

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL
PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

**Análise e implementação de esquemas upwind
polinomiais e suas aplicações em escoamentos de
fluidos incompressíveis**

Mateus Teixeira Magalhães

JUIZ DE FORA
DEZEMBRO, 2021

Análise e implementação de esquemas upwind polinomiais e suas aplicações em escoamentos de fluidos incompressíveis

MATEUS TEIXEIRA MAGALHÃES

Universidade Federal de Juiz de Fora
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional
Mestrado em Modelagem Computacional

Orientador: Prof. Dr. Rafael Alves Bonfim de Queiroz

Coorientador: Prof. Dr. Bernardo Martins Rocha

JUIZ DE FORA
DEZEMBRO, 2021

Ficha catalográfica elaborada através do programa de geração automática da Biblioteca Universitária da UFJF, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Teixeira Magalhães, Mateus.

Análise e implementação de esquemas upwind polinomiais e suas aplicações em escoamentos de fluidos incompressíveis / Mateus Teixeira Magalhães. -- 2021.

91 p.

Orientador: Rafael Alves Bonfim de Queiroz

Coorientador: Bernardo Martins Rocha

Dissertação (mestrado acadêmico) - Universidade Federal de Juiz de Fora, ICE/Engenharia. Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, 2021.

1. esquema upwind polinomial. 2. limitador de fluxo. 3. escoamento incompressível. 4. critério TVD/CBC. I. Alves Bonfim de Queiroz, Rafael, orient. II. Martins Rocha, Bernardo, coorient. III. Título.

Mateus Teixeira Magalhães

Análise e implementação de esquemas upwind polinomiais e suas aplicações em escoamentos de fluidos incompressíveis

Dissertação
apresentada ao
Programa de Pós-
Graduação em
Modelagem
Computacional
da Universidade
Federal de Juiz de
Fora como requisito
parcial à obtenção do
título de Mestre em
Modelagem
Computacional. Área
de concentração:
Modelagem
Computacional.

Aprovada em 20 de dezembro de 2021.

BANCA EXAMINADORA

Prof(a) Dr(a). Rafael Alves Bonfim de Queiroz - Orientador

Universidade Federal de Ouro Preto

Prof(a) Dr(a). Bernardo Martins Rocha - Coorientador

Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof(a) Dr(a). Eliandro Rodrigues Cirilo

Universidade Estadual de Londrina

Prof(a) Dr(a). Patrícia Habib Hallak

Universidade Federal de Juiz de Fora

Juiz de Fora, 07/12/2021.



Documento assinado eletronicamente por **Rafael Alves Bonfim de Queiroz, Usuário Externo**, em 20/12/2021, às 20:27, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Bernardo Martins Rocha, Professor(a)**, em 20/12/2021, às 20:53, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Patricia Habib Hallak, Professor(a)**, em 20/12/2021, às 21:05, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Eliandro Rodrigues Cirilo, Usuário Externo**, em 21/12/2021, às 10:51, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no Portal do SEI-Ufjf (www2.ufjf.br/SEI) através do ícone Conferência de Documentos, informando o código verificador **0607084** e o código CRC **D436A237**.

Resumo

Diversos problemas científicos e de engenharia sobre fluidos são caracterizados por escoamentos convectivos. Problemas dessa natureza são desafiadores e exigem o desenvolvimento de esquemas numéricos eficientes, robustos e precisos. Dessa forma, o tema tem sido uma das principais preocupações da comunidade científica na área de CFD (“Computational Fluid Dynamics”). Soluções numéricas para esse tipo de problema envolvem, entre outros, o desenvolvimento de esquemas numéricos para tratamento do termo convectivo e modelagem de turbulência.

O presente trabalho visa contribuir no estudo numérico e implementação de esquemas *upwind* polinomiais para tratamento do termo convectivo de equações diferenciais parciais e suas aplicações em escoamento de fluidos incompressíveis. Para tanto, este trabalho tem como objetivo a comparação dos esquemas *upwind* polinomiais TOPUS (“Third-Order Polynomial Upwind Scheme”), FSFL (“Flexible and Symmetric Flux Limiter”), SDPUS-C1 (“Six-Degree Polynomial Upwind Scheme”) e EPUS (“Eight-degree Polynomial Upwind Scheme”) entre si utilizando experimentos computacionais com variação de parâmetros. Problemas unidimensionais são resolvidos numericamente através de implementação computacional utilizando o método de diferenças finitas e formulação em variáveis normalizadas. Simulações bidimensionais de escoamento de fluidos são realizadas utilizando o OpenFOAM, através do método de volumes finitos e formulação em limitadores de fluxo para os esquemas. Neste trabalho tem-se como objetivo o estudo e implementação de esquemas *upwind* polinomiais avançados bem como a sua incorporação na ferramenta OpenFoam.

Uma contribuição importante deste trabalho é a implementação e estudo do esquema FSFL através de experimentos computacionais, fornecendo novos resultados e comparações não vistas na literatura até então. Os resultados obtidos com os experimentos realizados mostram que ambos os esquemas TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 e EPUS fornecem bons resultados para o tratamento do termo convectivo de equações de transporte. Em destaque o esquema EPUS obteve um melhor desempenho em termos de exatidão e o esquema TOPUS se destacou ao atingir um resíduo temporal mínimo com menos iterações. Além disso

o esquema SDPUS-C1 se mostrou muito efetivo tanto em termos de exatidão quanto de iterações para atingir um resíduo temporal mínimo estabelecido.

Palavras-chave: esquema *upwind* polinomial. limitador de fluxo. escoamento incompressível. critério TVD/CBC.

Abstract

Several scientific and engineering problems about fluids are characterized by convective flows. Problems of this nature are challenging and require the development of efficient, robust and accurate numerical schemes. Thus, the topic has been one of the main concerns of the scientific community in the area of CFD (Computational Fluid Dynamics). Numerical solutions for this type of problem involve, among others, the development of numerical schemes for the treatment of the convective term and turbulence modeling.

The present work aims to contribute to the numerical study and implementation of polynomial *upwind* schemes for the treatment of the convective term of partial differential equations and their applications in the flow of incompressible fluids. Therefore, this work aims to compare the polynomial *upwind* schemes TOPUS (“Third-Order Polynomial Upwind Scheme”), FSFL (“Flexible and Symmetric Flux Limiter”), SDPUS-C1 (“Six-Degree Polynomial Upwind Scheme”) and EPUS (“Eight-degree Polynomial Upwind Scheme”) together using computational experiments with parameter variation. One-dimensional problems are numerically solved through computational implementation using the finite difference method and formulation in normalized variables. Two-dimensional fluid flow simulations are performed using OpenFOAM, through the finite volume method and formulation in flow limiters for the schemes. This work aims to study and implement advanced polynomial *upwind* schemes as well as their incorporation into the OpenFoam tool.

An important contribution of this work is the implementation and study of the FSFL scheme through computational experiments, providing new results and comparisons not seen in the literature so far. The results obtained with the performed experiments show that both the TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 and EPUS schemes provide good results for the treatment of the convective term of transport equations. The EPUS scheme performed better in terms of accuracy and the TOPUS scheme stood out by achieving a minimum temporal residual with fewer iterations. In addition, the SDPUS-C1 scheme proved to be very effective both in terms of accuracy and iterations to reach an established minimum time residual.

Keywords: polynomial upwind scheme. flow limiter. incompressible flow. TVD / CBC criterion.

Agradecimentos

Dedico este trabalho aos meus colegas de curso que estiveram comigo nesta caminhada.

Ao Grupo de Educação Tutorial da Engenharia computacional que contribuiu fortemente para a minha formação.

Aos meus orientadores que estiveram sempre dispostos a me ajudar ao longo do desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus familiares, principalmente à minha mãe e minha avó, que sempre me apoiaram e possibilitaram que eu conseguisse me dedicar aos estudos.

Ao meu pai que veio a falecer no final de 2020.

