



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
Faculdade de Engenharia Mecânica

ADYLLYSON HEVERTON GOMES DO NASCIMENTO

**Solução Numérica de Escoamentos
Incompressíveis em Canais Planos com
Expansões Graduais**

CAMPINAS
2019

ADYLLYSON HEVERTON GOMES DO NASCIMENTO

Solução Numérica de Escoamentos Incompressíveis em Canais Planos com Expansões Graduais

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica, na Área de Térmica e Fluidos

Orientador: Prof. Dr. José Ricardo Figueiredo

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO ALUNO Adyllyson Heverton Gomes do Nascimento, E ORIENTADO PELO Prof. Dr. José Ricardo Figueiredo.

.....
ASSINATURA DO ORIENTADOR

**CAMPINAS
2019**

Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s): CAPES, 1784768

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura
Elizangela Aparecida dos Santos Souza - CRB 8/8098

N17s Nascimento, Adyllyson Heverton Gomes do, 1993-
Solução numérica de escoamentos incompressíveis em canais planos com expansões graduais / Adyllyson Heverton Gomes do Nascimento. – Campinas, SP : [s.n.], 2019.

Orientador: José Ricardo Figueiredo.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica.

1. Métodos numéricos. 2. Método dos volumes finitos. 3. Fluidodinâmica computacional (CFD). 4. Mecânica dos fluidos. I. Figueiredo, José Ricardo, 1953-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Mecânica. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Numerical solution of incompressible flows in flat channels with gradual expansions

Palavras-chave em inglês:

Numerical methods

Finite volume method

Computational fluid dynamics (CFD)

Fluid mechanics

Área de concentração: Térmica e Fluídos

Titulação: Mestre em Engenharia Mecânica

Banca examinadora:

José Ricardo Figueiredo [Orientador]

Carlos Alberto Carrasco Altemani

Aristeu da Silveira Neto

Data de defesa: 19-02-2019

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Mecânica

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENERGIA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO ACADÊMICO

Solução Numérica de Escoamentos Incompressíveis em Canais Planos com Expansões Graduais

Autor: Adyllyson Heverton Gomes do Nascimento

Orientador: Prof. Dr. José Ricardo Figueiredo

A Banca Examinadora composta pelos membros abaixo aprovou esta Dissertação:

Prof. Dr. José Ricardo Figueiredo
DE/FEM/UNICAMP

Prof. Dr. Carlos Alberto Carrasco Altemani
DE/FEM/UNICAMP

Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto
FEMEC/UFU

A Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no processo de vida acadêmica do aluno.

Campinas, 19 de fevereiro de 2019.

Dedicatória

À minha família, em especial aos meus pais e meu irmão, fonte inesgotável de carinho e presente ao longo de todo o meu caminho.

À minha namorada, melhor amiga e constante imprescindível em todos os momentos.

Agradecimentos

Agradeço em primeiro lugar a Deus pelo dom da vida, pela saúde, força e fé para superar as dificuldades.

Agradeço aos meus pais, Lucia Nascimento e Francisco Nascimento, por terem sido os pilares da minha educação e me dado as oportunidades de crescer, evoluir e que sem eles eu não me tornaria a pessoa que sou hoje.

Agradeço também à minha namorada, Cida Ferreira, por todo o apoio emocional e paciência nos momentos de ausência ao longo desse mestrado.

Não poderia deixar de expressar minha extrema gratidão pelo meu orientador, José Ricardo Figueiredo, por todo o ensino e apoio em todas etapas da realização deste projeto, ao longo de inúmeras horas de reunião e orientação.

Externo meu profundo agradecimento ao Prof. José Hilton, cujos inumeráveis incentivos tiveram grande importância na minha vinda à UNICAMP para realizar esse mestrado.

Um agradecimento especial aos amigos que fiz ao longo desses últimos anos, que mesmo de forma indireta foram muito importantes para que esse mestrado fosse completado.

Por fim, agradeço também aos professores e funcionários da Faculdade de Engenharia Mecânica da UNICAMP, que por meio do seu suporte técnico contribuíram para o meu desenvolvimento acadêmico. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Resumo

NASCIMENTO., Adyllyson Heverton Gomes do. Solução Numérica de Escoamentos Incompressíveis em Canais Planos com Expansões Graduais. 2019. 119p. Dissertação de Mestrado. Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

Este trabalho apresenta um estudo numérico do problema de escoamento incompressível de fluidos viscosos em canais simétricos com expansão gradual. O método de solução das equações da continuidade e de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis se baseia na descrição euleriana do escoamento, empregando as variáveis primitivas na forma divergente, dentro do contexto da formulação de volumes finitos, com o esquema UNIFAES para a discretização das derivadas espaciais da equação de transporte advectivo-difusivo. O método de solução adota o procedimento explícito de integração temporal do campo de velocidades e usa a equação de Poisson para o campo de pressão, cuja solução é obtida com várias iterações por passo de velocidade com o intuito de garantir conservatividade de massa durante todo o regime transitório. Em estudos comparativos neste contexto, a pouco conhecida estrutura de malhas semi-deslocada vem se destacando pela acuidade, em relação às malhas tradicionais, a deslocada e a co-localizada. Além disso, observou-se que na malha semi-deslocada uma superfície plana não-paralela aos eixos pode adequar-se de forma regular à malha cartesiana, uma flexibilidade geométrica inexistente nas outras malhas. Assim, a malha semi-deslocada permite que o problema de expansões formadas por paredes planas seja posto em coordenadas cartesianas, através da escolha adequada da razão de aspecto da malha numérica. A presente proposta explora esta flexibilidade geométrica da malha semi-deslocada para resolver com simplicidade um problema relevante.

Palavras-chave: Métodos Numéricos, Expansão Gradual, Volumes Finitos, UNIFAES, CFD.

Abstract

NASCIMENTO., Adyllyson Heverton Gomes do. Numerical Solution of Incompressible Flows in Flat Channels with Gradual Expansions. 2019. 119p. Master's Dissertation. School of Mechanical Engineering, University of Campinas, Campinas.

This work presents a numerical study of the incompressible flow problem of viscous fluids in symmetric channels with gradual expansion. The solution method of the continuity and Navier-Stokes equations for incompressible flows is based on the Eulerian description of the flow. It uses the primitive variables in the divergent form, in the context of the finite volume approach, with the UNIFAES scheme for the discretization of the spatial derivatives of the advective-diffusive transport equation. The solution method adopts the explicit time velocity integration and uses the Poisson equation for the pressure field. The solution of the Poisson equation is obtained with several iterations per velocity step in order to ensure mass conservation throughout the transient regime. In comparative studies in this context, the almost unknown semi-staggered mesh structure has been highlighted by accuracy, in relation to the traditional, staggered and collocated meshes. In addition, it was observed that in the semi-staggered mesh a flat surface non-parallel to the axes can be adjusted in a regular way to the Cartesian mesh. Such geometrical flexibility does not exist in other meshes. Thus, the semi-staggered mesh allows the problem of expansions formed by flat walls to be placed in Cartesian coordinates, by appropriate choice of the aspect ratio of the numerical mesh. The present proposal explores this geometric flexibility of the semi-staggered mesh to solve with simplicity a relevant problem.

Keywords: Numerical Methods, Gradual Expansion, Finite Volume, UNIFAES, CFD.

Lista de Ilustrações

3.1	Volume de controle bidimensional para discretização de volumes finitos.	41
3.2	Esquema unidimensional do volume de controle.	43
3.3	Molécula computacional do esquema UNIFAES.	47
3.4	Estrutura dos diferentes tipos de malhas computacionais.	52
3.5	Indexação das variáveis na malha semi-deslocada.	53
3.6	Estêncil numérico da equação de Poisson para pressão na malha quadrada. . . .	55
3.7	Tratamento da equação da pressão nas fronteiras do domínio.	56
4.1	Geometria do canal simétrico com expansão.	61
4.2	Descrição esquemática dos padrões de escoamento simétricos e assimétricos. .	63
4.3	Linhas de corrente para o caso $Re = 200$	65
4.4	Verificação da solução de independência de malha para o caso $Re = 200$	65
4.5	Comparação dos perfis de velocidade com experimentos para $Re = 35$	66
4.6	Comparação dos perfis de velocidade com experimentos para $Re = 80$	67
4.7	Comparação dos perfis de velocidade com experimentos para $Re = 187$	68
4.8	Diagrama de bifurcação para $D/d = 2$	69
4.9	Esquema dos comprimentos de reatamento.	69
4.10	Linhas de corrente em vários números de Reynolds para $D/d = 2$	70
4.11	Linhas de corrente em vários números de Reynolds para $D/d = 3$	71
4.12	Evolução dos comprimentos das zonas de recirculação com o número de Reynolds para diferentes taxas de expansão.	72
4.13	Arranjo da malha numérica utilizada nas simulações.	74
4.14	Nomenclatura dos comprimentos de separação e reatamento da expansão gradual.	75
4.15	Linhas de corrente em vários números de Reynolds para $\alpha = 10^\circ$	76
4.16	Linhas de corrente em vários números de Reynolds para $\alpha = 15^\circ$	77
4.17	Linhas de corrente em vários números de Reynolds para $\alpha = 20^\circ$	78
4.18	Evolução dos comprimentos das zonas de recirculação com o número de Reynolds para diferentes semi-ângulos de expansão.	80
4.19	Comprimentos de separação e reatamento em vários semi-ângulos de expansão para $Re = 75$	81
4.20	Efeito do semi-ângulo de expansão no coeficiente de pressão em vários números de Reynolds.	82
B.1	Extrapolação da propriedade ϕ pelo esquema upwind de segunda ordem. . . .	105
B.2	Curva de interpolação do esquema QUICK.	106
B.3	Volume de controle do esquema LOADS.	107

B.4	Esquema do sistema de coordenadas analítico e numérico.	108
B.5	Soluções analíticas encontradas para $Pe = 100$, $\lambda = 10$, $\theta = 22,5^\circ$	110
B.6	Perfis exatos e numéricos para as funções A, B, C e D em $x = 0,4$, malha 10×10 , $Pe = 100$, $\lambda = 10$, $\theta = 22,5^\circ$	112
B.7	Erro quadrático médio contra o refinamento para as funções A, B, C e D, $Pe = 100$, $\lambda = 10$, $\theta = 22,5^\circ$	113
B.8	Erro quadrático médio em função do ângulo θ e do número de Peclet (Pe) para a função A, malha 10×10 e $\lambda = 10$	114
B.9	Perfis exatos e numéricos e erro quadrático médio contra o refinamento para função A, $Pe = 10^9$, $\lambda = 10$ e $\theta = 22,5^\circ$	115

Lista de Tabelas

4.1	Resumo dos números críticos de Reynolds obtidos por diferentes autores. . . .	64
4.2	Malhas utilizadas para diferentes semi-ângulos de expansão.	75
4.3	Número crítico de Reynolds para diferentes semi-ângulos de expansão.	79
A.1	Comprimentos de separação e reatamento da expansão abrupta para $D/d = 2$. .	95
A.2	Comprimentos de separação e reatamento da expansão abrupta para $D/d = 3$. .	96
A.3	Comprimentos de separação e reatamento da expansão gradual para $\alpha = 10^\circ$. .	97
A.4	Comprimentos de separação e reatamento da expansão gradual para $\alpha = 15^\circ$. .	98
A.5	Comprimentos de separação e reatamento da expansão gradual para $\alpha = 20^\circ$. .	99
A.6	Comprimentos de separação e reatamento da expansão gradual para $\alpha = 26,56^\circ$. .	100
A.7	Comprimentos de separação e reatamento da expansão gradual para $\alpha = 30^\circ$. .	101

Lista de Abreviaturas e Siglas

Letras Latinas

A_u, A_v	-	Termos de fluxo advectivo-difusivo das componentes de momentum
x, y, z	-	Coordenadas espaciais $[m]$
u, v	-	Componentes da velocidade $[m/s]$
p	-	Pressão $[Pa]$
g	-	Aceleração gravitacional $[m/s^2]$
t	-	Tempo $[s]$
L_c	-	Comprimento característico $[m]$
V_c	-	Velocidade característica $[m/s]$
Re	-	Número de Reynolds
x^*, y^*	-	Coordenadas espaciais adimensionalizadas
u^*, v^*	-	Componentes da velocidade adimensionalizadas
p^*	-	Pressão hidrostática total adimensionalizada
t^*	-	Tempo adimensional
J	-	Fluxo advectivo-difusivo combinado
S	-	Termo fonte da equação de transporte
$\vec{V}$	-	Vetor velocidade
$\vec{A}$	-	Vetor área
P	-	Ponto nodal central relativo ao volume de controle
E	-	Ponto nodal vizinho a leste
W	-	Ponto nodal vizinho a oeste
N	-	Ponto nodal vizinho a norte
S	-	Ponto nodal vizinho a sul
i, j	-	Posicionamento dos pontos nodais em cada direção na malha
e	-	Interface leste do volume de controle
w	-	Interface oeste do volume de controle
n	-	Interface norte do volume de controle
s	-	Interface sul do volume de controle
C	-	Constantes
K	-	Termo fonte da equação geradora

Letras Gregas

ϕ	- Propriedade de transporte genérica
ρ	- Densidade $[kg/m^3]$
μ	- Viscosidade dinâmica $[Pa.s]$
ν	- Viscosidade cinemática $[m^2/s]$
∂	- Derivada parcial
∇	- Operador nabla
δ_x, δ_y	- Dimensões do volume de controle em cada coordenada
$\Delta x, \Delta y$	- Dimensões da malha em cada coordenada
π, Π, χ, ψ	- Coeficientes do esquema UNIFAES

Outras Notações

$\forall$	- Volume do volume de controle infinitesimal
-----------	--

Siglas

UNIFAES	- Unified Finite Approach Exponential-Type Scheme
QUICK	- Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematic
LOADS	- Locally Analytic Differencing Scheme
SIMPLE	- Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations
SIMPLER	- SIMPLE(Revised)
SIMPLEC	- SIMPLE(Consistent)
MAC	- Marker and Cell
WUDS-E	- Weighted Upstream Differencing Scheme-Extended

SUMÁRIO

Lista de Ilustrações	9
Lista de Tabelas	11
Lista de Abreviaturas e Siglas	12
SUMÁRIO	14
1 INTRODUÇÃO	16
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	20
2.1 Discussão Baseada na Metodologia Empregada	20
2.1.1 Formulação de Variáveis Primitivas e Integração Temporal Explícita . .	21
2.1.2 Esquema UNIFAES para Volumes Finitos	22
2.1.3 Estrutura da Malha Numérica	24
2.1.4 Forma de Análise dos Resultados	26
2.2 Pesquisa Bibliográfica	27
2.2.1 Métodos de Solução das Equações de Navier-Stokes	27
2.2.2 Estudos Experimentais de Escoamentos em Canais com Expansão . . .	29
2.2.3 Estudos Numéricos de Escoamentos em Canais com Expansão	32
3 DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO E NUMÉRICO	38
3.1 Método de Volumes Finitos	40
3.2 Esquema UNIFAES	42
3.2.1 Discretização Exponencial	42
3.2.2 Cálculo do Termo Fonte	45
3.3 Método Explícito para as Equações de Navier-Stokes	48
3.3.1 Equação de Poisson para Pressão	48
3.3.2 Malha Semi-Deslocada	51
3.3.3 Tratamento na Fronteira da Equação de Poisson para Pressão	56
3.4 Análise das Incertezas Numéricas	57
3.4.1 Extrapolação de Richardson	58
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	60
4.1 Escoamento em Canais com Expansão	61
4.1.1 Resultados para Expansão Abrupta - Validação	63
4.1.2 Resultados para Expansão Gradual	73

5	CONCLUSÕES	84
6	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	86
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	87
	APÊNDICES	95
A	– Tabelas dos Resultados Extrapolados	95
A.1	Expansão Abrupta	95
A.2	Expansão Gradual	97
B	– Desempenho de Esquemas de Volumes Finitos para a Equação de Transporte	
	Linear Advectivo-Difusivo	103
B.1	Esquemas de Interpolação de Volumes Finitos	103
B.1.1	Esquema Upwind de Segunda Ordem	105
B.1.2	Esquema QUICK	105
B.1.3	Esquema LOADS	106
B.2	Transporte Advectivo-Difusivo em Escoamento Paralelo	108
B.3	Resultados e Discussão	110
B.4	Conclusões	115
B.5	Ordem de Acurácia do Esquema QUICK	116

1 INTRODUÇÃO

Nos sistemas de escoamento interno, muitas vezes é necessário desacelerar o escoamento para recuperar a pressão estática. Canais com expansão de área seccional constituem componentes importantes em muitos dispositivos de engenharia, como válvulas, máquinas de fluxo, trocadores de calor e muitos outros, bem como em escoamentos geofísicos, na circulação sanguínea e em outros contextos. Micro-combustores que requerem mistura de fluidos compressíveis e incompressíveis em números de Reynolds muito baixos são outro exemplo de aplicação análoga, na qual a compreensão do efeito da instabilidade do escoamento no aprimoramento da mistura e como a geometria os afeta, pode resultar numa melhora da eficiência.

Embora a geometria de um canal com expansão gradual possa parecer simples, o escoamento é complexo. O conceito de trabalho consiste na ampliação gradual de sua área seccional de tal forma que o escoamento é desacelerado. Como resultado, de acordo com o princípio de Bernoulli, a pressão estática aumenta. No entanto, devido ao gradiente de pressão adverso, o escoamento pode separar-se das paredes laterais. A separação do escoamento causa grandes perdas de pressão e deteriora a função do canal com expansão gradual.

Nas últimas quatro décadas, muitos esforços foram dedicados ao estudo do escoamento sobre uma expansão abrupta, em regime laminar, para determinar os mecanismos de instabilidade que governam o escoamento, tendo merecido também estudos experimentais. Por exemplo, pode-se citar os trabalhos de Durst *et al.* (1974), Cherdron *et al.* (1978), Armaly *et al.* (1983), Fearn *et al.* (1990) e Durst *et al.* (1993). Tal fato o tornou um problema prototípico sendo muito empregado como caso-teste para programas de solução das equações da continuidade e de Navier-Stokes pela simplicidade geométrica da configuração cartesiana. Por outro lado, canais com expansão gradual, em regime laminar, têm sido bem menos estudados. A primeira investigação dessa geometria partiu de observações experimentais realizadas por Sobey (1985), enquanto que o primeiro estudo numérico surgiu com Shapira *et al.* (1990), empregando análise de estabilidade linear baseada no método de elementos finitos.

As observações de escoamentos laminares em canais bidimensionais com expansão simétrica mostraram que esses escoamentos se tornam assimétricos à medida que o número de Reynolds aumenta, incluindo a perda de estabilidade da solução simétrica. A intrigante física desses escoamentos é explicada pela observação de que um aumento da velocidade próximo a uma parede leva a uma diminuição na pressão que mantém a assimetria do escoamento (Shapira

et al., 1990). Este fenômeno de aderência à superfície é chamado de efeito Coanda. Cálculos numéricos complementares do ponto de bifurcação de quebra da simetria por Fearn *et al.* (1990) e análises de estabilidade linear de escoamentos em canais simétricos por Shapira *et al.* (1990), indicam que esse comportamento experimental observado ocorre em uma bifurcação das soluções das equações da continuidade e de Navier-Stokes.

Uma grande parte dos processos de transporte advectivo-difusivo em meio fluido ocorre em situações onde o domínio físico não tem uma geometria regular. Alguns exemplos práticos deste tipo de configuração foram mencionados no início do capítulo. Para simulação de escoamento utilizando uma formulação em coordenadas cartesianas, os métodos de diferenças finitas e de volumes finitos que, há tempos tem sido aplicados para o tratamento das equações da continuidade e de Navier-Stokes, tem sido utilizados com sucesso em inúmeros casos desde as suas primeiras implementações. Para simulação de escoamento em domínios irregulares, algumas aproximações foram desenvolvidas para um tratamento especial nas fronteiras. A derivação de expressões especiais de interpolação e a construção de malhas diferenciadas são alguns destes artifícios utilizados para a solução de problemas quando o domínio apresenta uma geometria irregular (Ferziger e Peric, 2001; Morton e Mayers, 2005).

Patankar (1980) apresenta uma alternativa relativamente simples para este tratamento especial nas fronteiras, para o método de volumes finitos, onde é gerada uma malha regular que envolve todo o domínio tratado, incluindo as regiões formadas pelas fronteiras irregulares, de modo que o excedente da malha é tratada de forma distinta. Então a malha que será considerada para o domínio físico será composta por regiões ativas e inativas, sendo que as fronteiras físicas do problema serão representadas pelas interfaces das duas regiões. Os cálculos são feitos em todo o domínio simulado, porém o método consiste em atribuir valores conhecidos da variável dependente às regiões inativas. É equivalente a representar como uma região sólida aquela região fora do domínio do escoamento do fluido. O método possui a desvantagem de não utilizar eficientemente a memória computacional, sendo necessário guardar informações para aquelas regiões inativas e ainda, se a fronteira física não coincidir com as fronteiras dos volumes de controle, esta deverá ser aproximada por uma série de degraus retangulares, o que faz necessário um refinamento mais acentuado nas regiões próximas às fronteiras.

Para evitar situações desta natureza, as opções comumente utilizadas seriam o desenvolvimento de outras alternativas, nos métodos de diferenças finitas e volumes finitos, para que problemas de domínios irregulares fossem contornados, como por exemplo a solução das equações em coordenadas generalizadas ou em malhas não-estruturadas, ou ainda a utilização do método

de elementos finitos cuja formulação traz um grande atrativo que é tratar geometrias irregulares mais facilmente. Para um canal com geometria irregular, as várias abordagens presentes na literatura de volumes finitos, empregam solução das equações em coordenadas generalizadas ou em malhas não-estruturadas, como pode ser encontrado em Coelho e Pereira (1993), Tsui e Wang (1995), Rosa e Pinho (2006) e Tsui e Pan (2006). Já estudos aplicando o método de elementos finitos são reportados por Shapira *et al.* (1990) e Allery *et al.* (2004). Recentemente, já se encontra soluções deste tipo de problema utilizando métodos espectrais (Swaminathan *et al.*, 2010; Jotkar *et al.*, 2015).

A importância prática dos canais com expansão gradual responde parcialmente pelos objetivos desta proposta. Tendo em vista as várias abordagens aplicadas a geometrias irregulares, tal fato reforça a importância da flexibilidade geométrica da malha semi-deslocada, permitindo que o problema de expansões formadas por paredes planas seja posto em coordenadas cartesianas, através da escolha adequada da razão de aspecto da malha numérica. Nesse contexto, outro objetivo é explorar a capacidade da malha semi-deslocada ajustar-se de forma regular a superfícies inclinadas em relação aos eixos da malha.

Esta proposta também se enquadra no objetivo mais amplo do desenvolvimento de um algoritmo de solução das equações da continuidade e de Navier-Stokes no caso incompressível, que vem sendo desenvolvido pelo orientador J. R. Figueiredo, colegas e orientados, empregando a descrição euleriana do escoamento, variáveis primitivas na forma divergente, abordagem de volumes finitos, esquema UNIFAES para discretização das derivadas espaciais da equação de transporte advectivo-difusivo, procedimento explícito de integração temporal do campo de velocidades e equação de Poisson para pressão.

No âmbito do desenvolvimento do algoritmo de solução das equações da continuidade e de Navier-Stokes, a pouco conhecida malha semi-deslocada vem sendo comparada às tradicionais malhas deslocada e co-localizada (Figueiredo e Oliveira, 2009a,b). Na estrutura semi-deslocada, as componentes de velocidade são definidas nos vértices do volume de controle de conservação da massa, e a pressão é definida no centro deste volume. Na malha co-localizada, todas as variáveis são definidas nos centros dos volumes de controle citado. Na malha deslocada, cada componente de velocidade é definida no centro das faces do volume de controle à qual é perpendicular, e a pressão no centro do volume. Nesse estudo, a malha semi-deslocada mostrou excelente desempenho em termos de acuidade, superando as demais. Alcança estabilidade equivalente à da malha co-localizada, ambas um pouco inferiores àquela da malha deslocada,

que se aproxima bastante da estabilidade física antes da transição à turbulência. Estes aspectos justificam a atenção à malha semi-deslocada.

Desse modo, a capacidade de flexibilidade geométrica da malha semi-deslocada, podendo ser aplicada, sem prejuízo da regularidade, a superfícies inclinadas em relação aos eixos principais, é apenas mais uma característica que torna esta malha atraente. Assim como a malha semi-deslocada, o esquema UNIFAES vem justamente percorrendo esse caminho de extensa avaliação, apresentando bom desempenho quanto à acuidade e estabilidade nos mais diversos tipos de problemas até então avaliados. Uma breve discussão da aplicação do esquema UNIFAES em alguns casos-teste é apresentada no Capítulo 2. Por esta razão torna-se evidente a sua aplicação a casos ainda não avaliados onde justamente há maiores dificuldades de se obterem soluções numéricas.

A presente proposta tem por contribuição apresentar novas avaliações numéricas das equações da continuidade e de Navier-Stokes para o caso bidimensional, ampliando assim o campo de aplicações do esquema de discretização UNIFAES e da malha semi-deslocada, como também da metodologia empregada para a solução das equações.

Finalmente, esta dissertação organiza-se da seguinte maneira: o Capítulo 2 apresenta ao leitor uma breve discussão, baseada na metodologia empregada no presente trabalho, sobre soluções numéricas das equações da continuidade e de Navier-Stokes no contexto da abordagem do método de volumes finitos e em seguida faz comentários de alguns dos trabalhos consultados na etapa de pesquisa bibliográfica. No Capítulo 3, são apresentadas as equações governantes para escoamento incompressível, bem como todo o desenvolvimento matemático e numérico da metodologia empregada para a solução das equações. O Capítulo 4 faz uma apresentação do problema estudado no presente trabalho, que é o do canal de expansão gradual. Em seguida, valida o método de solução a partir de um caso particular desta geometria, no qual corresponde ao do escoamento sobre uma expansão abrupta, que dispõe de extensos dados experimentais e numéricos na literatura. Por fim, apresenta os resultados para o canal com expansão gradual e discute os diversos cenários dos resultados obtidos. O Capítulo 5 registra as conclusões obtidas sobre o presente estudo e o Capítulo 6 sugere propostas para trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Na primeira parte deste capítulo faz-se uma discussão sobre as opções estratégicas da metodologia empregada, as quais se constituem no método de volumes finitos, formulação de variáveis primitivas, equação de Poisson para pressão, integração explícita das equações de momentum, esquema UNIFAES de discretização, estrutura da malha numérica e forma de análise dos resultados. Por sua vez, a segunda parte procura abordar comentários dos trabalhos mais relevantes para o desenvolvimento do presente trabalho.

2.1 Discussão Baseada na Metodologia Empregada

Os métodos de partição espacial, como diferenças finitas, elementos finitos e volumes finitos, apresentam grande flexibilidade, ajustando-se a contornos irregulares e a propriedades variáveis. São facilmente adaptáveis a métodos iterativos de solução numérica, a paralelização e vetorização. Ao contrário, os métodos espectrais exigem solução de sistemas de equações de grande dimensão e densidade, sendo mais dificilmente adaptáveis à paralelização (Fletcher, 1991). O método das características, restrito a equações hiperbólicas, não se aplica às equações de Navier-Stokes, as quais são elípticas nos casos incompressível e compressível subsônico.

Dentre os métodos de partição espacial, o método de volumes finitos tem se destacado na simulação de escoamentos e fenômenos de transporte principalmente por sua característica de conservatividade numérica, isto é, por garantir a conservação dos fluxos da variável transportada, independentemente do refinamento da malha, característica que não é necessariamente garantida pelos métodos de diferenças finitas e de elementos finitos. Essa característica tem sua importância reconhecida mesmo na literatura de diferenças finitas, nos casos em que o problema é determinado por condição de contorno não-homogênea de tipo fluxo, isto é, de segunda ou terceira espécie.

Tanto a velocidade quanto a vorticidade seguem equações de transporte, que poderão adotar a forma divergente ou a forma advectiva, também chamadas respectivamente conservativa ou não-conservativa, por razões numéricas. A formulação divergente ou conservativa é exigida pelo método de volumes finitos, seguindo necessariamente a descrição euleriana do movimento

fluido. Já a descrição lagrangeana emprega a forma advectiva ou "não-conservativa". Na verdade, a questão da conservatividade é posta em termos de sistemas em movimento, não de volumes de controle.

2.1.1 Formulação de Variáveis Primitivas e Integração Temporal Explícita

Desde o trabalho de Harlow e Welch (1965), a formulação numérica do sistema de equações de Navier-Stokes e da equação da continuidade, em termos das variáveis primitivas, velocidade e pressão, tem tido crescente uso em engenharia, prestando-se a simulações bi ou tridimensionais, com três ou quatro equações diferenciais respectivamente. Superou a formulação vorticidade-função-corrente, que foi a primeira abordagem bem-sucedida do sistema de equações de Navier-Stokes e da continuidade no caso incompressível, com o trabalho original de Thom (1933), mas que é restrita a casos bidimensionais, em que empregava apenas duas equações diferenciais. Para problemas tridimensionais, existem as formulações velocidade-vorticidade e potencial vetorial-vorticidade, mais pesadas computacionalmente, por demandarem cada uma delas seis equações diferenciais, e por isto são raramente empregadas.

Nas formulações de variáveis primitivas, a continuidade deve ser assegurada indiretamente pela pressão, requerendo-se alguma maneira de acoplamento entre elas. Isto é procurado por diversos métodos, como o da penalidade, compressibilidade artificial, entre outros. O método adotado no presente trabalho lida com uma equação de Poisson para a pressão, que é a expressão rigorosa da relação entre pressão e continuidade.

O método explícito de integração temporal soluciona numericamente as equações de transporte de momentum linear e da equação de Poisson para a pressão, esta última sendo obtida a partir das equações discretas de momentum linear e da continuidade. Com isto, a continuidade numérica é satisfeita na medida em que a equação de Poisson a seja. Ao longo do processo iterativo aparecem valores de dilatação residual devidos à iteração incompleta da equação de Poisson, mas estes são gradualmente eliminados, sem qualquer artificialismo, já que estes valores de dilatação aparecem naturalmente como termos fonte da equação de Poisson, e se tornam auto-corretores (Hirt e Harlow, 1967).

Já os métodos implícitos e semi-implícitos de integração temporal tendem a afastar-se da dilatação nula, e o emprego da dilatação residual como termos fonte da equação de Poisson não

é tão eficaz, requerendo alguma outra forma de correção (Fortuna, 2012). Alguns pesquisadores propõem métodos de projeção da solução não-solenoidal no espaço das funções solenoidais (Ferziger e Peric, 2001). Outra linha de procedimentos é dada pelos acoplamentos iterativos da família SIMPLE, SIMPLER, SIMPLEC, etc.

O argumento maior em favor dos métodos implícitos e semi-implícitos é o de que evitam as restrições dos métodos explícitos ao intervalo de tempo empregado na iteração. Por outro lado, favorecem os métodos explícitos a garantia de conservatividade da massa, bem como a maior simplicidade de sua programação, particularmente quando se poderá requerer vetorização ou paralelização. Além disso, em muitos casos o passo temporal deve ser necessariamente pequeno por razões de acuidade.

2.1.2 Esquema UNIFAES para Volumes Finitos

Tanto o transporte de momentum como a de vorticidade são governadas por equações de transporte advectivo-difusivo. Portanto, estas equações de transporte aparecem em qualquer formulação matemática do problema de Navier-Stokes. Equações similares governam o transporte de energia térmica, contaminante, energia cinética turbulenta e outras propriedades em escoamentos fluidos.

Cedo se constatou a insuficiência dos esquemas tradicionais de discretização nos métodos de partição para estas equações de transporte quando os termos advectivos passam a ser predominantes. Os esquemas de segunda ordem tradicionais, central em diferenças finitas e volumes finitos, e Galerkin em elementos finitos, podem ser empregados com boa acurácia em problemas com baixo a moderado números de Peclet, Reynolds ou Rayleigh, porém para valores maiores eles mostram soluções espacialmente oscilantes ou instabilidade numérica, dependendo do método de solução das equações. Por outro lado os esquemas tradicionais de primeira ordem, upwind em diferenças finitas e volumes finitos, e Pretov-Galerkin em elementos finitos, que são incondicionalmente estáveis, produzem soluções inacuradas e lenta convergência espacial.

Esta insuficiência forçou intensa pesquisa em diferentes linhas, desde meados do século passado, nos vários métodos de partição espacial. Uma das abordagens é a introdução de uma viscosidade artificial para forçar a estabilização dos esquemas central e Galerkin, onde tal pseudo-viscosidade deve esvair-se com o refinamento. Outra abordagem foi a procura direta

de discretizações alternativas para os termos advectivos. Em diferenças finitas são frequentemente empregadas aproximações polinomiais de terceira ou quarta ordem para estimação dos termos advectivos. No campo de volumes finitos, destacam-se entre os mais usados o esquema QUICK (Leonard, 1979), o upwind de segunda ordem (Tamamidis e Assanis, 1993) e a família de esquemas tipo exponencial ou localmente analíticos, onde aparece o UNIFAES.

Estes esquemas de tipo exponencial ou localmente analíticos empregam como curva interpolante a solução exata de uma equação linear que aproxima a própria equação de interesse. Tal curva interpolante permite aproximar simultaneamente os fluxos advectivos e difusivos ou viscosos. Estes esquemas possuem em geral alta estabilidade. O primeiro esquema exponencial foi formulado por Allen, D. N. de G. (Allen e Southwell, 1955), sendo reinventado por vários outros autores, nas técnicas de diferenças finitas, elementos finitos e volumes finitos. Para referências detalhadas sobre as duas primeiras técnicas de partição, sugere-se Figueiredo e Oliveira (2009a), tendo em vista que o presente texto se limita à técnica de volumes finitos. A ideia de um esquema exponencial apareceu em volumes finitos com Spalding (1972), que entretanto advoga, como uma forma aproximada do exponencial, o esquema híbrido, o qual alterna entre o central e o upwind sem difusão conforme o número de Peclet celular. Raithby e Torrance (1974) deduziram o esquema exponencial sob outra formulação. O esquema se populariza após Patankar (1980), na forma do esquema exponencial simples e de sua versão aproximada, o esquema Power-law.

O esquema exponencial simples em volumes finitos recebeu críticas por irrealismo (Leonard e Drummond, 1995), que se expressa em termos geométricos como uma interpolação não convincente e em termos algébricos por desprezar quaisquer outros termos que não seja advecção e difusão. Esta crítica deu origem a esquemas de tipo exponencial mais sofisticados e acurados como LOADS (Wong e Raithby, 1979; Prakash, 1984), Flux-Spline (Varejão, 1979; Karki *et al.*, 1989) e o esquema empregado no presente trabalho, UNIFAES (Figueiredo, 1997). Apesar de inacurado, o esquema exponencial simples é ainda muito usado, enquanto que os esquemas mais acurados, LOADS e Flux-Spline, são muito complexos computacionalmente. Já o UNIFAES exige acréscimo moderado de trabalho computacional em relação ao exponencial simples, com enorme ganho de acuidade.

