assim, ao invés de se usar

$$\mathbf{AB} \cdot (\nabla\phi)_f = \mathbf{AB} \cdot [w(\nabla\phi)_A + (1-w)(\nabla\phi)_B], \quad (4-12)$$

sendo $(\nabla\phi)_A$ calculado por meio da Eq. 4-10, pode-se utilizar diretamente

$$\mathbf{AB} \cdot (\nabla\phi)_f = \phi_B - \phi_A. \quad (4-13)$$

A diferença entre essas duas formas de se determinar a projeção sobre o segmento \mathbf{AB} do gradiente na face é a base da metodologia proposta no Capítulo 5. Novamente, a extensão para o caso de um gradiente de um vetor é trivial.

Termo Convectivo

A versão discreta do termo advectivo da equação de transporte Eq. 4-1 pode ser construída trivialmente a partir do operador divergente, Eq. 4-8, bastando para isso, substituir \mathbf{a} por $\rho \mathbf{u} \phi$. Como $(\rho \mathbf{u}) \cdot \mathbf{A} \mathbf{f}$ tem um significado físico de fluxo de massa que cruza a face f , \dot{m}_f , costuma-se aproximar

$$(\rho \mathbf{u} \phi)_f \cdot \mathbf{A} \mathbf{f} \approx \dot{m}_f \phi_f, \quad (4-14)$$

onde

$$\dot{m}_f = \mathbf{A} \mathbf{f}_f \cdot (\rho \mathbf{u})_f. \quad (4-15)$$

O termo advectivo discretizado pode então ser obtido de

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi) \xrightarrow{\text{discr}} = \frac{1}{V_i} \left[\sum_{f_A=1}^{N_A} \dot{m}_{f_A} \phi_{f_A} - \sum_{f_B=1}^{N_B} \dot{m}_{f_B} \phi_{f_B} \right]. \quad (4-16)$$

Interpolações lineares, tal como a Eq. 4-11, são utilizadas tanto para ϕ como para o fluxo de massa \dot{m} .

Termo Difusivo

A transformação do termo difusivo num operador discreto também se reduz a uma aplicação direta do esquema para o divergente (4.2.1), operando sobre o vetor $\Gamma \nabla \phi$,

$$\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) \xrightarrow{\text{discr}} = \frac{1}{V_i} \left[\sum_{f_A=1}^{N_A} \Gamma_{f_A} (\nabla \phi)_{f_A} \cdot \mathbf{A} \mathbf{f}_{f_A} - \sum_{f_B=1}^{N_B} \Gamma_{f_B} (\nabla \phi)_{f_B} \cdot \mathbf{A} \mathbf{f}_{f_B} \right]. \quad (4-17)$$

Em malhas ortogonais, o produto interno $(\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{A} \mathbf{f}_f$ pode ser eficientemente calculado de acordo com o esquema de gradiente na face (4.2.1), logo

$$(\Gamma \nabla \phi)_f \cdot \mathbf{A} \mathbf{f}_f \approx (\Gamma)_f |\mathbf{A} \mathbf{f}_f| \frac{[\phi_B - \phi_A]}{|\mathbf{A} \mathbf{B}|}. \quad (4-18)$$

O problema com malhas não ortogonais advém do fato de $\mathbf{A} \mathbf{f}$ não estar alinhado com $\mathbf{A} \mathbf{B}$, tornando impossível a utilização do esquema exposto em 4.2.1 (Eq. 4-13). Tal dificuldade pode ser contornada decompondo-se $\mathbf{A} \mathbf{f}$ em duas componentes, sendo uma delas paralela à $\mathbf{A} \mathbf{B}$.

Assim, o termo $\mathbf{A} \mathbf{f}_f \cdot (\nabla \phi)_f$ pode ser escrito como

$$\mathbf{A} \mathbf{f}_f \cdot (\nabla \phi)_f = \mathbf{d} \cdot (\nabla \phi)_f + (\mathbf{A} \mathbf{f}_f - \mathbf{d}) \cdot (\nabla \phi)_f, \quad (4-19)$$

onde \mathbf{d} é o componente de $\mathbf{A} \mathbf{f}_f$ paralelo à $\mathbf{A} \mathbf{B}$, e o primeiro termo do lado direito pode então ser calculado com o auxílio da Eq. 4-13.