Conteúdo

Lista de Figuras	7
Lista de Tabelas	10
Lista de Símbolos e Notações	11
Lista de Abreviações	12
1 Introdução	13
2 Modelagem Matemática	16
2.1 Equação de Advecção	16
2.2 Equação da Convecção-Difusão	19
2.3 Equações de Navier-Stokes	19
2.4 Estimativas de Erros	22
3 Esquemas <i>upwind</i> de Alta Resolução	24
3.1 Formulação de Variáveis Normalizadas	24
3.2 Formulação de Limitador de Fluxo	29
3.3 Esquemas <i>upwind</i> Polinomiais	32
3.3.1 TOPUS	32
3.3.2 FSFL	34
3.3.3 SDPUS-C1	36
3.3.4 EPUS	38
4 Modelagem Computacional	41
4.1 Discretização dos Termos Convectivos	41
4.2 OpenFOAM	45
5 Resolução Numérica de Problemas 1D	47
5.1 Advecção Linear	47
5.2 Camada Limite	58
6 Escoamentos 2D de Fluidos Incompressíveis	62
6.1 Escoamento em uma Cavidade	63
6.2 Escoamento de Poiseuille	75
6.3 Códigos implementados	78
7 Conclusões	80

Lista de Figuras

2.1	Condição CI1 definida por (2.5).	18
2.2	Condição CI2 definida por (2.6).	18
2.3	Condição CI3 definida por (2.7).	18
2.4	Ilustração do problema do escoamento em uma cavidade.	21
2.5	Ilustração do escoamento de Poiseuille em Regime Laminar	22
3.1	Posições D , R e U em relação à face computacional f , a direção da velocidade v_f fornece o sentido do escoamento.	24
3.2	Esquemas convectivos de alta resolução no NVD.	26
3.3	Regiões importantes no NVD: (a) CBC e (b) TVD.	28
3.4	Esquemas ADBQUICKEST, CUBISTA, VONOS e WACEB na região TVD de Sweby.	31
3.5	Curvas características do esquema TOPUS: (a) região TVD de Harten [36], (b) limitador na região TVD de Sweby [61].	34
3.6	Curvas características do esquema FSFL: (a) região TVD de Harten, (b) limitador na região TVD de Sweby.	36
3.7	Curvas características do esquema SDPUS-C1: (a) região TVD de Harten, (b) limitador na região TVD de Sweby.	38
3.8	Curvas características do esquema EPUS: (a) região TVD de Harten, (b) limitador na região TVD de Sweby.	39
4.1	Posições D , R e U em relação a face computacional f para velocidade de convecção $v_f \geq 0$	43
4.2	Posições D , R e U em relação a face computacional f para velocidade de convecção $v_f < 0$	43
4.3	Posições D , R e U em relação a face computacional g para velocidade de convecção $v_g \geq 0$	44
4.4	Posições D , R e U em relação a face computacional g para velocidade de convecção $v_g < 0$	44
5.1	Resultados numéricos para $\theta = 0,05$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.5).	49
5.2	Resultados numéricos para $\theta = 0,5$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.5).	50
5.3	Erros obtidos $\ E\ _2$ (equação 2.25) para $\theta = 0,05$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.5).	51
5.4	Erros obtidos $\ E\ _2$ (equação 2.25) para $\theta = 0,5$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.5).	51
5.5	Resultados numéricos para $\theta = 0,05$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.6).	52
5.6	Resultados numéricos para $\theta = 0,5$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.6).	53

5.7	Erros obtidos $\ E\ _2$ (equação 2.25) para $\theta = 0,05$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.6).	54
5.8	Erros obtidos $\ E\ _2$ (equação 2.25) para $\theta = 0,5$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.6).	54
5.9	Resultados numéricos para $\theta = 0,05$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.7). . .	55
5.10	Resultados numéricos para $\theta = 0,5$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.7). . .	56
5.11	Erros obtidos $\ E\ _2$ (equação 2.25) para $\theta = 0,05$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.7).	57
5.12	Erros obtidos $\ E\ _2$ (equação 2.25) para $\theta = 0,5$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.7).	57
5.13	Soluções numéricas obtidas comparado com solução analítica (linhas contínuas) para diferentes números de Reynolds e suas respectivas malhas.	59
6.1	Ilustração do problema do escoamento em uma cavidade.	63
6.2	Magnitude da velocidade \mathbf{u} (valores entre 0 e 1 m/s , do azul ao vermelho) e linhas de corrente para Reynolds 1000 (a esquerda) e 7500 (a direita), para os esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), tempo final de 300 segundos.	65
6.3	Solução numérica (linhas contínuas) e solução de referência [34] (pontos) da componente x da velocidade em $x = 0,5$ ao longo do eixo y para Reynolds 1000: (a) TOPUS, (b) FSFL, (c) SDPUS-C1 e (d) EPUS, utilizando uma malha de 128×128 pontos, tempo final de 300 segundos.	66
6.4	Solução numérica (linhas contínuas) e solução de referência [34] (pontos) da componente y da velocidade em $y = 0,5$ ao longo do eixo x para Reynolds 1000: (a) TOPUS, (b) FSFL, (c) SDPUS-C1 e (d) EPUS, utilizando uma malha de 128×128 pontos, tempo final de 300 segundos.	67
6.5	Solução numérica (linhas contínuas) e solução de referência [34] (pontos) da componente x da velocidade em $x = 0,5$ ao longo do eixo y para Reynolds 7500: (a) TOPUS, (b) FSFL, (c) SDPUS-C1 e (d) EPUS, utilizando uma malha de 128×128 pontos, tempo final de 300 segundos.	68
6.6	Solução numérica (linhas contínuas) e solução de referência [34] (pontos) da componente y da velocidade em $y = 0,5$ ao longo do eixo x para Reynolds 7500: (a) TOPUS, (b) FSFL, (c) SDPUS-C1 e (d) EPUS, utilizando uma malha de 128×128 pontos, tempo final de 300 segundos.	69
6.7	Erro $\ E\ _2$ entre solução numérica e os dados de referência [34] no tempo final de 300 segundos.	71
6.8	Erro entre solução numérica e solução de referência [26] para a componente x (a) e y (b) da velocidade ao variar o número de Reynolds mantendo uma malha fixa de 128×128 no tempo final de 300 segundos.	72
6.9	Esquema EPUS para vários números de Reynolds. Magnitude de velocidade de 0 a 1 m/s no tempo final de 300 segundos.	73
6.10	Número de iterações considerando um resíduo inicial mínimo de 10^{-3} para cada esquema em diferentes valores de Reynolds, 128×128	74
6.11	Escoamento de Poiseuille em Regime Laminar	76

6.12 Magnitude da velocidade no centro do canal, Reynolds 100, malha de 100×10 pontos.	76
6.13 Magnitude da velocidade \mathbf{u} para os esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d).	77

Lista de Tabelas

5.1	Esquema e valor de parâmetro livre que apresentou resultados mais próximos da solução analítica (menor erro) para cada condição inicial e número de Courant.	58
5.2	Ordem de convergência para os esquemas TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 e EPUS, .	60
6.1	Erro $\ E\ _2$ entre as solução numérica e dados de referência [34] no tempo final de 300 segundos.	70
6.2	Ordem de convergência para os esquemas TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 e EPUS. .	78

Lista de Símbolos e Notações

U_x, U_y :	componentes da velocidade no sistema de coordenadas cartesianas 2D
x, y :	coordenadas espaciais no sistema de coordenadas cartesianas 2D
ϕ :	variável genérica não normalizada
$\hat{\phi}$:	variável genérica normalizada
ψ :	função limitadora de fluxo
R :	posição “Remote-Upstream”
U :	posição “Upstream”
D :	posição “Downstream”
Re :	número de Reynolds
θ :	número de Courant
1D:	unidimensional
2D:	bidimensional
α	parâmetro livre do esquema TOPUS
β	parâmetro livre do esquema FSFL
γ	parâmetro livre do esquema SDPUS-C1
λ	parâmetro livre do esquema EPUS

Lista de Abreviações

TOPUS	“Third-Order Polynomial Upwind Scheme”
FSFL	“Flexible and Symmetric Flux Limiter”
SDPUS-C1	“Six-Degree Polynomial Upwind Scheme of C1 Class”
EPUS	“Eight-degree Polynomial Upwind Scheme”
ADBQUICKEST	“Adaptative Bounded QUICK with Estimated Streaming Terms”
CUBISTA	“Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection”
VONOS	“Variable-Order Non-Oscillatory Scheme”
WACEB	“Weighted Average Coefficients Ensuring Boundedness”
TVD	“Total Variation Diminishing”
FOU	“First-Order Upwind”
CBC	“Convection Boundedness Criterion”
CFD	“Computational Fluid Dynamics”
NV	“Normalized Variable”
NVD	“Normalized Variable Diagram”
NVF	“Normalized Variable Formulation”
OpenFOAM	“Open-source Field Operation And Manipulation”

1 Introdução

Problemas envolvendo escoamento de fluidos estão presentes em diversas aplicações científicas e de engenharia e muitas vezes são interdisciplinares englobando áreas da matemática, física, engenharia entre outras. O escoamento de fluidos é descrito matematicamente por equações diferenciais modeladas através leis de conservação e princípios de balanço. Muitos destes problemas são caracterizados por um escoamento convectivo, especialmente em regimes turbulentos. Problemas dessa natureza são desafiadores e exigem o desenvolvimento e utilização de métodos numéricos. Por esta razão tais problemas tem sido utilizados como um dos principais temas discutidos pela comunidade científica na área de CFD (“Computational Fluid Dynamics”).