O desempenho do UNIFAES foi avaliado em variados casos-teste lineares e não-lineares. Entre os casos-teste lineares estão as citadas soluções elementares da equação de transporte no escoamento paralelo pelo método de Fourier (Figueiredo, 1997; Nascimento *et al.*, 2018; Rodrigues *et al.*, 2018), desenvolvido no Apêndice B (Nascimento *et al.*, 2018), e o chamando teste

de Smith-Hutton (Figueiredo e Llagostera, 1999), que simula a convecção em um escoamento curvilíneo pré-estabelecido. Em ambos os testes lineares, o UNIFAES converge para quaisquer números de Peclet e apresenta excelente acuidade.

Entre os casos não-lineares há problemas de escoamento em meios porosos com convecção natural e mista (Figueiredo e Llagostera, 1999; Llagostera e Figueiredo, 2000a,b), em que se utilizam malhas irregularmente espaçadas. Teste unidimensionais simples foram empregados para demonstrar a convergência em malhas irregulares. Por fim, o UNIFAES foi empregado em escoamentos livres, dominados pelas equações da continuidade e de Navier-Stokes, no caso incompressível (Figueiredo e Oliveira, 2009a,b). No conjunto dos testes, o UNIFAES aparece frequentemente como o melhor esquema, sendo também muito bom quando eventualmente superado por outro esquema.

2.1.3 Estrutura da Malha Numérica

Na solução dos diversos tipos de problema das equações da continuidade e de Navier-Stokes, além da questão do esquema de discretização dos termos advectivo-difusivos discutida na seção anterior, coloca-se também a questão da estrutura da malha. A primeira estrutura de malha bem-sucedida para escoamentos incompressíveis pelo método de variáveis primitivas foi a malha deslocada, em que a pressão é definida no centro do volume de controle e as componentes de velocidades são definidas no centro das faces desse volume de controle. Buscando maior simplicidade geométrica, particularmente para contornos irregulares, surgiu depois em volumes finitos a malha co-localizada, em que todas as variáveis são postas no centro do volume de controle. Raramente empregada é malha semi-deslocada, em que a pressão ocupa o centro do volume de controle e as componentes de velocidade são co-localizadas nos vértices. Estas três malhas referem-se a volumes finitos e diferenças finitas. Em elementos finitos, predomina a malha co-localizada nos vértices do "elemento". Para literatura detalhada, sugere-se Figueiredo e Oliveira (2009a).

Estas quatro malhas foram comparadas por meio do problema da cavidade hidrodinâmica, empregando os esquemas central, exponencial simples e UNIFAES (Figueiredo e Oliveira, 2009a,b). Considerando os casos estáveis, a malha semi-deslocada apresentou excelente acuidade, seguida pela malha co-localizada nos centros e pela malha deslocada, com acuidade

próxima, enquanto a malha co-localizada nos vértices teve desempenho sensivelmente pior e foi abandonada por inacuidade, mesmo após algum aprimoramento (Figueiredo e Oliveira, 2011). Por outro lado, a malha deslocada demonstrou maior estabilidade e robustez, evoluindo sempre monotonicamente com o refinamento, enquanto para altos números de Reynolds a malha semi-deslocada mostrou-se instável em malhas grosseiras, e a malha co-localizada nos centros apresentou uma mudança abrupta no perfil de solução com o refinamento.

As malhas deslocada e semi-deslocada foram recentemente comparadas no problema do escoamento em canal com degrau e neste problema com a inclusão de obstáculo (Medeiros Filho, 2018). Os resultados mostram comportamentos das malhas assemelhados ao do problema anteriormente descrito. Em particular, mantém-se muito acurada a malha semi-deslocada, apesar de sua equação de Poisson discreta ser não diagonalmente dominante numa malha retangular com alta razão de aspecto. O emprego da aproximação do momentum, análoga à de Rhie e Chow (1983) para malhas co-localizadas, mostrou-se muito eficiente na malha semi-deslocada.

Este teste do escoamento em canal com degrau é experimentalmente reproduzível, tendo se observado que a transição laminar-turbulento inicia-se por volta do número de Reynolds 1200, este definido a partir da velocidade média e do diâmetro hidráulico do canal de entrada. É importante registrar que os números de Reynolds que transitam para a instabilidade numérica têm sido da ordem dos números de Reynolds críticos de transição, como se segue. A malha co-localizada têm se mostrado um pouco hipostável em relação aos resultados experimentais, conseguido estabilidade até número de Reynolds 1000 na versão bidimensional, enquanto que a malha semi-deslocada foi mais além, chegando até número de Reynolds 1200. Já a malha deslocada parece um tanto hiperestável, chegando a convergir para números de Reynolds 1500 ou mais para certos níveis de refinamento da malha bidimensional. Na versão tridimensional com a malha semi-deslocada foi obtida estabilidade até número de Reynolds 800 (Santos e Figueiredo, 2011).

Dado que em problemas lineares o esquema UNIFAES mostrara-se estável a qualquer número de Peclet, este novo fato, da transição para instabilidade numérica ocorrer a números de Reynolds da ordem daquela da transição para a turbulência, sugere que a instabilidade manifestada nos vários programas computacionais foi essencialmente a instabilidade não-linear que determina a transição física para a turbulência, o que é um excelente indicador da qualidade das simulações.

2.1.4 Forma de Análise dos Resultados

A análise dos resultados de quaisquer métodos numéricos de partição espacial, por sua natureza de aproximação, passa pela questão do erro numérico. Em todos os artigos de aplicação do esquema UNIFAES, referidos nas Seções 2.1.2 e 2.1.3, colocou-se a questão do erro. Os testes empregando as soluções elementares da equação de transporte em escoamento paralelo pelo método de Fourier foram os únicos que dispunham de solução analítica para comparação. Todos os demais testes, mesmo o linear de Smith-Hutton, não dispõem de referencial *a priori*.

Nestes casos, os procedimentos conhecidos na literatura geral, em numérica, para estimação e eventualmente compensação do erro numérico nos métodos de partição baseiam-se na análise em série de Taylor do erro em termos do espaçamento da malha. Existe a alternativa de estimar o erro de consistência por análise formal, e introduzir uma compensação por tal erro como termo fonte no próprio programa computacional. Tal procedimento é complexo e praticamente equivale à construção de outro esquema de ordem superior. O procedimento mais conhecido e mais simples, que não envolve nova programação, consiste na análise da evolução dos resultados numéricos com o refinamento da malha através da extrapolação de Richardson (Richardson, 1911; Richardson e Gaunt, 1927), que avalia a tendência da solução quando o espaçamento tende a zero, e portanto, permite estimar o erro, ou antes a correção necessária.

Entretanto, em mecânica dos fluidos computacional não há forma padronizada de emprego da extrapolação de Richardson, e há até mesmo certo ceticismo em relação à extrapolação. Roache (1998), num livro dedicado inteiramente à questão da validação e verificação da acuidade de métodos numéricos e de modelos físicos, embora inicialmente se baseie na extrapolação de Richardson, sentiu a necessidade de acrescentar um fator de correção empírico para tal estimação da incerteza.

Há razões objetivas para este ceticismo. A condição de emprego da série de Taylor para estimação do resultado tendencial é que a malha seja suficientemente refinada para que os erros de menores ordens sejam efetivamente dominantes, qualquer que seja o esquema de discretização empregado. Tal condição é dificilmente satisfeita por esquemas de primeira ordem, como o upwind, ou pelo esquema exponencial simples, cujo comportamento aproxima o do upwind, ou ainda por esquemas não-monotônicos, como o híbrido e mesmo o QUICK, conforme constatado por Nascimento *et al.* (2018) (ver Apêndice B) e Rodrigues *et al.* (2018). De fato, algumas irregularidades foram observadas quando a extrapolação de Richardson foi empregada para avaliar

o desempenho do esquema QUICK (Santos e Figueiredo, 2007), forçando os autores a recorrer a métodos estatísticos para contornar problemas de convergência. Tal fato pode ser atribuído ao seu comportamento não-monotônico. Da experiência com esquemas deste tipo surgiu, certamente, boa parte do ceticismo da literatura para com a extrapolação. Entretanto, a extrapolação de Richardson foi empregada com sucesso por Figueiredo e Llagostera (1999) e Figueiredo e Oliveira (2009a,b, 2011) utilizando os esquemas central e UNIFAES, já que nesses esquemas o comportamento de segunda ordem passa a ser verificado já em malhas moderadamente refinadas.

Desse modo, os desenvolvimentos de caráter numérico dispõem de uma ferramenta fundamental de avaliação dos resultados através da extrapolação de Richardson. A rigor, consiste num procedimento exclusivamente matemático para avaliar o erro de um método matemático aproximado. Sendo assim, a metodologia da extrapolação de Richardson é empregada neste trabalho para estimar os resultados espacialmente convergidos. Essa metodologia é mostrada com detalhes na Seção 3.4.

2.2 Pesquisa Bibliográfica

Nesta seção faz-se uma pesquisa bibliográfica das diferentes abordagens de solução das equações da continuidade e de Navier-Stokes para escoamento incompressível, as quais se constituem em modelo matemático de problemas de escoamentos de fluidos viscosos e, em conjunto, apresenta-se trabalhos que trata do problema de expansão em canais. Não se trata de uma revisão completa, pois existem milhares de trabalhos relacionados com o tema. Sendo assim, foram abordados os trabalhos mais relevantes para o desenvolvimento do presente trabalho.

2.2.1 Métodos de Solução das Equações de Navier-Stokes

Thom (1933) propôs a primeira solução numérica para um escoamento viscoso. As equações governantes foram resolvidas em termos da formulação vorticidade-função-corrente. Ele calculou manualmente as linhas de corrente de um escoamento estacionário ao redor de um ci-

lindro, utilizando diferenças finitas e um método iterativo. Um dos aspectos mais interessantes deste trabalho é que ele apresenta o conceito de refinamento localizado, ou adaptativo, da malha de pontos discretos para melhorar a qualidade da solução numérica.

Harlow e Welch (1965) desenvolveram um dos primeiros métodos para resolver as equações da continuidade e de Navier-Stokes. Os autores descreveram uma técnica para a investigação numérica de escoamento transitório de fluido incompressível. A técnica, chamada de método MAC, lida com uma equação de Poisson para a pressão e com as equações de momento para o cálculo da velocidade. O método MAC foi inicialmente desenvolvido para resolver problemas com superfícies livres, em que partículas marcadoras definem a localização da superfície livre do fluido. Na sua formulação original, as equações de Navier-Stokes são aproximadas na forma de diferenças finitas, empregando a formulação de variáveis primitivas, e a solução é feita pelo avanço de passo de tempo finito.

Chorin (1967) introduziu um método numérico para resolver problemas de escoamento viscoso incompressível. O autor percebeu que, para escoamentos estacionários, uma estrutura semelhante às equações para escoamentos compressíveis podia ser recuperada pela adição de um termo de compressibilidade artificial sob a forma da derivada temporal da pressão, adicionada à equação da continuidade. Quando o regime permanente é atingido, esse termo desaparece, de forma que os resultados finais não são influenciados. O método, chamado de método da compressibilidade artificial, usa a formulação de variáveis primitivas e é igualmente aplicável a problemas bi e tridimensionais. Como forma de avaliação do método, o autor apresenta uma aplicação em problemas de convecção térmica. Com esse trabalho, Chorin concluiu que este método é dependente do termo de compressibilidade artificial, estando sujeito a instabilidades.

Chorin (1968) propôs o método da projeção para resolver as equações de Navier-Stokes dependentes do tempo. O método utiliza a formulação de variáveis primitivas e foi a primeira abordagem que permitiu uma solução econômica de problemas tridimensionais dependentes do tempo. A principal vantagem do método da projeção é que os cálculos dos campos de velocidade e pressão são desacoplados. Uma forma incompleta da equação de momentum é resolvida a cada passo de tempo, gerando um campo de velocidade aproximado que não satisfaz a conservação de massa. Então, uma correção é aplicada para produzir um campo de velocidade livre de divergência, projetando o campo de velocidade não-solenoidal no espaço das funções solenoidais. Uma característica distintiva do método de projeção de Chorin é que o campo de velocidade é forçado a satisfazer uma restrição de continuidade discreta no final de cada inter-

valo de tempo sem a necessidade de calcular a equação de momentum e a equação de Poisson simultaneamente.

Patankar (1980) descreve, em seu livro de métodos numéricos, os fundamentos do método SIMPLE para solução numérica das equações de Navier-Stokes incompressíveis. Este método se baseia na utilização de uma equação de correção de velocidade e uma de correção de pressão. A equação da continuidade é a equação governante para correção da pressão. Este método é desenvolvido para malha do tipo deslocada. Consiste em primeiramente estimar um campo de pressão e obter o campo de velocidade correspondente através da solução das equações de momentum. Com estas velocidades é possível resolver a equação de correção de pressão obtida através da restrição da conservação de massa. Com a pressão corrigida recalcula-se o campo de velocidade, repetindo-se o ciclo de iterações até a convergência. Um dos pontos negativos deste método é que a correção de pressão é superestimada, sendo recomendado o uso de fatores de sub-relaxação.

Rhie e Chow (1983) apresentaram um método numérico de volumes finitos para a solução das equações de Navier-Stokes em regime permanente bidimensional incompressível, em coordenadas curvilíneas gerais. Este método foi aplicado em escoamentos turbulentos sobre aerofólios, utilizando o modelo $k - \varepsilon$ para fechamento da turbulência. São geradas as coordenadas ajustadas ao domínio para os cálculos. Em vez da malha deslocada, um sistema de malhas co-localizadas é empregado para o cálculo, e uma técnica específica é desenvolvida para suprimir as oscilações do campo de pressão das malhas co-localizadas. Os resultados são comparados com os dados experimentais disponíveis. Cabe mencionar que tal técnica foi amplamente empregada posteriormente na literatura científica.

2.2.2 Estudos Experimentais de Escoamentos em Canais com Expansão

Durst *et al.* (1974) relataram perfis e espectros das flutuações de velocidade medidos com um anemômetro Laser-Doppler ao longo da linha central de uma expansão abrupta simétrica de razão 1:3. Os valores de velocidades obtidos do anemômetro e as fotografias correspondentes obtidas por visualização do escoamento são apresentadas para números de Reynolds de 56, 114 e 252, baseados na altura do canal e na velocidade máxima, ambas a montante. Certas medições para números de Reynolds acima de 252 também estão incluídas. As medições em um número

de Reynolds de 56 indicaram que o escoamento foi aparentemente bidimensional na região central com regiões de separação de comprimentos iguais. Em um número de Reynolds igual a 114, as duas regiões de separação da expansão simétrica tinham comprimentos diferentes, levando a perfis de velocidade assimétricos. Em um número de Reynolds de 252, uma terceira zona de separação foi encontrada em uma parede, a jusante da menor das duas zonas de separação. Em números de Reynolds ainda maiores, o escoamento tornou-se menos estável e a periodicidade tornou-se cada vez mais importante no escoamento principal.

Em seus estudos, Cherdron *et al.* (1978) demonstraram que o escoamento simétrico em expansões abruptas simétricas pode existir apenas dentro de uma faixa limitada de números de Reynolds. Eles realizaram visualização do escoamento e medições de anemometria Laser-Doppler para obter informações detalhadas sobre a média temporal dos vários regimes de escoamento próximos à expansão abrupta e indicaram que as condições que dão origem à escoamentos assimétricos estão nas perturbações geradas na borda da expansão e que são amplificadas nas camadas de cisalhamento. Também é mostrado que a intensidade da energia flutuante em baixos números de Reynolds pode ser maior do que em escoamentos turbulentos correspondentes. Sob as condições de uma razão de expansão de 1:2 e razão de aspecto de 8, eles observaram que o escoamento tornou-se assimétrico em números de Reynolds maior que 185, com base na velocidade máxima e na altura do canal a montante.

Sobey (1985) mostrou em seus experimentos que para uma expansão abrupta simétrica de razão 1:3, em baixos números de Reynolds, o escoamento era bidimensional para a maior parte da largura do canal, com apenas pequenos vórtices tridimensionais nos cantos. Com o aumento do número de Reynolds, os vórtices tridimensionais aumentavam de tamanho até um número de Reynolds igual a 210 (o número de Reynolds é baseado na velocidade máxima na região de expansão e na altura do canal correspondente), onde todo o campo de escoamento se tornou tridimensional. Ele relatou que para um número de Reynolds igual a 75, o escoamento tornou-se assimétrico (os números originais no artigo de Sobey eram diferentes devido a uma definição diferente do número de Reynolds). Sobey também descobriu que um padrão semelhante foi observado em canais onde a expansão tinha uma inclinação de 45°.

Fearn *et al.* (1990) estudaram a origem dos escoamentos assimétricos estáveis em uma expansão abrupta simétrica usando técnicas experimentais e numéricas. Como o ponto de quebra da simetria é estruturalmente instável, os autores sugerem que esta não é uma transição repentina, e que qualquer tipo de pequena perturbação no escoamento, como um pequeno grau de assimetria na geometria de expansão, pode levar ao surgimento de escoamentos assimétricos.

Os autores ainda relatam que, em números mais altos de Reynolds, o escoamento neste tipo de configuração torna-se tridimensional antes de se tornar instável. As evidências experimentais sugerem que a dependência do tempo está associada a efeitos tridimensionais. Os resultados mostram uma boa concordância entre os experimentos e os cálculos numéricos. Para uma razão de expansão de 1:3, eles encontraram um Reynolds crítico de 40,45 (baseado na meia altura do canal e na velocidade máxima a montante).

Durst *et al.* (1993) realizaram medidas detalhadas de velocidade e previsões numéricas para o escoamento através de um duto bidimensional plano com uma expansão abrupta simétrica de razão 1:2. Os dados experimentais foram obtidos utilizando-se anemômetro Laser-Doppler em diversos valores do número de Reynolds, sendo realizadas medições mais extensas para três números de Reynolds 70, 300 e 610. Neste trabalho o número de Reynolds é definido com base na altura do canal e na velocidade máxima a montante. As previsões numéricas foram feitas utilizando um método de volumes finitos com uma discretização temporal explícita. Nas proximidades do Reynolds crítico, o número necessário de iterações para obter uma solução assimétrica é muito alto, sendo dependente da resolução da malha. Isso levou os autores a utilizar uma perturbação artificial no campo inicial de velocidades para acelerar a convergência numérica. Tanto os experimentos quanto as previsões numéricas confirmam uma bifurcação de quebra da simetria do escoamento, levando a uma longa e curta zona de separação, para números de Reynolds acima de 125. Com números crescentes de Reynolds acima deste valor, a região separada curta permanece aproximadamente constante no comprimento, ao passo que a região longa aumenta no comprimento.

Em Ruck e Makiola (1993), investigações do campo de velocidade foram realizadas em um escoamento sobre um degrau inclinado com vários ângulos de inclinação da parede. Os dados de velocidade foram medidos por um anemômetro Laser-Doppler, permitindo determinar quantidades integrais do escoamento, como por exemplo linhas de separação ou comprimentos de reatamento. O objetivo desta investigação foi determinar as diferenças nas grandezas do campo de escoamento turbulento quando comparado com a geometria com ângulo de 90°. O ângulo de inclinação variou entre 10° e 90°. Os números de Reynolds (baseado na altura do degrau e na velocidade máxima na entrada do canal) foram obtidos até 64000. Adicionalmente, a influência da taxa de expansão no campo de escoamento foi investigada para três razões diferentes. Os experimentos devem contribuir para a compreensão da fenomenologia dos escoamentos separados e estabelecer uma base de dados abrangente para a validação de códigos numéricos.

2.2.3 Estudos Numéricos de Escoamentos em Canais com Expansão

Shapira *et al.* (1990) realizaram estudos da instabilidade de escoamentos bidimensionais através de canais com expansão simétrica em torno de sua linha central. Os semi-ângulos dos canais variam de 10° a 90° com razões de expansão de 1:2 e 1:3, e o número de Reynolds, baseado na velocidade máxima e na altura do canal na região de entrada, foi de até 400. Uma análise de estabilidade linear foi realizada para determinar as condições críticas do escoamento, mostrando que o autovalor que corresponde ao modo menos estável é real, indicando que para números de Reynolds maiores que um valor crítico existem soluções assimétricas estáveis. Um distúrbio linear foi aplicado e um algoritmo de elementos finitos, com diferenciação de Galerkin, dependente do tempo foi usado para isolar o modo menos estável e o valor próprio correspondente. Como alguns dos resultados, para uma razão de expansão de 1:3, o número crítico de Reynolds para mudança de estabilidade foi de 82,6 para um semi-ângulo de 90° e 147 para o semi-ângulo de 10° .

Coelho e Pereira (1993) conduziram estudos numéricos da utilização da malha não-deslocada, com coordenadas não-ortogonais, em escoamentos tridimensionais laminares em geometrias complexas. Tiveram como objetivo principal a análise da capacidade de solução do algoritmo em casos gerais e a investigação de suas limitações no cálculo de escoamentos em malhas altamente não-ortogonais. Uma abordagem do método de volumes finitos é adotada e o acoplamento dos campos de velocidade e pressão é atingido usando o esquema de interpolação de Rhie e Chow (1983). Foram analisados e apresentados diversos casos-teste. Os casos de referência padrão incluem o escoamento através de um difusor quadrado. Como alguns dos resultados para este caso, três diferentes malhas foram testadas, a saber, uma malha cartesiana e duas configurações de malhas não-ortogonais. Os resultados mostram que a acurácia das soluções é muito similar nas malhas analisadas.

Tsui e Wang (1995) realizaram estudos numéricos do escoamento laminar em difusores bidimensionais planos. Foram considerados quatro casos, com números de Reynolds iguais a 56 e 144 (definido com base na velocidade máxima e na altura do degrau a montante) e taxas de expansão 1:3 e 1:4. Uma vez que a geometria apresenta limites irregulares, as equações governantes são escritas em coordenadas não-ortogonais curvilíneas, enquanto que as componentes de velocidades são mantidas em coordenadas cartesianas. O esquema upwind de segunda ordem foi implementado para aproximar os termos advectivos. As equações são discretizadas

utilizando a técnica de volumes finitos e uma malha não-deslocada é usada no estudo. Com isso faz-se o uso no método de interpolação do momentum de Rhie e Chow (1983) para calcular as velocidades nas faces do volume de controle. Para o acoplamento pressão-velocidade é adotado o algoritmo SIMPLE. Os resultados demonstraram que em baixo número de Reynolds e baixa taxa de expansão, o escoamento é quase simétrico em relação à linha central, independentemente do ângulo de difusão. À medida que o número de Reynolds ou a taxa de expansão aumenta, uma grande região de recirculação se forma em uma parede lateral e uma pequena no outro lado. Como conclusão, os autores relatam que a recuperação de pressão é maior para o escoamento simétrico do que para o assimétrico, devido à força de recirculação ser mais fraca no primeiro.

Alleborn *et al.* (1997) investigaram o escoamento laminar bidimensional de um fluido viscoso incompressível através de um canal com expansão repentina. Usaram um método de continuação para estudar a estrutura de bifurcações das equações governantes discretas. Eles consideraram pequenas perturbações no escoamento e resolveram numericamente as equações linearizadas por um método baseado na iteração de Arnoldi, para determinar a estabilidade dos diferentes ramos de solução. O comportamento dos autovalores críticos na vizinhança desses pontos de bifurcação é estudado. São considerados casos-limite para os parâmetros geométricos e do escoamento, e os resultados numéricos são comparados com soluções analíticas para esses casos. Seus resultados mostraram redemoinhos viscosos e fracos, conhecidos como turbilhões de Moffatt, nos cantos da expansão no limite de escoamento crescente, um fenômeno que foi negligenciado em estudos anteriores.

Drikakis (1997) apresentou um estudo numérico de escoamentos laminares incompressíveis em expansões abruptas. Os cálculos foram realizados para vários números de Reynolds e razões de expansão. Os resultados revelaram que o escoamento permanece simétrico até certo número de Reynolds, dependendo da taxa de expansão, enquanto as assimetrias aparecem em números de Reynolds mais altos. Os cálculos indicaram que o número crítico de Reynolds da bifurcação de quebra da simetria diminui com o aumento da taxa de expansão, enquanto que o escoamento recupera a simetria a jusante de um comprimento de canal inicial. As assimetrias do escoamento foram verificadas comparando vários esquemas de discretização até quarta ordem de precisão, bem como vários solucionadores iterativos, empregando a formulação da compressibilidade artificial (Chorin, 1967) para o acoplamento das equações da continuidade e do momentum.

Battaglia *et al.* (1997) tiveram como objetivo o estudo numérico do campo de escoamento em canais bidimensionais com expansões descontínuas, para entender como a taxa de expansão do canal influencia as soluções simétricas e não-simétricas. Para melhorar a confiança e compreensão dos resultados, duas técnicas numéricas distintas são usadas. As características gerais no campo de escoamento em regimes simétricos e não-simétricos são determinadas por um procedimento de marcha no tempo baseado em diferenças finitas. Os campos de escoamento e a estrutura de bifurcação das soluções estacionárias das equações de Navier-Stokes são determinados independentemente usando a técnica de elementos finitos. Os dois procedimentos são então comparados tanto aos números de Reynolds críticos previstos quanto às características do escoamento. Medidas experimentais disponíveis na literatura são utilizadas para avaliar os resultados numéricos. Os resultados mostram que o número crítico de Reynolds diminui com o aumento da taxa de expansão do canal.

Yang e Hou (1999) estenderam os estudos de Tsui e Wang (1995), restrito ao caso laminar, e apresentaram previsões numéricas para o escoamento turbulento em difusores bidimensionais simétricos. As grades são estabelecidas empregando um sistema de coordenadas não-ortogonais para lidar com a geometria complexa. As equações governantes turbulentas são resolvidas por um método de volume de controle baseado em diferenças finitas, usando uma forma modificada do modelo $k - \varepsilon$ junto com o algoritmo SIMPLE. Os parâmetros estudados incluem o número de Reynolds, o ângulo do difusor e taxa de expansão de 1:3. Os resultados mostram que houve uma sensível influência do número de Reynolds sobre o tamanho da região de recirculação para o escoamento turbulento. Contudo, uma influência mais evidente foi notada com a mudança do ângulo do difusor. Além disso, com o aumento do número de Reynolds ou do ângulo do difusor, o coeficiente de recuperação de pressão diminui.

Neofytou e Drikakis (2003) investigaram o escoamento de fluido não-newtoniano através de uma expansão abrupta simétrica de razão 1:2, usando três modelos da literatura para simular o comportamento reológico do sangue. Semelhante ao escoamento newtoniano, a quebra do padrão simétrico também ocorre em um ponto crítico que depende do número de Reynolds e dos parâmetros específicos incluídos em cada um dos três modelos. A investigação engloba um estudo paramétrico para cada modelo, especificamente os valores críticos em que ocorre a transição do escoamento estável para instável.

Allery *et al.* (2004) aplicaram o método numérico assintótico (ANM) no estudo do efeito Coanda em várias configurações de escoamento, as quais se constituem nos problemas de expansões abruptas e graduais e da cavidade quadrada aberta. Segundo os autores, o ANM é

um método rápido, eficiente e robusto para determinar bifurcações estacionárias deste tipo. Os números críticos de Reynolds obtidos com o ANM são então comparados com os resultados encontrados na literatura. Finalmente, é proposto leis de evolução dos números críticos de Reynolds, de acordo com os vários parâmetros geométricos.

Tsui e Pan (2006) apresentaram um método de correção de pressão para resolver escoamentos viscosos incompressíveis. O desenvolvimento deste método tem como objetivo lidar com as malhas não-estruturadas, que são feitas de volumes de controle com topologia arbitrária. Para aumentar a robustez do método, todas as variáveis são co-localizadas no centro da célula. O teorema da divergência de Gauss é empregado para discretização, e formas vetoriais são utilizadas em toda a formulação. Desta forma, o método é igualmente aplicável a problemas bi e tridimensionais. Uma abordagem super-relaxada é adotada para a aproximação do fluxo difusivo cruzado para lidar com malhas "inclinadas". A aplicação da metodologia para escoamentos na cavidade com a tampa deslizante e em difusores mostra que não mais que dois passos na correção da pressão são suficientes para obter uma convergência rápida e estável. O método também é aplicado a escoamento tridimensional em um tanque misturado por pás.

Rosa e Pinho (2006) tiveram como objetivo a avaliação numérica da variação do coeficiente de perda de pressão, para o escoamento laminar de um fluido newtoniano em difusores axissimétricos, como uma função do número de Reynolds, do ângulo do difusor e da taxa de expansão. As investigações numéricas foram realizadas por meio de um código baseado na formulação de volumes finitos usando uma malha co-localizada não-ortogonal. As equações de transportes foram discretizadas levando em consideração o esquema central para os termos difusivos e o esquema upwind de segunda ordem para os termos advectivos. O acoplamento pressão-velocidade foi baseado numa modificação do algoritmo SIMPLEC. Como forma de avaliar os resultados, uma análise teórica é apresentada por meio de um balanço unidimensional de energia e momentum.

Wahba (2007) estudou numericamente o escoamento laminar incompressível em uma expansão súbita plana, tendo como objetivo a investigação do efeito do uso de diferentes solucionadores iterativos no cálculo do ponto de bifurcação. Para este propósito, as equações governantes, para escoamento bidimensional incompressível, são escritas em termos da formulação vorticidade-função-corrente. Uma discretização de volumes finitos de segunda ordem é aplicada no estudo. Solucionadores explícitos e implícitos são usados para resolver o sistema resultante de equações algébricas. É mostrado que o solucionador explícito recupera a solução assimétrica estável, enquanto que o solucionador implícito pode recuperar tanto a solução simétrica

instável quanto a solução assimétrica estável, dependendo se a estimativa inicial é simétrica ou não. Descobriu-se também que o tipo de perfil de velocidade na região de entrada do canal, seja parabólico ou uniforme, tem um efeito significativo no início da bifurcação. Observou-se que os perfis uniformes tendem a estabilizar a solução simétrica, retardando o início da bifurcação a um número mais alto de Reynolds em comparação com os perfis parabólicos.

Tsui e Wang (2007) realizaram estudos numéricos tridimensionais do escoamento através de uma expansão abrupta simétrica com razão de 1:3 em baixos números de Reynolds. A razão de aspecto do canal pode variar dentro de uma ampla faixa para examinar sua influência no escoamento que se bifurca de um estado simétrico para um assimétrico. Os cálculos numéricos foram conduzidos usando o método de volumes finitos com uma malha não-estruturada juntamente com o algoritmo SIMPLE. Os resultados revelam que o número crítico de Reynolds da bifurcação de quebra da simetria aumenta quando a razão de aspecto é reduzida. Foi mostrado que, para a razão de aspecto 8, o efeito de parede lateral pode ser negligenciado e o escoamento no plano central pode ser considerado como bidimensional. Isso explica a boa concordância dos resultados numéricos com simulações bidimensionais. Cálculos também foram realizados para mostrar que uma pequena assimetria na geometria do canal provoca uma transição suave de estados simétricos para não-simétricos.

Swaminathan *et al.* (2010) apresentaram uma análise de estabilidade global do escoamento de um canal divergente com pequenos ângulos de expansão. O escoamento no canal divergente é escolhido no estudo, uma vez que para um escoamento teórico de Jeffery-Hamel, o perfil de velocidade obedece à similaridade. Uma função de perturbação é adicionada nas equações de Navier-Stokes incompressíveis e o método de colocação espectral de Chebyshev é utilizado para soluções das equações. Os autores mencionam que mesmo em configurações de escoamentos semelhantes, como o escoamento de canais com placas paralelas ou com pequenos ângulos de expansão, os modos globais são mostrados como qualitativamente diferentes. Um argumento de escala para o motivo pelo qual o número crítico de Reynolds é tão sensível à divergência, neste estudo, é oferecido.

Nabavi (2010) propôs um estudo tridimensional para investigar o início da assimetria do escoamento laminar incompressível em um canal com expansão gradual. São levados em conta diferentes ângulos de divergência do difusor, números de Reynolds e relações de aspecto no estudo. As equações governantes são resolvidas usando o software Fluent, no qual um esquema de volumes finitos é usado para a discretização. O algoritmo SIMPLEC é usado para o acoplamento pressão-velocidade. O modelo numérico apresentado é validado em relação aos dados

experimentais disponíveis na literatura. Por fim, os efeitos do ângulo do difusor e da relação de aspecto sobre o número crítico de Reynolds, no qual há o início da assimetria do escoamento, são investigados. O autor menciona que é possível eliminar o escoamento assimétrico impondo um campo de velocidades oscilante na solução estável do escoamento.

Louda *et al.* (2013) trataram da solução numérica do escoamento turbulento incompressível em um canal com degrau variando o ângulo de inclinação. Além disso, a inclinação da parede superior também é considerada. O modelo matemático é baseado nas equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds (RANS). As equações governantes são fechadas utilizando dois modelos de viscosidade turbulenta, o modelo SST e o TNT $k - \omega$. A solução numérica é realizada independentemente por dois métodos, um empregando o método da compressibilidade artificial combinada com uma discretização implícita de volumes finitos, e outro usando um método de elementos finitos estabilizado de Petrov-Galerkin. As simulações numéricas bi e tridimensionais são então comparadas com dados experimentais disponíveis na literatura.

Kotapati *et al.* (2014) aplicaram o método de Lattice-Boltzmann (LBM) em conjunto com um modelo de turbulência que simula os grandes vórtices (LES), para calcular o escoamento separado através de um canal em degrau com diferentes ângulos de inclinação. O número de Reynolds, baseado na altura do degrau e na velocidade máxima na entrada, é de 64000 e a taxa de expansão do canal é de 1:1,48. Além de validar a solução do método de Lattice-Boltzmann com os experimentos da literatura, este estudo também investiga os efeitos da tridimensionalidade, a proximidade da entrada ao degrau e a resolução da grade na qualidade das predições.

Jotkar *et al.* (2015) estudaram os mecanismos lineares de instabilidade de escoamentos bidimensionais através de um canal simétrico com expansão gradual. Os limites extremos deste problema são comparados com aqueles do escoamento entre placas paralelas (escoamento de Poiseuille) e em expansões abruptas. As computações foram conduzidas por duas abordagens diferentes. Um código de simulação numérica direta, baseado em um método espectral, foi utilizado para calcular as características gerais do escoamento, enquanto que o método iterativo de Newton, baseado no método de elementos finitos, foi usado para analisar as condições críticas do escoamento. A análise de estabilidade linear confirma a instabilidade como um tipo de quebra de simetria, levando assim a uma bifurcação do escoamento. Com um aumento adicional do número de Reynolds, é mostrado que o escoamento assimétrico estável desenvolve uma terceira região de separação, mas que esta não está relacionada a uma instabilidade. Assim, os mecanismos de instabilidade, incluindo as bifurcações primárias e secundárias, são estudados em detalhes para derivar uma ligação entre o escoamento de Poiseuille e o de expansões abruptas.

3 DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO E NUMÉRICO

O enfoque do presente trabalho será no caso do escoamento bidimensional incompressível, viscoso e laminar. Embora o escoamento não precise ser isotérmico, variações de temperatura serão consideradas pequenas o suficiente para que alterações na densidade e na viscosidade do fluido, devidas às variações de temperatura, sejam consideradas desprezíveis. Portanto, a viscosidade também será considerada constante e uniforme. Assim, as equações da continuidade e de Navier-Stokes em coordenadas cartesianas são escritas na forma divergente ou conservativa:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v u)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \rho g_x \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v v)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \rho g_y \quad (3.3)$$

A adimensionalização das equações da continuidade e de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis e isotérmicos pode ser feita a partir das seguintes grandezas adimensionais:

$$\begin{aligned} u^* &= \frac{u}{V_c} & v^* &= \frac{v}{V_c} & p^* &= (p + \rho g z) \frac{L_c}{\mu V_c} \\ x^* &= \frac{x}{L_c} & y^* &= \frac{y}{L_c} & t^* &= t \frac{\mu V_c}{\rho L_c^2} \end{aligned} \quad (3.4)$$

em que as coordenadas espaciais x e y são adimensionalizadas com base num comprimento característico L_c , as componentes de velocidade u e v por uma velocidade característica V_c , e o tempo t por $\rho L_c^2 / (\mu V_c)$. A pressão total adimensional pode ser escrita pela soma da pressão física p e da carga hidrostática $\rho g z$, adimensionalizada por $\mu V_c / L_c$.