Várias propostas para essa decomposição são detalhadamente apresentadas em Jasak (1996), com as respectivas implicações numéricas em termos de estabilidade e erro de truncamento.

Entretanto, no que se refere aos objetivos do corrente trabalho, o exposto acima é considerado o suficiente.

4.2.2 Discretização Temporal

O processo de discretização espacial filtra uma função contínua $a(\mathbf{x}, t)$, disponibilizando N_V valores de $\bar{a}(i, t)$, sendo N_V o número total de volumes de controle. Assim, a função original foi apenas parcialmente discretizada,

uma vez que t ainda é uma variável contínua. A equação de transporte semi-discretizada pode ser, então, escrita em forma matricial, como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho [I] [\phi_i(t)]) + [C] [\phi_i(t)] = [D] [\phi_i(t)] + [F] [\phi_i(t)] , \quad (4-20)$$

onde as matrizes $[C]$, $[D]$, e $[F]$, são as resultantes do processo de discretização espacial dos termos advectivo, difusivo e fonte, respectivamente, e $[I]$ é a matriz identidade, todas elas com $N_V \times N_V$ elementos. O vetor $\phi_i(t)$ contém as variáveis de interesse, correspondentes a cada volume de controle i .

A discretização temporal empregada no presente trabalho (disponível no código OpenFOAM), consiste de uma aproximação de segunda ordem, conhecida como diferenças retrógradas (*backward differences*, BD) (Jasak, 1996). Neste esquema, a integral responsável pela filtragem temporal reduz-se a uma simples amostragem no instante de tempo $t = t_{n+1}$. Considerando-se que as matrizes $[C]$, $[D]$, e $[F]$ não variam ao longo do tempo, obtém-se o seguinte sistema de equações:

$$\rho [I] \left(\frac{\partial}{\partial t} [\phi_i(t)] \right)_{n+1} + [C] [\phi_i^{n+1}] = [D] [\phi_i^{n+1}] + [F] [\phi_i^{n+1}] , \quad (4-21)$$

onde se considerou ρ independente do tempo.

A derivada temporal no instante futuro (t_{n+1}), no primeiro termo da Eq. 4-21, é calculada com aproximação de ordem dois a partir de séries de Taylor, envolvendo três níveis temporais: o próximo instante de tempo, t_{n+1} , o atual, ou o que contém as informações mais atualizadas, t_n , e o instante passado, t_{n-1} . Tem-se então, que

$$\left(\frac{\partial \phi_i(t)}{\partial t} \right)_{n+1} = \frac{1}{2\Delta t} [3\phi_i^{n+1} - 4\phi_i^n + \phi_i^{n-1}] . \quad (4-22)$$

Levando-se a Eq. 4-22 à Eq. 4-21 obtém-se:

$$\rho [I] \frac{1}{2\Delta t} [3\phi_i^{n+1} - 4\phi_i^n + \phi_i^{n-1}] + [C] [\phi_i^{n+1}] = [D] [\phi_i^{n+1}] + [F] [\phi_i^{n+1}] , \quad (4-23)$$

que, resolvida sucessivamente para uma seqüência de instantes de tempo, fornecerá a evolução temporal de ϕ .

Em qualquer dos casos acima, a discretização resulta num sistema de N_V equações a N_V incógnitas, que pode ser resolvido por métodos apropriados de álgebra linear. A princípio, a escolha do método de solução para esse sistema é irrelevante do ponto de vista da previsão do escoamento, que é o foco do presente trabalho. Na prática, dificilmente o erro cometido na solução do sistema de equações resultante supera os demais erros, provocados ao longo de todo o processo, desde a modelagem física das equações, até as discretizações temporais e espaciais. Não obstante, por razões óbvias, dá-se preferência a algoritmos rápidos, se possível, com pouco armazenamento em memória, tal como métodos iterativos com gradiente conjugado (Golub e Van Loan, 1996).