O sucesso na abordagem de problemas de natureza convectiva pode ser obtido através de diversas técnicas, entre elas têm-se: i) desenvolvimento de esquemas *upwind* de alta resolução; e ii) modelagem de turbulência. Esquemas *upwind* são técnicas numéricas especializadas na aproximação de termos convectivos em equações diferenciais, tais como as equações de Navier-Stokes. Diz-se que são de alta ordem caso sua ordem de convergência seja maior ou igual a 2. Esquemas *upwind* tem como ideia base a utilização de esquemas numéricos tão precisos quanto possível em regiões suaves e ao mesmo tempo adicionar dissipação numérica controlada em regiões de gradiente elevado. Com esses esquemas é possível manter a estabilidade da solução numérica, capturar discontinuidades e choques, além de conseguir convergência, sendo esquemas computacionalmente simples e econômicos. Uma estratégia bastante comum [19] para se atingir estes objetivos tem sido a combinação de variáveis normalizadas de Leonard [39] ou limitadores de fluxo [61] com condições para estabilidade não linear TVD (“Total Variation Diminishing”) de Harten [36] e/ou Sweby [61] além do critério CBC (“Convection Boundedness Criterion”) de Gaskell e Lau [31]. Com o critério TVD visa-se conseguir variações limitadas no tempo para propriedades físicas, além de impor um ajuste automático dos esquemas de acordo com os gradientes locais, já com o critério CBC visa-se produzir soluções limitadas.

Neste trabalho visa-se o tratamento numérico de problemas convectivos através do

uso de esquemas *upwind* polinomiais, cuja formulação é feita através de polinômios. Neste sentido, este trabalho tem como principal objeto de estudo esquemas *upwind* polinomiais e suas aplicações em escoamento de fluidos incompressíveis, tendo como foco, em particular, os esquemas TOPUS [51], FSFL [51], SDPUS-C1 [42] e EPUS [42]. Como principal motivação deste trabalho tem-se o estudo e experimentação destes esquemas, a comparação destes esquemas entre si e com outros resultados da literatura e também a contribuição na implementação destes esquemas através de códigos próprios, além da contribuição na implementação de esquemas na ferramenta OpenFOAM [3].

Problemas unidimensionais (1D) são resolvidos numericamente utilizando o método de diferenças finitas e a implementação dos esquemas *upwind* através de variáveis normalizadas. Problemas bidimensionais (2D) de escoamento de fluidos incompressíveis também são abordados utilizando a ferramenta OpenFOAM através do método de volumes finitos e implementação de limitadores de fluxo dos esquemas.

Este trabalho está dividido em 7 capítulos, separados de forma que o capítulo 2 apresenta a modelagem matemática com equações, leis de conservação e condições que descrevem os problemas de escoamento de fluidos abordados. No capítulo 3 são apresentados os conceitos essenciais para o entendimento de esquemas *upwind* de forma geral bem como suas formulações através de variáveis normalizadas e limitadores de fluxo. Após a apresentação de tais conceitos e formulações, são apresentadas as formulações por variáveis normalizadas e limitadores de fluxo para cada um dos esquemas em estudo, TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 e EPUS, bem como o comportamento de cada esquema em relação aos critérios TVD e CBC. No capítulo 4 são apresentados os conceitos relacionados a modelagem computacional e solução numérica dos problemas de escoamento de fluidos abordados, descrições e informações sobre os métodos utilizados, implementações e sobre a ferramenta OpenFOAM estão presentes neste capítulo. No capítulo 5 são apresentados resultados numéricos e comparações com soluções analíticas para diversos problemas 1D através do método de diferenças finitas e formulação dos esquemas em variáveis normalizadas. No capítulo 6 são apresentados os resultados obtidos em experimentos computacionais para problemas 2D de escoamento de fluidos incompressíveis utilizando a ferramenta OpenFOAM e formulações em limitadores de fluxo para os esquemas em estudo. Por fim, o capítulo 7 sintetiza

observações e conclusões a cerca do estudo feito e dos resultados obtidos, levantando vantagens e desvantagens de cada esquema entre si e em comparação com a literatura. O texto se encerra com as referências bibliográficas.

2 Modelagem Matemática

Neste capítulo são apresentadas as Equações Diferenciais Parciais (EDPs) básicas para testar o desempenho dos esquemas *upwind* polinomiais, objeto dessa dissertação.

2.1 Equação de Advecção

Para a simulação do transporte de escalares, o seguinte modelo 1D é adotado [49]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (2.1)$$

com condição inicial

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in [x_L, x_R], \quad (2.2)$$

e condição de contorno

$$u(x_L, t) = u_L, \quad u(x_R, t) = u_R \quad (u_L \text{ e } u_R \text{ são constantes}), \quad (2.3)$$

em que t é o tempo; u é a variável dependente, assemelhando-se a velocidade de um escoamento num meio fluido; a é constante; x_R e x_L são, respectivamente, os extremos direito e esquerdo do domínio 1D.

A solução exata de (2.1) é dada por [44]:

$$u(x, t) = u_0(x - at). \quad (2.4)$$

Nos experimentos numéricos, três condições numéricas diferentes $u(x, 0) = u_0(x)$ são adotadas para resolver (2.1), a saber:

- Condição inicial 1 (CI1) [38]:

$$u_0(x) = \begin{cases} e^{-\log(50)\left(\frac{x-0.15}{0.05}\right)^2} & x \in [0, 0.2), \\ 1, & x \in (0.3, 0.4), \\ 20x - 10, & x \in (0.5, 0.55), \\ 12 - 20x, & x \in [0.55, 0.6), \\ \sqrt{1 - \left(\frac{x-0.75}{0.05}\right)^2}, & x \in (0.7, 0.8), \\ 0, & x \notin S = [0, 0.2) \cup (0.3, 0.4) \cup (0.5, 0.55) \cup [0.55, 0.6) \cup (0.7, 0.8), \end{cases} \quad (2.5)$$

- Condição inicial 2 (CI2) [69]:

$$u_0(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0, 0.2], \\ 4x - 0.6, & x \in (0.2, 0.4], \\ -4x + 2.6, & x \in (0.4, 0.6], \\ 1, & x \in (0.6, 0.8], \\ 0, & x \in S = [-1, 0) \cup (0.8, 1], \end{cases} \quad (2.6)$$

- Condição inicial 3 (CI3) [35]:

$$u_0(x) = \begin{cases} -x \sin\left(\frac{3\pi x^2}{2}\right), & x \in [-1, -1/3], \\ |\sin(2\pi x)|, & x \in (-1/3, 1/3), \\ 2x - 1 - \frac{1}{6} \sin(3\pi x), & x \in [1/3, 1], \end{cases} \quad (2.7)$$

As condições (CI1), (CI2) e (CI3) são representadas nas Figuras 2.1, 2.2 e 2.3, respectivamente. Estas condições iniciais foram escolhidas por apresentarem regiões de descontinuidade e picos, representando um desafio numérico mesmo quando utilizadas em problemas unidimensionais simples, como o problema em questão.

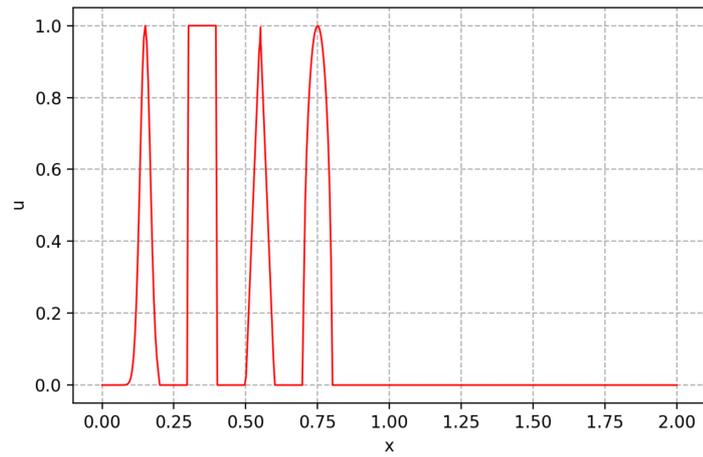


Figura 2.1: Condição CI1 definida por (2.5).