O número de Reynolds que caracteriza o escoamento é dado por:

$$\text{Re} = \frac{\rho V_c L_c}{\mu} \quad (3.5)$$

Substituindo os parâmetros adimensionais dados pela Eq. (3.4) na equação da continuidade (3.1) e nas equações de momentum linear (3.2) e (3.3), e omitindo o expoente (*) por simplicidade na notação, as equações da continuidade e de Navier-Stokes tornam-se:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \text{Re} \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \text{Re} \frac{\partial(vu)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \text{Re} \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \text{Re} \frac{\partial(vv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \quad (3.8)$$

Nas equações de momentum linear adimensionais, o primeiro termo do lado esquerdo representa a variação no tempo da variável dependente e os demais termos correspondem ao fluxo advectivo. Do lado direito têm-se a variação espacial da pressão e os termos de fluxo viscoso, respectivamente. O gradiente de pressão atua sobre o campo de velocidades variando o fluxo em determinado volume de controle. Sendo assim, a única função da pressão no escoamento incompressível é fazer com que o campo de velocidades satisfaça a equação da continuidade (3.6). As equações de momentum podem ainda serem escritas utilizando uma variável A_ϕ , que representa os fluxos líquidos advectivos e difusivos. Portanto,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = A_u - \frac{\partial p}{\partial x} \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = A_v - \frac{\partial p}{\partial y} \quad (3.10)$$

onde,

$$A_u = -\text{Re} \frac{\partial(uu)}{\partial x} - \text{Re} \frac{\partial(vu)}{\partial y} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (3.11)$$

$$A_v = -\text{Re} \frac{\partial(uv)}{\partial x} - \text{Re} \frac{\partial(vv)}{\partial y} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \quad (3.12)$$

3.1 Método de Volumes Finitos

O método de volumes finitos consiste na integração das equações diferenciais de conservação, escritas na forma divergente, em cada volume de controle. Neste processo, são assumidos perfis de variação das variáveis dependentes entre os pontos nodais, baseados na determinação dos fluxos nas fronteiras dos volumes. Dessa forma, as equações discretizadas expressam o princípio de conservação da mesma forma que a equação diferencial faz para volumes infinitesimais, garantido desse modo a conservação integral das grandezas envolvidas. Essa característica existe para qualquer número de pontos de malha, exibindo balanços integrais exatos mesmo para solução de malha grosseira (Patankar, 1980).

As equações de transporte de momentum linear, Eqs. (3.9), (3.10), (3.11) e (3.12), podem ser escritas por uma equação de balanço de uma variável genérica ϕ na forma:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + A_\phi = S \quad (3.13)$$

onde S representa um termo fonte, que neste caso é o gradiente de pressão, e A_ϕ é dado por:

$$A_\phi = \text{Re} \frac{\partial(u\phi)}{\partial x} + \text{Re} \frac{\partial(v\phi)}{\partial y} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \quad (3.14)$$

Nesta seção, o método de volumes finitos será apresentado com relação à equação genérica do termo de fluxo advectivo-difusivo, A_ϕ , tendo em vista que o tratamento do gradiente de pressão será detalhado na Seção 3.3. O termo de fluxo líquido advectivo-difusivo é então integrado no volume da célula da Figura 3.1, que reproduz um volume de controle retangular com a notação usual de volumes finitos, mostrando os fluxos advectivo-difusivos localizados nas faces do volume de controle. Reescrevendo a Eq. (3.14) na notação vetorial, tem-se que:

$$\int_V A_\phi dV = \text{Re} \int_V \nabla \cdot (\vec{V} \phi) dV - \int_V \nabla \cdot (\nabla \phi) dV \quad (3.15)$$

Utilizando o teorema da divergência,

$$\int_V A_\phi dV = \text{Re} \oint_S (\vec{V} \phi) d\vec{A} - \oint_S (\nabla \phi) d\vec{A} \quad (3.16)$$

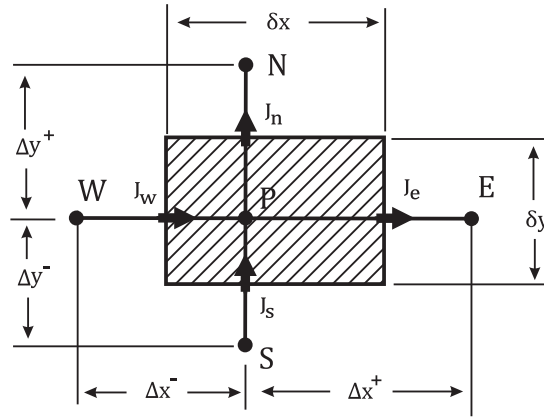


Figura 3.1: Volume de controle bidimensional para discretização de volumes finitos.

As integrais de superfície, na Eq. (3.16), representam os fluxos nas interfaces do volume de controle citado. Dessa forma, estas integrais são numericamente aproximadas pelo somatório dos fluxos multiplicados pelas respectivas áreas das faces da célula, assumindo comprimento unitário na direção perpendicular ao plano. Assim,

$$\begin{aligned} \int_{\forall} A_{\phi} d\forall = & \operatorname{Re} [(u\phi)_e - (u\phi)_w] \delta y + \operatorname{Re} [(v\phi)_n - (v\phi)_s] \delta x \\ & - \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] \delta y - \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right] \delta x \end{aligned} \quad (3.17)$$

A Eq. (3.17) pode ser expressa mais compactamente em termos do fluxo advectivo-difusivo combinado da propriedade genérica ϕ , considerado constante em cada interface do volume de controle, que pode ser dado na forma:

$$J_e = \operatorname{Re} u_e \phi_e - \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_e \quad (3.18)$$

assim como para as demais fronteiras w , n e s . Dessa forma, a Eq. (3.17) torna-se:

$$\int_{\forall} A_{\phi} d\forall = (J_e - J_w) \delta y + (J_n - J_s) \delta x \quad (3.19)$$

Analisando a forma das Eqs. (3.18) e (3.19), observa-se que os termos presentes envolvem valores das variáveis e suas derivadas nas fronteiras dos volumes de controle considerados, e como na malha numérica estes valores não são disponíveis nestas localizações, mas sim nos nós principais, deve-se então aproximá-los por uma curva interpolante que envolva valores da própria variável em pontos vizinhos da malha. Cada esquema de volumes finitos é caracterizado

pela curva interpolante usada para aproximar o valor da variável ϕ e sua derivada nas interfaces dos volumes de controle. Neste trabalho será utilizado o esquema UNIFAES para a discretização espacial dos termos advectivo-difusivos das equações de transporte.

3.2 Esquema UNIFAES

O esquema de discretização UNIFAES, idealizado e desenvolvido por Figueiredo (1997), traz em sua formulação original uma nova alternativa para o cálculo do termo fonte de uma equação linear não-homogênea que aproxima a própria equação de interesse, cuja solução exata fornece uma curva interpolante que permite aproximar simultaneamente os fluxos advectivos e difusivos da Eq. (3.18). Esta nova alternativa trouxe ao método algumas características interessantes quanto a estabilidade numérica, simplicidade de implementação e acuidade nos resultados, como já previamente mencionado na Seção 2.1.2 sobre o desempenho do UNIFAES nos mais diversos tipos de problemas até então avaliados.

3.2.1 Discretização Exponencial

Os esquemas exponenciais utilizam como curva de interpolação a solução exata da equação diferencial de transporte unidimensional, também chamada de equação geradora. Com o uso da equação da continuidade, Eq. (3.6), prova-se que as Eqs. (3.13) e (3.14) podem ser também escritas na forma advectiva. Portanto,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \text{Re}u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \text{Re}v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = S \quad (3.20)$$

A equação unidimensional geratriz da função de interpolação, por exemplo na direção x , é escrita como:

$$\text{Re}u \frac{d\phi}{dx} - \frac{d^2 \phi}{dx^2} = K_x \quad (3.21)$$

em que a solução da Eq. (3.21) aproxima os termos advectivos e difusivos dados na Eq. (3.18), assumindo a componente de velocidade u localmente como constante, assim como o termo não-homogêneo K_x , o qual representa todos os termos da equação original, Eq. (3.20), que não estão inclusos explicitamente na Eq. (3.21).

Pode-se encontrar analiticamente a solução geral da Eq. (3.21) como:

$$\phi(x) = C_1 + C_2 \exp(\text{Re}u x) + \frac{K_x}{\text{Re}u} x \quad (3.22)$$

A determinação do termo não-homogêneo K_x não é trivial no contexto de volumes finitos. Os vários esquemas exponenciais diferem uns dos outros na determinação deste termo. De fato, o esquema exponencial simples (Raithby e Torrance, 1974; Patankar, 1980) assume K_x nulo, perdendo muito da similaridade entre as equações original e geradora, Eqs. (3.20) e (3.21) respectivamente. Assumindo que o termo não-homogêneo possa ser calculado de alguma forma, as constantes C_1 e C_2 são determinadas por ajuste de curva da Eq. (3.22) aos nós da malha. Os valores de ϕ_e e $\partial\phi/\partial x|_e$ são então calculados e substituídos na Eq. (3.18).

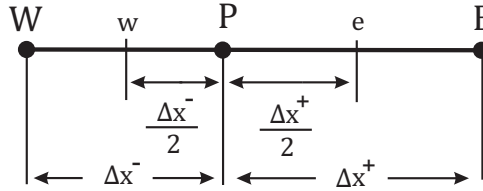


Figura 3.2: Esquema unidimensional do volume de controle.

Avaliando o valor da função, dada pela Eq. (3.22), e sua derivada, para a interface e do volume de controle conforme a Figura 3.2, com referência no ponto P , tem-se:

$$\begin{aligned} \phi_e &= C_1 + C_2 \exp\left(\text{Re}u_e \frac{\Delta x^+}{2}\right) + \frac{K_e}{\text{Re}u_e} \frac{\Delta x^+}{2} \\ \frac{d\phi}{dx}\bigg|_e &= C_2 \text{Re}u_e \exp\left(\text{Re}u_e \frac{\Delta x^+}{2}\right) + \frac{K_e}{\text{Re}u_e} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Assim, substituindo as expressões da Eq. (3.23) na Eq. (3.18), o fluxo advectivo-difusivo combinado na fronteira e do volume de controle assume a forma:

$$J_e = \text{Re}u_e C_1 + \frac{K_e}{\text{Re}u_e} \left(\text{Re}u_e \frac{\Delta x^+}{2} - 1 \right) \quad (3.24)$$

Assumindo que o termo K_x possa ser calculado em cada volume de controle, e ajustando o perfil interpolante, Eq. (3.22), aos pontos P e E de acordo com a Figura 3.2, forma-se então o sistema:

$$\begin{aligned}\phi_P &= C_1 + C_2 \\ \phi_E &= C_1 + C_2 \exp(\text{Re}u_e \Delta x^+) + \frac{K_e}{\text{Re}u_e} \Delta x^+\end{aligned}\quad (3.25)$$

que pode ser resolvido para C_1 conduzindo a:

$$C_1 = \phi_P - \frac{\phi_E - \phi_P}{\exp(\text{Re}u_e) - 1} + \frac{K_e}{\text{Re}u_e} \frac{\Delta x^+}{\exp(\text{Re}u_e) - 1} \quad (3.26)$$

Dessa forma, substituindo a Eq. (3.26) na Eq. (3.24) o fluxo na interface e é dado por:

$$\begin{aligned}J_e &= \text{Re}u_e \phi_P + \frac{\phi_P - \phi_E}{\Delta x^+} \frac{\text{Re}u_e \Delta x^+}{\exp(\text{Re}u_e \Delta x^+) - 1} \\ &\quad + K_e \Delta x^+ \left[\frac{1}{\exp(\text{Re}u_e \Delta x^+) - 1} - \frac{1}{\text{Re}u_e \Delta x^+} + \frac{1}{2} \right]\end{aligned}\quad (3.27)$$

onde, procedendo de forma similar, pode-se encontrar expressões análogas para J_w , J_n e J_s nas demais fronteiras. Substituindo a Eq. (3.27) e as expressões para os outros fluxos na Eq. (3.19), após cancelar o termo $\text{Re}[(u_e - u_w)\delta_y + (v_n - v_s)\delta_x]$ devido a equação da continuidade discretizada, resulta em:

$$\begin{aligned}\int_{\forall} A_\phi d\forall &= (\phi_P - \phi_E)\pi(p_e) \frac{\delta_y}{\Delta x^+} + (\phi_P - \phi_W)\pi(-p_w) \frac{\delta_y}{\Delta x^-} \\ &\quad + (\phi_P - \phi_N)\pi(p_n) \frac{\delta_x}{\Delta y^+} + (\phi_P - \phi_S)\pi(-p_s) \frac{\delta_x}{\Delta y^-} + \psi\end{aligned}\quad (3.28)$$

onde, cada coeficiente pode ser determinado como:

$$\begin{aligned}p_e &= \text{Re}u_e \Delta x^+ & p_w &= \text{Re}u_w \Delta x^- & \pi(p) &= \frac{p}{\exp(p) - 1} \\ p_n &= \text{Re}v_n \Delta y^+ & p_s &= \text{Re}v_s \Delta y^- & \chi(p) &= \frac{\pi(p) - 1}{p} + \frac{1}{2} \\ \psi &= [K_e \Delta x^+ \chi(p_e) - K_w \Delta x^- \chi(p_w)] \delta_y + [K_n \Delta y^+ \chi(p_n) - K_s \Delta y^- \chi(p_s)] \delta_x\end{aligned}\quad (3.29)$$

As funções $\pi(p)$ e $\chi(p)$ são monotônicas para todos os valores reais de p celular. No entanto, suas formas algébricas apresentam limitações. Quando o valor de p celular é nulo nessas expressões, conduz à uma indeterminação, e em valores de p muito baixos, perde-se alguma precisão na divisão entre diferenças muito pequenas. Dessa forma, a prática seguida neste trabalho é representar essas funções por um polinômio de terceira ou quarta ordem em relação à origem, para valores de p celulares menores que 0,01. Por outro lado, se esses valores excedem a faixa de argumentos admissíveis para o cálculo das exponenciais no computador, a função $\pi(p)$ é calculada de acordo com seus limites $\lim_{p \rightarrow +\infty} \pi(p) = 0$ e $\lim_{p \rightarrow -\infty} \pi(p) = -p$, como também para a função $\chi(p)$ que tende para $\lim_{p \rightarrow +\infty} \chi(p) = 0,5$ e $\lim_{p \rightarrow -\infty} \chi(p) = -0,5$.

3.2.2 Cálculo do Termo Fonte

A modelagem do termo fonte K_x é o que diferencia os vários esquemas exponenciais não-homogêneos. O primeiro esquema de volumes finitos tipo exponencial a incluir o termo K_x foi o LOADS (Wong e Raithby, 1979; Prakash, 1984), no qual K_x é calculado por comparação entre as Eqs. (3.20) e (3.21). O LOADS determina K_x contabilizando o fluxo cruzado, por advecção e difusão, e o termo fonte, através de suas respectivas faces. O cálculo dos fluxos advectivos e difusivos cruzados é feito por meio do esquema exponencial simples, onde os termos não-homogêneos K_x são negligenciados. Um procedimento análogo é empregado no esquema WUDS-E (Ulson de Souza, 1992; Maliska, 2004), no qual o termo fonte da equação geradora é calculado usando o esquema central, em vez do exponencial simples usado no LOADS.

O segundo esquema para volumes finitos que incluiu o cálculo do termo fonte em sua formulação foi o Flux-Spline (Varejão, 1979; Karki *et al.*, 1989). O cálculo do termo K_x é feito através da exigência de que os fluxos advectivo-difusivos combinados sejam contínuos entre os volumes de controle vizinhos, o que é conseguido através de um procedimento iterativo, análogo ao método SIMPLE (Patankar, 1980).

O UNIFAES (Unified Finite Approaches Exponential-type Scheme) é o terceiro esquema para equações gerais não-homogêneas, tendo recebido tal sigla devido ao fato de que as informações dos termos não-homogêneos K_x , requeridas pelo tratamento de volumes finitos, são fornecidas pela abordagem de diferenças finitas do esquema de Allen e Southwell (1955). A formulação original deste esquema apresentou um meio de obter diretamente uma representa-

ção numérica das primeiras e segundas derivadas combinadas, para cada direção coordenada, na equação de transporte na forma não-conservativa, escrita de maneira análoga à Eq. (3.21), mas centrada no ponto nodal P . O desenvolvimento algébrico de Allen e Southwell (1955) foi originalmente projetado para malhas regularmente espaçadas, sendo aqui apresentado como uma generalização para malhas irregulares.

A solução exata da equação geral fornece uma curva interpolante análoga à Eq. (3.22), acrescentando o subíndice P à componente local de velocidade u . Ajustando a curva interpolante aos três nós vizinhos W , P e E , segundo a Figura 3.2, tem-se:

$$\begin{aligned}\phi_W &= C_1 + C_2 \exp(-\text{Re}u_P \Delta x^-) - \frac{K_P}{\text{Re}u_P} \Delta x^- \\ \phi_P &= C_1 + C_2 \\ \phi_E &= C_1 + C_2 \exp(\text{Re}u_P \Delta x^+) + \frac{K_P}{\text{Re}u_P} \Delta x^+\end{aligned}\tag{3.30}$$

Resolvendo o sistema de equações acima para K_P , obtêm-se o termo fonte para um nó central P avaliado na forma como segue:

$$K_P = (\phi_P - \phi_E)\Pi^+ + (\phi_P - \phi_W)\Pi^- \tag{3.31}$$

onde,

$$\begin{aligned}\Pi^+ &= \frac{\text{Re}u_P \pi(\text{Re}u_P \Delta x^+)}{\Delta x^+ [\pi(-\text{Re}u_P \Delta x^-) - \pi(\text{Re}u_P \Delta x^+)]} \\ \Pi^- &= \frac{\text{Re}u_P \pi(-\text{Re}u_P \Delta x^-)}{\Delta x^- [\pi(-\text{Re}u_P \Delta x^-) - \pi(\text{Re}u_P \Delta x^+)]}\end{aligned}\tag{3.32}$$

em que a função de aproximação de $\pi(\pm \text{Re}u_P \Delta x^\pm)$ é dada pela forma apresentada na Eq. (3.29). Para o caso de malha regular, onde $\Delta x^+ = \Delta x^- = \Delta x$, a Eq. (3.32) reduz para o esquema original de Allen e Southwell (1955). Portanto,

$$\begin{aligned}\Pi^+ &= \frac{\pi(\text{Re}u_P \Delta x)}{\Delta x^2} \\ \Pi^- &= \frac{\pi(-\text{Re}u_P \Delta x)}{\Delta x^2}\end{aligned}\tag{3.33}$$

Dessa forma, conforme apresentado nesta seção, pelo ajuste da curva interpolante (3.22) aos três pontos principais da malha, a metodologia de Allen e Southwell (1955) foi capaz de

determinar o análogo de diferenças finitas do fluxo advectivo-difusivo combinado na direção considerada. Este análogo de diferenças finitas é igual ao termo fonte K_x da equação geradora Eq. (3.21). Generalizando a expressão da Eq. (3.31), sem o subíndice P , para qualquer ponto principal da malha e substituindo na Eq. (3.21), obtêm-se:

$$\text{Re}u \frac{d\phi}{dx} - \frac{d^2\phi}{dx^2} = K_x = (\phi_P - \phi_E)\Pi^+ + (\phi_P - \phi_W)\Pi^- \quad (3.34)$$

onde, as expressões para Π^+ e Π^- são dadas pelas Eqs. (3.32) ou (3.33) sem o subíndice P na componente local de velocidade u .

Apesar do esquema original de Allen e Southwell (1955) não ser numericamente conservativo, seu uso dentro da abordagem do método de volumes finitos garante a conservatividade porque $K_e^{i,j} = K_w^{i+1,j}$, de modo que $J_e^{i,j} = J_w^{i+1,j}$. No UNIFAES, o termo fonte $K_e^{i,j}$, por exemplo, é encontrado por interpolação linear da generalização acima das estimativas de K_P nos nós (i,j) e $(i+1,j)$, utilizando a Eq. (3.34) para determinar cada K_x . Assim, uma média aritmética é assumida na forma:

$$K_e^{i,j} = \frac{K_x^{i,j} + K_x^{i+1,j}}{2} \quad (3.35)$$

Nota-se que a expressão para K_x , Eq. (3.34), envolve valores da variável ϕ em três nós vizinhos, W , P e E . Com isto, para calcular o valor de K_w são necessários os valores de K_W e K_P , e por sua vez para encontrar K_W são necessários valores de ϕ em WW , W e P . Dessa forma, a molécula computacional necessária ao esquema UNIFAES envolve nós extras em cada direção, conforme está representado na Figura 3.3.

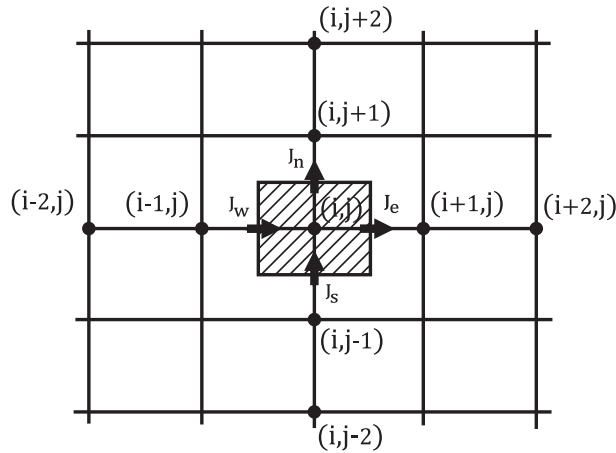


Figura 3.3: Molécula computacional do esquema UNIFAES.

No caso de nós próximos as fronteiras do domínio, verifica-se que o nó WW estaria fora do domínio, impossibilitando assim o cálculo de K_x . Então, para casos semelhantes a este, foi utilizada uma extrapolação linear considerando os valores de K_x para dois nós vizinhos e adjacentes que estejam dentro do domínio para estimar o valor de K_x na fronteira do volume de controle adjacente à fronteira do domínio.

3.3 Método Explícito para as Equações de Navier-Stokes

A discretização das equações da continuidade e de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis requer consideração especial, pois a derivada temporal da densidade não aparece mais na equação da continuidade e, portanto, não há nenhuma ligação óbvia com a pressão como existe para o escoamento compressível através da densidade. Por isso, existe uma restrição em relação a conservação de massa que precisa ser satisfeita. Vários métodos foram desenvolvidos para tratar esta situação particular.

A integração explícita no tempo empregada por Harlow e Welch (1965), através do método MAC, para a estrutura de malha deslocada, foi um dos primeiros métodos para resolver as equações da continuidade e de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis. O método lida com uma equação de Poisson para a pressão para o acoplamento dos campos de velocidade e pressão. O presente trabalho aplica a metodologia empregada por Harlow e Welch (1965), estendendo a sua abordagem para a estrutura de malha semi-deslocada.

3.3.1 Equação de Poisson para Pressão

A função da pressão no escoamento incompressível pode ser entendida a partir de um escoamento com componentes de velocidades u e v no instante de tempo t_0 , em que se deseja determinar o campo de velocidades e de pressão p no instante de tempo $t_0 + \Delta t$, ou seja, no nível de tempo $n + 1$. Para isso, seguindo as ideias apresentadas em Fortuna (2012), considere a seguinte discretização explícita para as equações de momentum u e v , Eqs. (3.9) e (3.10) respectivamente:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = F(u^n, v^n, p^{n+1}) \quad (3.36)$$

$$\frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} = G(u^n, v^n, p^{n+1}) \quad (3.37)$$

em que F e G contêm os termos advectivos, difusivos e de pressão. As Eqs. (3.36) e (3.37) podem ser escritas como,

$$u^{n+1} = F_1(u^n, v^n, p^{n+1}) \quad (3.38)$$

$$v^{n+1} = G_1(u^n, v^n, p^{n+1}) \quad (3.39)$$

onde,

$$F_1(u^n, v^n, p^{n+1}) = \Delta t F(u^n, v^n, p^{n+1}) + u^n \quad (3.40)$$

$$G_1(u^n, v^n, p^{n+1}) = \Delta t G(u^n, v^n, p^{n+1}) + v^n$$

A conservação de massa no nível de tempo $n + 1$ exige que os valores das componentes de velocidade u^{n+1} e v^{n+1} satisfaçam a equação da continuidade. Portanto,

$$\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} + \frac{\partial v^{n+1}}{\partial y} = 0 \quad (3.41)$$

Substituindo as Eqs. (3.38) e (3.39) para u^{n+1} e v^{n+1} respectivamente, na Eq. (3.41), têm-se:

$$\frac{\partial F_1(u^n, v^n, p^{n+1})}{\partial x} + \frac{\partial G_1(u^n, v^n, p^{n+1})}{\partial y} = 0 \quad (3.42)$$

que, como será mostrado, representa uma equação de Poisson para a pressão.

O valor de p^{n+1} nas funções F_1 e G_1 deve ser tal que a Eq. (3.42) seja satisfeita para todos os pontos do escoamento. Portanto, o campo de pressão no instante $n + 1$ deve permitir que os valores de u^{n+1} e v^{n+1} satisfaçam a equação da continuidade. Dessa forma, a principal função da pressão no escoamento incompressível é fazer com que o campo de velocidades satisfaça a equação da continuidade (Fortuna, 2012).

A importância da equação de Poisson para a pressão é que ela faz a ligação entre as equações do momentum e da continuidade, fornecendo valores de p que permitem as velocidades u e v , obtidas a partir das respectivas equações de momentum, satisfazer a equação da continuidade.

Um procedimento para obter analiticamente a equação de Poisson, Eq. (3.42), consiste na aplicação das seguintes operações: primeiro, deriva-se a componente x da equação de momentum, Eq. (3.9), em relação a x . Segundo, deriva-se a componente y da equação de momentum, Eq. (3.10), em relação a y . Obtêm-se, então, os resultados:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) &= \frac{\partial A_u}{\partial x} - \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right) &= \frac{\partial A_v}{\partial y} - \frac{\partial^2 p}{\partial y^2}\end{aligned}\tag{3.43}$$

Por fim, soma-se as equações resultantes, e após isolar os termos envolvendo p , chega-se em uma equação de Poisson para a pressão na forma:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = \frac{\partial A_u}{\partial x} + \frac{\partial A_v}{\partial y} - \frac{\partial D}{\partial t}\tag{3.44}$$

na qual a expressão para D é conhecida como o termo de dilatação:

$$D = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\tag{3.45}$$

O termo da dilatação D , que é nulo pela condição de incompressibilidade $\nabla \cdot \vec{V} = 0$, poderia ser eliminado da Eq. (3.44). Porém, pelas razões expostas a seguir, esse termo será mantido na Eq. (3.44). Suponha-se que o campo inicial de velocidade satisfaça $\nabla \cdot \vec{V}^0 = 0$ e que, durante todos os instantes subsequentes de tempo, ele permaneça com divergência nula. Isso implica em $\partial D / \partial t = 0$, dessa forma a equação de Poisson para pressão seria:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = \frac{\partial A_u}{\partial x} + \frac{\partial A_v}{\partial y}\tag{3.46}$$

Portanto, se o campo inicial de velocidades for realmente solenoidal, isto é, satisfazer $\nabla \cdot \vec{V}^0 = 0$, como suposto anteriormente, implica que o campo de pressões dado pela Eq. (3.46) fará com que o campo de velocidades se mantenha solenoidal durante toda a evolução temporal do escoamento. Por outro lado, se o campo inicial de velocidade não for solenoidal,

a Eq. (3.46) indica que a divergência inicial não-nula será mantida ao longo da simulação, acarretando problemas para o método numérico de solução.

Infelizmente, nem sempre é possível construir um campo inicial de velocidades que seja solenoidal, particularmente em domínios com geometrias complexas. Mesmo que o campo inicial de velocidades seja solenoidal, a solução numérica da Eq. (3.46) não é exata, já que o processo iterativo de solução da equação de Poisson deve ser finalizado após um número finito de iterações, introduzindo assim algum erro nos cálculos. Isso faz com que o valor da dilatação D , dado pela forma discreta da Eq.(3.45), seja diferente de zero. Deste modo, métodos numéricos que utilizam a equação de Poisson para a pressão normalmente retêm, nessa equação, o termo $\partial D/\partial t$. Assim, a equação de Poisson é escrita na forma da Eq. (3.44).

Hirt e Harlow (1967) mostraram que o termo $\partial D/\partial t$ leva em conta os erros no cálculo do campo de velocidades devido à solução inexata da equação de Poisson em passos anteriores. Assim, como esses erros fazem com que a dilatação D seja diferente de zero, o termo $\partial D/\partial t$ em geral não-nulo, contribui para estabilizar o cálculo da solução numérica.

Portanto, para a solução de escoamentos incompressíveis, pode-se utilizar uma equação de Poisson para a pressão, que escrita em coordenadas cartesianas e em duas dimensões, é representada pela Eq. (3.44). O campo de pressão obtido a partir da solução dessa equação permite determinar um campo de velocidades que satisfaz, simultaneamente, as equações de momentum e da continuidade.

3.3.2 Malha Semi-Deslocada

Dentre os vários pontos importantes que devem ser observados para que sejam obtidos bons resultados na solução das equações da continuidade e de Navier-Stokes, um deles é a localização de armazenamento das informações relacionadas às componentes da velocidade e da pressão na malha computacional. Três alternativas para localização das variáveis na célula computacional são apresentadas por Peyret e Taylor (1983), conforme a Figura 3.4. Os estudos comparativos já realizados dessas três malhas foram discutidos na Seção 2.1.3. Dentre estas, as duas formas de armazenamento das variáveis na malha computacional mais utilizadas no método dos volumes finitos são as estruturas da malha deslocada e co-localizada, sendo a malha semi-deslocada mais raramente empregada.

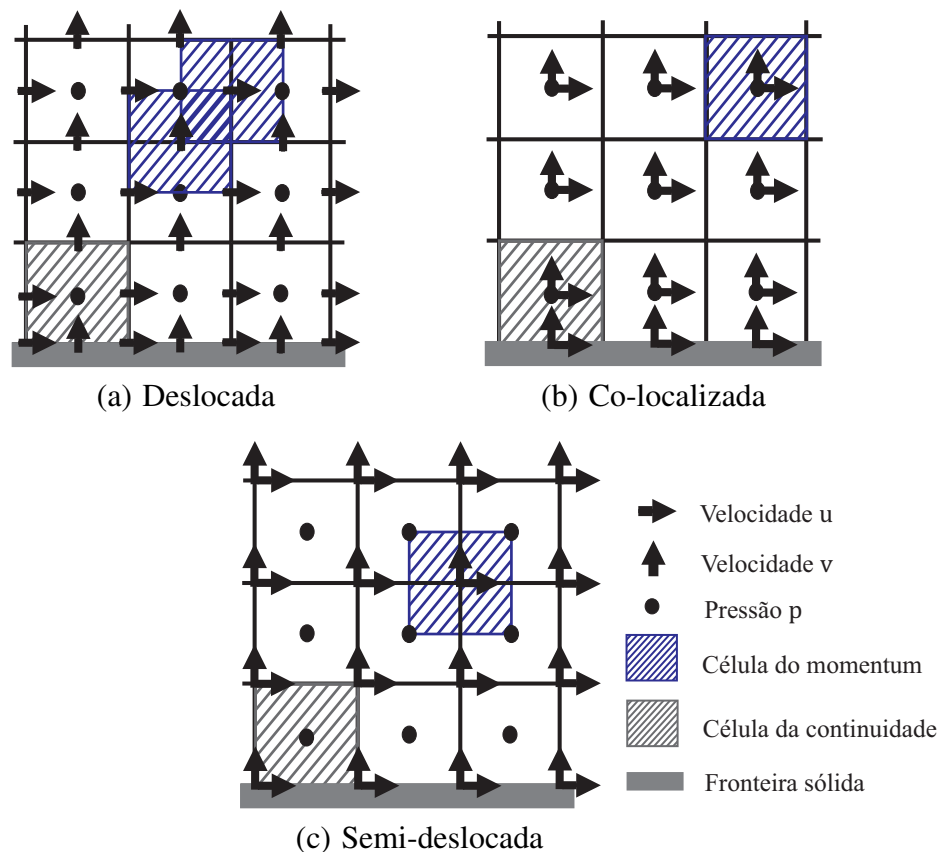


Figura 3.4: Estrutura dos diferentes tipos de malhas computacionais.

Na malha deslocada, Figura 3.4(a), a pressão é localizada no centro do volume de controle e cada componente de velocidade nas faces dos volumes. Ela é frequentemente adotada como uma estratégia clássica para formar um único campo de pressão fortemente acoplado. No entanto, pelo menos uma das componentes de momentum vizinho à fronteira sólida é necessariamente irregular. A fim de preencher inteiramente o domínio com volumes de controle, a componente de momentum paralela à fronteira sólida deve ser irregularmente espaçada, e a componente de momentum normal pode ser regularmente espaçada. Além disso, cada componente de velocidade possui um estêncil de discretização diferente, o que reduz sua flexibilidade em escoamentos com geometrias complexas.

Em contraste, a malha co-localizada, Figura 3.4(b), na qual todas as variáveis são postas no centro do volume de controle, sempre produz um campo desacoplado de pressão, permitindo formar um campo com oscilações não-realistas. Para suprimir a oscilação de pressão indesejada, pode-se adotar a interpolação de momentum de Rhie e Chow (1983), onde se imita a malha deslocada dentro da estrutura co-localizada. Além do mais, esse arranjo da malha requer uma extrapolação numérica para determinar os valores de pressão na região do contorno, exigindo uma condição explícita para a pressão, o que introduz um erro numérico adicional.

Na malha semi-deslocada, Figura 3.4(c), a pressão é localizada no centro do volume de controle e ambas componentes de velocidade são co-localizadas em seus vértices. Em princípio, essa malha é ideal no sentido de que elimina toda a extrapolação de velocidade inerente à estratégia da malha deslocada, quando adjacente às fronteiras do domínio. Em segundo lugar, facilita a derivação de um conjunto consistente de condições de contorno para os gradientes de velocidades. Por último, nenhuma condição de contorno para a pressão é necessária para resolver o campo de pressão. Além disso, observou-se que na malha semi-deslocada uma superfície plana não-paralela aos eixos pode adequar-se de forma regular à malha cartesiana, uma flexibilidade geométrica inexistente nas outras malhas. No entanto, assim como a estrutura co-localizada, a malha semi-deslocada permite formar um campo de pressão desacoplado, mas que este não interfere no campo de velocidade do escoamento (Peyret e Taylor, 1983).