4.3

Discretização das Equações de Navier-Stokes

Como apresentado no Capítulo 3, as equações de Navier-Stokes filtradas, onde a turbulência é modelada por meio de um processo difusivo, são expressas como:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u}) = \nabla \cdot [\nu_{eff} (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u})] - \nabla p + \mathbf{f}_b, \quad (4-24a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (4-24b)$$

onde $\nu_{eff} = \nu + \nu_{SGS}$.

Ambas as equações podem ser consideradas como um caso particular da equação geral de transporte, Eq. (4-1). No caso da continuidade $\phi = 1$, $\Gamma = Sc = Sp = 0$; já no caso da equação de conservação de quantidade de movimento $\phi = \mathbf{u}$, $\Gamma = \nu_{eff}$, $Sc = \mathbf{f}_b + \nabla \cdot [\nu_{eff} (\nabla^T \mathbf{u})]$ e $Sp = 0$. O termo da pressão também é um termo de fonte constante Sc , porém como é desconhecido, necessita de tratamento especial.

Apesar das equações de transporte que governam o movimento de um fluido incompressível serem apenas casos particulares da equação de transporte, Eq. (4-1), algumas características peculiares requerem tratamento especial. Entre elas, destacam-se a não-linearidade do termo advectivo, que neste caso é quadrático em \mathbf{u} , e o acoplamento implícito entre velocidade e pressão, pela equação de continuidade.

A não-linearidade do termo advectivo não traz nenhuma dificuldade adicional, já que, a matriz $[C]$ é avaliada no instante de tempo n , logo, de

acordo com a Eq. 4-14,

$$(\rho \mathbf{u} \mathbf{u})_f \cdot \mathbf{A}_f \approx \dot{m}_f^n \mathbf{u}_f^{n+1}. \quad (4-25)$$

Porém, devido ao caráter advectivo deste termo, visando à estabilidade numérica do método, pode-se utilizar diferentes interpolações para determinar \mathbf{u}_f^{n+1} . Uma possibilidade é, como vimos, empregar uma interpolação linear de acordo com o esquema de diferenças centrais. No entanto, pode-se alternativamente, atribuir pesos maiores para informações a montante da face, o que resulta numa família de esquemas "polarizados", sendo o mais famoso destes, o esquema *Upwind* de primeira ordem. Neste último, o peso para o valor disponível no centróide a montante da face é um, enquanto para o a jusante, zero.

O termo de forçamento de pressão é o responsável por garantir a conservação de massa (Eq. 4-24b), a qual, implicitamente, acopla os campos de velocidade e pressão. Assim, associada à equação de conservação de massa, deve haver uma equação para a pressão.

Neste estudo, o acoplamento é feito através do procedimento PISO, proposto por Issa (1985). Para tal, reescreve-se o sistema linear resultante das discretizações das equações de quantidade de movimento como:

$$a_P \mathbf{u}_P = \mathbf{H}(\mathbf{u}) - \nabla p, \quad (4-26)$$

enquanto para a conservação de massa, tem-se que:

$$\sum_{face} \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{A}_f = 0. \quad (4-27)$$

Na Eq. 4-26, a_P são os coeficientes que multiplicam as incógnitas principais (\mathbf{u}_P) no sistema linear resultante. Por sua vez, $\mathbf{H}(\mathbf{u})$ é formado, não só pelos coeficientes fora da diagonal, que multiplicam os vizinhos (\mathbf{u}_N), como também, pelos termos fontes, que incluem o termo transiente, condições de contorno, e demais fontes, porém excluindo o gradiente de pressão,

$$\mathbf{H}(\mathbf{u}) = \sum_N a_N \mathbf{u}_N + b_0 \mathbf{u}^0 + b, \quad (4-28)$$

onde b_0 são os coeficientes que multiplicam os valores antigos das incógnitas, simbolicamente representados por \mathbf{u}^0 , e b , as demais fontes.