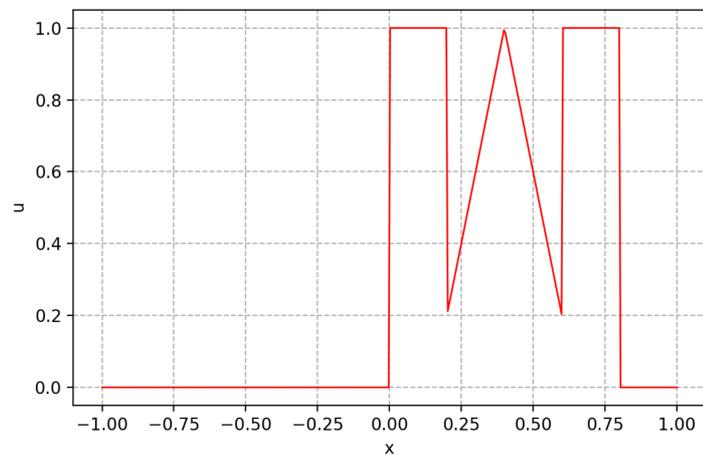


Figura 2.2: Condição CI2 definida por (2.6).

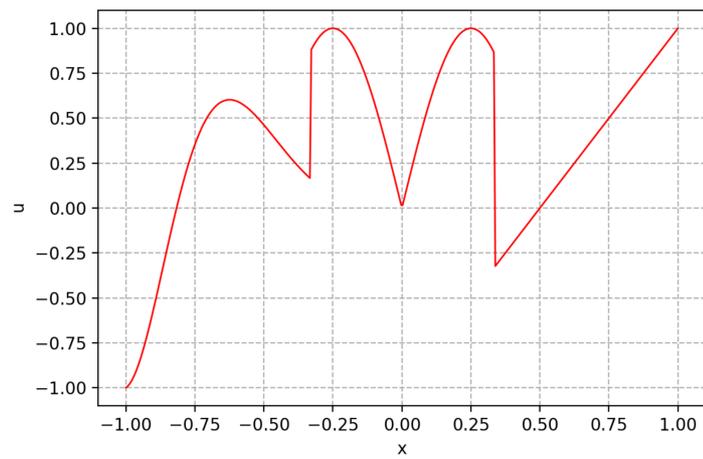


Figura 2.3: Condição CI3 definida por (2.7).

2.2 Equação da Convecção-Difusão

De modo geral, a equação de convecção-difusão 1D é expressa por [49]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (f(u)) = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (2.8)$$

com condição inicial

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in [x_L, x_R], \quad (2.9)$$

e condição de contorno

$$u(x_L, t) = u_L, \quad u(x_R, t) = u_R \quad (u_L \text{ e } u_R \text{ são constantes}). \quad (2.10)$$

Em (2.8), $f(u)$ é a função fluxo, ν é o coeficiente de viscosidade (constante).

Em particular, neste trabalho, considera-se nas simulações condições que resultam em uma equação da camada limite (boundary layer [52]) que é obtida considerando (2.8) com

$$\nu > 0 \quad \text{e} \quad f(u) = au, \quad a - \text{constante}. \quad (2.11)$$

Assim, reescreve-se (2.8) desta forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial (au)}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (2.12)$$

A equação (2.12) com $a = 1$, condição inicial $u(x, 0) = 0$, e condições de contornos $u(0, t) = \tanh\left(\frac{0.25}{\nu}\right)$ e $u(1, t) = -\tanh\left(\frac{0.25}{\nu}\right)$ apresenta a solução analítica em regime permanente dada por [14]:

$$u(x) = \frac{(1 - \exp(\frac{x}{\nu}))}{(1 - \exp(\frac{1}{\nu}))}, \quad x \in [0, 1], \quad (2.13)$$

onde $\nu = \frac{1}{Re}$ e Re denota o número de Reynolds.

2.3 Equações de Navier-Stokes

No caso em que o fluido é considerado um meio homogêneo incompressível, têm-se que a massa específica $\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_0$ das partículas não varia durante o seu movimento e as proprie-

dades de transporte são constantes [64, 48]. escoamentos de fluidos com essa propriedade de massa específica são chamados de escoamentos incompressíveis e são modelados matematicamente através de equações específicas.

As equações matemáticas das leis físicas de conservação, consideradas para a simulação de escoamentos em regime laminar, neste trabalho, são as equações instantâneas de Navier-Stokes e continuidade adimensionais, dadas por

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{Fr^2} g_i, \quad i = 1, 2, \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.15)$$

nos quais u_i é a i -ésima componente do campo de velocidade, p é a pressão cinemática (pressão dividida pela massa específica), $Re = LU_0/\nu$ e $Fr = U_0/\sqrt{L|g|}$ são, respectivamente, os números de Reynolds e Froude, e g_i é a i -ésima componente da aceleração gravitacional. O parâmetro ν é o coeficiente de viscosidade cinemática molecular (constante) do fluido dado por $\nu = \mu/\rho$ (μ é a viscosidade dinâmica do fluido), e U_0 e L são as escalas de velocidade e comprimento característicos, respectivamente.

As condições de contorno consideradas, neste trabalho, para resolver o sistema formado por (2.14) e (2.15) são:

- Condição de contorno de entrada de fluido:

$$\mathbf{u}_n = U_0, \quad \mathbf{u}_t = 0, \quad (2.16)$$

em que \mathbf{u}_n é a velocidade normal ao contorno e \mathbf{u}_t é a velocidade tangencial ao contorno;

- Condição de contorno de saída de fluido:

$$\frac{\partial \mathbf{u}_n}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial \mathbf{u}_t}{\partial n} = 0, \quad (2.17)$$

em que n e t denotam direções normais e tangenciais à entrada e à saída, respectivamente;

- Condição de contorno sem escorregamento na superfície rígida:

$$\mathbf{u}_t = 0, \quad \mathbf{u}_n = 0; \quad (2.18)$$

- Condição de contorno com escorregamento na superfície rígida:

$$\mathbf{u}_n = 0, \quad \frac{\partial \mathbf{u}_t}{\partial n} = 0. \quad (2.19)$$

Em específico, considerando o escoamento em uma cavidade em duas dimensões (2D), cuja geometria é mostrada na Figura 2.4,

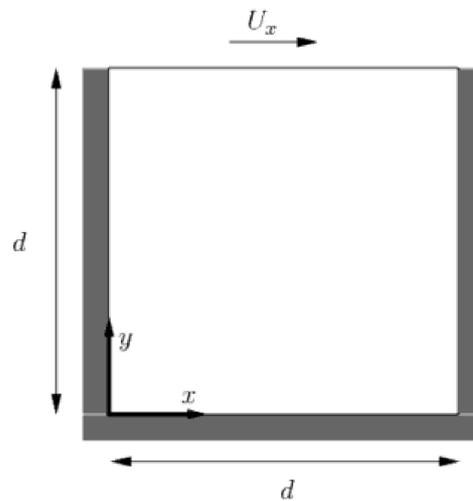


Figura 2.4: Ilustração do problema do escoamento em uma cavidade.

adotam-se as condições de contorno:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= (U_x, 0) \quad \text{e} \quad p = 0 \quad \text{em} \quad y = d \\ \mathbf{u} &= (0, 0), \quad p = 0 \quad \text{em} \quad y = 0, \quad x = 0 \quad \text{e} \quad x = d \end{aligned} \quad (2.20)$$

Para este problema, a condição inicial é expressa por:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= (0, 0), \\ p &= 0. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Para o problema do escoamento de Poiseuille, ilustrado na Figura 2.5, têm-se a condição inicial:



Figura 2.5: Ilustração do escoamento de Poiseuille em Regime Laminar

$$\mathbf{u} = (0, 0) \quad \text{e} \quad p = 0, \quad (2.22)$$

e a condição de contorno:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= (U_x, 0) \quad \text{e} \quad \nabla p = 0 \quad \text{na parede esquerda do tubo ("inflow"),} \\ p &= 0 \quad \text{e} \quad \nabla \mathbf{u} = 0 \quad \text{na parede direita ("outflow"),} \\ \mathbf{u} &= (0, 0) \quad \text{e} \quad \nabla p = 0 \quad \text{nas demais paredes.} \end{aligned} \quad (2.23)$$