A abordagem de integração explícita temporal para a solução das equações da continuidade e de Navier-Stokes em variáveis primitivas, Eqs. (3.6), (3.9) e (3.10), empregada por Harlow e Welch (1965), é agora apresentada para a estrutura de malha semi-deslocada. A Figura 3.5 apresenta os respectivos volumes de controle do momentum e da continuidade na malha semi-deslocada, mostrando também a indexação das variáveis na célula.

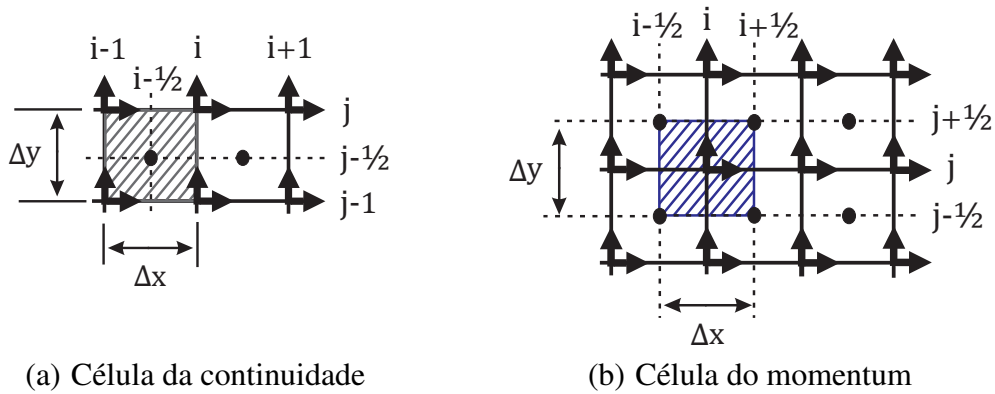


Figura 3.5: Indexação das variáveis na malha semi-deslocada.

Considere-se, inicialmente, a discretização da equação da continuidade na célula de volumes finitos, mostrada na Figura 3.5(a). Integrando a Eq. (3.6), atentando para a definição da Eq. (3.45), no volume de controle centrado no ponto $(i - 1/2, j - 1/2)$, têm-se:

$$D_{i-1/2, j-1/2}^n = \frac{u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n - u_{i-1,j}^n - u_{i-1,j-1}^n}{2\Delta x} + \frac{v_{i,j}^n + v_{i-1,j}^n - v_{i,j-1}^n - v_{i-1,j-1}^n}{2\Delta y} \quad (3.47)$$

e similarmente para o instante de tempo $n + 1$.

A discretização temporal das equações de momentum, Eqs. (3.9) e (3.10), é baseada no método de Euler explícito, em que todos os termos que envolvem as variáveis dependentes são discretizados no nível de tempo n . A discretização é feita no volume de controle mostrado na Figura 3.5(b). Portanto,

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} = A_{u_{i,j}}^n - \frac{p_{i+1/2,j+1/2}^n + p_{i+1/2,j-1/2}^n - p_{i-1/2,j+1/2}^n - p_{i-1/2,j-1/2}^n}{2\Delta x} \quad (3.48)$$

$$\frac{v_{i,j}^{n+1} - v_{i,j}^n}{\Delta t} = A_{v_{i,j}}^n - \frac{p_{i+1/2,j+1/2}^n + p_{i-1/2,j+1/2}^n - p_{i+1/2,j-1/2}^n - p_{i-1/2,j-1/2}^n}{2\Delta y} \quad (3.49)$$

Deseja-se, assim, que as velocidades calculadas no nível de tempo $n + 1$ satisfaçam a equação da continuidade, discretizada na forma:

$$\begin{aligned} D_{i-1/2,j-1/2}^{n+1} &= \frac{u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j-1}^{n+1} - u_{i-1,j}^{n+1} - u_{i-1,j-1}^{n+1}}{2\Delta x} \\ &+ \frac{v_{i,j}^{n+1} + v_{i-1,j}^{n+1} - v_{i,j-1}^{n+1} - v_{i-1,j-1}^{n+1}}{2\Delta y} = 0 \end{aligned} \quad (3.50)$$

Portanto, a versão discreta da equação de Poisson, Eq. (3.44), é obtida substituindo-se, na Eq. (3.50), as Eqs. (3.48) e Eqs. (3.49), para $u_{i,j}^{n+1}$ e $v_{i,j}^{n+1}$ respectivamente, além das expressões correspondentes para as demais componentes de velocidades. Fazendo essas substituições e rearranjando os termos resultantes, obtêm-se:

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right) p_{i-1/2,j-1/2}^n \\ & + \left(\frac{0,25}{\Delta x^2} + \frac{0,25}{\Delta y^2} \right) (p_{i-3/2,j+1/2}^n + p_{i+1/2,j-3/2}^n + p_{i+1/2,j+1/2}^n + p_{i-3/2,j-3/2}^n) \\ & + \left(\frac{0,5}{\Delta x^2} - \frac{0,5}{\Delta y^2} \right) (p_{i+1/2,j-1/2}^n + p_{i-3/2,j-1/2}^n - p_{i-1/2,j+1/2}^n - p_{i-1/2,j-3/2}^n) \\ & = \frac{A_{u_{i,j}}^n + A_{u_{i,j-1}}^n - A_{u_{i-1,j}}^n - A_{u_{i-1,j-1}}^n}{2\Delta x} + \frac{A_{v_{i,j}}^n + A_{v_{i-1,j}}^n - A_{v_{i,j-1}}^n - A_{v_{i-1,j-1}}^n}{2\Delta y} \\ & + \frac{D_{i-1/2,j-1/2}^n}{\Delta t} \end{aligned} \quad (3.51)$$

Nota-se que, por causa da precisão aritmética limitada ou por causa de iterações insuficientes na solução da Eq. (3.51), conforme discutido na Seção 3.3.1, existe um termo de dilatação

residual $D_{i-1/2,j-1/2}^n/\Delta t$, que é calculado de acordo com a Eq. (3.47), ficando como um termo fonte na equação de Poisson, Eq. (3.51), que continuamente reduz o próprio resíduo da dilatação. No resultado convergido, tal termo fonte tende a anular-se, não introduzindo nenhum problema de consistência no método.

A partir do campo de velocidades u^n e v^n em $t = t_n$, o procedimento de cálculo segue os seguintes passos: primeiro, calcula-se o lado direito da equação de Poisson, Eq. (3.51), escrevendo os coeficientes para todos os pontos do domínio computacional. Os coeficientes A_u e A_v são calculados de acordo com a Eq. (3.28). Segundo, soluciona-se a Eq. (3.51), por um método iterativo, para obter o campo de pressão no instante de tempo n . Por fim, valores apropriados de p^n , obtidos no passo anterior, são substituídos nas Eqs. (3.48) e (3.49), para calcular explicitamente as velocidades no instante $n + 1$.

A equação da pressão, Eq. (3.51) geralmente não é diagonalmente dominante, exceto no caso $\Delta x = \Delta y$, no qual os coeficientes de influência dos nós $(i+1/2, j-1/2)$, $(i-3/2, j-1/2)$, $(i-1/2, j+1/2)$ e $(i-1/2, j-3/2)$ desaparecem, de modo que o nó central $(i-1/2, j-1/2)$ torna-se dependente apenas dos nós diagonais $(i-3/2, j+1/2)$, $(i+1/2, j-3/2)$, $(i+1/2, j+1/2)$ e $(i-3/2, j-3/2)$. A Figura 3.6 retrata o estêncil numérico da equação da pressão na estrutura de malha semi-deslocada no caso $\Delta x = \Delta y$.

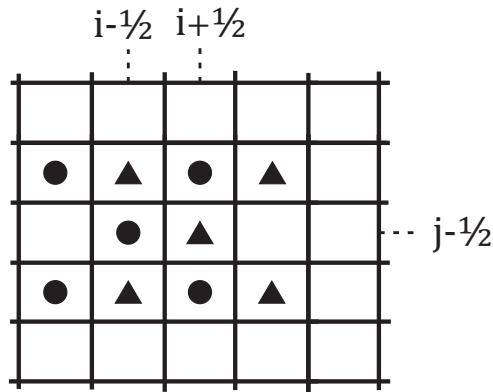


Figura 3.6: Estêncil numérico da equação de Poisson para pressão na malha quadrada.

Pode-se notar que existem duas células de pressão desacopladas. Este fato leva à existência de duas soluções para a pressão. Essas soluções diferem uma da outra por uma variação arbitrária e aparentemente não há razão para que essas variações sejam idênticas (Peyret e Taylor, 1983). A existência dos dois campos de pressão poderia levar a oscilações não-realistas na pressão computada. Uma medida para eliminar o campo oscilatório de pressão, seria utilizar a interpolação de momentum de Rhie e Chow (1983). Contudo, a forma das equações base-

ada na aproximação de Rhie e Chow (1983) viola a versão discreta da conservação de massa (Figueiredo e Oliveira, 2009b). Sendo assim, apenas a forma original das equações na malha semi-deslocada é considerada neste trabalho, utilizando a interpolação de Rhie e Chow (1983) como pós-processamento, exclusivamente para produzir campos de pressão suaves, sem perturbar o campo de velocidade numericamente solenoidal.

3.3.3 Tratamento na Fronteira da Equação de Poisson para Pressão

A equação da pressão para um volume de controle adjacente a uma parede sólida é deduzida simplesmente usando as condições de contorno impostas sobre o campo de velocidade nos termos de dilatação, sem recorrer a condições de contorno suplementares. Ao se fazer isto, todos os nós de pressão serão internos ao domínio e nenhuma condição explícita de pressão no contorno será necessária. A seguir, tem-se um exemplo da equação da pressão discretizada próximo a fronteira do domínio. Considere os seguintes volumes de controle adjacentes a uma fronteira sólida, como mostrado na Figura 3.7:

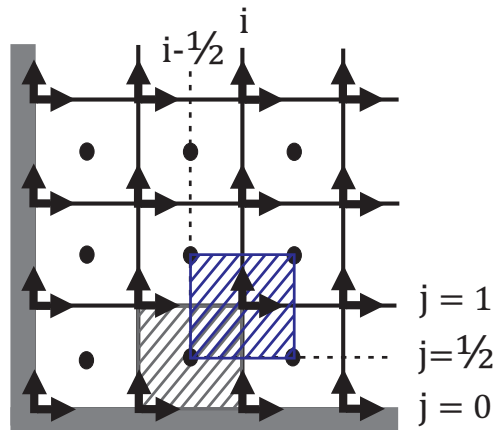


Figura 3.7: Tratamento da equação da pressão nas fronteiras do domínio.

A legenda da Figura 3.7 segue aquela apresentada na Figura 3.4, para os volumes de controle da continuidade e do momentum. Deseja-se, então, que a equação discretizada da continuidade, adjacente a parede sólida, seja satisfeita no instante $n + 1$. Assim,

$$D_{i-1/2,1/2}^{n+1} = \frac{u_{i,1}^{n+1} + u_{i,0}^{n+1} - u_{i-1,1}^{n+1} - u_{i-1,0}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{v_{i,1}^{n+1} + v_{i-1,1}^{n+1} - v_{i,0}^{n+1} - v_{i-1,0}^{n+1}}{2\Delta y} = 0 \quad (3.52)$$

Pela condição de não-deslizamento na parede, as velocidades $u_{i,0}^{n+1}$, $u_{i-1,0}^{n+1}$, $v_{i,0}^{n+1}$ e $v_{i-1,0}^{n+1}$, na Eq. 3.52, são nulas durante todos os instantes de tempo. Além disso, as equações discretizadas do momentum no ponto $(i,1)$ são dadas por:

$$\frac{u_{i,1}^{n+1} - u_{i,1}^n}{\Delta t} = A_{u_{i,1}}^n - \frac{p_{i+1/2,3/2}^n + p_{i+1/2,1/2}^n - p_{i-1/2,3/2}^n - p_{i-1/2,1/2}^n}{2\Delta x} \quad (3.53)$$

$$\frac{v_{i,1}^{n+1} - v_{i,1}^n}{\Delta t} = A_{v_{i,1}}^n - \frac{p_{i+1/2,3/2}^n + p_{i-1/2,3/2}^n - p_{i+1/2,1/2}^n - p_{i-1/2,1/2}^n}{2\Delta y} \quad (3.54)$$

e analogamente para o ponto $(i-1,1)$. Substituindo-se as Eqs. (3.53) e (3.54), na Eq. (3.52), para $u_{i,1}^{n+1}$ e $v_{i,1}^{n+1}$ respectivamente, além das expressões correspondentes ao ponto $(i-1,1)$, obtêm-se a equação da pressão para o ponto $(i-1/2,1/2)$ na forma:

$$\begin{aligned} \left(\frac{0,5}{\Delta x^2} + \frac{0,5}{\Delta y^2} \right) p_{i-1/2,1/2}^n &= \left(\frac{0,25}{\Delta x^2} + \frac{0,25}{\Delta y^2} \right) (p_{i+1/2,3/2}^n + p_{i-3/2,3/2}^n) \\ &+ \left(\frac{0,25}{\Delta x^2} - \frac{0,25}{\Delta y^2} \right) (p_{i+1/2,1/2}^n + p_{i-3/2,1/2}^n) \\ &- \left(\frac{0,5}{\Delta x^2} - \frac{0,5}{\Delta y^2} \right) p_{i-1/2,3/2}^n - \frac{A_{u_{i,1}}^n - A_{u_{i-1,1}}^n}{2\Delta x} \\ &- \frac{A_{v_{i,1}}^n + A_{v_{i-1,1}}^n}{2\Delta y} + \frac{D_{i-1/2,1/2}^n}{\Delta t} \end{aligned} \quad (3.55)$$

onde, procedendo de maneira análoga, pode-se deduzir equações da pressão para todos os volumes de controle de fronteira do domínio.

3.4 Análise das Incertezas Numéricas

Com base nos trabalhos de Roache (1998) e Ferziger e Peric (2001), o erro da solução numérica de uma variável de interesse é gerado por quatro fontes principais: erros de truncamento, erros de iteração, erros de arredondamento e erros de programação. Ao longo do presente trabalho, os erros de arredondamento são controlados ao se empregar a precisão adequada na obtenção das soluções numéricas, isto é, eles são muitos menores do que os erros de truncamento.

Os erros de iteração, quando existem, são minimizados ao se realizar um grande número de iterações e considera-se que não existem erros de programação. Dessa forma, esta seção apresenta a metodologia empregada para o cálculo da incerteza das soluções numéricas, definida como uma estimativa do erro de truncamento. Neste caso, quando o erro da solução numérica é gerado apenas por erros de truncamento, denomina-se erro de discretização (Ferziger e Peric, 2001).

O valor do erro numérico só pode ser obtido quando a solução analítica do modelo matemático é conhecida. Porém, em termos práticos, isto é, para soluções numéricas de modelos matemáticos cuja solução analítica é desconhecida, não é possível obter o erro numérico. Nestes casos é necessário estimar o valor da solução analítica. Assim, em vez do erro numérico, calcula-se o erro estimado. A incerteza da solução numérica de uma variável de interesse é avaliada pela diferença entre a sua solução analítica estimada e a própria solução numérica.

Na literatura, são apresentadas diversas formas de obter o valor da solução analítica estimada. Este trabalho emprega a metodologia da extrapolação de Richardson (Richardson, 1911; Richardson e Gaunt, 1927; Roache, 1998), como uma forma de estimar os resultados espacialmente convergidos, sendo usada como uma ferramenta fundamental de avaliação dos resultados. O uso da extrapolação de Richardson é muito simplificado se a malha é refinada proporcionalmente em todas as direções, de modo que a relação de aspecto da malha é mantida constante com o refinamento. Este é o caso do presente trabalho.

3.4.1 Extrapolação de Richardson

A extrapolação de Richardson (Richardson, 1911; Richardson e Gaunt, 1927) foi originalmente desenvolvida como um meio de combinar soluções numéricas, usando diferentes níveis de refinamento, para aumentar a ordem de precisão dos resultados. Roache (1982) demonstrou que esta abordagem poderia ser aplicada à solução numérica de equações diferenciais parciais, quando ele aplicou a técnica à solução da equação de Poisson em uma sequência de malhas retangulares uniformes, obtendo um resultado de ordem superior na malha mais grosseira.

Segundo Roache (1982), para que a extrapolação de Richardson seja confiável, é importante satisfazer determinadas condições. Em primeiro lugar, a solução em qualquer nível de refinamento da malha não pode exibir oscilações (como aquelas obtidas por esquemas não-monotônicos, por exemplo). Em segundo lugar, as soluções numéricas devem estar na faixa

assintótica de convergência, ou seja, aquela em que o erro do esquema passa a ser dominado pelo termo de ordem mais baixa da análise de erro por série de Taylor do esquema. Terceiro, as soluções devem ser obtidas com rigorosos critérios de convergência, de modo que os efeitos dos processos iterativos incompletos possam ser considerados desprezíveis.

Considerando que essas condições sejam asseguradas e assumindo que as soluções discretas $f_{\Delta x}$ possam ser expressas em termos do espaçamento da malha Δx , a aproximação numérica pode ser escrita na forma:

$$f_{\Delta x} - f_{\Delta x \rightarrow 0} = C(\Delta x)^p \quad (3.56)$$

onde $f_{\Delta x \rightarrow 0}$ é a solução discreta no limite da malha indefinidamente refinada, p é a ordem assintótica do erro de discretização e C é um coeficiente que se admite ter valor constante, portanto é independente de qualquer discretização.

Presumindo que seja conhecida a ordem assintótica p do erro de discretização, que é admitida igual à ordem do erro de truncamento, a estimativa de $f_{\Delta x \rightarrow 0}$ pode ser determinada a partir dos resultados numéricos obtidos com dois níveis de refinamentos distintos. Aplicando a Eq. (3.56) a duas malhas diferentes, Δx_1 (grossa) e Δx_2 (fina), cujas soluções numéricas são respectivamente $f_{\Delta x_1}$ e $f_{\Delta x_2}$, tem-se o sistema:

$$\begin{aligned} f_{\Delta x_1} - f_{\Delta x \rightarrow 0} &= C(\Delta x_1)^p \\ f_{\Delta x_2} - f_{\Delta x \rightarrow 0} &= C(\Delta x_2)^p \end{aligned} \quad (3.57)$$

Resolvendo o sistema da Eq. (3.57) para $f_{\Delta x \rightarrow 0}$ chega-se a expressão da extrapolação de Richardson para a estimativa do valor da solução analítica, que é dada por:

$$f_{\Delta x \rightarrow 0} = f_{\Delta x_2} + \frac{f_{\Delta x_2} - f_{\Delta x_1}}{r^p - 1} \quad (3.58)$$

onde r é a razão de refino da malha, definida por $r = \Delta x_1 / \Delta x_2$.

A extrapolação de Richardson fornece, além da magnitude da estimativa, o seu sinal, isto é, se $f_{\Delta x \rightarrow 0}$ é maior ou menor do que $f_{\Delta x_2}$ através da diferença entre $f_{\Delta x_2}$ e $f_{\Delta x_1}$, pois a razão de refino da malha r e a ordem assintótica p sempre são maiores do que a unidade, fazendo com que o denominador da Eq. (3.58) seja sempre positivo.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta dissertação foi estudado numericamente o problema de escoamento incompressível de fluidos viscosos em canais simétricos com expansão gradual. O método de solução das equações da continuidade e de Navier-Stokes se baseia na descrição euleriana do escoamento, empregando as variáveis primitivas na forma divergente, na formulação de volumes finitos, com o esquema UNIFAES para a discretização das derivadas espaciais da equação de transporte advectivo-difusivo e empregando a estrutura de malha semi-deslocada. O método de solução adota o procedimento explícito de integração temporal do campo de velocidades e usa a equação de Poisson para o campo de pressão, seguindo a metodologia apresentada por Harlow e Welch (1965).

Para a obtenção dos resultados numéricos, foi desenvolvido um programa computacional na linguagem Pascal. Devido ao procedimento explícito de integração temporal, o passo de tempo foi fixado, em cada caso, de acordo com um procedimento heurístico habitual, como o mínimo entre o limite advectivo obtido da condição de CFL (Courant, Friedrichs and Lewy) e o limite difusivo:

$$\Delta t_{advectivo} = \min \left\{ \frac{\Delta x}{Re}, \frac{\Delta y}{Re} \right\}$$

$$\Delta t_{difusivo} = \frac{0,5}{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}} \quad (4.1)$$

multiplicado por um fator de segurança de 0,5. Assim, $\Delta t = 0,5 \min\{\Delta t_{adv}, \Delta t_{dif}\}$. Foi adotado como critério de parada da simulação numérica o resíduo quadrático médio da equação do momentum linear, este devendo ser menor que 10^{-6} .

O sistema de equações de pressão foi fechado empregando os valores de velocidade na fronteira, conforme descrito na Seção 3.3.3, mesmo na saída, em que os valores de velocidade variam ao longo do processo iterativo. A equação de Poisson da pressão é resolvida iterativamente com 200 varreduras por um método de sub-relaxação. Devido ao fato que a malha não é quadrada ($\Delta x \neq \Delta y$), deixando de ser diagonalmente dominante, foi implementada uma correção no método iterativo, através de um fator de sub-relaxação para a equação da pressão, expresso na forma como segue:

$$w = \frac{\left| \frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right|}{\left| \frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right| + \left| \frac{2}{\Delta x^2} - \frac{2}{\Delta y^2} \right|} \quad (4.2)$$

O numerador da Eq. (4.2) é o termo da diagonal da matriz da pressão e o denominador é a soma dos termos de uma linha da matriz. Usa-se essa expressão para compensar a falta da diagonalidade dominante. Se a malha apresentasse $\Delta x = \Delta y$, consequentemente $w = 1$.

4.1 Escoamento em Canais com Expansão

Considere um escoamento de um fluido incompressível, newtoniano e viscoso através de um canal plano com altura d , que se expande simetricamente, com semi-ângulo α , para um canal com altura D , conforme ilustrado na Figura 4.1. Para um semi-ângulo $\alpha = 90^\circ$, o canal torna-se uma expansão abrupta.

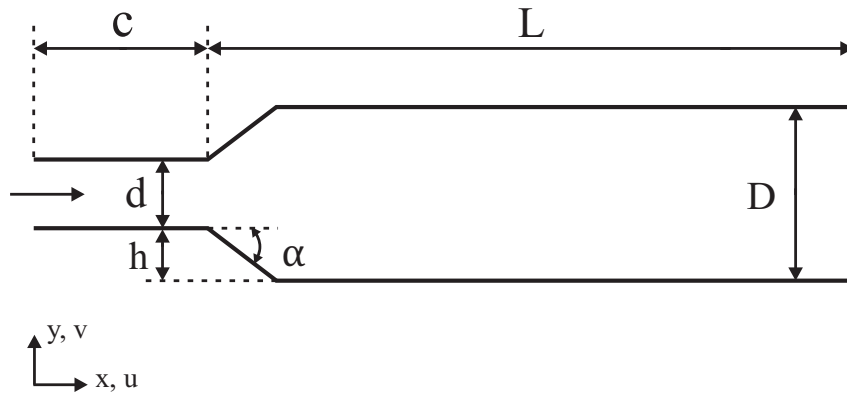


Figura 4.1: Geometria do canal simétrico com expansão.

Na forma adimensionalizada das equações da continuidade e de Navier-Stokes, todas as velocidades são normalizadas pela velocidade média $\bar{U}_{med}$ na entrada do canal, e as coordenadas espaciais pela altura do canal d a montante. Sendo assim, no presente trabalho, a definição do número de Reynolds é dada por:

$$\text{Re} = \frac{\bar{U}_{med} d}{\nu} \quad (4.3)$$

onde $\bar{U}_{med}$ também corresponde a $2/3$ da velocidade máxima no centro da entrada do canal, para um perfil de velocidades parabólico desenvolvido, e ν é a viscosidade cinemática.

As dimensões da geometria na Figura 4.1 são compostas por uma altura do canal de entrada $d = 1$, uma região de entrada de fluido com comprimento $c = 5d$ e comprimento do canal a jusante de $L = 45d$, de tal modo que o escoamento parabólico desenvolvido seja recuperado na saída do canal. A taxa de expansão é definida como D/d , onde D é a altura do canal a jusante da expansão e d é a altura do canal a montante. h é a altura do degrau.

Todos os contornos sólidos são impermeáveis e condições de contorno de não-deslizamento, $u = v = 0$, são impostas ao longo das paredes do canal. Na saída do domínio, localizada em $x = (c + L)$ e $0 \leq y \leq D$, foi assumida a condição de contorno de Neumann homogênea, $\partial u / \partial x = 0$ e $\partial v / \partial x = 0$, para as componentes de velocidades. Como condição de entrada, um perfil parabólico desenvolvido foi especificado na região de entrada do canal, em $x = 0$ e $h \leq y \leq (h + d)$, na forma adimensional como segue:

$$u(y) = -\frac{6}{d^2}(y - h)(y - (d + h)) \quad (4.4)$$

com a componente de velocidade $v = 0$.

O intervalo de interesse do número de Reynolds, no presente trabalho, compreende casos entre $20 \leq Re \leq 410$. O comprimento total do canal é considerado o mesmo para todas as simulações, visto que foi encontrado ser adequado em termos de restaurar o escoamento totalmente desenvolvido na saída do domínio. As taxas de expansão estudadas incluem $D/d = 2$ e 3 , e os semi-ângulos incluem $\alpha = 10^\circ; 15^\circ; 20^\circ; 26,56^\circ; 30^\circ$ e 90° . Uma justificativa será dada adiante a respeito do fato de se não levar em conta semi-ângulos intermediários entre 30° e 90° .

A literatura é escassa em informações sobre comportamento de fluidos newtonianos em escoamentos laminares em canais com expansão gradual, não havendo por isso um conhecimento de trabalhos experimentais por parte do autor. Por outro lado, um caso particular desta geometria, que corresponde ao do escoamento sobre uma expansão abrupta, dispõe de extensos dados experimentais e numéricos na literatura. Dessa forma, para validar o método de solução são feitas comparações dos resultados numéricos com medidas experimentais para o caso de uma expansão abrupta. Em seguida, apresenta-se os resultados do escoamento em canais com expansão gradual, além de comparações com resultados numéricos disponíveis na literatura.

4.1.1 Resultados para Expansão Abrupta - Validação

Escoamento laminar em uma expansão simétrica abrupta, como aquela da Figura 4.1 com semi-ângulo $\alpha = 90^\circ$, é um problema clássico de escoamento de fluido que admite múltiplas soluções. Este fato foi demonstrado numericamente e experimentalmente por vários autores. Para números de Reynolds menores que um certo valor crítico, o escoamento na expansão abrupta é simétrico com duas regiões de recirculação de tamanhos iguais. Para números de Reynolds maiores do que o valor crítico, o escoamento sofre uma bifurcação de quebra de simetria, tornando a solução simétrica instável. A solução estável torna-se assimétrica com duas regiões de recirculação de tamanhos diferentes. Duas soluções assimétricas são possíveis, sendo uma delas a imagem espelhada da outra. O esquema dos escoamentos é mostrado na Figura 4.2.

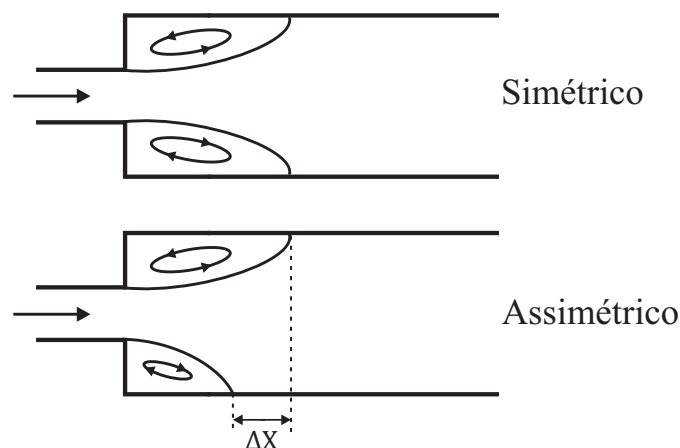


Figura 4.2: Descrição esquemática dos padrões de escoamento simétricos e assimétricos.

Os métodos adotados para encontrar o número crítico de Reynolds, para a bifurcação de quebra de simetria, podem ser divididos em três categorias: análises de bifurcação, simulações numéricas e experimentos. Na análise de bifurcação, são adotadas análises de estabilidade linear para identificar o ponto exato da bifurcação (Fearn *et al.*, 1990; Shapira *et al.*, 1990; Alleborn *et al.*, 1997). Para os outros dois métodos, é necessário aumentar ou diminuir gradualmente o número de Reynolds para procurar o ponto crítico assintoticamente. Além disso, o número crítico de Reynolds é sensível a pequenas imperfeições que são inevitáveis, especialmente no aparato experimental (Cherdron *et al.*, 1978). Portanto, é bastante difícil localizar exatamente esse ponto por esses dois métodos.

Um resumo dos números críticos de Reynolds obtidos usando os métodos acima para taxas de expansão $D/d = 2$ e 3 está na Tabela 4.1. A maneira de definir o número de Reynolds é crucial, portanto, o esclarecimento a seguir é essencial. O número de Reynolds pode ser baseado na velocidade de entrada média ou máxima, $\bar{U}_{med}$ e U_{max} respectivamente, e na altura do canal a montante d . Considerando isso, pode-se comparar resultados entre estudos em que o número de Reynolds é diferentemente calculado. A última coluna da Tabela 4.1 também fornece o valor convertido do número de Reynolds baseado na definição do presente trabalho.

Tabela 4.1: Resumo dos números críticos de Reynolds obtidos por diferentes autores.

Referência	D/d	Definição de Re	Re_{cr}	$Re_{convertido}$
Cherdron <i>et al.</i> (1978) (Experimentos)	1:2 —	U_{max}, d	185 —	123,3 —
Durst <i>et al.</i> (1993) (Simulação numérica)	1:2 —	U_{max}, d	125 —	83,3 —
Fearn <i>et al.</i> (1990) (Análise de bifurcação)	— 1:3	$U_{max}, d/2$	— 40,25	— 53,9
Shapira <i>et al.</i> (1990) (Análise de bifurcação)	1:2 1:3	U_{max}, d	215 82,6	143,3 55
Drikakis (1997) (Simulação numérica)	1:2 1:3	U_{max}, d	216 80	144 53,3
Battaglia <i>et al.</i> (1997) (Análise de bifurcação)	1:2 1:3	$\bar{U}_{med}, d$	143,6 53,8	143,6 53,8
Battaglia <i>et al.</i> (1997) (Simulação numérica)	1:2 1:3	$\bar{U}_{med}, d$	150 – 155 57 – 58	150 – 155 57 – 58
Alleborn <i>et al.</i> (1997) (Análise de bifurcação)	1:2 1:3	U_{max}, d	218 80	145,3 53,3

No presente trabalho, o número de Reynolds crítico foi obtido por meio de simulações numéricas. Como mencionado acima, esse procedimento não pode revelar o ponto de bifurcação diretamente, contudo as simulações numéricas podem prever o campo de escoamento com certa precisão em ambos os lados da condição crítica. Dessa forma, uma indicação do ponto de bifurcação pode ser inferida partindo de uma solução simétrica e uma assimétrica, e assim diminuindo a distância entre elas computando os escoamentos em números intermediários de

Reynolds. Não surpreendentemente, os resultados mostram que o tempo de convergência fica maior à medida que se aproxima do número crítico de Reynolds, deixando assim alguma incerteza no valor final do ponto crítico. Observações semelhantes foram relatadas por Battaglia *et al.* (1997). Drikakis (1997) menciona a dificuldade de fixar o número crítico de Reynolds, uma vez que os resultados ficam extremamente dependentes da resolução da malha.

Uma malha retangular uniforme foi usada nas simulações numéricas. Para avaliar o efeito da resolução da malha, um caso de escoamento laminar em $Re = 200$ e taxa de expansão 1:2 foi selecionado. Este caso envolve separação assimétrica, como visto a partir das linhas de corrente do escoamento na Figura 4.3.

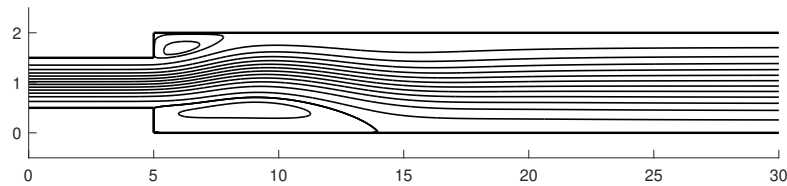


Figura 4.3: Linhas de corrente para o caso $Re = 200$.

Um estudo de sensibilidade da malha foi realizado usando duas malhas: 150×60 e 200×80 . Uma solução de independência de malha é verificada na Figura 4.4, comparando a distribuição do coeficiente de atrito na parede nas duas malhas. O coeficiente de atrito, c_f , é definido por $c_f = \tau_w / (\frac{1}{2} \rho \bar{U}_{med}^2)$, onde τ_w é a tensão cisalhante na parede.

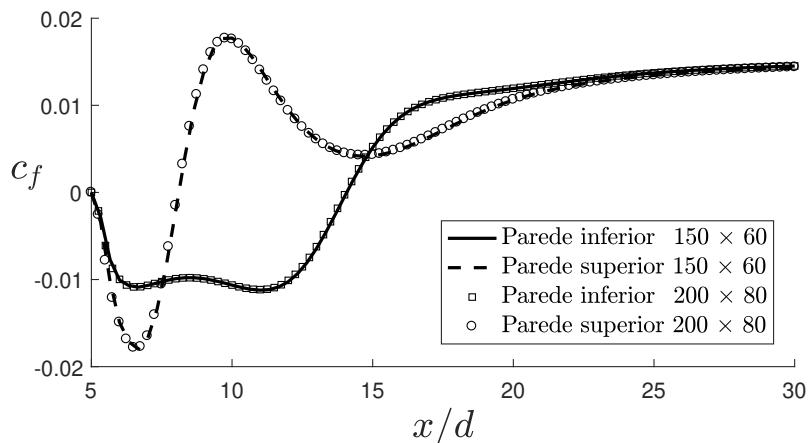


Figura 4.4: Verificação da solução de independência de malha para o caso $Re = 200$.

Ambas as malhas capturaram o mesmo número de regiões de recirculação, e a diferença na predição de seus tamanhos foi menor que 2%. Os espaçamentos Δx e Δy das malhas foram mantidos para o caso da taxa de expansão 1:3. Assim, foram usadas, para este caso, malhas de 150×90 e 200×120 .

Para validar o método de solução, foram realizadas computações para os números de Reynolds $Re = 35, 80$ e 187 , que são referidos aproximadamente como $Re = 26, 60$ e 140 no estudo de Fearn *et al.* (1990). Novamente, a causa da diferença deve-se às diferentes definições utilizadas para o número de Reynolds. Assim, os perfis de velocidade medidos por Fearn *et al.* (1990) são comparados com os resultados numéricos do presente trabalho para uma taxa de expansão $D/d = 3$. Nas Figuras 4.5, 4.6 e 4.7 a seguir, as computações numéricas são representadas pelas linhas sólidas, enquanto que os dados experimentais pelos símbolos em círculo.

A Figura 4.5 mostra a comparação dos perfis de velocidade com os dados experimentais em várias posições do canal para $Re = 35$.