A partir da Eq. 4-26, as velocidades \mathbf{u}_P podem ser expressas por:

$$\mathbf{u}_P = \frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a_P} - \frac{1}{a_P} \nabla p, \quad (4-29)$$

que interpolada, fornece os valores nas faces,

$$(\mathbf{u}_P)_f = \left(\frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a_P} \right)_f - \left(\frac{1}{a_P} \nabla p \right)_f. \quad (4-30)$$

Tomando-se o produto interno desta última equação por \mathbf{A}_f e realizando-se o somatório sobre as faces do volume de controle, tem-se:

$$\begin{aligned} \sum_{faces} \mathbf{A}_f \cdot (\mathbf{u}_P)_f &= \sum_{faces} \mathbf{A}_f \cdot \left(\frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a_P} \right)_f - \sum_{faces} \mathbf{A}_f \cdot \left(\frac{1}{a_P} \nabla p \right)_f \\ &\approx \sum_{faces} \mathbf{A}_f \cdot \left(\frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a_P} \right)_f - \sum_{faces} \mathbf{A}_f \cdot \left(\frac{1}{a_P} \right)_f (\nabla p)_f, \end{aligned} \quad (4-31)$$

a qual deve se anular para cada volume de controle, a fim de garantir conservação de massa na forma discreta. Note-se que a passagem da Eq. 4-30 para a Eq. 4-31 corresponde à versão discreta do operador divergente, de acordo com o esquema apresentado na seção 4.2.1.

Assim, têm-se uma equação para a pressão que força a garantia da conservação de massa, que juntamente com a conservação discreta de momento, forma o sistema discreto fechado que rege o escoamento:

$$\mathbf{u}_P = \frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a_P} - \frac{1}{a_P} \nabla p, \quad (4-32a)$$

$$\sum_{faces} \mathbf{A}_f \cdot \left(\frac{1}{a_P} \right)_f (\nabla p)_f = \sum_{faces} \mathbf{A}_f \cdot \left(\frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a_P} \right)_f, \quad (4-32b)$$

onde o fluxo $\mathbf{A}_f \cdot (\mathbf{u})_f$ é calculado como

$$\mathbf{A}_f \cdot (\mathbf{u})_f = \mathbf{A}_f \cdot \left(\frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a_P} \right)_f - \mathbf{a}_f \cdot \left(\frac{1}{a_P} \right)_f (\nabla p)_f. \quad (4-33)$$

Este sistema é resolvido de forma segregada, de acordo com o algoritmo PISO (1985), que envolve três passos principais:

1. A equação de momento (4-32a) é resolvida primeiramente, sendo os coeficientes a_P , \mathbf{H} e gradiente de pressão calculados com os valores mais recentes de \mathbf{u} disponíveis (\mathbf{u}^n). A solução da equação de momento

fornece então uma previsão para um novo campo de velocidades, que no entanto deve ser corrigido de forma a garantir conservação de massa. Este passo é chamado de preditor do momento.

2. Usando os valores previstos de \mathbf{u} , o operador $\mathbf{H}(\mathbf{u})$ é construído e a equação de pressão (4-32b) pode ser formulada. A solução da equação de pressão fornece uma primeira estimativa do novo campo de pressões. Este passo é conhecido como solução da pressão.
3. Os fluxos podem ser recalculados através da Eq. 4-33, de forma a serem consistentes com o novo campo de pressão. Este novo fluxo satisfaz a conservação de massa em cada volume de controle. O campo de velocidades também deve ser corrigido, de maneira explícita, utilizando-se a Eq. 4-29.

Os itens 2 e 3 formam um ciclo interno do algoritmo PISO, o qual pode ser repetido até que se atinja uma certa tolerância, ou um certo número de iterações.

Pode-se dizer, então, que o PISO consiste, para cada passo de tempo, numa previsão implícita do momento, seguida de uma série de ciclos de solução de pressão, com correções explícitas de velocidade.

O objetivo deste capítulo foi então, mais do que expor os muitos detalhes internos do código OpenFoam, apresentar os tratamentos numéricos mais relevantes para o presente trabalho, seja para a utilização dos tradicionais modelos sub-malha (Capítulo 7), seja para formar um embasamento que facilite as discussões sobre uma possível alternativa para a modelagem sub-malha, apresentada no próximo Capítulo.