2.4 Estimativas de Erros

Neste trabalho, os erros entre as soluções numérica e exata são calculados pelas seguintes relações [49]:

$$\|E\|_1 = \frac{\sum_{i=1}^N |\phi_{i,\text{exata}} - \phi_{i,\text{numérica}}|}{\sum_{i=1}^N |\phi_{i,\text{exata}}|}, \quad (2.24)$$

$$\|E\|_2 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\phi_{i,\text{exata}} - \phi_{i,\text{numérica}})^2}{\sum_{i=1}^N (\phi_{i,\text{exata}})^2}}, \quad (2.25)$$

$$\|E\|_\infty = \frac{\max_{1 \leq i \leq n} |\phi_{i,\text{exata}} - \phi_{i,\text{numérica}}|}{\max_{1 \leq i \leq n} |\phi_{i,\text{exata}}|}. \quad (2.26)$$

onde ϕ é a grandeza numérica avaliada, i a i -ésima célula em um domínio discreto e N é o número total de células computacionais do domínio discreto. As estimativas de erro também são utilizadas para se calcular as ordens de convergência [49] dos esquemas em estudo. A taxa de convergência [49] é uma medida de quanto o erro decresce a medida que a malha discretizada é refinada. Considerando o erro numérico $\|E\|$ e o espaçamento h entre os pontos de uma malha, tem-se que o erro $\|E\|$ é proporcional a h através da relação $\|E\| \propto h^n$, onde n é a ordem de convergência do método. Um método de segunda ordem, por exemplo, tem seu reduzido em 4 vezes quando a malha discreta é dobrada (espaçamento

h entre os pontos reduzido pela metade), dessa forma $n = 2$ na relação $\|E\| \propto h^n$. Dessa relação tem-se:

$$\begin{aligned}\|E\| &= h^n \\ \log(\|E\|) &= \log(h^n) \\ \log(\|E\|) &= n\log(h) \\ n &= \frac{\log(\|E\|)}{\log(h)}\end{aligned}\tag{2.27}$$

Dessa forma as ordens de convergência podem ser calculadas por:

$$\mathbf{Ordem}_{\|E\|} = \frac{\log(\|E\|_{i+1}) - \log(\|E\|_i)}{\log(h_{i+1}) - \log(h_i)},\tag{2.28}$$

onde i indica a malha utilizada, assim $\|E\|_i$ e h_i são, respectivamente, o erro obtido e o espaçamento entre os pontos da malha i . O refinamento de malha é feito de forma que cada malha $i + 1$ tem o dobro de pontos da malha i . Considerando como exemplo um problema 1D com $x \in [0, 1]$ e uma malha de 10 pontos para $i = 1$, as malhas seguintes serão de 20, 40, 80 e 160 pontos, e os espaçamentos entre as malhas serão de 0,1; 0,05; 0,025; 0,0125; 0,00625. Dessa forma, para calcular as ordens de convergência de um método, basta definir uma malha inicial, o número de refinamentos, calcular o erro entre a solução numérica e analítica e aplicar a equação 2.28, obtendo uma ordem de convergência a cada refinamento. Conforme a malha é refinada a ordem de convergência é obtida com maior exatidão e se aproxima de algum valor teórico esperado, de acordo com o método numérico utilizado e sua ordem de convergência. Diferentes normas de erro podem ser utilizadas e cada uma vai gerar uma ordem de convergência, utilizando a norma $\|E\|_1$ (equação 2.24) tem-se uma ordem de convergência diferente do que utilizando a norma $\|E\|_\infty$ (equação 2.26), por exemplo.

3 Esquemas *upwind* de Alta Resolução

Neste capítulo são apresentados a formulação em variáveis normalizadas, a formulação em limitadores de fluxo e os esquemas *upwind* polinomiais analisados e implementados neste trabalho.

3.1 Formulação de Variáveis Normalizadas

A formulação de variáveis normalizadas foi proposta por Leonard [39] visando obter esquemas convectivos capazes de resolver gradientes elevados e, ao mesmo tempo, manter estabilidade nas soluções numéricas.

Sejam as posições D (“Downstream”), R (“Remote Upstream”) e U (“Upstream”) em relação à face computacional f da molécula computacional ilustrada na Figura 3.1 então, uma variável genérica ϕ expressa em variáveis normalizadas é definida como segue:

$$\hat{\phi}_f = \frac{\phi_f - \phi_R}{\phi_D - \phi_R}, \quad (3.1)$$

em que ϕ_D e ϕ_R são, respectivamente, os valores não normalizados da grandeza ϕ nos pontos D e R . Deste modo, a variável genérica ϕ nas posições D e R resulta em $\hat{\phi}_D = 1$ e $\hat{\phi}_R = 0$, respectivamente. Por outro lado, a variável $\hat{\phi}_U$ é definida por

$$\hat{\phi}_U = \frac{\phi_U - \phi_R}{\phi_D - \phi_R} \quad (3.2)$$

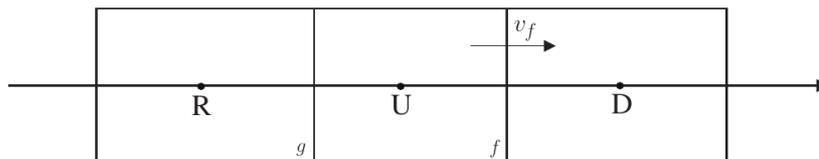


Figura 3.1: Posições D , R e U em relação à face computacional f , a direção da velocidade v_f fornece o sentido do escoamento.

Leonard [39] elaborou o que chamou de NVD (“Normalised Variable Diagram”) para

representar a relação entre as variáveis normalizadas $\hat{\phi}_f$ e $\hat{\phi}_U$. Esta relação entre estas variáveis normalizadas pode resultar em diferentes esquemas *upwind* de alta resolução em variáveis normalizadas. A seguir, estão listados alguns exemplos de esquemas *upwind* de alta resolução em variáveis normalizadas:

- ADBQUICKEST [28]

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} (2-\theta)\hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0; a), \\ \hat{\phi}_U + \frac{1}{2}(1-|\theta|)(1-\hat{\phi}_U) - \frac{1}{6}(1-\theta^2)(1-2\hat{\phi}_U), & \hat{\phi}_U \in [a; b], \\ 1-\theta + \theta\hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in (b; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1], \end{cases}$$

em que $\theta = \frac{u\delta t}{\delta x}$ é o número de Courant; e os parâmetros a e b são:

$$a = \frac{2 - 3|\theta| + \theta^2}{7 - 6\theta - 3|\theta| + 2\theta^2}, \quad b = \frac{-4 + 6\theta - 3|\theta| + \theta^2}{-5 + 6\theta - 3|\theta| + 2\theta^2}.$$

- CUBISTA [6]

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} 1,75\hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0; 0,375), \\ 0,75\hat{\phi}_U + 0,375, & \hat{\phi}_U \in [0,375; 0,75], \\ 0,25\hat{\phi}_U + 0,75, & \hat{\phi}_U \in (0,75; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1], \end{cases}$$

- VONOS [65]

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} 10\hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0; \frac{3}{74}), \\ 0,375(1 + 2\hat{\phi}_U), & \hat{\phi}_U \in [\frac{3}{74}; 0,5), \\ 1,5\hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0,5; \frac{2}{3}), \\ 1, & \hat{\phi}_U \in [\frac{2}{3}; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1], \end{cases}$$

- WACEB [60]

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} 2\hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0; 0,3), \\ 0,75\hat{\phi}_U + 0,375, & \hat{\phi}_U \in [0,3; \frac{5}{6}], \\ 1; & \hat{\phi}_U \in (\frac{5}{6}; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1], \end{cases}$$

Na Figura 3.2 os esquemas ADBQUICKEST, CUBISTA, VONOS e WACEB estão representados no NVD.

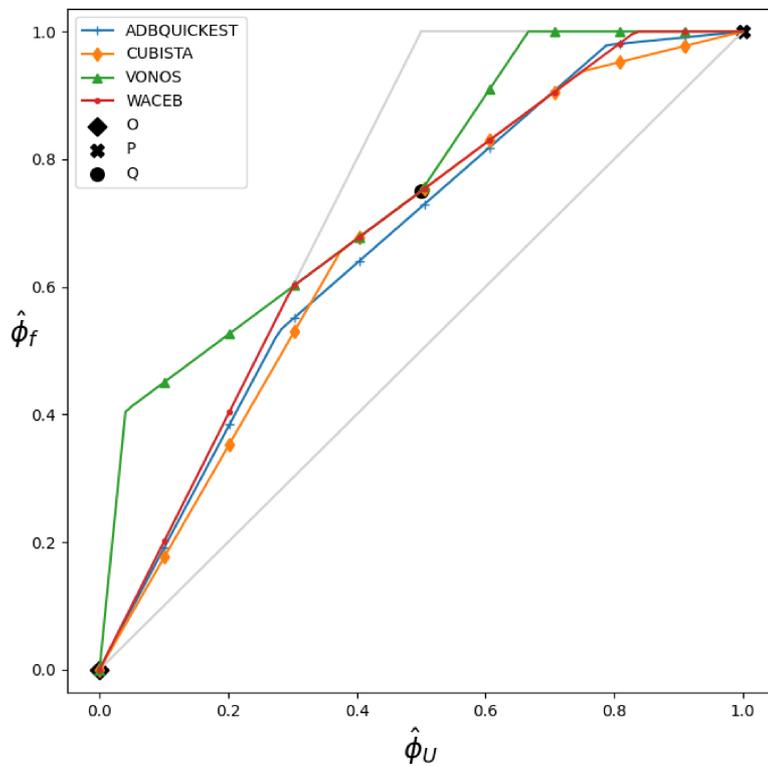


Figura 3.2: Esquemas convectivos de alta resolução no NVD.