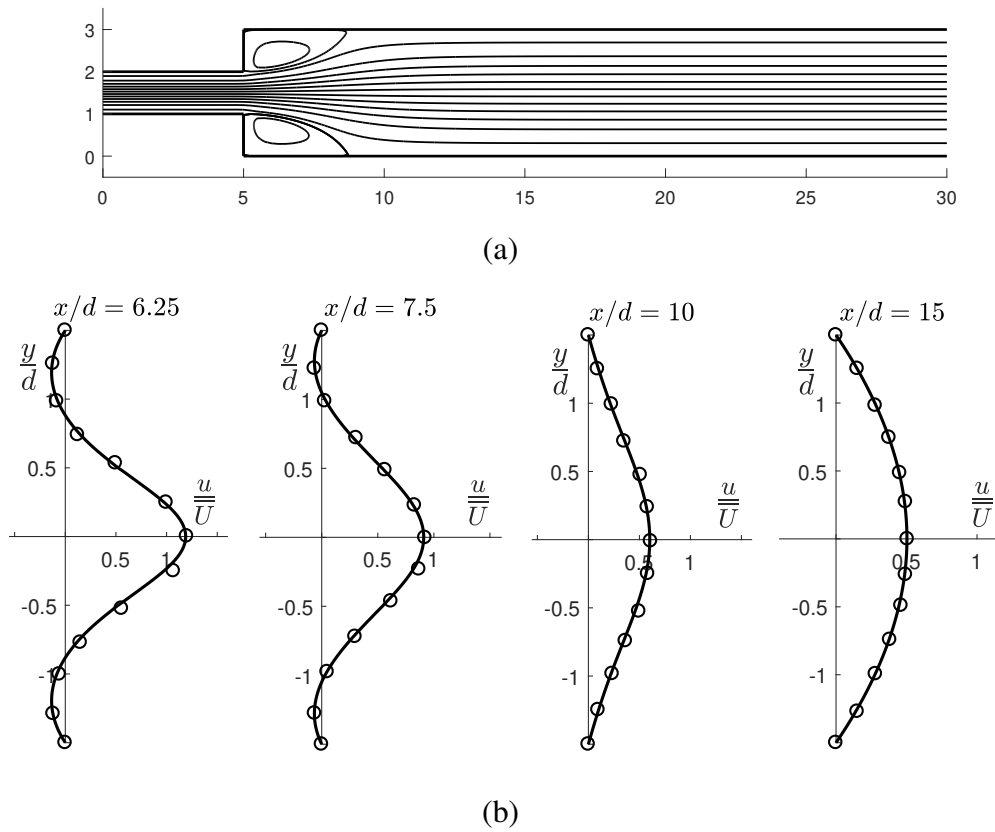


Figura 4.5: Comparação dos perfis de velocidade com experimentos para $Re = 35$.

A Figura 4.5(a) mostra o esboço das linhas de corrente para $Re = 35$. A Figura 4.5(b) mostra os perfis de velocidade em quatro posições do canal. Em todas as quatro estações de comparação, os perfis permanecem simétricos em relação ao eixo central e uma boa concordância pode ser observada entre os resultados numéricos e experimentais. Nas posições correspondentes às distâncias a jusante de $6,25d$ e $7,5d$, a inversão do escoamento dentro das regiões

de recirculação é facilmente identificável. O resultado na distância $15d$ a jusante da expansão, mostra que o perfil do escoamento é novamente parabólico.

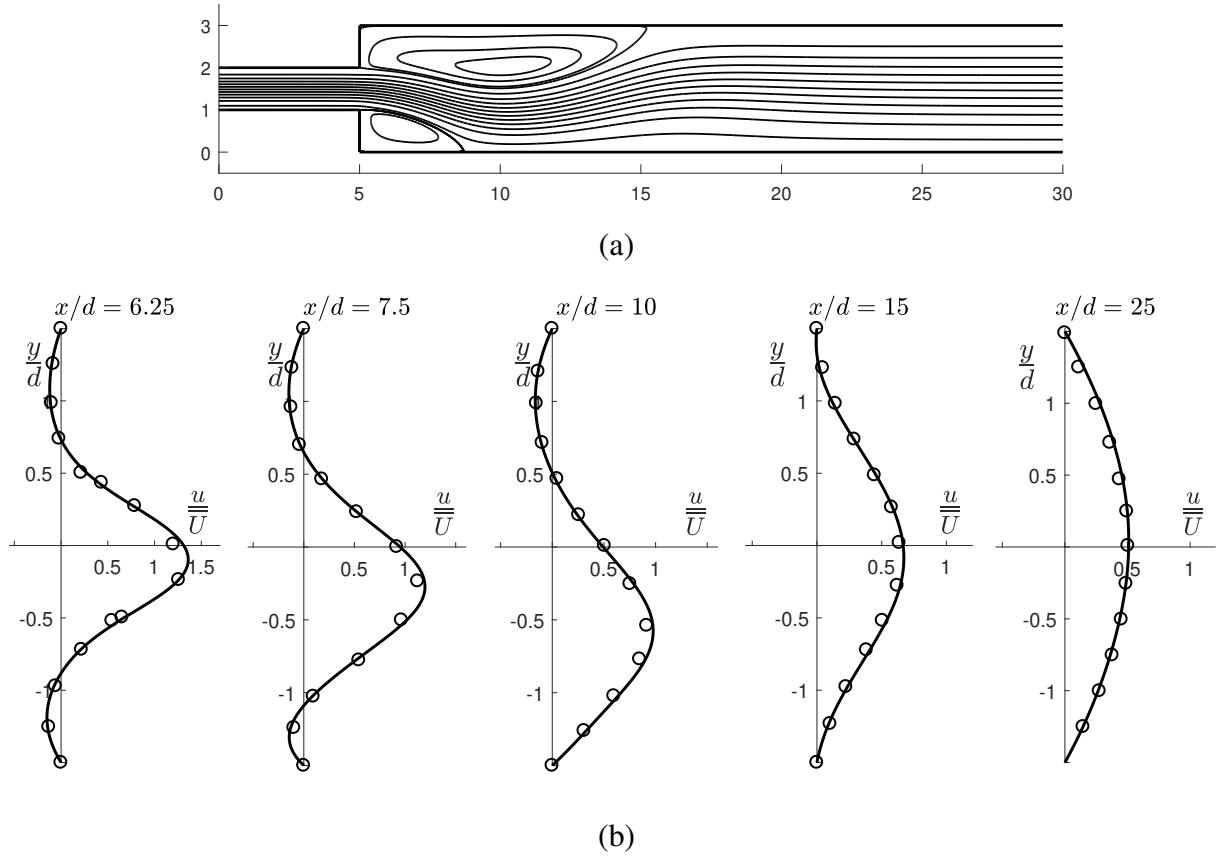


Figura 4.6: Comparação dos perfis de velocidade com experimentos para $Re = 80$.

A Figura 4.6 mostra informações similares para $Re = 80$. Ao aumentar o número de Reynolds para 80, o escoamento torna-se assimétrico, com duas regiões de recirculação de tamanhos diferentes nas paredes superior e inferior, como ilustrado pelas linhas de corrente na Figura 4.6(a). Uma boa concordância entre os resultados experimentais e numéricos do escoamento neste regime assimétrico também é mostrada na série de perfis de velocidade na Figura 4.6(b). Os resultados em $Re = 80$ indicam que o escoamento retém uma assimetria acentuada em $x = 10d$, até se tornar parabólico mais um vez em uma distância a jusante de $25d$.

Um aumento adicional no número de Reynolds para 187 resulta no desenvolvimento de uma terceira zona de recirculação, formada no mesmo lado da menor das duas anteriores, que é visível na posição $x = 25d$. Esses resultados estão apresentados na Figura 4.7. No geral, os cálculos obtidos das soluções numéricas tiveram uma boa concordância com os dados experimentais de Fearn *et al.* (1990). A predição do campo de escoamento em ambos os lados da condição crítica apresentou bons resultados quando comparados com dados experimentais. Isso

valida o método de solução empregado no presente trabalho, o qual é usado para determinar o ponto de bifurcação do escoamento.

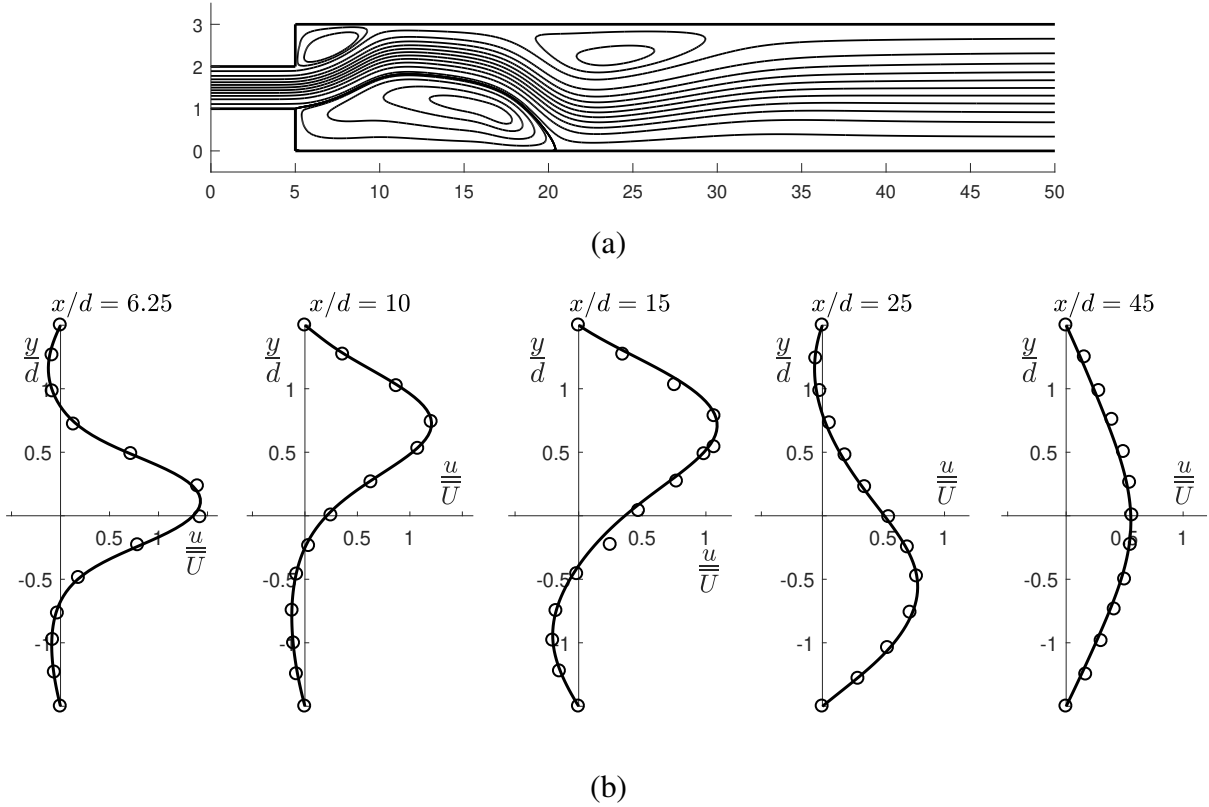


Figura 4.7: Comparação dos perfis de velocidade com experimentos para $Re = 187$.

A transição de um escoamento simétrico estável para um assimétrico é ilustrada no diagrama de bifurcação mostrado na Figura 4.8, para uma taxa de expansão de $D/d = 2$. Nessa figura, a distância entre os pontos de reatamento nas paredes inferior e superior ΔX , como esquematizado na Figura 4.2, é plotada em relação ao número de Reynolds. No presente trabalho, o número crítico de Reynolds previsto está no intervalo entre $Re_{cr} = 142$ a 143 (o valor exato do número crítico de Reynolds é difícil de fixar devido a dependência da resolução da malha). Este intervalo está de acordo com as previsões numéricas de Drikakis (1997) e das análises de estabilidade de Shapira *et al.* (1990), mas é diferente do valor calculado por Durst *et al.* (1993). Drikakis (1997), por sua vez, fornece uma possível explicação do que poderia ter afetado os cálculos numéricos deste último trabalho.

Para uma taxa de expansão de $D/d = 3$, o número crítico de Reynolds se encontra no intervalo de $Re_{cr} = 52$ a 53 , tendo uma boa concordância com os resultados de Fearn *et al.* (1990) e os cálculos de bifurcação de Battaglia *et al.* (1997). As faixas de valores obtidos, no presente trabalho, para o número crítico de Reynolds para as taxas de expansão $D/d = 2$ e 3 ,

podem ser comparados com aqueles da Tabela 4.1, obtidos por diferentes autores, indicando uma boa proximidade nos resultados. Convém mencionar que, para obter essas pequenas faixas de valores do número crítico de Reynolds, foi necessário um refinamento mais acentuado da malha próximo da condição crítica do escoamento (ver tabelas do Apêndice A).

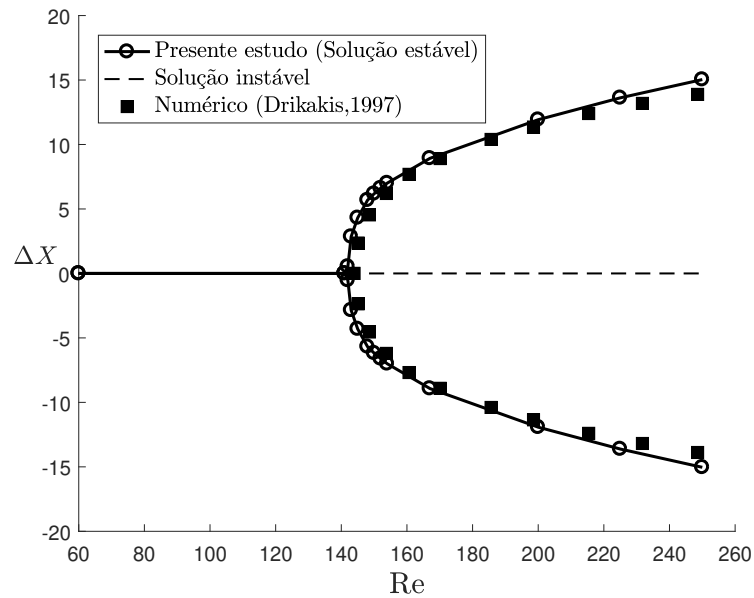


Figura 4.8: Diagrama de bifurcação para $D/d = 2$.

A bifurcação também pode ser ilustrada considerando como o escoamento se une às paredes do canal para os regimes simétricos e assimétricos. Um esquema do canal é mostrado na Figura 4.9, indicando os tamanhos das zonas de recirculação, representadas pelos comprimentos de reatamento.

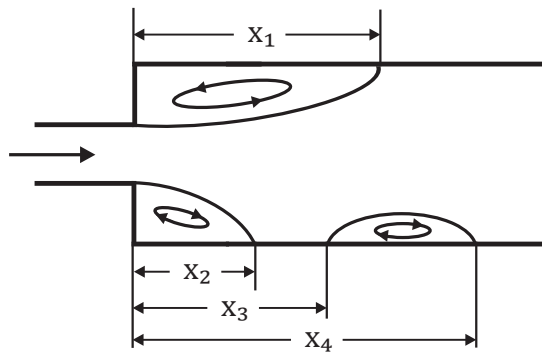


Figura 4.9: Esquema dos comprimentos de reatamento.

O desenvolvimento global do escoamento, obtido com o aumento do número de Reynolds, pode ser visto de forma qualitativa através da série de imagens das linhas de corrente, mostradas nas Figuras 4.10 e 4.11 para as taxas de expansão $D/d = 2$ e 3, respectivamente.

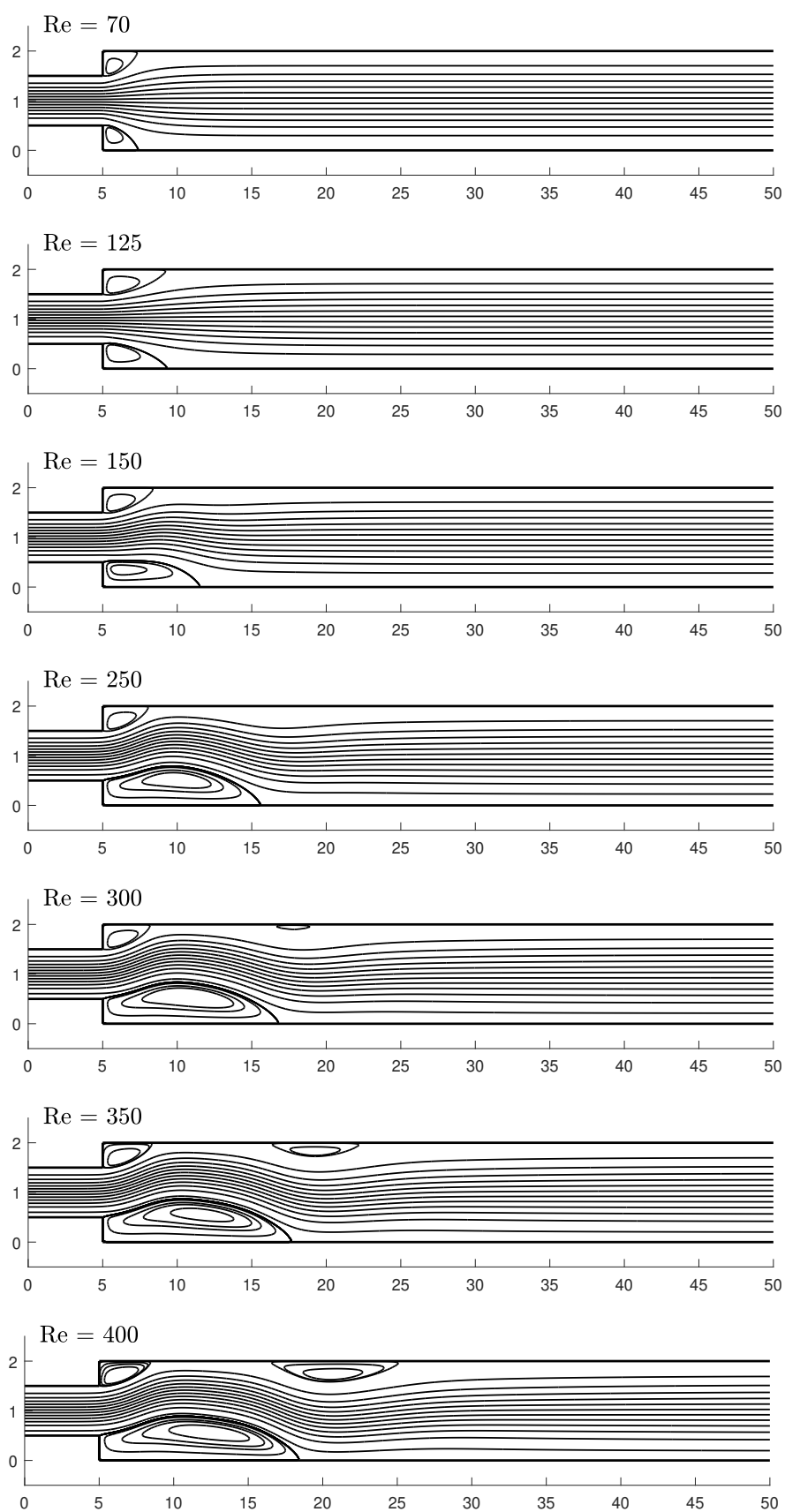


Figura 4.10: Linhas de corrente em vários números de Reynolds para $D/d = 2$.

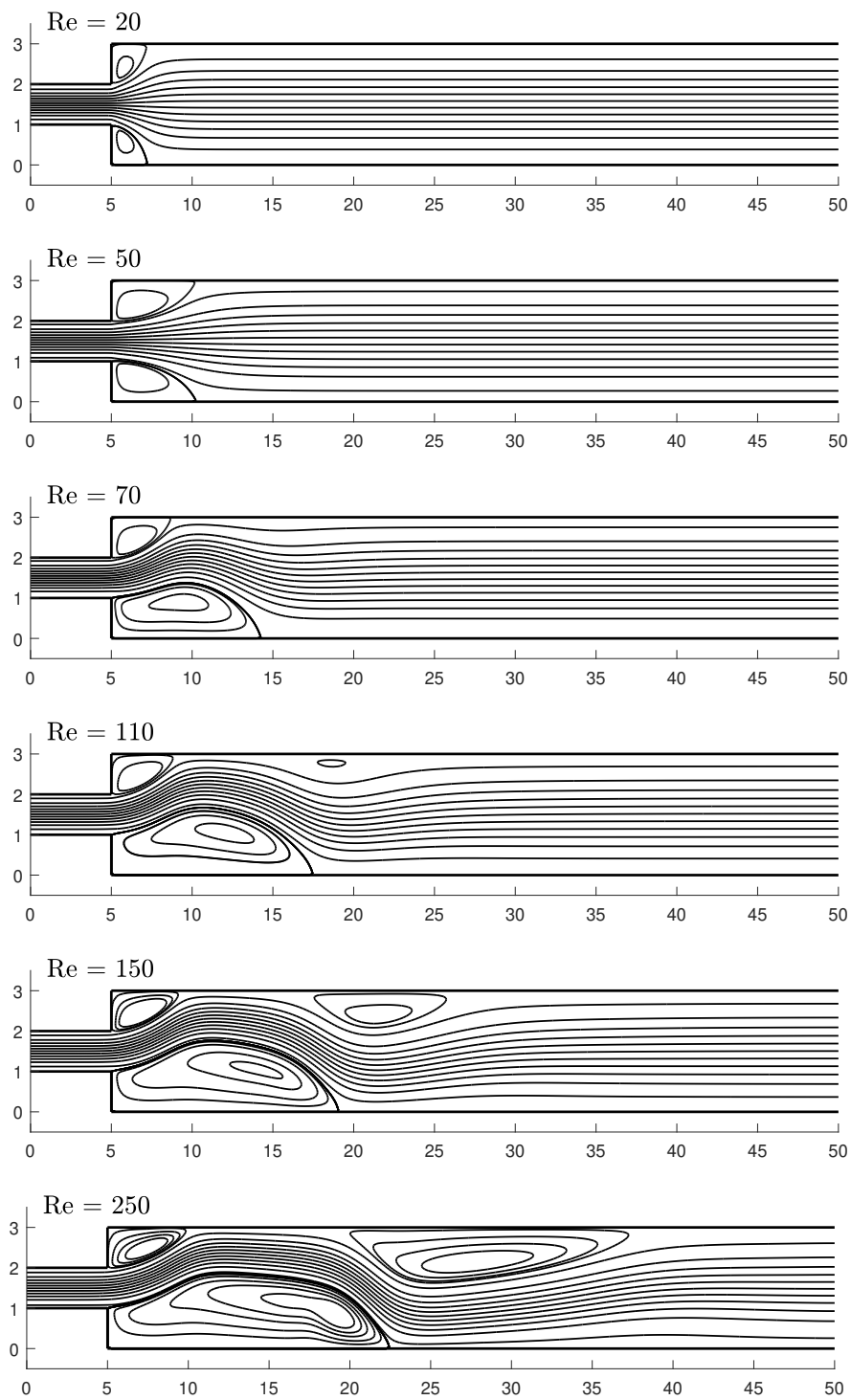


Figura 4.11: Linhas de corrente em vários números de Reynolds para $D/d = 3$.

O desenvolvimento do escoamento é mostrado de uma forma mais condensada na Figura 4.12, para as taxas de expansão de $D/d = 2$ e 3, na qual os comprimentos das regiões de recirculação são mostrados como uma função do número de Reynolds.

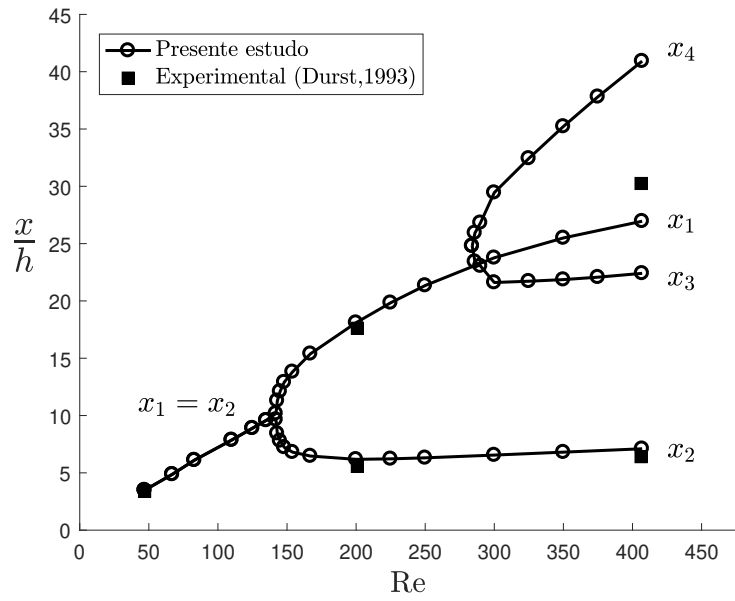
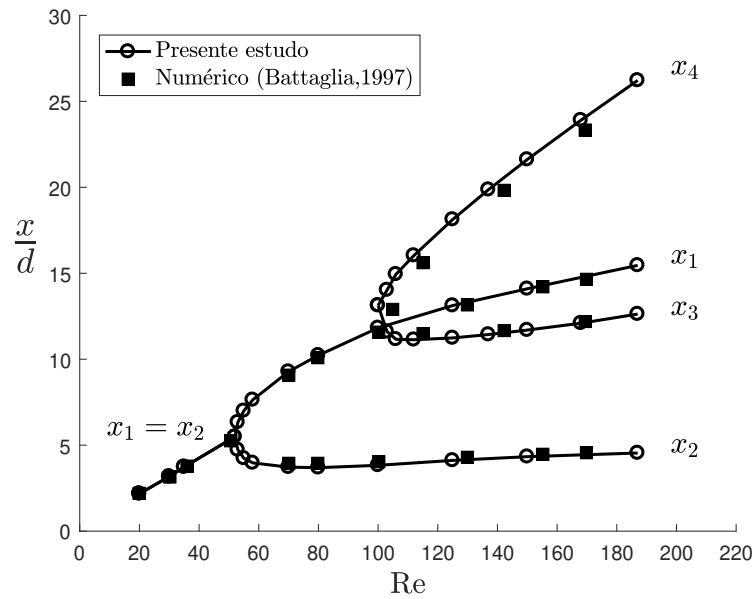
(a) Taxa de expansão $D/d = 2$ (b) Taxa de expansão $D/d = 3$

Figura 4.12: Evolução dos comprimentos das zonas de recirculação com o número de Reynolds para diferentes taxas de expansão.

Inicialmente, em baixos números de Reynolds, os comprimentos x_1 e x_2 são iguais, indicando escoamento simétrico. Em um número crítico de Reynolds, há uma ramificação que indica escoamento assimétrico, para o qual o comprimento x_2 permanece relativamente constante, enquanto o comprimento x_1 na parede oposta do canal, começa a aumentar monotonicamente.

mente. Uma terceira região de recirculação se desenvolve com novos aumentos do número de Reynolds, representados pelos comprimentos x_3 e x_4 .

O trabalho experimental de Durst *et al.* (1993) realizou medições para três números de Reynolds, a saber, 47, 200 e 407, baseados na definição do presente trabalho. Os comprimentos das zonas de recirculação foram normalizados com a altura do degrau h , como mostrado na Figura 4.12(a). A figura também indica uma boa concordância entre os resultados numéricos e experimentais, exceto para o comprimento x_1 em $Re = 407$, que apresentou um valor cerca de 10,5% menor do que o observado nas medições. Este resultado ainda é melhor que as computações numéricas apresentadas por Durst *et al.* (1993), prevendo um valor 18% menor que o experimental. A terceira zona de recirculação aparece para $Re = 284$, a qual corresponde aos comprimentos x_3 e x_4 . Durst *et al.* (1993) mencionam que nenhuma tentativa foi feita experimentalmente para determinar os comprimentos dessa terceira zona.

Os comprimentos de recirculação para a taxa de expansão $D/d = 3$ são comparados na Figura 4.12(b) com o trabalho numérico de Battaglia *et al.* (1997). Os comprimentos foram normalizados com a altura do canal de entrada d e, em geral, foram obtidas boas concordâncias entre os resultados. Neste caso, a terceira região de recirculação começa a se desenvolver por volta de $Re = 100$. Battaglia *et al.* (1997) mencionam que esta mudança qualitativa no escoamento não está associada a um ponto de bifurcação das soluções das equações de Navier-Stokes.

4.1.2 Resultados para Expansão Gradual

A simplicidade geométrica de uma expansão abrupta permite resolver as equações da continuidade e de Navier-Stokes, usando uma malha regular em coordenadas cartesianas, sem grandes complicações. No entanto, para a geometria irregular de uma expansão gradual, quase sempre é necessário um tratamento especial nas fronteiras. Neste contexto, a malha semi-deslocada oferece, com simplicidade, uma alternativa para lidar com os contornos irregulares. Ela permite que o problema de expansões formadas por paredes planas seja posto em coordenadas cartesianas, ajustando-se de forma regular às superfícies inclinadas em relação aos eixos da malha. A Figura 4.13 mostra o ajuste da malha semi-deslocada na região dos contornos irregulares.

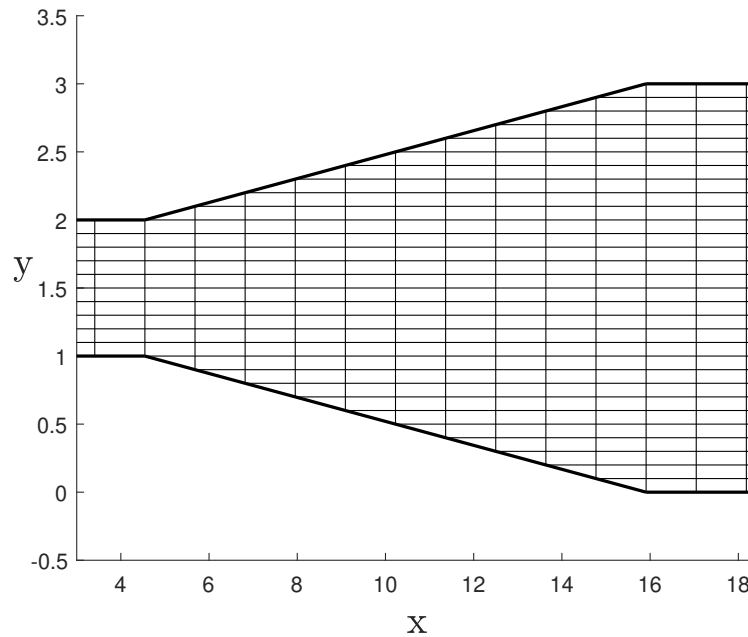


Figura 4.13: Arranjo da malha numérica utilizada nas simulações.

Uma vez que, na malha semi-deslocada, ambas as componentes de velocidade são co-localizadas nos vértices do volume de controle, a estrutura dessa malha permite reter diretamente as informações das condições de contorno da velocidade, quando adjacentes às fronteiras irregulares do domínio, através da escolha adequada da razão de aspecto da malha numérica. Dessa forma, ainda nenhuma condição de contorno para a pressão é necessária para resolver o campo de pressão (ver Seção 3.3.3).

A grande desvantagem dessa abordagem, no presente problema, é com relação a grandes semi-ângulos α de expansão. Para um ajuste regular, a razão de aspecto da malha obedece a seguinte relação: $\Delta y / \Delta x = \tan \alpha$. Assim, se fosse considerado um semi-ângulo $\alpha = 45^\circ$, a condição de ortogonalidade implicaria em uma malha quadrada, ou seja, $\Delta x = \Delta y$. Para se ter uma ideia, considere as dimensões do canal dadas na Figura 4.1. Para uma taxa de expansão $D/d = 3$ com semi-ângulo $\alpha = 45^\circ$, fixando 60 volumes de controle na direção y ($\Delta y = 0,05$), resultaria em 1000 volumes de controle na direção x . Tais razões de aspecto da malha podem afetar a precisão dos resultados e a estabilidade da solução. Por essa razão, no presente trabalho, são considerados apenas semi-ângulos $\alpha \leq 30^\circ$.

São apresentados os resultados para o escoamento no canal com expansão gradual, considerando a taxa de expansão $D/d = 3$. Com base no teste de independência de malha realizado na seção anterior, foram empregadas, para o caso do escoamento em uma expansão gradual, malhas com refinamentos $\Delta y_1 = 0,066$ e $\Delta y_2 = 0,05$ (o que corresponde a 45 e 60 volumes

de controle, respectivamente), enquanto que o tamanho das malhas na direção x dependerá do semi-ângulo α de expansão em cada caso. Um resumo das malhas utilizadas para cada semi-ângulo de expansão está mostrado na Tabela 4.2. Foi observado que a diferença na predição dos tamanhos das regiões de recirculação, em todos os casos, foi menor que 2%.

Tabela 4.2: Malhas utilizadas para diferentes semi-ângulos de expansão.

α	Malha 1	Malha 2
10°	132×45	176×60
15°	200×45	268×60
20°	272×45	364×60
$26,56^\circ$	375×45	500×60
30°	432×45	578×60

A configuração da geometria do canal, com os respectivos comprimentos de separação (x_{01} , x_{02} e x_3) e reatamento (x_1 , x_2 e x_4), está mostrada na Figura 4.14.

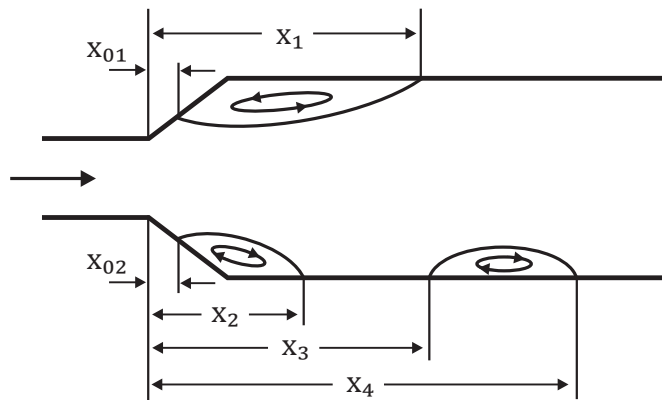


Figura 4.14: Nomenclatura dos comprimentos de separação e reatamento da expansão gradual.

Shapira *et al.* (1990) notaram que o número crítico de Reynolds é sensível ao semi-ângulo de inclinação α das paredes do canal. Este, por sua vez, diminui quando o semi-ângulo de inclinação aumenta. Exemplos das linhas de corrente, obtidas a partir da solução do campo de escoamento, são apresentadas nas Figuras 4.15, 4.16 e 4.17 que mostram o efeito do número de Reynolds e do semi-ângulo de expansão na localização dos pontos de separação e reatamento.

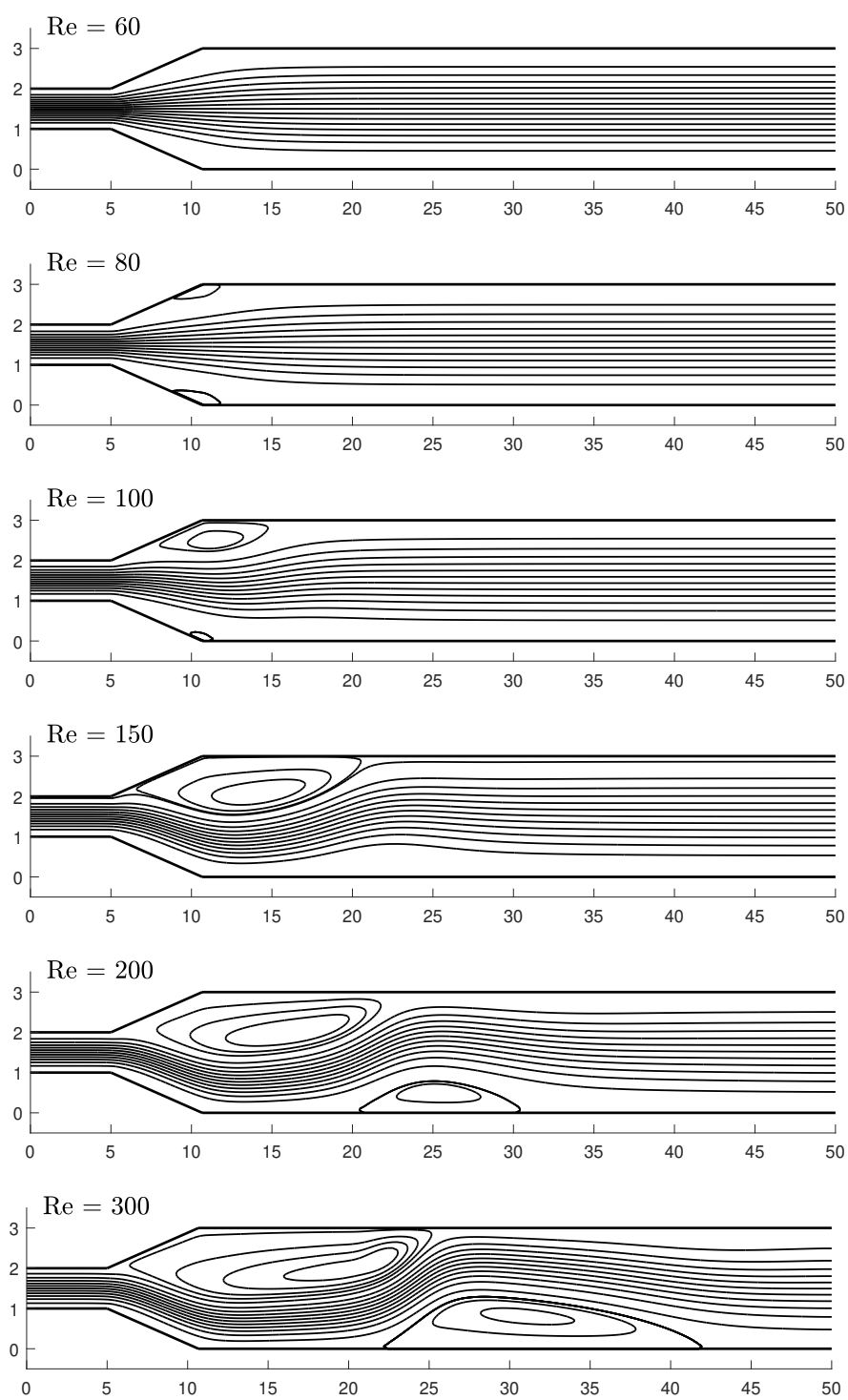


Figura 4.15: Linhas de corrente em vários números de Reynolds para $\alpha = 10^\circ$.

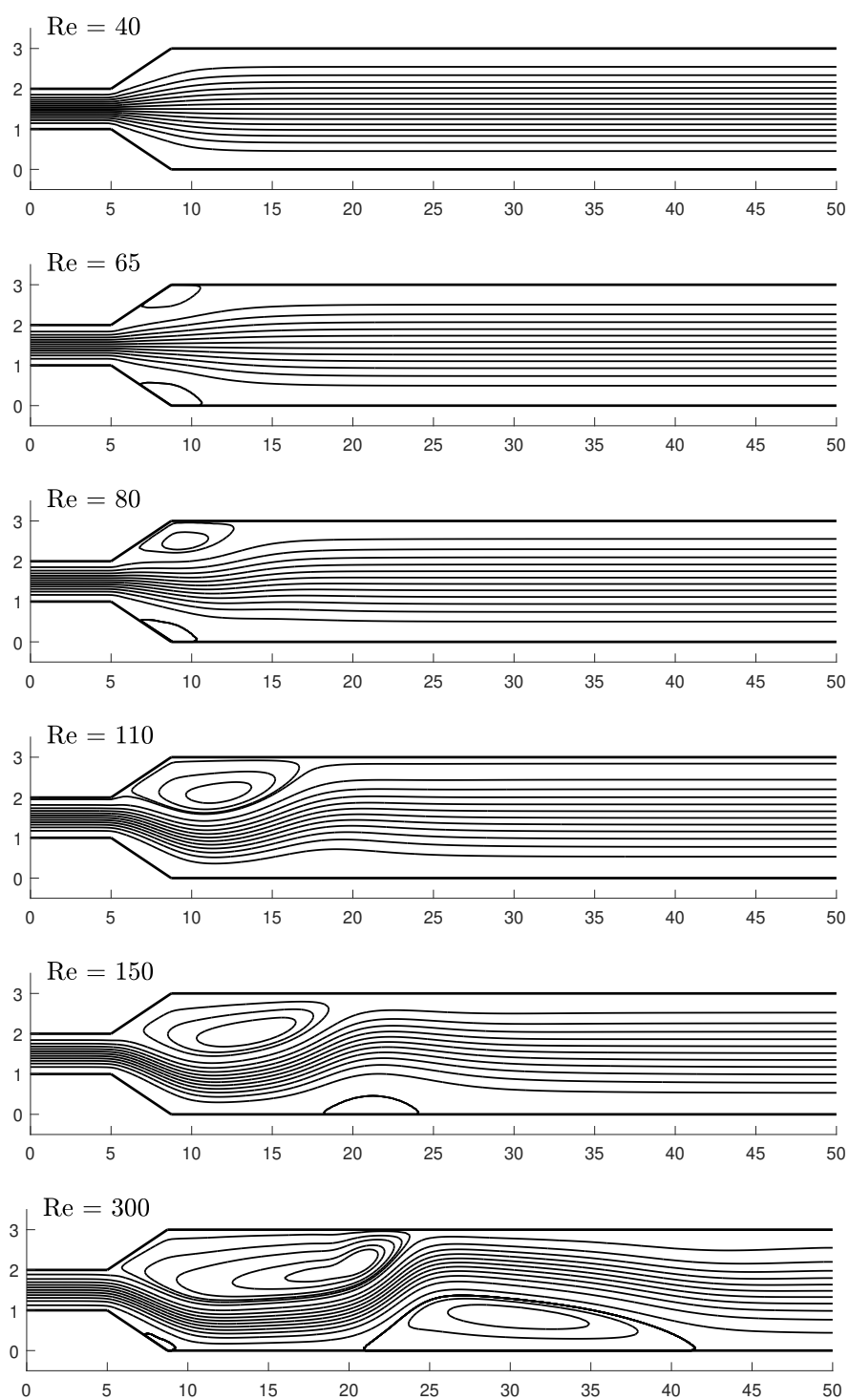


Figura 4.16: Linhas de corrente em vários números de Reynolds para $\alpha = 15^\circ$.

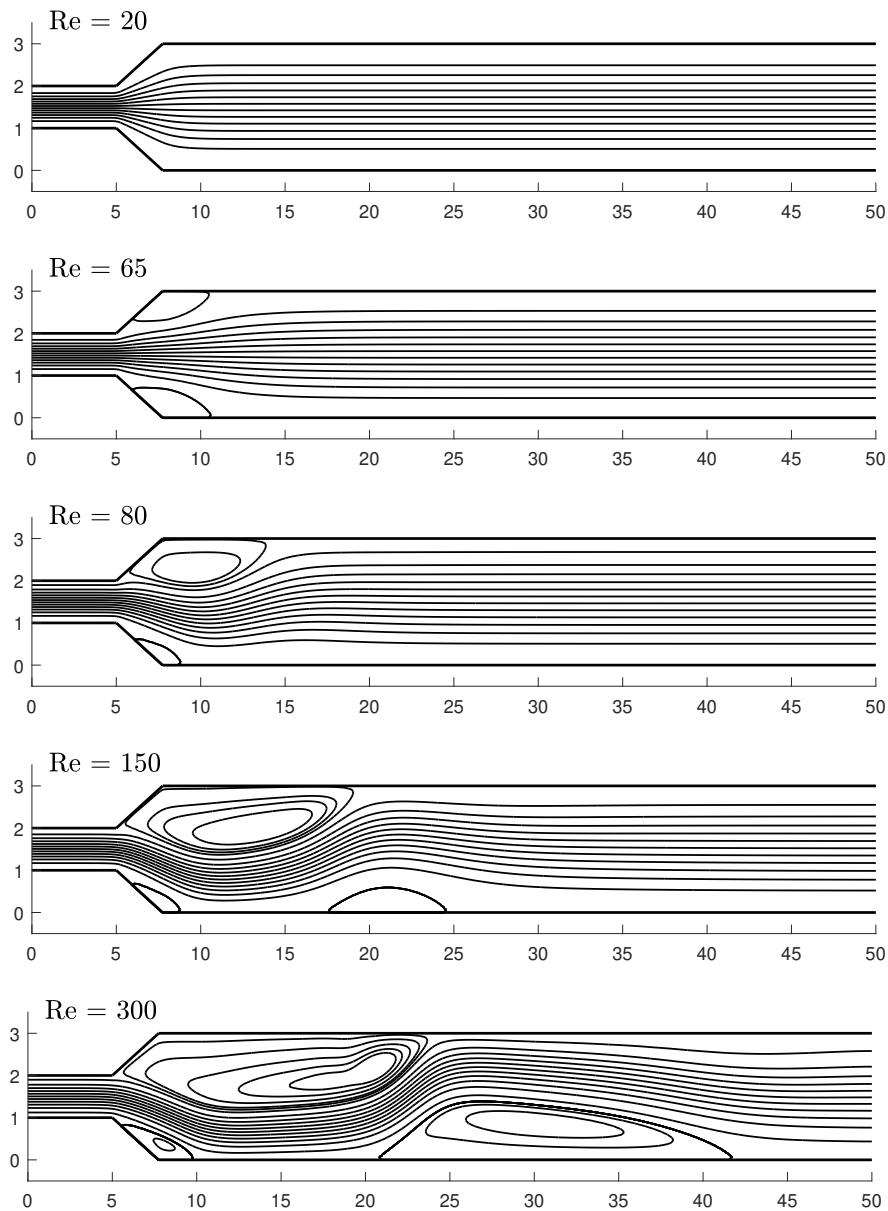


Figura 4.17: Linhas de corrente em vários números de Reynolds para $\alpha = 20^\circ$.

A partir das soluções, pode-se concluir as seguintes tendências no comportamento das regiões de recirculação: (i) À medida que o número de Reynolds aumenta, a região de recirculação torna-se maior e o ponto dereatamento move-se a jusante. (ii) Para semi-ângulos de expansão menores que 90° , o ponto de separação está localizado a jusante da borda de expansão. À medida que o número de Reynolds aumenta, para uma dada geometria, o ponto de separação se move a montante. (iii) Para qualquer semi-ângulo de expansão, há um valor do número de Reynolds abaixo do qual nenhuma separação pode ser observada.

Além disto, para um semi-ângulo $\alpha = 10^\circ$ e números de Reynolds acima de 100, a menor das duas regiões de recirculação próxima a borda de expansão desaparece. Ela volta a se desen-

volver para o semi-ângulo $\alpha = 15^\circ$, em números de Reynolds por volta de 175. Para $\alpha = 20^\circ$, tal região de recirculação se manteve em todos os números de Reynolds analisados, nos casos de separação. Também foi observado que para valores maiores de α , o padrão do escoamento principal, para o mesmo número de Reynolds, manteve o mesmo comportamento.

O número crítico de Reynolds da bifurcação de quebra de simetria foi investigado para vários semi-ângulos de expansão e esses resultados são mostrados na Tabela 4.3, que também inclui os resultados de Shapira *et al.* (1990) por efeito de comparação. As computações revelam que o número crítico de Reynolds diminui quando se aumenta o semi-ângulo de expansão. Os resultados do presente trabalho para a taxa de expansão $D/d = 3$ estão de acordo com os resultados de Shapira *et al.* (1990).

Tabela 4.3: Número crítico de Reynolds para diferentes semi-ângulos de expansão.

α	Re_{cr} (Presente estudo)	Re_{cr} (Shapira <i>et al.</i> (1990))
10°	97 – 98	97,9
15°	77 – 78	78,3
20°	70 – 71	71,1
$26,56^\circ$	65 – 66	66,1
30°	63 – 64	64,3

O desenvolvimento do escoamento como uma função do número de Reynolds para os semi-ângulos de expansão $\alpha = 10^\circ$, 15° e 30° é sumarizado na Figura 4.18, no qual os comprimentos das regiões de recirculação segue a definição apresentada na Figura 4.14.

Os gráficos da Figura 4.18, para vários semi-ângulos de expansão, em geral apresentam o mesmo comportamento. A princípio, os tamanhos das regiões de recirculação são iguais, o que indica escoamento simétrico. Em seguida, o escoamento sofre uma bifurcação de quebra de simetria em um número crítico de Reynolds, apresentados na Tabela 4.3, para o qual o escoamento torna-se assimétrico. Para baixos semi-ângulos de expansão $\alpha \leq 15^\circ$, com o aumento do número de Reynolds, a região de recirculação definida por $(x_1 - x_{01})$ continua a crescer, enquanto a outra região $(x_2 - x_{02})$ diminui.

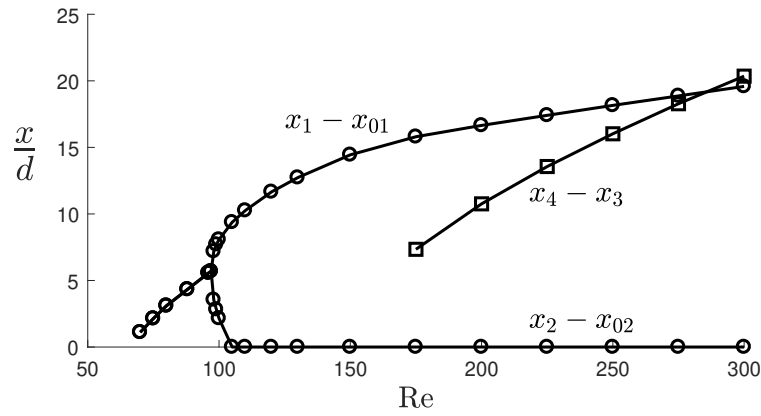
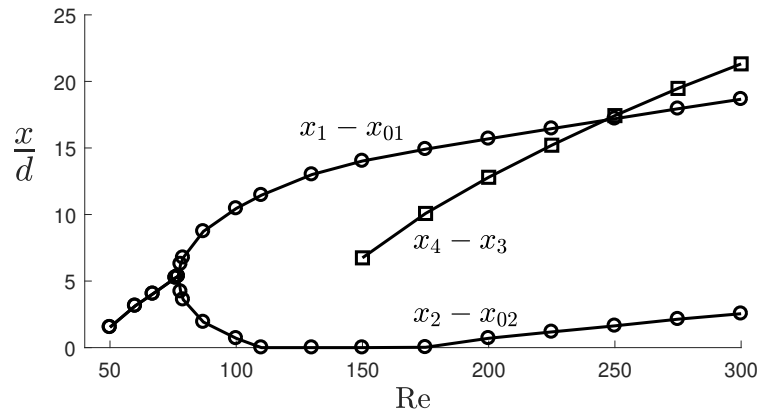
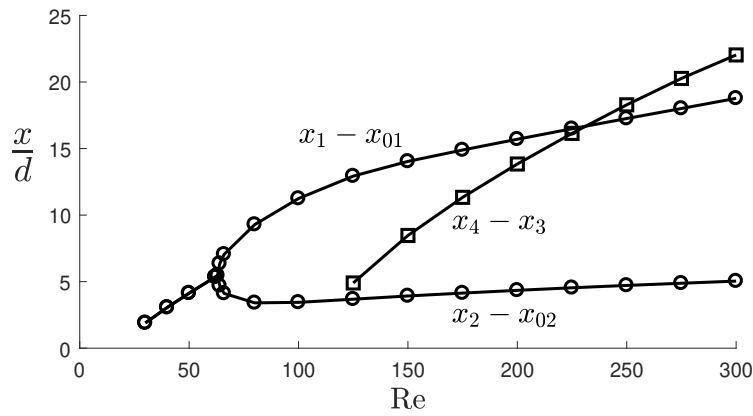
(a) Semi-ângulo $\alpha = 10^\circ$ (b) Semi-ângulo $\alpha = 15^\circ$ (c) Semi-ângulo $\alpha = 30^\circ$

Figura 4.18: Evolução dos comprimentos das zonas de recirculação com o número de Reynolds para diferentes semi-ângulos de expansão.

No caso de $\alpha = 10^\circ$ e números de Reynolds acima de 100, foi observado que a região ($x_2 - x_{02}$) desaparece. Para $\alpha = 15^\circ$ o mesmo comportamento acontece, porém a região de recirculação volta a se desenvolver por volta de $Re = 175$, continuando a crescer monotonicamente.

mente. Para $\alpha \geq 20^\circ$, a região de recirculação ($x_2 - x_{02}$) permanece relativamente constante. Em todos os casos, uma terceira região de recirculação, ($x_4 - x_3$), sempre se desenvolve com novos aumentos do número de Reynolds.

A evolução do efeito do semi-ângulo de expansão α nos comprimentos de separação e reatamento para $Re = 75$, é mostrado na Figura 4.19. Para $\alpha \leq 15^\circ$ os resultados apenas refletem o fato de que o escoamento se mantém simétrico. Contudo, o escoamento torna-se assimétrico para $\alpha \geq 20^\circ$. Para $\alpha = 30^\circ$, o ponto de separação do escoamento se encontra próximo da borda de expansão do canal, localizando-se a uma distância $x_{01} = 0,282$ na parede superior e $x_{02} = 0,366$ na inferior. Pode-se notar, também, que os comprimentos de reatamento das regiões de recirculação nas paredes superior e inferior permanecem aproximadamente constantes quando o semi-ângulo do canal se torna maior que 20° .

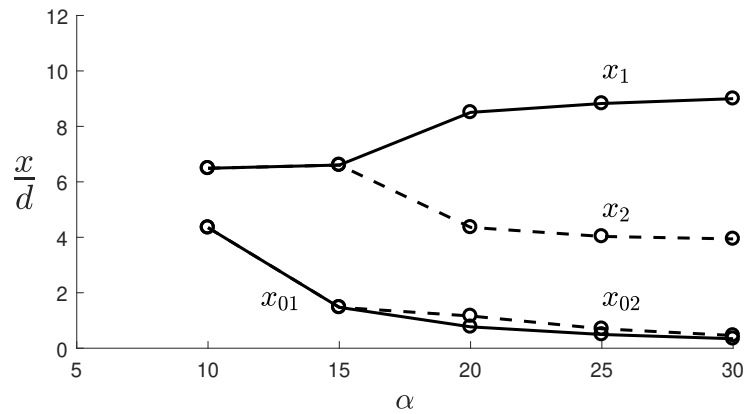
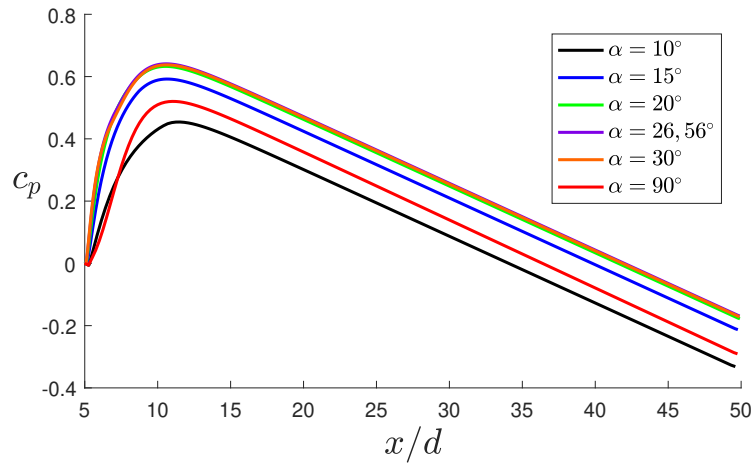


Figura 4.19: Comprimentos de separação e reatamento em vários semi-ângulos de expansão para $Re = 75$.

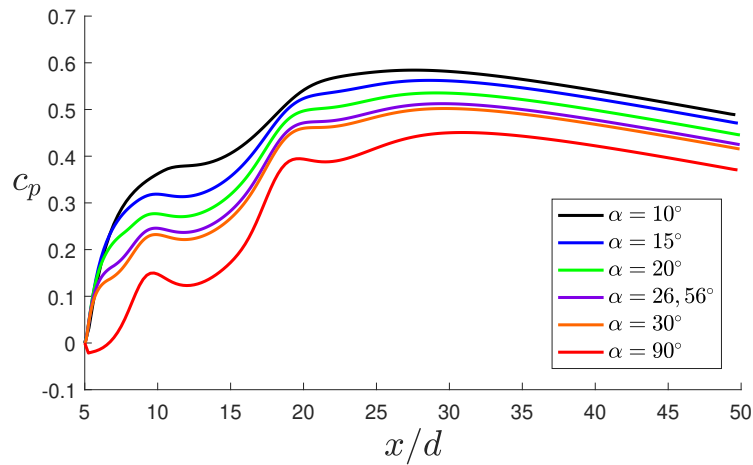
Efeitos do semi-ângulo de expansão na distribuição de pressão também foram investigados. As distribuições do coeficiente de pressão ao longo da coordenada x para os casos de $Re = 40$ (escoamento simétrico) e $Re = 150$ (escoamento assimétrico) estão ilustradas na Figura 4.20. O coeficiente de pressão c_p é definido como:

$$c_p = \frac{\frac{1}{A} \int_A p dA - \frac{1}{A_1} \int_{A_1} p_1 dA_1}{\frac{1}{2} \rho \bar{U}_{med}^2} \quad (4.5)$$

onde o subscrito 1 denota a entrada do canal, A é a área de seção transversal e $\bar{U}_{med}$ é a velocidade média na entrada do canal.



(a) Re = 40



(b) Re = 150

Figura 4.20: Efeito do semi-ângulo de expansão no coeficiente de pressão em vários números de Reynolds.

Em condições de separação simétricas, os valores de pressão nas paredes superior e inferior são os mesmos. Pode-se ver, na Figura 4.20(a), que a pressão aumenta inicialmente no canal, atinge um valor máximo a jusante da borda de expansão e, em seguida, diminui gradualmente em direção à saída. Isto se deve ao fato de que o escoamento volta a se tornar totalmente desenvolvido. Para um escoamento totalmente desenvolvido, a queda de pressão, causada por efeitos de atrito, é inversamente proporcional ao número de Reynolds. Consequentemente, a inclinação da distribuição do coeficiente de pressão para Re = 150 (Figura 4.20(b)) é menor do que no caso de Re = 40 (Figura 4.20(a)).

Quando ocorre assimetria do escoamento, a pressão tem valores diferentes nas paredes superior e inferior. Em alguns números de Reynolds, uma queda de pressão ocorre a jusante da

zona de recirculação na parede superior e a jusante da menor zona de recirculação na parede inferior, porém esse comportamento não ocorre na terceira zona de recirculação mais distante na parede inferior. De fato, a aparência da queda de pressão na região de recuperação para o caso de $Re = 150$ (Figura 4.20(b)) deve-se a formação da menor zona de recirculação na parede inferior. Neste caso, a zona de recirculação cria um deslocamento do escoamento, visto a partir das linhas de corrente nas Figuras 4.15, 4.16 e 4.17 e, conseqüentemente uma queda de pressão. No entanto, isso não ocorre a jusante de uma terceira zona de recirculação na parede inferior, porque o escoamento na parede superior já está conectado e, portanto, não pode criar um deslocamento do escoamento com uma queda de pressão.

Tendo em vista as distribuições do coeficiente de pressão c_p na Figura 4.20, verifica-se que para o caso de $Re = 40$ a recuperação de pressão é mais efetiva para semi-ângulos no intervalo de $20^\circ \leq \alpha \leq 30^\circ$. Já para o caso de $Re = 150$ um fenômeno interessante notado é que, ao contrário do caso de $Re = 40$, a recuperação máxima de pressão não ocorre nos maiores semi-ângulos de expansão. Foi observado que o coeficiente de pressão diminui quando o semi-ângulo de expansão aumenta. Resultados análogos foram obtidos no estudo de Tsui e Wang (1995). Observações semelhantes também podem ser encontradas no escoamento turbulento (Yang e Hou, 1999). Além disso, pode-se observar que a recuperação máxima da pressão ocorre no intervalo de $x/d = 10$ a 12 e $x/d = 27$ a 30 para $Re = 40$ e 150 , respectivamente.

5 CONCLUSÕES

Um método numérico para a solução das equações da continuidade e de Navier-Stokes que emprega a descrição euleriana do escoamento, variáveis primitivas na forma divergente, abordagem de volumes finitos, malha semi-deslocada, esquema UNIFAES para discretização das derivadas espaciais das equações de transporte advectivo-difusivo, procedimento explícito de integração temporal do campo de velocidades e equação de Poisson para pressão, foi aplicado com sucesso para simular escoamentos laminares em canais simétricos bidimensionais com expansão gradual.

A flexibilidade geométrica da malha semi-deslocada possibilitou um ajuste de forma regular aos contornos irregulares do domínio, tratando as equações da continuidade e de Navier-Stokes em coordenadas cartesianas. Apesar da razão de aspecto da malha, em grandes semi-ângulos de expansão, afetar a precisão dos cálculos e a estabilidade da solução, a abordagem apresentou resultados satisfatoriamente acurados e estáveis nos casos $\alpha \leq 30^\circ$. Também, foi possível resolver a equação da pressão não diagonalmente dominante da malha semi-deslocada por método iterativo, empregando um fator de sub-relaxação adequado. O nível do resíduo final da conservação de massa foi aproximadamente 10^{-11} .

O cálculo do campo de escoamento mostrou que a transição de um padrão de escoamento simétrico para um assimétrico é suave, de modo que a bifurcação do escoamento está relacionada a uma instabilidade de quebra de simetria. Neste caso, a análise das computações numéricas do presente trabalho se mostrou satisfatória para encontrar o número crítico de Reynolds, além do qual a solução simétrica é instável. Também foi apresentado que o escoamento assimétrico estável desenvolve uma terceira região de recirculação, mas que esta não está relacionada a uma instabilidade do escoamento.

O número crítico de Reynolds no ponto de bifurcação foi determinado para taxas de expansão 1:2 e 1:3. Para o caso do canal com uma expansão abrupta, foi demonstrado que o número crítico de Reynolds diminui com o aumento da taxa de expansão. Os resultados das simulações numéricas mostraram-se em bom acordo com trabalhos experimentais e numéricos disponíveis na literatura. Para um canal com expansão gradual, as computações revelaram que o número crítico de Reynolds diminui quando se aumenta o semi-ângulo de expansão.

Os resultados também mostraram que para uma taxa de expansão fixa, à medida que o número de Reynolds aumenta, a região de recirculação torna-se maior e o ponto dereatamento move-se a jusante. Para uma expansão abrupta ($\alpha = 90^\circ$), a separação do escoamento ocorre na borda de expansão, enquanto que para semi-ângulos menores que 90° , o ponto de separação está localizado a jusante da borda. Além disso, para qualquer semi-ângulo de expansão, há um valor do número de Reynolds abaixo do qual nenhuma separação pode ser observada.

6 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

O esquema UNIFAES nos últimos anos tem sido aplicado a vários tipos de soluções para avaliação de seu comportamento, dentre elas algumas apresentadas no presente trabalho. Dessa forma, é importante que se faça uma completa avaliação nos mais diversos casos, de modo a ampliar o campo de aplicações do esquema UNIFAES.

Isto posto, como sugestões de trabalhos futuros, inicialmente caberia a utilização de malhas não-uniformes ou não-estruturadas, bem como solucionar as equações em coordenadas generalizadas, com o objetivo de lidar com a geometria irregular deste trabalho. Assim, os resultados, entre as diferentes abordagens, poderiam ser comparados.

Outro ponto de interesse seria a modelagem tridimensional desta geometria, como meio de comparação com os resultados bidimensionais. Além disso, para números de Reynolds mais elevados, é necessária uma investigação mais profunda, a fim de melhorar a compreensão da natureza transitória do escoamento, bem como investigar as limitações numéricas e físicas impostas por esquemas de discretização e modelos de turbulência. Assim, uma análise em regime turbulento é sugerida.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALLEBORN, N.; NANDAKUMAR, K.; RASZILLIER, H. e DURST, F. Further contributions on the two-dimensional flow in a sudden expansion. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 330, 169–188, jan 1997.

ALLEN, D.N.G. e SOUTHWELL, R.V. Relaxation methods applied to determine the motion, in two dimensions, of a viscous fluid past a fixed cylinder. **Quart. J. Mech. and Applied Math.**, v. 8, n. 2, 129–145, 1955.

ALLERY, C.; CADOU, J.M.; HAMDOUNI, A. e RAZAFINDRALANDY, D. Application of the asymptotic numerical method to the coanda effect study. **Revue Européenne des Éléments Finis**, v. 13, n. 1-2, 57–77, jan 2004.

ARMALY, B.F.; DURST, F.; PEREIRA, J.C.F. e SCHÖNUNG, B. Experimental and theoretical investigation of backward-facing step flow. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 127, n. -1, 473, feb 1983.

BATTAGLIA, F.; TAVENER, S.J.; KULKARNI, A.K. e MERKLE, C.L. Bifurcation of low reynolds number flows in symmetric channels. **AIAA Journal**, v. 35, n. 1, 99–105, jan 1997.

CHERDRON, W.; DURST, F. e WHITELAW, J.H. Asymmetric flows and instabilities in symmetric ducts with sudden expansions. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 84, n. 01, 13, jan 1978.

CHORIN, A.J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. **Journal of Computational Physics**, v. 2, n. 1, 12–26, aug 1967.

CHORIN, A.J. Numerical solution of the navier-stokes equations. **Mathematics of Computation**, v. 22, n. 104, 745–745, 1968.

COELHO, P. e PEREIRA, J. Calculation procedure for 3-d laminar flows in complex geometries using a nonstaggered nonorthogonal grid system. **Applied Mathematical Modelling**, v. 17, n. 11, 562–576, nov 1993.

DRIKAKIS, D. Bifurcation phenomena in incompressible sudden expansion flows. **Physics of Fluids**, v. 9, n. 1, 76–87, jan 1997.

DURST, F.; MELLING, A. e WHITELAW, J.H. Low reynolds number flow over a plane symmetric sudden expansion. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 64, n. 01, 111, jun 1974.

DURST, F.; PEREIRA, J.C.F. e TROPEA, C. The plane symmetric sudden-expansion flow at low reynolds numbers. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 248, n. -1, 567, mar 1993.

FEARN, R.M.; MULLIN, T. e CLIFFE, K.A. Nonlinear flow phenomena in a symmetric sudden expansion. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 211, n. -1, 595, feb 1990.

FERZIGER, J.H. e PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. Springer-Verlag, 2001.

FIGUEIREDO, J.R. Performance of five-point differencing schemes for two-dimensional fluid transport equations. **Journal of Computational Physics**, v. 101, n. 2, 256–264, aug 1992.

FIGUEIREDO, J.R. A unified finite-volume finite-differencing exponential-type scheme for convective-diffusive fluid transport equations. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences**, v. 19, n. 3, 371–391, 1997.

FIGUEIREDO, J.R. e LLAGOSTERA, J. Comparative study of the unified finite approach exponential-type scheme (unifaes) and its application to natural convection in a porous cavity. **Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals**, v. 35, n. 3, 347–367, may 1999.

FIGUEIREDO, J.R. e OLIVEIRA, K.P.M. Comparative study of unifaes and other finite-volume schemes for the discretization of advective and viscous fluxes in incompressible navier-

stokes equations, using various mesh structures. **Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals**, v. 55, n. 5, 379–405, apr 2009a.

FIGUEIREDO, J.R. e OLIVEIRA, K.P.M. Comparative study of the accuracy of the fundamental mesh structures for the numerical solution of incompressible navier-stokes equations in the two-dimensional cavity problem. **Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals**, v. 55, n. 5, 406–434, apr 2009b.

FIGUEIREDO, J.R. e OLIVEIRA, K.P.M. Reevaluation of the vertex collocated mesh for primitive variable computation of incompressible fluid flows by enforcing continuity-based boundary conditions. **Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals**, v. 60, n. 3, 168–178, sep 2011.

FLETCHER, C.A.J. **Computational Techniques for Fluid Dynamics 2**. Springer Berlin Heidelberg, 1991.

FORTUNA, A.O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos fluidos**. EDUSP, 2012.

HARLOW, F.H. e WELCH, J.E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. **Physics of Fluids**, v. 8, n. 12, 2182, 1965.

HIRT, C. e HARLOW, F.H. A general corrective procedure for the numerical solution of initial-value problems. **Journal of Computational Physics**, v. 2, n. 2, 114–119, nov 1967.

JOTKAR, M.; PÉREZ, J.M.; THEOFILIS, V. e GOVINDARAJAN, R. Instability mechanisms in straight-diverging-straight channels. **Procedia IUTAM**, v. 14, 236–245, 2015.

KARKI, K.; MONGIA, H. e PATANKAR, S. Solution of three-dimensional flow problems using a flux-spline method. In **27th Aerospace Sciences Meeting**. American Institute of Aeronautics and Astronautics, jan 1989.

KOTAPATI, R.B.; SHOCK, R. e CHEN, H. Lattice-boltzmann simulations of flows over backward-facing inclined steps. **International Journal of Modern Physics C**, v. 25, n. 01, 1340021, jan 2014.

LEONARD, B. A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 19, n. 1, 59–98, jun 1979.

LEONARD, B.P. e DRUMMOND, J.E. Why you should not use ‘hybrid’, ‘power-law’ or related exponential schemes for convective modelling - there are much better alternatives. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 20, n. 6, 421–442, mar 1995.

LLAGOSTERA, J. e FIGUEIREDO, J.R. Numerical study on mixed convection in a horizontal flow past a square porous cavity using UNIFAES scheme. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences**, v. 22, n. 4, 583–597, 2000a.

LLAGOSTERA, J. e FIGUEIREDO, J.R. Application of the UNIFAES discretization scheme to mixed convection in a porous layer with a cavity, using the darcy model. **Journal of Porous Media**, v. 3, n. 2, 16, 2000b.

LOUDA, P.; PŘÍHODA, J.; KOZEL, K. e SVÁČEK, P. Numerical simulation of flows over 2d and 3d backward-facing inclined steps. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, v. 43, 268–276, oct 2013.

MALISKA, C.R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. LTC, 2004.

MEDEIROS FILHO, D. L. **Estudo Numérico do Escoamento Sobre um Degrau com a Presença de um Obstáculo de Seção Retangular**. 2018. Dissertação (Mestrado). Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

MORTON, K.W. e MAYERS, D.F. **Numerical Solution of Partial Differential Equations: An Introduction**. Cambridge University Press, 2005.

NABAVI, M. Three-dimensional asymmetric flow through a planar diffuser: Effects of divergence angle, reynolds number and aspect ratio. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 37, n. 1, 17–20, jan 2010.