Segundo Leonard [39] qualquer esquema não linear, formulado em variáveis normalizadas é de segunda ordem de precisão se atender as condições:

(C1) passa pelo ponto $O(0,0)$ do NVD (ver Figura 3.2)

$$\hat{\phi}_f = 0, \quad \text{para } \hat{\phi}_U = 0; \quad (3.3)$$

(C2) passa pelo ponto $P(1, 1)$ do NVD

$$\hat{\phi}_f = 1, \quad \text{para } \hat{\phi}_U = 1; \quad (3.4)$$

(C3) passa pelo ponto $Q(0, 5, 0, 75)$ do NVD

$$\hat{\phi}_f = 0,75, \quad \text{para } \hat{\phi}_U = 0,5; \quad (3.5)$$

Além das condições (C1)–(C3), se o esquema também atender à condição abaixo é de terceira ordem:

(C4) passa pelo ponto Q com inclinação de 0,75

$$\left. \frac{d\hat{\phi}_f}{d\hat{\phi}_U} \right|_Q = \hat{\phi}'_f(0,5) = 0,75; \quad (3.6)$$

Junto com as condições (C1)–(C4), Leonard [39] recomenda que

(R1) para valores de $\hat{\phi}_U$ menores que 0 ou maiores que 1, o esquema FOU (“First-Order Upwind”) deve ser empregado:

$$\hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U, \quad \text{para } \hat{\phi}_f \notin [0, 1]. \quad (3.7)$$

Combinando as condições (C1)–(C4) e a recomendação (R1), na literatura [42] têm agregado outras condições para elaboração de esquemas *upwind* polinomiais:

(C5) continuidade na derivada primeira no ponto $O(0, 0)$ do NVD

$$\left. \frac{d\hat{\phi}_f}{d\hat{\phi}_U} \right|_O = \hat{\phi}'_f(0) = 1; \quad (3.8)$$

(C6) continuidade na derivada primeira no ponto $P(1, 1)$ do NVD

$$\left. \frac{d\hat{\phi}_f}{d\hat{\phi}_U} \right|_P = \hat{\phi}'_f(1) = 1; \quad (3.9)$$

(C7) continuidade na derivada segunda no ponto $O(0,0)$ do NVD

$$\left. \frac{d}{d\hat{\phi}_U} \left(\frac{d\hat{\phi}_f}{d\hat{\phi}_U} \right) \right|_O = \hat{\phi}_f''(0) = 0; \quad (3.10)$$

(C8) continuidade na derivada segunda no ponto $P(1,1)$ do NVD

$$\left. \frac{d}{d\hat{\phi}_U} \left(\frac{d\hat{\phi}_f}{d\hat{\phi}_U} \right) \right|_P = \hat{\phi}_f''(1) = 0. \quad (3.11)$$

Considerando-se a importância de soluções limitadas no transporte de propriedades físicas, Gaskell e Lau [31] propuseram o critério de limitação CBC. No contexto de variáveis normalizadas, um esquema convectivo produz solução limitada se ele está inteiramente contido na região CBC mostrada na Figura 3.3, isto é, o esquema deve satisfazer às seguintes condições:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \hat{\phi}_f \in [\hat{\phi}_U, 1], & \text{para } \hat{\phi}_f \in [0, 1], \\ \hat{\phi}_f = 0, & \text{para } \hat{\phi}_U = 0, \\ \hat{\phi}_f = 1, & \text{para } \hat{\phi}_U = 1, \\ \hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U, & \text{para } \hat{\phi}_f \notin [0, 1]. \end{array} \right. \quad (3.12)$$

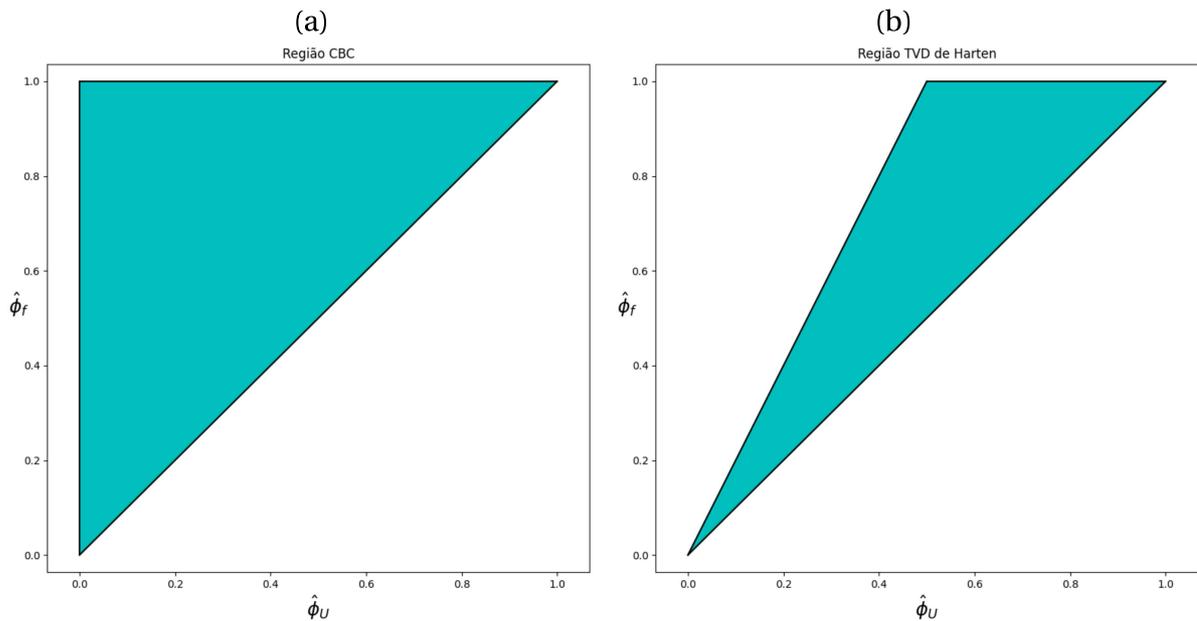


Figura 3.3: Regiões importantes no NVD: (a) CBC e (b) TVD.

Apesar do critério CBC de Gaskell e Lau [31] tratar o problema de estabilidade adequadamente, ele não garante convergência da solução numérica. Para convergência, as res-

trições TVD de Harten [36] devem ser satisfeitas. No contexto de variáveis normalizadas essas restrições de Harten são expressas por:

$$\begin{cases} \hat{\phi}_f \in [\hat{\phi}_U, 2\hat{\phi}_U] \text{ e } \hat{\phi}_f \leq 1, & \text{para } \hat{\phi}_U \in [0, 1], \\ \hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U, & \text{para } \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (3.13)$$

A partir da Figura 3.3, nota-se que a região TVD de Harten está contida dentro da região CBC. Assim, se um esquema é TVD então ele é também CBC, porém o contrário não é válido.

3.2 Formulação de Limitador de Fluxo

Além da formulação de variáveis normalizadas, é comum também expressar um esquema convectivo em termos de limitador de fluxo. Seja um esquema convectivo formulado em termos de variáveis normalizadas:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} F(\hat{\phi}_U), & \text{para } \hat{\phi}_U \in [0, 1], \\ \hat{\phi}_U, & \text{para } \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (3.14)$$

onde $F(\hat{\phi}_U)$ denota que $\hat{\phi}_f$ é uma função conhecida de $\hat{\phi}_U$, em geral não linear.

A formulação por limitador de fluxo [61] considera que o esquema (3.14) pode ser reescrito por:

$$\hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U + \frac{1}{2}\psi(r_f)(1 - \hat{\phi}_U), \quad (3.15)$$

em que r_f é definido por:

$$r_f = \frac{\hat{\phi}_U}{1 - \hat{\phi}_U}. \quad (3.16)$$

Logo, o limitador de fluxo $\psi(r_f)$ pode ser obtido para uma esquema como sendo

$$\psi(r_f) = \frac{2(\hat{\phi}_f - \hat{\phi}_U)}{1 - \hat{\phi}_U}. \quad (3.17)$$

A partir da equação (3.16), obtém-se

$$\hat{\phi}_U = \frac{r_f}{1 + r_f}. \quad (3.18)$$

Assim, substituindo (3.18) em (3.17), resulta o limitador de fluxo $\psi(r_f)$ do esquema convectivo $\hat{\phi}_f$:

$$\psi(r_f) = 2[(1 + r_f)\hat{\phi}_f - r_f], \quad (3.19)$$

onde $\hat{\phi}_f$ dependerá de r_f através de (3.18).

Analisando as equações (3.14) e (3.15), têm-se que $\psi(r_f) = 0$, para $\hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U$ e, em específico, para $\hat{\phi}_U \notin [0, 1]$. Da equação (3.16), temos que $r_f < 0$ para $\hat{\phi}_U \notin [0, 1]$. Para $r_f \geq 0$, o limitador de fluxo $\psi(r_f)$ é obtido substituindo a equação (3.14), quando $\hat{\phi}_U \in [0, 1]$, na equação (3.19) e levando em conta a expressão de $\hat{\phi}_U$ em (3.18).

Abaixo, estão listados alguns exemplos de limitadores de fluxo de esquemas *upwind* de alta resolução.

- ADBQUICKEST [28]

$$\psi(r_f) = \max \left\{ 0, \min \left[2r_f(1 - \theta), \frac{2 + \theta^2 - 3|\theta| + (1 - \theta^2)r_f}{3}, 2(1 - \theta) \right] \right\},$$

- CUBISTA [6]

$$\psi(r_f) = \max \left\{ 0, \min [2r_f(1 - C_1), 0, 75 + 0, 25r_f, 2(1 - C_2)] \right\},$$

em que $C_1 = C_2 = 0, 25$;

- VONOS [65]

$$\psi(r_f) = \max \left\{ 0, \min [r_f, 0, 75 + 0, 25r_f, 18r_f, 2] \right\};$$

- WACEB [60]

$$\psi(r_f) = \max \left\{ 0, \min [2r_f, 0, 75 + 0, 25r_f, 2] \right\}.$$

Para que o limitador de fluxo seja considerado TVD deve satisfazer as restrições a seguir:

$$\begin{cases} \psi(r_f) \geq 0, & \text{para } r_f \geq 0, \\ \psi'(r_f) \leq 2, & \text{para } r_f \text{ tendendo a } 0, \end{cases} \quad (3.20)$$

onde a segunda restrição está associada ao princípio de monotonicidade de Sweby [61].

A Figura 3.4 apresenta os limitadores de fluxo dos esquemas ADBQUICKEST, CUBISTA, VONOS e WACEB na região TVD de Sweby.

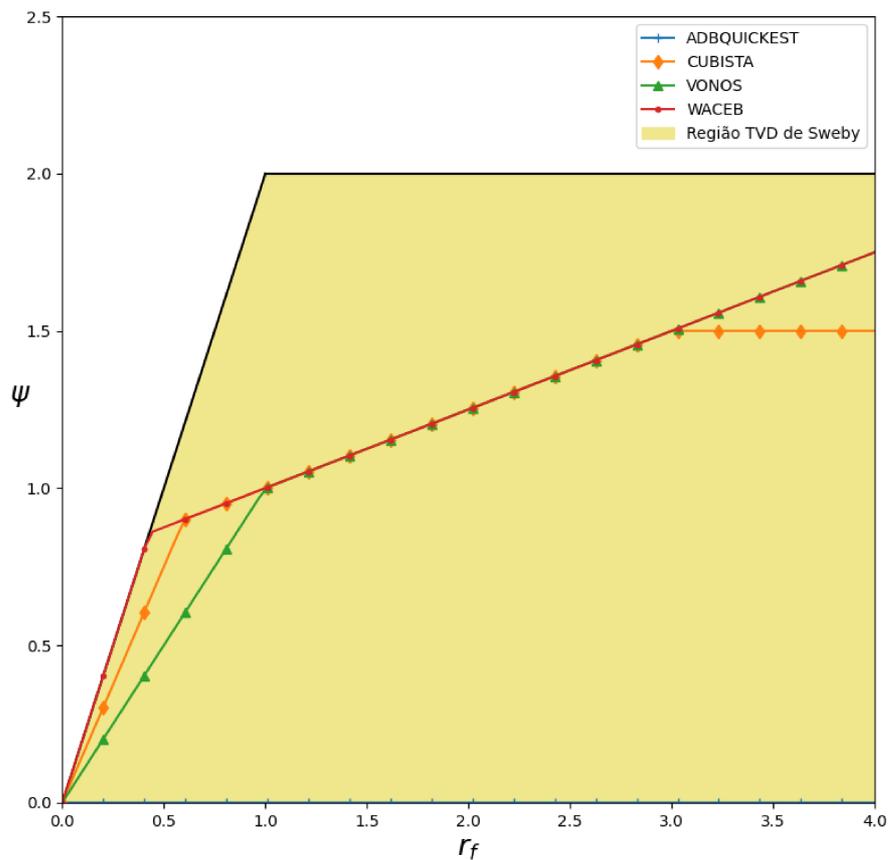


Figura 3.4: Esquemas ADBQUICKEST, CUBISTA, VONOS e WACEB na região TVD de Sweby.

Além das restrições TVD mencionadas na equação (3.20), algumas condições desejáveis que um limitador de fluxo satisfaça são:

(CL1) no mínimo, segunda ordem de precisão

$$\psi(1) = 1; \quad (3.21)$$

(CL2) propriedade de simetria [8]

$$\frac{\psi(r_f)}{r_f} = \psi\left(\frac{1}{r_f}\right). \quad (3.22)$$

3.3 Esquemas *upwind* Polinomiais

Os esquemas *upwind* polinomiais em variáveis normalizadas são expressos por

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \sum_{i=1}^n a_i (\hat{\phi}_U)^i, & \text{para } \hat{\phi}_U \in [0, 1] \\ \hat{\phi}_U, & \text{para } \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (3.23)$$

onde a_i são constantes a serem determinadas de acordo com o esquema escolhido, i é a potência da variável $\hat{\phi}_U$, definida em (3.2), e n indica o grau do polinômio.

Em variáveis não normalizadas o esquema torna-se

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_R + (\phi_D - \phi_R) \sum_{i=1}^n a_i \left(\frac{\phi_U - \phi_R}{\phi_D - \phi_R}\right)^i, & \text{para } \hat{\phi}_U \in [0, 1] \\ \phi_U, & \text{para } \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (3.24)$$

Considerando as equações (3.18), (3.19) e (3.23), o limitador de fluxo dos esquemas *upwind* polinomiais é dado por

$$\psi(r_f) = \begin{cases} 2 \left[(1 + r_f) \left(\sum_{i=1}^n a_i \left(\frac{r_f}{1+r_f} \right)^i \right) - r_f \right], & \text{para } r_f \geq 0, \\ 0, & \text{para } r_f < 0. \end{cases} \quad (3.25)$$

A seguir, apresentam-se os esquemas *upwind* polinomiais conhecidos como TOPUS, FSFL, EPUS e SDPUS-C1, que são implementados e empregados neste trabalho em simulações de problemas envolvendo leis de conservação 1D e 2D.

3.3.1 TOPUS

O esquema TOPUS (“Third-Order Polynomial Upwind Scheme”) foi proposto por Queiroz [51] e colaboradores [21, 23, 50]. Este esquema foi empregado com sucesso para resolver problemas 1D e aplicações 2D e 3D envolvendo escoamentos de fluidos com superfícies livres em regimes laminares e turbulentos [12, 22, 29].

Considerando a formulação geral de um esquema *upwind* polinomial (3.23), o pro-

cesso de construção do esquema TOPUS [51] considera $n = 4$ e determina os coeficientes a_i empregando as condições (C1), (C2), (C3) e (C4) especificadas nas equações (3.3), (3.4), (3.5), e (3.6), respectivamente. O emprego destas condições resulta em um sistema linear que para ter solução única necessita de que um coeficiente a_i seja definido como parâmetro livre. Para tanto, fixa-se $a_4 = \alpha$, obtendo $a_1 = \frac{-\alpha+10}{4}$, $a_2 = \frac{5\alpha-10}{4}$ e $a_3 = -2\alpha + 1$. Adota-se também a recomendação (R1) definida em (3.7).