NASCIMENTO, A.H.G.; RODRIGUES, G.S. e FIGUEIREDO, J.R. Performance of finite volume discretization schemes for the convective-diffusive linear transport equation. part i: Low eigenvalue-peclet ratios. **17th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering**, novembro 2018.

NEOFYTOU, P. e DRIKAKIS, D. Non-newtonian flow instability in a channel with a sudden expansion. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 111, n. 2-3, 127–150, apr 2003.

PATANKAR, S.V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. McGraw-Hill Inc.,US, 1980.

PEACEMAN, D.W. e RACHFORD, H.H. The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations. **Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics**, v. 3, n. 1, 28–41, mar 1955.

PEYRET, R. e TAYLOR, T.D. **Computational Methods for Fluid Flow**. Springer Berlin Heidelberg, 1983.

PRAKASH, C. Application of the locally analytic differencing scheme to some test problems for convection-diffusion equation. **Numerical Heat Transfer**, v. 7, n. 2, 165–182, apr 1984.

RAITHBY, G. e TORRANCE, K. Upstream-weighted differencing schemes and their application to elliptic problems involving fluid flow. **Computers & Fluids**, v. 2, n. 2, 191–206, aug 1974.

RHIE, C.M. e CHOW, W.L. Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. **AIAA Journal**, v. 21, n. 11, 1525–1532, nov 1983.

RICHARDSON, L.F. The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 210, n. 459-470, 307–357, jan 1911.

RICHARDSON, L.F. e GAUNT, J.A. The deferred approach to the limit. part i. single lattice. part II. interpenetrating lattices. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 226, n. 636-646, 299–361, jan 1927.

RICHTMYER, R.D. e MORTON, K.W. **Difference Methods for Initial-Value Problems**. Krieger Publishing Co, 1994.

ROACHE, P.J. Scaling of high-reynolds-number weakly separated channel flows. In **Numerical and Physical Aspects of Aerodynamic Flows**, pp. 87–98. Springer Berlin Heidelberg, 1982.

ROACHE, P.J. **Verification and Validation in Computational Science and Engineering**. Hermosa Pub, 1998.

RODRIGUES, G.S.; NASCIMENTO, A.H.G. e FIGUEIREDO, J.R. Performance of finite volume discretization schemes for the convective-diffusive linear transport equation. part ii: High eigenvalue-peclet ratios. **17th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering**, novembro 2018.

ROSA, S. e PINHO, F. Pressure drop coefficient of laminar newtonian flow in axisymmetric diffusers. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, v. 27, n. 2, 319–328, apr 2006.

RUCK, B. e MAKIOLA, B. Flow separation over the inclined step. In **Notes on Numerical Fluid Mechanics (NNFM)**, pp. 47–55. Vieweg Teubner Verlag, 1993.

SANTOS, R.G. e FIGUEIREDO, J.R. Laminar elliptic flow in the entrance region of tubes. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 29, n. 3, sep 2007.

SANTOS, R.G. e FIGUEIREDO, J.R. Numerical simulation study in a three-dimensional backward-facing step flow. **21st International Congress of Mechanical Engineering**, oct 2011.

SHAPIRA, M.; DEGANI, D. e WEIHS, D. Stability and existence of multiple solutions for viscous flow in suddenly enlarged channels. **Computers & Fluids**, v. 18, n. 3, 239–258, jan 1990.

SOBEY, I.J. Observation of waves during oscillatory channel flow. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 151, n. -1, 395, feb 1985.

SPALDING, D.B. A novel finite difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 4, n. 4, 551–559, jul 1972.

SWAMINATHAN, G.; SAHU, K.C.; SAMEEN, A. e GOVINDARAJAN, R. Global instabilities in diverging channel flows. **Theoretical and Computational Fluid Dynamics**, v. 25, n. 1-4, 53–64, mar 2010.

TAMAMIDIS, P. e ASSANIS, D.N. Evaluation of various high-order-accuracy schemes with and without flux limiters. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 16, n. 10, 931–948, may 1993.

THOM, A. The flow past circular cylinders at low speeds. **Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 141, n. 845, 651–669, sep 1933.

TSUI, Y.Y. e PAN, Y.F. A pressure-correction method for incompressible flows using unstructured meshes. **Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals**, v. 49, n. 1, 43–65, jan

2006.

TSUI, Y.Y. e WANG, C.K. Calculation of laminar separated flow in symmetric two-dimensional diffusers. **Journal of Fluids Engineering**, v. 117, n. 4, 612, 1995.

TSUI, Y.Y. e WANG, H.W. Side-wall effects on the bifurcation of the flow through a sudden expansion. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 56, n. 2, 167–184, 2007.

ULSON DE SOUZA, Antônio Augusto. **Um Esquema para Minimização da Difusão Numérica na Solução de Escoamentos em Geometrias Arbitrárias**. 1992. Tese (Doutorado). Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis.

VAREJÃO, Luciano Magno Costalonga. **Flux-Spline Method for Heat and Momentum Transfer**. 1979. Tese (Doutorado). University of Minnesota, Minneapolis.

WAHBA, E. Iterative solvers and inflow boundary conditions for plane sudden expansion flows. **Applied Mathematical Modelling**, v. 31, n. 11, 2553–2563, nov 2007.

WONG, H.H. e RAITHBY, G.D. Improved finite-difference methods based on a critical evaluation of the approximation errors. **Numerical Heat Transfer**, v. 2, n. 2, 139–163, apr 1979.

YANG, Y.T. e HOU, C.F. Numerical calculation of turbulent flow in symmetric two-dimensional diffusers. **Acta Mechanica**, v. 137, n. 1-2, 43–54, mar 1999.

APÊNDICE A – Tabelas dos Resultados Extrapolados

A seguir são apresentadas as tabelas com as extrapolações dos comprimentos de separação e reatamento para os problemas da expansão abrupta e gradual. Em todos os casos, usou-se a extrapolação de Richardson de segunda ordem (ver Seção 3.4.1).

A.1 Expansão Abrupta

Tabela A.1: Comprimentos de separação e reatamento da expansão abrupta para $D/d = 2$.

Re	Malha	x_1	x_2	x_3	x_4
50	150×60	3,881	3,881	0,000	0,000
	200×80	3,791	3,791	0,000	0,000
	Extrapolado	3,676	3,676	0,000	0,000
100	150×60	7,281	7,281	0,000	0,000
	200×80	7,175	7,175	0,000	0,000
	Extrapolado	7,039	7,039	0,000	0,000
135	150×60	9,671	9,673	0,000	0,000
	200×80	9,583	9,583	0,000	0,000
	Extrapolado	9,470	9,467	0,000	0,000
140	150×60	10,030	10,025	0,000	0,000
	200×80	9,924	9,923	0,000	0,000
	Extrapolado	9,839	9,841	0,000	0,000
141	—	—	—	—	—
	400×80	9,881	9,844	0,000	0,000
	Extrapolado	9,881	9,844	0,000	0,000
142	—	—	—	—	—
	400×80	9,981	9,815	0,000	0,000
	Extrapolado	9,981	9,815	0,000	0,000
143	—	—	—	—	—
	400×80	11,288	8,435	0,000	0,000
	Extrapolado	11,288	8,435	0,000	0,000
150	150×60	13,375	7,080	0,000	0,000
	200×80	13,240	7,062	0,000	0,000
	Extrapolado	13,066	7,038	0,000	0,000
200	150×60	18,181	6,261	0,000	0,000
	200×80	18,103	6,180	0,000	0,000
	Extrapolado	18,004	6,075	0,000	0,000

Tabela A.1 – Continuação

Re	Malha	x_1	x_2	x_3	x_4
250	150 × 60	21,386	6,400	0,000	0,000
	200 × 80	21,345	6,309	0,000	0,000
	Extrapolado	21,292	6,193	0,000	0,000
300	150 × 60	23,761	6,638	21,168	29,937
	200 × 80	23,764	6,551	21,607	29,450
	Extrapolado	23,769	6,438	22,173	28,823
350	150 × 60	25,434	6,921	21,714	35,405
	200 × 80	25,495	6,806	21,862	35,222
	Extrapolado	25,573	6,659	22,051	34,986
407	150 × 60	26,855	7,190	22,264	41,023
	200 × 80	26,955	7,100	22,407	40,922
	Extrapolado	27,082	6,985	22,591	40,793

Tabela A.2: Comprimentos de separação e reatamento da expansão abrupta para $D/d = 3$.

Re	Malha	x_1	x_2	x_3	x_4
35	150 × 90	3,816	3,816	0,000	0,000
	200 × 120	3,755	3,755	0,000	0,000
	Extrapolado	3,676	3,676	0,000	0,000
50	150 × 90	5,353	5,353	0,000	0,000
	200 × 120	5,281	5,281	0,000	0,000
	Extrapolado	5,188	5,188	0,000	0,000
51	—	—	—	—	—
	400 × 90	5,294	5,294	0,000	0,000
	Extrapolado	5,294	5,294	0,000	0,000
52	—	—	—	—	—
	400 × 90	5,396	5,396	0,000	0,000
	Extrapolado	5,396	5,396	0,000	0,000
53	150 × 90	6,254	4,814	0,000	0,000
	200 × 120	6,331	4,729	0,000	0,000
	Extrapolado	6,431	4,620	0,000	0,000
60	150 × 90	8,051	3,889	0,000	0,000
	200 × 120	7,973	3,874	0,000	0,000
	Extrapolado	7,872	3,855	0,000	0,000
80	150 × 90	10,342	3,784	0,000	0,000
	200 × 120	10,292	3,743	0,000	0,000
	Extrapolado	10,228	3,691	0,000	0,000
100	150 × 90	11,869	3,937	11,829	13,364
	200 × 120	11,837	3,893	11,835	13,238
	Extrapolado	11,795	3,837	11,843	13,077

Tabela A.2 – Continuação

Re	Malha	x_1	x_2	x_3	x_4
150	150 × 90	14,143	4,394	11,742	21,668
	200 × 120	14,138	4,334	11,749	21,612
	Extrapolado	14,132	4,257	11,758	21,540
187	150 × 90	15,451	4,692	12,636	26,224
	200 × 120	15,454	4,628	12,626	26,219
	Extrapolado	15,458	4,545	12,614	26,212
250	150 × 90	17,546	5,135	14,316	33,138
	200 × 120	17,571	5,065	14,329	33,295
	Extrapolado	17,603	4,976	14,345	33,497

A.2 Expansão Gradual

Tabela A.3: Comprimentos de separação e reatamento da expansão gradual para $\alpha = 10^\circ$.

Re	Malha	x_{01}	x_1	x_{02}	x_2	x_3	x_4
60	132 × 45	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	176 × 60	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	Extrapolado	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
80	132 × 45	4,016	6,980	4,016	6,979	0,000	0,000
	176 × 60	3,831	6,947	3,832	6,947	0,000	0,000
	Extrapolado	3,592	6,905	3,595	6,906	0,000	0,000
90	132 × 45	3,335	7,879	3,336	7,876	0,000	0,000
	176 × 60	3,173	7,809	3,174	7,806	0,000	0,000
	Extrapolado	2,964	7,719	2,967	7,716	0,000	0,000
96	—	—	—	—	—	—	—
	264 × 90	2,758	8,323	2,758	8,322	0,000	0,000
	Extrapolado	2,758	8,323	2,758	8,322	0,000	0,000
97	—	—	—	—	—	—	—
	264 × 90	2,721	8,409	2,722	8,406	0,000	0,000
	Extrapolado	2,721	8,409	2,722	8,406	0,000	0,000
98	132 × 45	2,572	9,827	3,920	6,916	0,000	0,000
	176 × 60	2,494	9,691	3,516	7,055	0,000	0,000
	Extrapolado	2,393	9,515	2,996	7,235	0,000	0,000
100	132 × 45	2,393	10,457	4,806	6,615	0,000	0,000
	176 × 60	2,292	10,373	4,293	6,452	0,000	0,000
	Extrapolado	2,163	10,265	3,633	6,243	0,000	0,000

Tabela A.3 – Continuação

Re	Malha	x_{01}	x_1	x_{02}	x_2	x_3	x_4
150	132×45	1,392	15,693	0,000	0,000	0,000	0,000
	176×60	1,306	15,746	0,000	0,000	0,000	0,000
	Extrapolado	1,195	15,814	0,000	0,000	0,000	0,000
200	132×45	1,094	17,498	0,000	0,000	14,689	25,756
	176×60	1,021	17,673	0,000	0,000	14,915	25,673
	Extrapolado	0,928	17,897	0,000	0,000	15,205	25,566
250	132×45	0,964	18,764	0,000	0,000	15,432	31,638
	176×60	0,848	19,004	0,000	0,000	15,702	31,723
	Extrapolado	0,698	19,313	0,000	0,000	16,049	31,833
300	132×45	0,857	20,049	0,000	0,000	16,433	36,767
	176×60	0,772	20,354	0,000	0,000	16,758	37,110
	Extrapolado	0,663	20,745	0,000	0,000	17,176	37,552

Tabela A.4: Comprimentos de separação e reatamento da expansão gradual para $\alpha = 15^\circ$.

Re	Malha	x_{01}	x_1	x_{02}	x_2	x_3	x_4
40	200×45	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	268×60	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	Extrapolado	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
60	200×45	2,153	5,290	2,153	5,289	0,000	0,000
	268×60	2,024	5,253	2,024	5,253	0,000	0,000
	Extrapolado	1,857	5,206	1,857	5,207	0,000	0,000
70	200×45	1,778	6,198	1,779	6,194	0,000	0,000
	268×60	1,668	6,156	1,668	6,156	0,000	0,000
	Extrapolado	1,528	6,102	1,527	6,104	0,000	0,000
76	—	—	—	—	—	—	—
	362×81	1,454	6,701	1,454	6,701	0,000	0,000
	Extrapolado	1,454	6,701	1,454	6,701	0,000	0,000
77	—	—	—	—	—	—	—
	362×81	1,434	6,796	1,434	6,796	0,000	0,000
	Extrapolado	1,434	6,796	1,434	6,796	0,000	0,000
78	200×45	1,606	8,088	2,173	5,668	0,000	0,000
	268×60	1,493	7,705	1,802	6,011	0,000	0,000
	Extrapolado	1,403	7,399	1,505	6,285	0,000	0,000
80	200×45	1,327	8,564	2,013	5,169	0,000	0,000
	268×60	1,250	8,514	1,843	5,187	0,000	0,000
	Extrapolado	1,150	8,448	1,625	5,211	0,000	0,000
100	200×45	0,955	11,408	3,427	4,124	0,000	0,000
	268×60	0,891	11,398	3,004	4,167	0,000	0,000
	Extrapolado	0,808	11,385	2,460	4,222	0,000	0,000

Tabela A.4 – Continuação

Re	Malha	x_{01}	x_1	x_{02}	x_2	x_3	x_4
150	200×45	0,684	14,704	0,000	0,000	12,721	19,466
	268×60	0,624	14,797	0,000	0,000	12,918	19,329
	Extrapolado	0,547	14,916	0,000	0,000	13,171	19,154
200	200×45	0,568	16,256	3,431	4,132	13,318	26,115
	268×60	0,514	16,451	2,868	4,194	13,538	26,108
	Extrapolado	0,444	16,702	2,144	4,274	13,822	26,098
250	200×45	0,489	17,685	2,777	4,413	14,345	31,776
	268×60	0,455	17,953	2,092	4,349	14,636	31,902
	Extrapolado	0,412	18,297	1,211	4,268	15,011	32,063
300	200×45	0,458	19,120	2,037	4,584	15,534	36,853
	268×60	0,409	19,426	1,603	4,573	15,863	37,162
	Extrapolado	0,345	19,820	1,044	4,558	16,286	37,559

Tabela A.5: Comprimentos de separação e reatamento da expansão gradual para $\alpha = 20^\circ$.

Re	Malha	x_{01}	x_1	x_{02}	x_2	x_3	x_4
20	272×45	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	364×60	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	Extrapolado	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
50	272×45	1,331	4,458	1,331	4,458	0,000	0,000
	364×60	1,251	4,434	1,251	4,434	0,000	0,000
	Extrapolado	1,148	4,402	1,148	4,402	0,000	0,000
65	272×45	1,028	5,878	1,028	5,875	0,000	0,000
	364×60	0,954	5,849	0,954	5,848	0,000	0,000
	Extrapolado	0,859	5,813	0,859	5,813	0,000	0,000
69	—	—	—	—	—	—	—
	492×81	0,853	6,213	0,853	6,212	0,000	0,000
	Extrapolado	0,853	6,213	0,853	6,212	0,000	0,000
70	—	—	—	—	—	—	—
	492×81	0,839	6,314	0,844	6,294	0,000	0,000
	Extrapolado	0,839	6,314	0,844	6,294	0,000	0,000
71	272×45	0,956	7,770	1,269	4,842	0,000	0,000
	364×60	0,860	7,566	1,082	5,003	0,000	0,000
	Extrapolado	0,783	7,402	0,932	5,133	0,000	0,000
75	272×45	0,771	8,505	1,162	4,359	0,000	0,000
	364×60	0,721	8,468	1,064	4,379	0,000	0,000
	Extrapolado	0,657	8,421	0,937	4,405	0,000	0,000
80	272×45	0,707	9,286	1,209	4,062	0,000	0,000
	364×60	0,659	9,263	1,096	4,072	0,000	0,000
	Extrapolado	0,598	9,234	0,950	4,085	0,000	0,000

Tabela A.5 – Continuação

Re	Malha	x_{01}	x_1	x_{02}	x_2	x_3	x_4
100	272×45	0,565	11,425	1,217	3,802	0,000	0,000
	364×60	0,527	11,432	1,085	3,802	0,000	0,000
	Extrapolado	0,477	11,442	0,916	3,802	0,000	0,000
150	272×45	0,443	14,376	0,989	4,014	12,220	19,903
	364×60	0,396	14,487	0,874	4,021	12,399	19,809
	Extrapolado	0,336	14,631	0,726	4,029	12,629	19,689
200	272×45	0,369	16,013	0,815	4,359	13,062	26,355
	364×60	0,347	16,212	0,711	4,385	13,290	26,371
	Extrapolado	0,318	16,467	0,577	4,419	13,583	26,390
250	272×45	0,346	17,553	0,692	4,715	14,234	32,032
	364×60	0,313	17,810	0,607	4,749	14,513	32,157
	Extrapolado	0,271	18,141	0,497	4,794	14,871	32,318
300	272×45	0,330	19,044	0,609	5,049	15,474	37,112
	364×60	0,288	19,364	0,529	5,094	15,817	37,424
	Extrapolado	0,234	19,776	0,425	5,151	16,259	37,825

Tabela A.6: Comprimentos de separação e reatamento da expansão gradual para $\alpha = 26,56^\circ$.

Re	Malha	x_{01}	x_1	x_{02}	x_2	x_3	x_4
20	375×45	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	500×60	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	Extrapolado	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
40	375×45	0,841	3,636	0,842	3,635	0,000	0,000
	500×60	0,792	3,614	0,792	3,613	0,000	0,000
	Extrapolado	0,729	3,585	0,729	3,585	0,000	0,000
50	375×45	0,679	4,591	0,680	4,588	0,000	0,000
	500×60	0,639	4,566	0,639	4,565	0,000	0,000
	Extrapolado	0,588	4,534	0,588	4,535	0,000	0,000
64	—	—	—	—	—	—	—
	674×81	0,488	5,922	0,489	5,916	0,000	0,000
	Extrapolado	0,488	5,922	0,489	5,916	0,000	0,000
65	—	—	—	—	—	—	—
	674×81	0,482	6,033	0,483	6,013	0,000	0,000
	Extrapolado	0,482	6,033	0,483	6,013	0,000	0,000
66	375×45	0,585	7,263	0,698	4,861	0,000	0,000
	500×60	0,516	7,092	0,596	4,959	0,000	0,000
	Extrapolado	0,460	6,956	0,514	5,038	0,000	0,000
70	375×45	0,475	8,090	0,613	4,275	0,000	0,000
	500×60	0,439	8,053	0,563	4,294	0,000	0,000
	Extrapolado	0,393	8,006	0,499	4,317	0,000	0,000

Tabela A.6 – Continuação

Re	Malha	x_{01}	x_1	x_{02}	x_2	x_3	x_4
80	375×45	0,408	9,529	0,607	3,879	0,000	0,000
	500×60	0,381	9,517	0,555	3,880	0,000	0,000
	Extrapolado	0,346	9,501	0,488	3,883	0,000	0,000
100	375×45	0,356	11,495	0,553	3,834	0,000	0,000
	500×60	0,322	11,510	0,501	3,834	0,000	0,000
	Extrapolado	0,278	11,529	0,434	3,833	0,000	0,000
150	375×45	0,282	14,297	0,447	4,214	12,058	20,301
	500×60	0,261	14,403	0,398	4,213	12,215	20,229
	Extrapolado	0,232	14,539	0,334	4,213	12,416	20,137
200	375×45	0,253	15,954	0,380	4,606	13,006	26,678
	500×60	0,228	16,132	0,343	4,612	13,206	26,697
	Extrapolado	0,197	16,360	0,295	4,620	13,463	26,722
250	375×45	0,239	17,502	0,342	4,949	14,197	32,337
	500×60	0,205	17,732	0,297	4,962	14,448	32,455
	Extrapolado	0,160	18,028	0,240	4,979	14,770	32,608
300	375×45	0,229	19,013	0,311	5,258	15,462	37,384
	500×60	0,194	19,269	0,275	5,268	15,742	37,642
	Extrapolado	0,148	19,598	0,229	5,280	16,101	37,973

Tabela A.7: Comprimentos de separação e reatamento da expansão gradual para $\alpha = 30^\circ$.

Re	Malha	x_{01}	x_1	x_{02}	x_2	x_3	x_4
20	432×45	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	578×60	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	Extrapolado	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
40	432×45	0,624	3,685	0,624	3,684	0,000	0,000
	578×60	0,580	3,665	0,580	3,664	0,000	0,000
	Extrapolado	0,524	3,639	0,523	3,640	0,000	0,000
50	432×45	0,519	4,656	0,519	4,652	0,000	0,000
	578×60	0,478	4,632	0,479	4,629	0,000	0,000
	Extrapolado	0,426	4,600	0,426	4,601	0,000	0,000
62	—	—	—	—	—	—	—
	780×81	0,375	5,803	0,376	5,799	0,000	0,000
	Extrapolado	0,375	5,803	0,376	5,799	0,000	0,000
63	—	—	—	—	—	—	—
	780×81	0,371	5,915	0,372	5,895	0,000	0,000
	Extrapolado	0,371	5,915	0,372	5,895	0,000	0,000
64	432×45	0,482	6,963	0,526	5,026	0,000	0,000
	578×60	0,419	6,771	0,453	5,145	0,000	0,000
	Extrapolado	0,369	6,617	0,395	5,239	0,000	0,000

Tabela A.7 – Continuação

Re	Malha	x_{01}	x_1	x_{02}	x_2	x_3	x_4
70	432×45	0,367	8,259	0,462	4,146	0,000	0,000
	578×60	0,336	8,235	0,423	4,152	0,000	0,000
	Extrapolado	0,295	8,205	0,373	4,160	0,000	0,000
80	432×45	0,329	9,616	0,451	3,858	0,000	0,000
	578×60	0,301	9,609	0,411	3,856	0,000	0,000
	Extrapolado	0,265	9,601	0,359	3,855	0,000	0,000
100	432×45	0,289	11,535	0,415	3,860	0,000	0,000
	578×60	0,254	11,553	0,371	3,857	0,000	0,000
	Extrapolado	0,210	11,576	0,315	3,853	0,000	0,000
150	432×45	0,229	14,264	0,333	4,257	11,994	20,462
	578×60	0,212	14,365	0,300	4,254	12,141	20,402
	Extrapolado	0,190	14,496	0,258	4,250	12,331	20,325
200	432×45	0,213	15,913	0,293	4,640	12,963	26,801
	578×60	0,184	16,082	0,254	4,645	13,153	26,826
	Extrapolado	0,148	16,299	0,205	4,652	13,399	26,858
250	432×45	0,201	17,457	0,260	4,976	14,158	32,443
	578×60	0,169	17,679	0,232	4,987	14,399	32,564
	Extrapolado	0,127	17,964	0,195	5,000	14,709	32,720
300	432×45	0,192	18,965	0,234	5,274	15,421	37,454
	578×60	0,162	19,213	0,213	5,283	15,692	37,712
	Extrapolado	0,122	19,532	0,186	5,294	16,041	38,044

APÊNDICE B – Desempenho de Esquemas de Volumes Finitos para a Equação de Transporte Linear Advectivo-Difusivo

Resumo. O problema bidimensional do transporte de um escalar em um campo de escoamento uniforme é utilizado para avaliação dos vários aspectos numéricos de diferentes esquemas de discretização. Este problema é modelado pela equação de transporte advectivo-difusivo, aqui discretizada pelo método de volumes finitos. Propõe-se uma metodologia que avalia a influência do número de Peclet e a dependência da direção do escoamento, no erro rms dos esquemas numéricos: central, upwind, exponencial simples, upwind de segunda ordem, QUICK, LOADS e UNIFAES. O sistema algébrico gerado a partir das discretizações é resolvido pelo método ADI para os esquemas de cinco pontos, enquanto que os termos extras do upwind de segunda ordem, QUICK, UNIFAES e LOADS são tratados explicitamente. As condições de contorno são do tipo Dirichlet. Os valores da propriedade escalar nas fronteiras do domínio são fornecidos por soluções analíticas. Os esquemas que empregam o termo fonte da equação geradora, isto é, UNIFAES e LOADS, apresentam os melhores desempenhos em quase todas as funções, ao lado do esquema QUICK. A menor dependência com a direção do escoamento é apresentada pelo UNIFAES. Com o aumento do número de Peclet, UNIFAES e QUICK superam os demais, sendo seguido de perto pelo LOADS. No entanto, o UNIFAES tem a vantagem de ser incondicionalmente estável para todos os números de Peclet, enquanto que o QUICK pode apresentar comportamento oscilatório.

B.1 Esquemas de Interpolação de Volumes Finitos

Este trabalho apresenta um teste sistemático de vários esquemas de volumes finitos para o caso da equação de transporte de uma propriedade escalar em escoamento de velocidade uniforme. Esta equação linear é resolvida pelo método de separação de variáveis, levando a soluções elementares cuja combinação linear fornece a solução geral. A presente investigação proporciona um teste dos vários esquemas, varrendo essas soluções elementares.

Os esquemas serão derivados com respeito à equação de transporte advectivo-difusivo em coordenadas cartesianas de uma propriedade escalar $\phi(x,y,t) \equiv \phi$, sem termo fonte, através

de um campo bidimensional de velocidade uniforme, a qual é representada pela equação linear homogênea de coeficientes constantes:

$$\frac{\partial(\rho c \phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho c u \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho c v \phi)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = 0 \quad (\text{B.1})$$

A Eq. (B.1) é posta na forma adimensional dividindo as coordenadas espaciais (x, y) por uma dimensão característica L e as componentes de velocidades (u, v) por uma velocidade característica V . Considerando o caso de Γ constante e sem mudança na notação, chega-se a:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial(\text{Pe} u \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\text{Pe} v \phi)}{\partial y} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (\text{B.2})$$

onde Pe é o número de Peclet global dado por $\text{Pe} = \rho V L c / \Gamma$. A variável t representa, agora, o tempo adimensional, dado pelo tempo dimensional multiplicado por $\Gamma / (\rho c L^4)$.

Integrando a Eq. (B.2) no volume de controle da Figura 3.1 e empregando o teorema da divergência, obtêm-se:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} \Delta x \Delta y + (J_e - J_w) \Delta y + (J_n - J_s) \Delta x = 0 \quad (\text{B.3})$$

onde J_e é o fluxo advectivo-difusivo combinado considerado constante na face e do volume de controle:

$$J_e = \text{Pe} u_e \phi_e - \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_e \quad (\text{B.4})$$

e assim por diante para as demais fronteiras.

A seguir apresentam-se resumidamente os esquemas de discretização upwind de segunda ordem, QUICK e LOADS. Detalhes algébricos do esquema UNIFAES encontram-se na Seção 3.2. Os demais esquemas clássicos aqui empregados dispensam apresentação, tendo em vista que são bem fundamentados na literatura.

B.1.1 Esquema Upwind de Segunda Ordem

No esquema upwind de segunda ordem (SOU), apresentado por Tamamidis e Assanis (1993), o valor de ϕ na interface é aproximado por uma extrapolação linear a partir de dois nós vizinhos a montante (ver Figura B.1). A solução usa um perfil linear por partes. Considerando a direção do escoamento sempre no sentido positivo, tem-se para os termos advectivos:

$$\begin{aligned}\phi_e &= \frac{3}{2}\phi_P - \frac{1}{2}\phi_W \\ \phi_w &= \frac{3}{2}\phi_W - \frac{1}{2}\phi_{WW}\end{aligned}\tag{B.5}$$

Para os termos difusivos, mantém-se a mesma discretização do esquema central (perfil linear por partes).

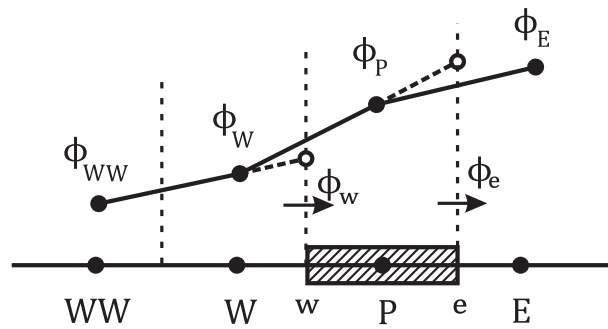


Figura B.1: Extrapolação da propriedade ϕ pelo esquema upwind de segunda ordem.

B.1.2 Esquema QUICK

Esquema proposto por Leonard (1979), o QUICK (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics), emprega uma interpolação parabólica para contabilizar o valor de ϕ em cada interface do volume de controle. A função quadrática relativa a uma dada interface é ajustada a três nós vizinhos, dois a montante e um a jusante (ver Figura B.2). Tal curva de interpolação é usada para os termos advectivos. Os termos difusivos podem ser avaliados usando o gradiente da função quadrática. Mas, é interessante notar que, para um volume de controle de

face centrada, esta prática resulta na mesma expressão do diferenciamento central. Novamente, considerando a direção positiva do escoamento, tem-se que pelo esquema QUICK:

$$\begin{aligned}\phi_e &= \frac{3}{8}\phi_E + \frac{3}{4}\phi_P - \frac{1}{8}\phi_W \\ \phi_w &= \frac{3}{8}\phi_P + \frac{3}{4}\phi_W - \frac{1}{8}\phi_{WW}\end{aligned}\tag{B.6}$$

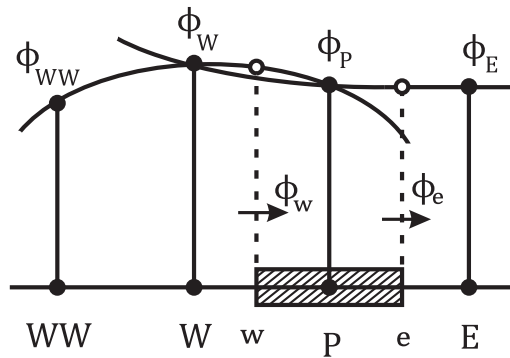


Figura B.2: Curva de interpolação do esquema QUICK.

B.1.3 Esquema LOADS

A maioria dos esquemas de tipo exponencial usa como curva interpolante a solução da equação diferencial unidimensional, por exemplo, na direção x :

$$\text{Pe}u \frac{d\phi}{dx} - \frac{d^2\phi}{dx^2} = K_x\tag{B.7}$$

que aproxima os termos advectivo e difusivo dados na Eq. (B.4) assumindo a componente da velocidade u localmente como constante, assim como o termo não-homogêneo K_x , o qual representa todos os termos da equação original, Eq. (B.2), que não estão inclusos explicitamente na Eq. (B.7). A solução geral da Eq. (B.7) é:

$$\phi = C_1 + \frac{K_x}{\text{Pe}u}x + C_3 \exp(\text{Pe}ux)\tag{B.8}$$

Utilizando a Eq. (B.8) como uma curva interpolante entre os pontos P e E (ver Figura 3.1), o fluxo combinado dado pela Eq. (B.4) pode ser escrito como:

$$J_e = \text{Pe} u_e \phi_P + \frac{\phi_P - \phi_E}{\Delta x} \frac{\text{Pe} u_e \Delta x}{\exp(\text{Pe} u_e \Delta x) - 1} + K_e \Delta x \left[\frac{1}{\exp(\text{Pe} u_e \Delta x) - 1} - \frac{1}{\text{Pe} u_e \Delta x} + \frac{1}{2} \right] \quad (\text{B.9})$$

expressões análogas podem ser obtidas para as demais fronteiras.

O primeiro esquema de volumes finitos tipo exponencial a incluir o termo K_x foi o LO-ADS (Locally Analytic Differencing Scheme) de Wong e Raithby (1979), no qual K_x é calculado por comparação entre a Eq. (B.2) e Eq. (B.7):

$$K_x = - \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \text{Pe} v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) \quad (\text{B.10})$$

O LOADS determina K_x contabilizando o fluxo total, por advecção e difusão, através de suas respectivas faces. Para o cálculo de K_e (ver Figura B.3), os termos da Eq. (B.10) podem ser avaliados da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \frac{(\partial \phi / \partial t)_P + (\partial \phi / \partial t)_E}{2} \\ \text{Pe} v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} &= \frac{1}{\Delta y} \left[\frac{(J_n - J_s) + (J_{ne} - J_{se})}{2} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

onde os termos K nas outras direções são calculados por um procedimento análogo. O cálculo dos fluxos advectivos e difusivos cruzados na Eq. (B.11) é feito por meio do esquema exponencial simples, onde os termos K são negligenciados.

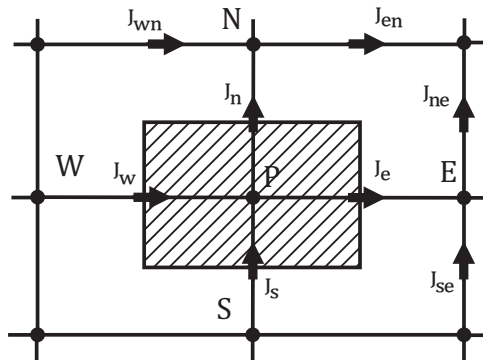


Figura B.3: Volume de controle do esquema LOADS.

B.2 Transporte Advectivo-Difusivo em Escoamento Paralelo

O transporte advectivo-difusivo em coordenadas cartesianas de uma propriedade escalar $\phi(x,y) \equiv \phi$, em regime permanente, sem termo fonte, através de um campo de velocidade uniforme é representado pela equação linear homogênea de coeficientes constantes na sua forma adimensional:

$$\text{Pe}u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \text{Pe}v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (\text{B.12})$$

onde as componentes de velocidades são $u = V \cos \theta$ e $v = V \sin \theta$, com módulo V e ângulo θ com o eixo x . Para determinação da solução exata, a Eq. (B.12) é reescrita em função do sistema de coordenadas (s,n) , respectivamente paralela e normal à linha de corrente do escoamento, como mostrado na Figura B.4, resultando:

$$\text{Pe} \frac{\partial \phi}{\partial s} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial s^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial n^2} = 0 \quad (\text{B.13})$$

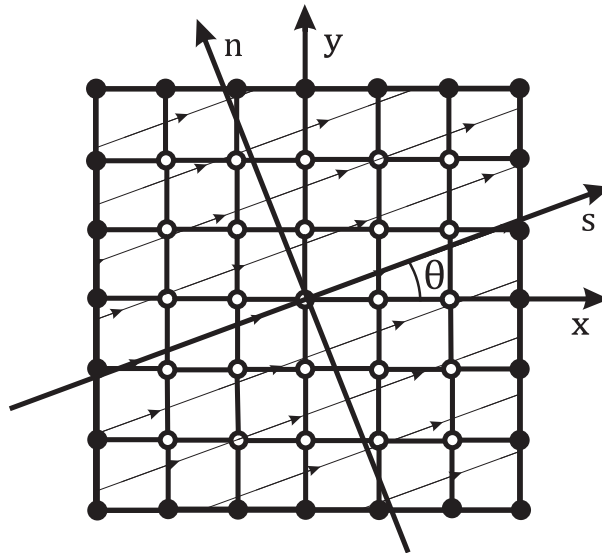


Figura B.4: Esquema do sistema de coordenadas analítico e numérico.

A Eq. (B.13) pode ser resolvida pelo método de separação de variáveis, assumindo soluções do tipo $\phi(s,n) = \xi(s)\zeta(n)$, como apresentadas por Figueiredo (1992, 1997):

$$\xi(s) = C_1 \exp\left(\frac{\text{Pe} + \sqrt{\text{Pe}^2 \pm 4\lambda^2}}{2}s\right) + C_2 \exp\left(\frac{\text{Pe} - \sqrt{\text{Pe}^2 \pm 4\lambda^2}}{2}s\right) \quad (\text{B.14})$$

$$\zeta(n) = C_3 \exp\left(\sqrt{-(\pm 1)\lambda n}\right) + C_4 \exp\left(-\sqrt{-(\pm 1)\lambda n}\right)$$

onde o autovalor λ pertence ao conjunto dos números reais não-negativos e os C_i são constantes. Tomando os sinais positivos antes de λ na Eq. (B.14), uma vez que todas as características essenciais das funções seno ou cosseno pode ser mostradas por qualquer uma delas, as soluções em forma de seno aparecem na forma:

$$\phi_A = \exp\left(\frac{\text{Pe} - \sqrt{\text{Pe}^2 + 4\lambda^2}}{2}s\right) \sin(\lambda n) \quad (\text{B.15})$$

$$\phi_B = \exp\left(\frac{\text{Pe} + \sqrt{\text{Pe}^2 + 4\lambda^2}}{2}s\right) \sin(\lambda n) \quad (\text{B.16})$$

Agora, as funções com o sinal negativo antes do autovalor são consideradas na Eq. (B.14). Observe que, como a origem do sistema de coordenadas coincide com o centro do domínio numérico, as exponenciais negativas e positivas aparecerão simetricamente. Assim, sem perda de generalidade, apenas a solução $\exp(\lambda n)$ pode ser considerada. Dessa forma, no caso de $\lambda/\text{Pe} \leq 0,5$, as soluções encontradas são:

$$\phi_C = \exp\left(\frac{\text{Pe} - \sqrt{\text{Pe}^2 - 4\lambda^2}}{2}s\right) \exp(\lambda n) \quad (\text{B.17})$$

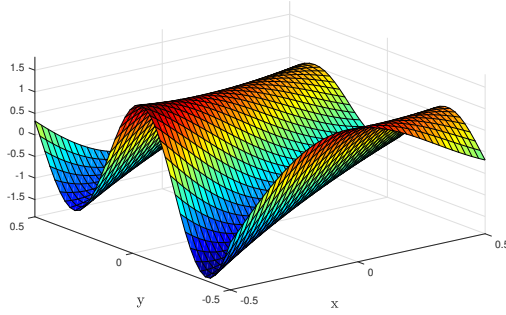
$$\phi_D = \exp\left(\frac{\text{Pe} + \sqrt{\text{Pe}^2 - 4\lambda^2}}{2}s\right) \exp(\lambda n) \quad (\text{B.18})$$

Para o caso $\lambda/\text{Pe} > 0,5$, o discriminante dentro da raiz quadrada pode ser negativo, sendo portanto, uma exponencial complexa. Assim, as soluções elementares são encontradas na forma real como:

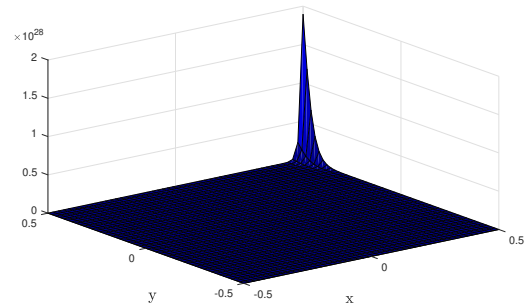
$$\phi_{CD} = \exp\left(\frac{\text{Pe}}{2}s\right) \sin\left(\sqrt{\lambda^2 - \frac{\text{Pe}^2}{4}}s\right) \exp(\lambda n) \quad (\text{B.19})$$

$$\phi_{DC} = \exp\left(\frac{\text{Pe}}{2}s\right) \cos\left(\sqrt{\lambda^2 - \frac{\text{Pe}^2}{4}}s\right) \exp(\lambda n) \quad (\text{B.20})$$

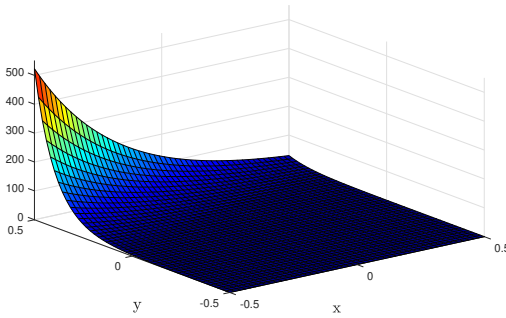
A investigação do presente trabalho é restrita a análises com baixas razões $\lambda/\text{Pe} (\leq 0,1)$ para as funções dos tipos A, B, C e D, como mostrado na Figura B.5. Aqui, as razões Autovalor-Peclet referem-se a λ/Pe . Maiores razões de λ/Pe , que incluem também as funções CD e DC, são consideradas no trabalho complementar de Rodrigues *et al.* (2018).



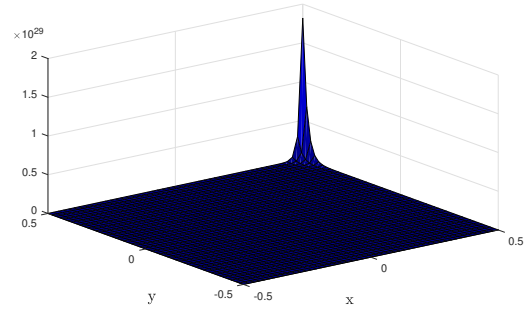
(a) Função A



(b) Função B



(c) Função C



(d) Função D

Figura B.5: Soluções analíticas encontradas para $\text{Pe} = 100$, $\lambda = 10$, $\theta = 22,5^\circ$.

As funções A e B, que são senoidais na direção normal do escoamento e exponenciais na direção das linhas de corrente, diferem uma da outra na natureza mais suave ou abrupta da exponencial. Essa diferença vem do fato de se tomar mais ou menos a raiz quadrada do discriminante na exponencial. Uma situação análoga ocorre entre as funções C e D, ambas exponenciais na direção cruzada.

B.3 Resultados e Discussão

As soluções elementares, Eqs. (B.15) a (B.18), são empregadas para comparar as várias discretizações de volumes finitos: central, upwind, exponencial simples, upwind de segunda or-

dem, QUICK, LOADS e UNIFAES. A solução exata da Eq. (B.13) é imposta como condição de contorno de Dirichlet nas fronteiras do domínio quadrado (ver Figura B.4). Para os esquemas QUICK e upwind de segunda ordem, nas fronteiras do domínio onde apareceriam termos relacionados à nós que estariam fora do domínio de cálculo, a formulação do esquema central foi usada. Esta prática foi tomada para que todos os nós envolvidos no sistema de equações estivessem contidos dentro do domínio.

O tempo é usado apenas para controlar o processo iterativo do qual a solução do problema é obtida. Apenas a solução de regime permanente é alcançada. O sistema linear algébrico originado da discretização da Eq. (B.2) é resolvido com o método ADI (Alternating Direction Implicit) de Peaceman e Rachford (1955), para os esquemas de cinco pontos. Os termos extras do upwind de segunda ordem, QUICK, UNIFAES e LOADS são calculados explicitamente.

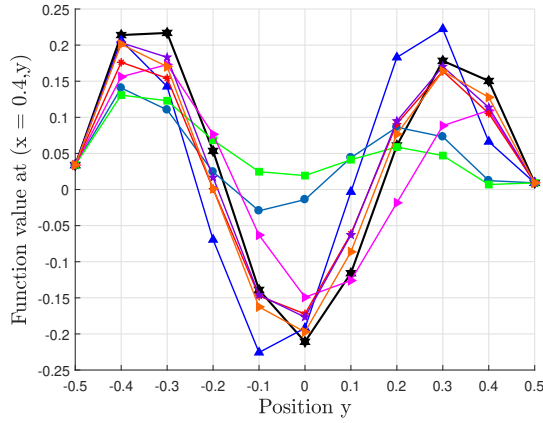
O comportamento numérico dos diversos esquemas de discretização usados para solução da equação de transporte advectivo-difusivo, Eq. (B.12), será agora discutido. Os erros rms de cada esquema são comparativamente apresentados e relacionados às suas respectivas soluções exatas. Para todos os testes, a solução numérica foi considerada convergida sempre que a taxa máxima de variação da função ϕ com o tempo fosse menor que 10^{-5} . Os erros são apresentados pela média quadrática (erro rms) e normalizados pela distância máxima entre os valores de ϕ dentro do domínio, incluindo os valores das fronteiras.

A maioria dos cálculos a serem apresentados referem-se a um conjunto padrão de parâmetros dados por $\lambda = 10$ e $\theta = 22,5^\circ$. A Figura B.6 apresenta os perfis das soluções exatas e numéricas para as funções A, B, C e D com $Pe = 100$ e malha 10×10 .

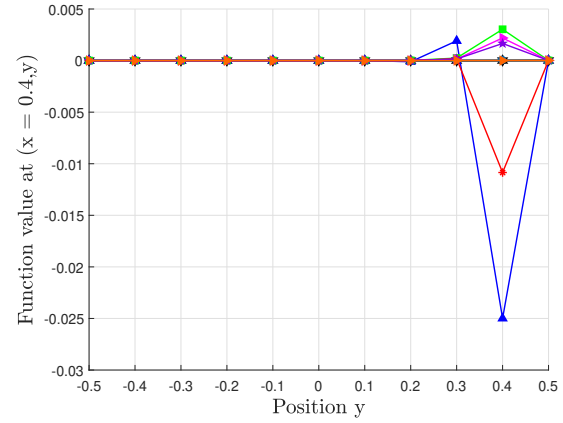
Considerando tais baixas razões $\lambda/Pe (= 0,1)$, as funções A e C apresentam baixas derivadas ao longo da direção do escoamento e moderadas na direção normal, de modo que tendem a representar situações de difusão na direção do fluxo cruzado. Enquanto isso, as funções B e D têm altas derivadas na fronteira de saída, onde existe uma relevante difusão contracorrente, sendo as funções praticamente nula a montante dessa região de contorno.

Para as funções A e C, os esquemas upwind e exponencial simples, embora altamente estáveis e livres de oscilações, confirmam-se como esquemas fortemente difusivos. Por outro lado, nas funções B e D, o exponencial simples ao lado do UNIFAES apresentam resultados que coincidem visualmente com a solução exata. Nestes casos, o LOADS mostra algumas oscilações, mas que ainda são menores do que as oscilações apresentadas pelos esquemas central e QUICK. Em sua investigação do LOADS, Prakash (1984) também identificou alguns casos de

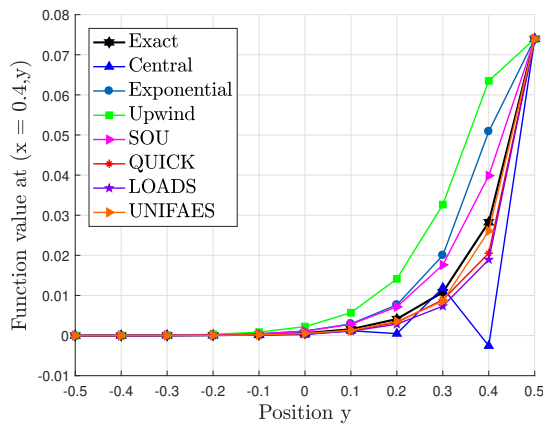
comportamento oscilatório. Devido à sua limitação a moderados números de Peclet, o esquema central mostra um comportamento oscilatório em todas as funções.



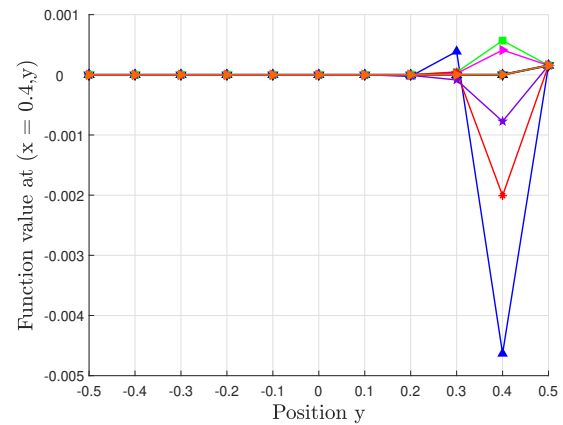
(a) Função A



(b) Função B



(c) Função C

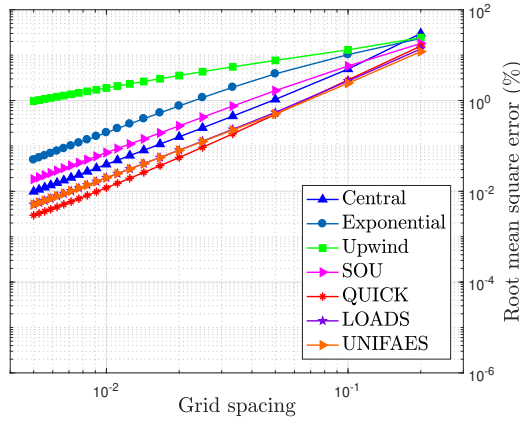


(d) Função D

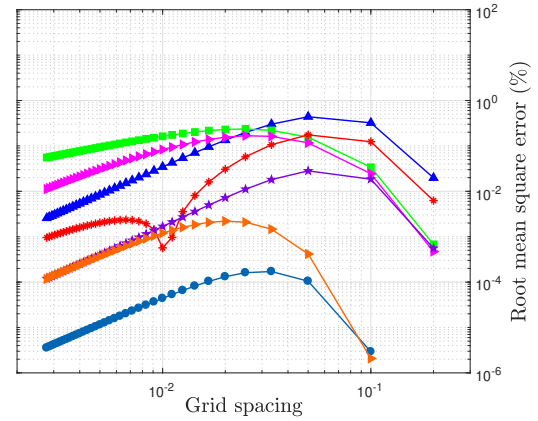
Figura B.6: Perfis exatos e numéricos para as funções A, B, C e D em $x = 0,4$, malha 10×10 , $Pe = 100$, $\lambda = 10$, $\theta = 22,5^\circ$.

Ambos os esquemas que contabilizam o termo fonte da equação geradora, UNIFAES e LOADS, juntamente com o esquema QUICK apresentam os melhores desempenhos em quase todas as funções. Na função A, os erros rms são 2,16%, 2,42% e 2,55%, respectivamente. Da mesma forma, os erros rms na função C são de 0,11%, 0,44% e 0,24%, respectivamente. No entanto, nas funções B e D, o QUICK é superado pelo UNIFAES e LOADS. O esquema UNIFAES comporta-se satisfatoriamente em todas as funções. Na função C, é claramente o melhor para o conjunto de parâmetros adotados.

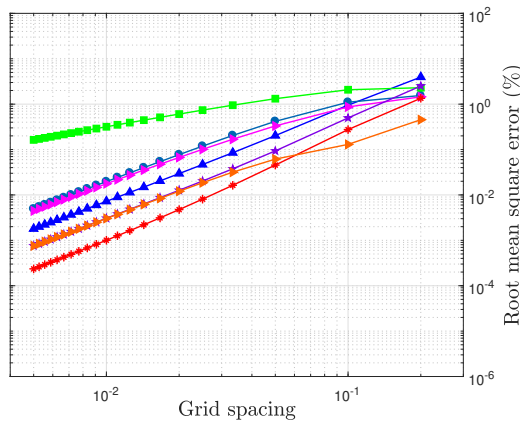
A Figura B.7 mostra o erro contra o refinamento para todos os esquemas. Os erros são apresentados pela média quadrática, expressos como uma porcentagem da diferença entre o máximo e o mínimo de cada função.



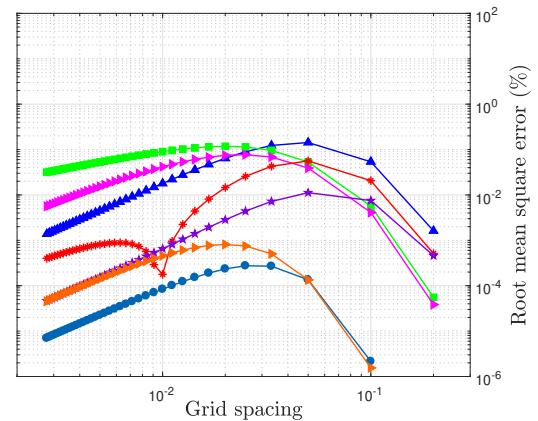
(a) Função A



(b) Função B



(c) Função C



(d) Função D

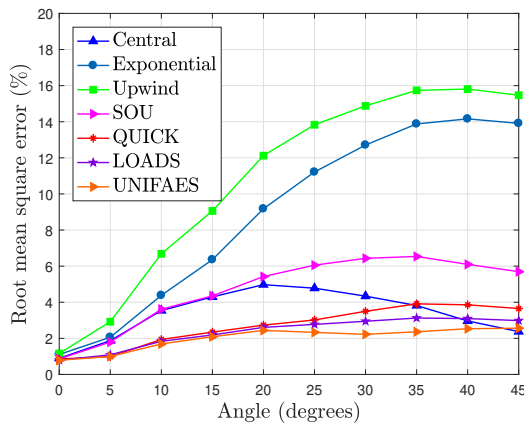
Figura B.7: Erro quadrático médio contra o refinamento para as funções A, B, C e D, $Pe = 100$, $\lambda = 10$, $\theta = 22,5^\circ$.

O esquema upwind apresenta os piores resultados em todas as funções, exceto em malhas grosseiras. Nas funções A e C, o comportamento quadrático de diminuição do erro com o refinamento é geralmente alcançado para uma malha de 40×40 volumes de controle. Observa-se também, nas funções B e D, um comportamento não-monotônico dos esquemas para malhas grosseiras. O esquema QUICK é o único a apresentar para malhas moderadamente refinadas. A ausência de monotonicidade fez com que o erro quadrático assintótico fosse alcançado apenas para malhas com refinamento a partir de 400×400 volumes de controle. Como pode ser visto na

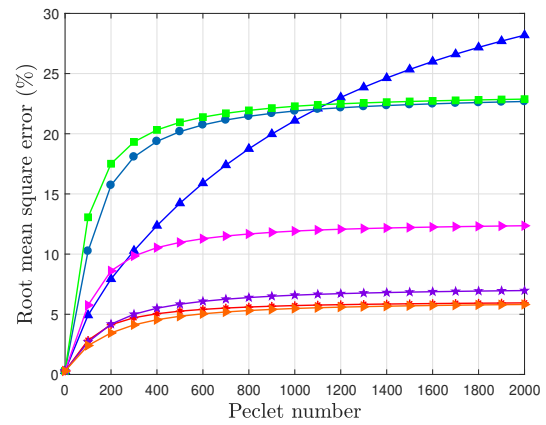
Figura B.7, o QUICK se mostra como um esquema acurado de segunda ordem. Isso é provado por uma análise formal do erro em série de Taylor na Seção B.5.

O upwind de segunda ordem exibe desempenho intermediário em todos os casos. Os esquemas UNIFAES, LOADS e QUICK apresentam os melhores resultados para a grande maioria das funções. Os erros assintóticos do UNIFAES e LOADS parecem coincidir em todos os casos. Nas funções A e C, o QUICK supera o UNIFAES e LOADS em acuidade.

A avaliação do efeito do ângulo entre o escoamento e as linhas da malha, nos vários esquemas, é mostrada na Figura B.8(a) para a função A, que apresenta o erro rms como uma função do ângulo θ . É importante mencionar que são obtidas soluções convergidas com todos os esquemas para qualquer ângulo θ . No entanto, a solução exata é melhor representada, por todos os esquemas, para o ângulo $\theta = 0^\circ$ com erros no intervalo de 0,7% a 1,04%. O esquema UNIFAES possui a menor dependência do ângulo, com os menores erros, sendo seguido de perto pelo LOADS. O erro máximo de cada esquema é sumarizado como segue: central = 4,97% para $\theta = 20^\circ$, exponencial simples = 14,15% para $\theta = 40^\circ$, upwind = 15,81% para $\theta = 40^\circ$, upwind de segunda ordem = 6,53% para $\theta = 35^\circ$, QUICK = 3,91% para $\theta = 35^\circ$, LOADS = 3,12% para $\theta = 35^\circ$ e UNIFAES = 2,56% para $\theta = 45^\circ$.



(a) $Pe = 100$



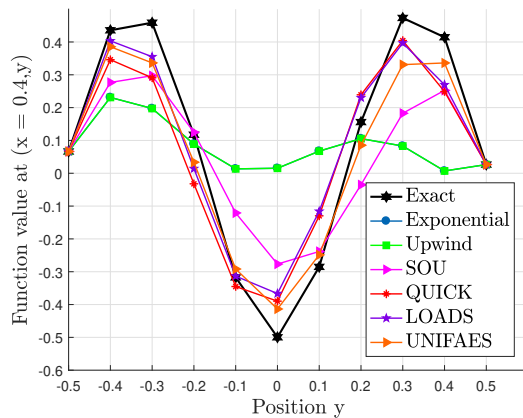
(b) $\theta = 22,5^\circ$

Figura B.8: Erro quadrático médio em função do ângulo θ e do número de Peclet (Pe) para a função A, malha 10×10 e $\lambda = 10$.

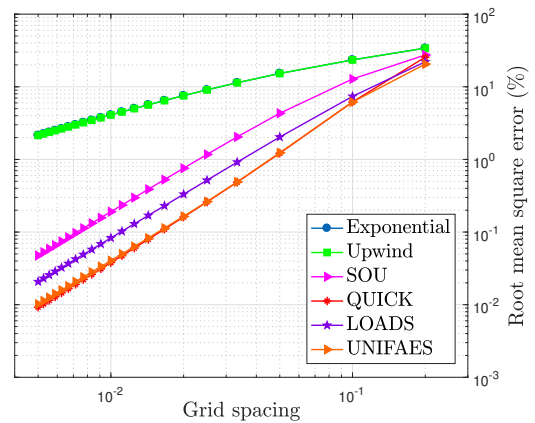
A Figura B.8(b) mostra o comportamento, para a função A, das soluções numéricas dos esquemas para um amplo intervalo de números de Peclet. O esquema UNIFAES é o menos afetado pelo aumento do número de Peclet, juntamente com os esquemas QUICK e LOADS, apresentando os menores erros. À medida que o número de Peclet aumenta, os erros rms do upwind e do exponencial simples tendem a coincidir. Pode-se observar que os erros da maioria

dos esquemas se tornam relativamente constantes à medida que o número de Peclet aumenta, exceto o esquema central, em que os erros continuam a crescer.

O desempenho dos esquemas para um alto número de Peclet (10^9), exceto o esquema central devido à sua estabilidade restrita, é mostrado na Figura B.9(a). Além disso, a Figura B.9(b) mostra as curvas dos erros contra o refinamento. Ambas as curvas referem-se à função A. Fica claro que, para números de Peclet elevados, os esquemas UNIFAES, LOADS e QUICK apresentam os melhores resultados, tornando mais evidente suas diferenças com os resultados obtidos pelos outros esquemas. Assim, os esquemas UNIFAES, LOADS e QUICK mostram excelente acuidade para todos os tipos de funções em todo o intervalo de números de Peclet analisados.



(a) malha 10×10



(b)

Figura B.9: Perfis exatos e numéricos e erro quadrático médio contra o refinamento para função A, $Pe = 10^9$, $\lambda = 10$ e $\theta = 22,5^\circ$.

B.4 Conclusões

Embora restrita ao caso de velocidade constante, a metodologia de testes empregada, variando o espectro de soluções, foi capaz de reproduzir muitas situações encontradas em problemas aplicados, tal como os efeitos do ângulo entre o escoamento e as linhas da malha, variações do número de Peclet e níveis distintos de suavidade.

Claramente, o desempenho de todos os esquemas depende da solução particular da equação de transporte. Reafirmando as conclusões dos diversos estudos anteriores, o esquema central

mostrou um comportamento oscilatório em todas as funções ϕ . Para altos números de Peclet, pode-se ver que os resultados do exponencial simples tendem para aqueles do esquema upwind, apesar que nas funções B e D, o exponencial simples exibiu uma ótima precisão nos resultados. Foi visto que o upwind de segunda ordem apresentou desempenho intermediário em todos os casos analisados. Resumindo os resultados para as baixas razões λ/Pe , os melhores desempenhos globais foram obtidos pelo UNIFAES, LOADS e QUICK, mostrando excelente acuidade para todos os tipos de funções ao longo de todo o intervalo de números de Peclet estudados. No entanto, o cálculo do termo fonte pelo UNIFAES é mais simples que o do LOADS. Em problemas transitórios e tridimensionais, o cálculo do termo fonte pelo LOADS demanda alto custo computacional. O esquema UNIFAES, por outro lado, não é computacionalmente caro. Também deve ser mencionado que o UNIFAES tem a vantagem de ser incondicionalmente estável para todos os números de Peclet, enquanto que o QUICK mostrou convergência não-monotônica para as funções B e D.

A relevância da convergência espacial monotônica está relacionada à necessidade do refinamento da malha para avaliação da acurácia, qualquer que seja o esquema empregado. Isto é exemplificado pelo uso da extrapolação de Richardson em alguns problemas. Esta extrapolação foi empregada com sucesso por Figueiredo e Llagostera (1999) e Figueiredo e Oliveira (2009a,b, 2011) usando o esquema central e UNIFAES. No entanto, algumas irregularidades foram observadas quando a extrapolação de Richardson foi empregada para avaliação do desempenho do esquema QUICK (Santos e Figueiredo, 2007). Isso pode ser atribuído ao seu comportamento não-monotônico.

B.5 Ordem de Acurácia do Esquema QUICK

Existe alguma controvérsia na literatura quanto à alegação da precisão de terceira ordem do esquema QUICK. Assim, a presente análise distinguirá dois possíveis casos para determinar a ordem de acurácia do esquema. Primeiro, considere a aproximação dada pela curva de interpolação como uma função cujo valor é definido na face do volume de controle. Uma expressão genérica pode ser aplicada para gerar uma família inteira de fórmulas definindo uma regra geral de interpolação para os valores da face do volume de controle. O valor da função na face e é definido a partir dos valores nos pontos da malha, a seguir:

$$\phi_e = \phi_P + \alpha(\phi_E - \phi_P) + \beta(\phi_P - \phi_W) \quad (\text{B.21})$$

Condições gerais podem ser escritas para que esta fórmula de interpolação seja acurada, pelo menos, de segunda ou de terceira ordem. Uma malha uniforme é assumida em toda análise. A escolha $\alpha = 1/2$ e $\beta = 0$ corresponde ao esquema central. A escolha $\alpha = \beta = 0$ reproduz o esquema upwind. Selecionando $\alpha = 0$ e $\beta = 1/2$ leva ao esquema upwind de segunda ordem. O esquema QUICK é obtido escolhendo os parâmetros $\alpha = 3/8$ e $\beta = 1/8$ resultando na primeira expressão da Eq. (B.6).

Portanto, o primeiro caso se concentra na derivação das condições para que a Eq. (B.21) seja, pelo menos, acurada de terceira ordem. Para isso, a análise do erro requer que os termos dos lados esquerdo e direito na Eq. (B.21), sejam expandidos em série de Taylor em torno do ponto P. Assumindo que a função ϕ seja suficientemente diferenciável, de acordo com a Figura B.2 tem-se:

$$\begin{aligned} \phi_e &= \phi_P + \frac{\partial \phi_P}{\partial x} \left(\frac{\Delta x}{2} \right) + \frac{\partial^2 \phi_P}{\partial x^2} \frac{1}{2!} \left(\frac{\Delta x}{2} \right)^2 + \frac{\partial^3 \phi_P}{\partial x^3} \frac{1}{3!} \left(\frac{\Delta x}{2} \right)^3 + \dots \\ \phi_E &= \phi_P + \frac{\partial \phi_P}{\partial x} (+\Delta x) + \frac{\partial^2 \phi_P}{\partial x^2} \frac{1}{2!} (+\Delta x)^2 + \frac{\partial^3 \phi_P}{\partial x^3} \frac{1}{3!} (+\Delta x)^3 + \dots \\ \phi_W &= \phi_P + \frac{\partial \phi_P}{\partial x} (-\Delta x) + \frac{\partial^2 \phi_P}{\partial x^2} \frac{1}{2!} (-\Delta x)^2 + \frac{\partial^3 \phi_P}{\partial x^3} \frac{1}{3!} (-\Delta x)^3 + \dots \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Substituindo as expressões da Eq. (B.22) na Eq. (B.21), conduz a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_P}{\partial x} \frac{\Delta x}{2} + \frac{\partial^2 \phi_P}{\partial x^2} \frac{\Delta x^2}{8} + \frac{\partial^3 \phi_P}{\partial x^3} \frac{\Delta x^3}{48} + \dots &= \frac{\partial \phi_P}{\partial x} (\alpha + \beta) \Delta x \\ &+ \frac{\partial^2 \phi_P}{\partial x^2} \left(\frac{\alpha}{2} - \frac{\beta}{2} \right) \Delta x^2 + \frac{\partial^3 \phi_P}{\partial x^3} \left(\frac{\alpha}{6} + \frac{\beta}{6} \right) \Delta x^3 + \dots \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Assim, as condições que a Eq. (B.23) deve respeitar para que seja, pelo menos, acurada de terceira ordem, são:

$$\begin{aligned} \alpha + \beta &= 1/2 \\ \alpha - \beta &= 1/4 \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

Resolvendo o sistema da Eq. (B.24), encontra-se os parâmetros $\alpha = 3/8$ e $\beta = 1/8$. Observe que esses parâmetros correspondem ao do esquema QUICK. Assim, prova-se que as expressões da Eq. (B.6) é de fato uma aproximação de terceira ordem para o valor da função ϕ nas faces do volume de controle. No entanto, quando se considera o operador $\partial/\partial x$ discretizado a partir de uma equação de transporte, ou seja, o análogo em volumes de controle da primeira derivada $(\phi_e - \phi_w)/\Delta x$, baseado apenas nos valores dos pontos da malha, a aproximação do QUICK para a primeira derivada é apenas acurada de segunda ordem, como mostrado a seguir.

Como descrito na Seção B.1.2, uma curva de interpolação parabólica é usada para aproximar os termos advectivos, enquanto que para os termos difusivos a diferenciação central é mantida. Assim, a atenção concentra-se apenas nos termos advectivos. Ao integrar e aplicar o teorema da divergência no termo advectivo, obtém-se o análogo, em volumes finitos, da primeira derivada, na forma:

$$\frac{1}{\Delta x} \int_w^e \frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} dx \cong \frac{1}{\Delta x} [(\rho u \phi)_e - (\rho u \phi)_w] \quad (\text{B.25})$$

O segundo caso emprega um procedimento clássico, usando o conceito de representação da primeira derivada $\partial\phi_P/\partial x$ no ponto central P e empregando a curva de interpolação parabólica ϕ , que é usada para a análise do erro por série de Taylor em um volume de controle unidirecional com espaçamento regular. Esta curva de interpolação ϕ assume a forma genérica:

$$\phi = a + bx + cx^2 \quad (\text{B.26})$$

Ao ajustar a expressão da Eq. (B.26), por exemplo, para os pontos WW, W e P (ver Figura B.2), segue-se que:

$$\phi = \phi_P + \left(\frac{3\phi_P - 4\phi_W + \phi_{WW}}{2\Delta x} \right) x + \left(\frac{\phi_P - 2\phi_W + \phi_{WW}}{2\Delta x^2} \right) x^2 \quad (\text{B.27})$$

Assim, para $x = \Delta x/2$ e $x = -\Delta x/2$ é possível avaliar o valor de ϕ nas faces e e w , respectivamente, resultando nas expressões da Eq. (B.6). Na presente análise, o coeficiente ρu , na Eq. (B.25), é considerado constante, portanto a atenção é voltada apenas para o fluxo advectivo líquido. Substituindo as expressões da Eq. (B.6) na Eq. (B.25) resulta em:

$$\frac{\phi_e - \phi_w}{\Delta x} = \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{3}{8}\phi_E + \frac{3}{8}\phi_P - \frac{7}{8}\phi_W + \frac{1}{8}\phi_{WW} \right] \quad (\text{B.28})$$

Substituindo as duas últimas expressões da Eq. (B.22) e a referente expansão em série de Taylor de ϕ_{WW} , na Eq. (B.28) obtêm-se:

$$\frac{\phi_e - \phi_w}{\Delta x} = \frac{\partial \phi_P}{\partial x} + \frac{\partial^3 \phi_P}{\partial x^3} \frac{\Delta x^2}{24} + \frac{\partial^4 \phi_P}{\partial x^4} \frac{\Delta x^3}{16} + \dots \quad (\text{B.29})$$

Portanto, conclui-se que o esquema QUICK produz uma estimativa do termo advectivo $\partial \phi_P / \partial x$ (onde o coeficiente ρu foi suprimido para simplicidade), dentro da abordagem de volumes finitos, de segunda ordem. O esquema QUICK leva a um erro de truncamento dominante igual a $-(\partial^3 \phi_P / \partial x^3) \Delta x^2 / 24$.

O perfil em degrau, em volumes finitos, aproxima o valor da função na face do volume de controle com erro de primeira ordem e a derivada também com erro de primeira ordem. Analogamente, o perfil linear por partes aproxima a função na face do volume de controle e a derivada com erro de segunda ordem. No entanto, a mesma analogia não pode ser aplicada ao esquema QUICK. Este resultado pode ser provado indiretamente através do teorema da equivalência de Lax (Richtmyer e Morton, 1994), que afirma que para a solução numérica de um problema linear, usando uma discretização consistente, a estabilidade do método numérico é uma condição necessária e suficiente para convergência. O erro de consistência de um método numérico é obtido a partir da análise de erro em série de Taylor, já o erro de convergência é o resultado do refinamento da malha. Assim, pelo teorema de Lax, se um esquema numérico tem um erro de consistência de segunda ordem e é estável, então o esquema também tem erro de convergência de segunda ordem. Esta afirmação reforça ainda mais a análise da ordem de acurácia do esquema QUICK realizado neste seção.