O esquema TOPUS [51] em variáveis normalizadas é expresso por

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \alpha \hat{\phi}_U^4 + (-2\alpha + 1) \hat{\phi}_U^3 + \left(\frac{5\alpha-10}{4}\right) \hat{\phi}_U^2 + \left(\frac{-\alpha+10}{4}\right) \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0, 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (3.26)$$

Aplicando a definição de variável normalizada (ver equação (3.1)) em (3.26), o esquema TOPUS [51] em particular, resultante em variáveis não normalizadas é dado por

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_R + (\phi_D - \phi_R) \left[\alpha \hat{\phi}_U^4 + (-2\alpha + 1) \hat{\phi}_U^3 + \left(\frac{5\alpha-10}{4}\right) \hat{\phi}_U^2 + \left(\frac{-\alpha+10}{4}\right) \hat{\phi}_U \right], & \hat{\phi}_U \in [0, 1], \\ \phi_U, & \hat{\phi}_U \notin [0, 1], \end{cases} \quad (3.27)$$

onde a variável normalizada $\hat{\phi}_U$ está definida em (3.2). Na equação (3.26), para $\alpha \in [-2, 2]$, o esquema TOPUS [51] está inteiramente contido na região CBC. No caso em que $\alpha = 2$, o esquema TOPUS [51] é TVD de Harten. O esquema SMARTER de Waterson e Deconinck [68] é obtido fazendo-se $\alpha = 0$.

Substituindo os coeficientes $a_1 = \frac{-\alpha+10}{4}$, $a_2 = \frac{5\alpha-10}{4}$, $a_3 = -2\alpha + 1$ e $a_4 = \alpha$ do esquema TOPUS [51] na equação (3.25), obtém-se a sua formulação em limitador de fluxo:

$$\psi(r_f) = \begin{cases} \frac{(-0,5\alpha+1)r_f^3 + (\alpha+4)r_f^2 + (-0,5\alpha+3)r_f}{(1+r_f)^3}, & r_f \geq 0, \\ 0, & r_f < 0, \end{cases} \quad (3.28)$$

Para fins de implementação computacional, reescreve-se esse limitador como

$$\psi(r_f) = \frac{0,5(|r_f| + r_f) \left[(-0,5\alpha + 1)r_f^2 + (\alpha + 4)r_f + (-0,5\alpha + 3) \right]}{(1 + |r_f|)^3}. \quad (3.29)$$

Na notação mais usual, o limitador de fluxo do esquema TOPUS [51] é

$$\psi(r_f) = \max \left\{ 0, \frac{0,5(|r_f| + r_f) \left[(-0,5\alpha + 1)r_f^2 + (\alpha + 4)r_f + (-0,5\alpha + 3) \right]}{(1 + |r_f|)^3} \right\}.$$

A Figura 3.5 mostra curvas características do esquema TOPUS [51] em variáveis normalizadas na região TVD de Harten e seu respectivo limitador de fluxo na região TVD de Sweby para determinados valores de α . Nota-se que a escolha do parâmetro $\alpha = 2$ garante que o esquema TOPUS [51] esteja inteiramente contido nestas regiões.

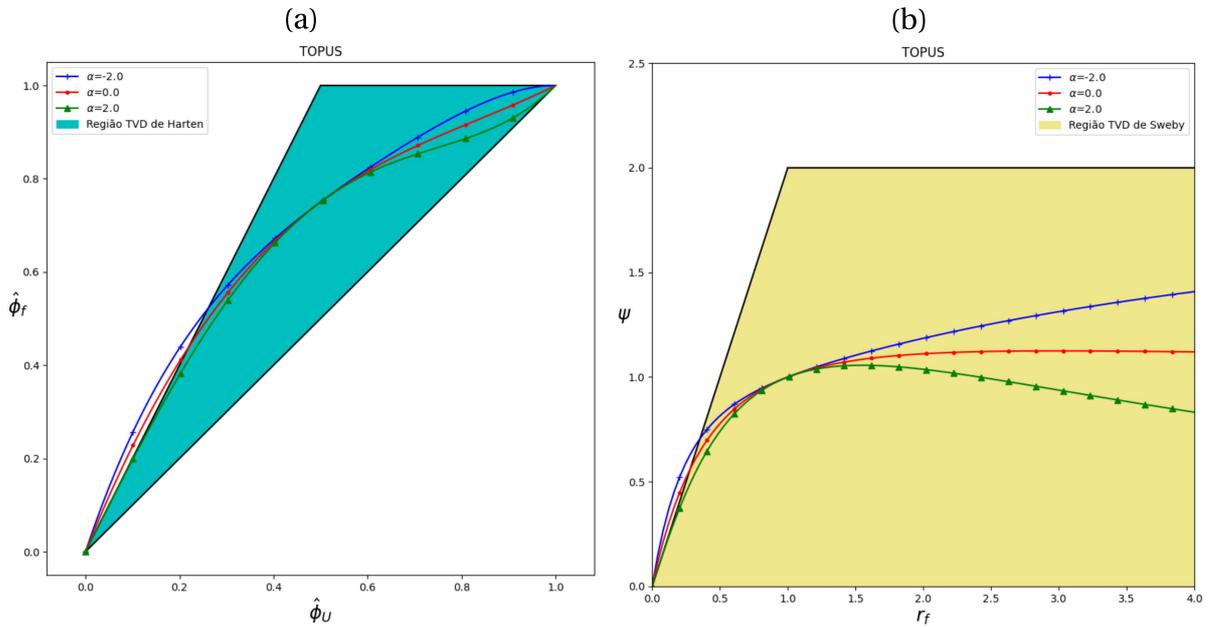


Figura 3.5: Curvas características do esquema TOPUS: (a) região TVD de Harten [36], (b) limitador na região TVD de Sweby [61].

3.3.2 FSFL

O esquema FSFL (“Flexible and Symmetric Flux Limiter”) foi desenvolvido por Queiroz [51] levando em conta a propriedade de simetria (Equação 3.22) e tendo como inspiração o limitador TOPUS [51].

É importante informar que o esquema FSFL [51] foi pouco explorado para solução de leis de conservação na literatura. Isto motiva a implementação e aplicação dele em problemas abordados neste estudo.

A formulação geral do FSFL [51] é dada por

$$\psi(r_f) = \begin{cases} \frac{ar_f^3 + br_f^2 + cr_f}{(1+r_f)^3}, & r_f \geq 0, \\ 0, & r_f < 0, \end{cases} \quad (3.30)$$

em que os parâmetros a , b e c devem ser determinados. Para tanto, impõem-se as condições (CL1) e (CL2) definidas nas equações (3.21) e (3.22), respectivamente. Bem como, adota-se $a = \beta$ como sendo uma variável livre para tornar o limitador de fluxo flexível.

Após a determinação dos parâmetros a , b e c , o limitador de fluxo FSFL [51] torna-se

$$\psi(r_f) = \begin{cases} \frac{\beta r_f^3 + (8-2\beta)r_f^2 + \beta r_f}{(1+r_f)^3}, & r_f \geq 0, \\ 0, & r_f < 0, \end{cases} \quad (3.31)$$

em que $\beta \in [0, 2]$. Esta faixa de valores de β é estabelecida através de duas restrições que $\psi(r_f)$ deve respeitar para que o limitador seja TVD (ver equação 3.20).

Da mesma forma que o limitador TOPUS [51], o limitador FSFL [51] pode ser reescrito por

$$\psi(r_f) = \max \left\{ 0, \frac{0.5(|r_f| + r_f)[\beta r_f^2 + (8-2\beta)r_f + \beta]}{(1+|r_f|)^3} \right\}. \quad (3.32)$$

Adotando (3.16) em (3.31) e, em seguida, substituindo a expressão resultante em (3.15) obtém-se o esquema FSFL [51] em variáveis normalizadas:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} (-2\beta + 4)\hat{\phi}_U^4 + (4\beta - 8)\hat{\phi}_U^3 + \left(\frac{-5\beta+8}{2}\right)\hat{\phi}_U^2 + \left(\frac{\beta+2}{2}\right)\hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0, 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (3.33)$$

Logo, o grau do polinômio fundamental deste esquema é $n = 4$ e seus coeficientes são $a_1 = \frac{\beta+2}{2}$, $a_2 = \frac{-5\beta+8}{2}$, $a_3 = 4\beta - 8$ e $a_4 = -2\beta + 4$.

Abaixo tem-se o esquema FSFL [51] em variáveis não-normalizadas:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_R + (\phi_D - \phi_R) [(-2\beta + 4)\hat{\phi}_U^4 + (4\beta - 8)\hat{\phi}_U^3 + \left(\frac{-5\beta+8}{2}\right)\hat{\phi}_U^2 + \left(\frac{\beta+2}{2}\right)\hat{\phi}_U], & \hat{\phi}_U \in [0, 1], \\ \phi_U, & \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (3.34)$$

A Figura 3.6 mostra curvas características do esquema FSFL [51] em variáveis normalizadas na região TVD de Harten e seu respectivo limitador de fluxo na região TVD de Sweby. Nota-se que o esquema FSFL [51] está inteiramente contido nestas regiões quando se utiliza $\beta \in [0, 2]$.

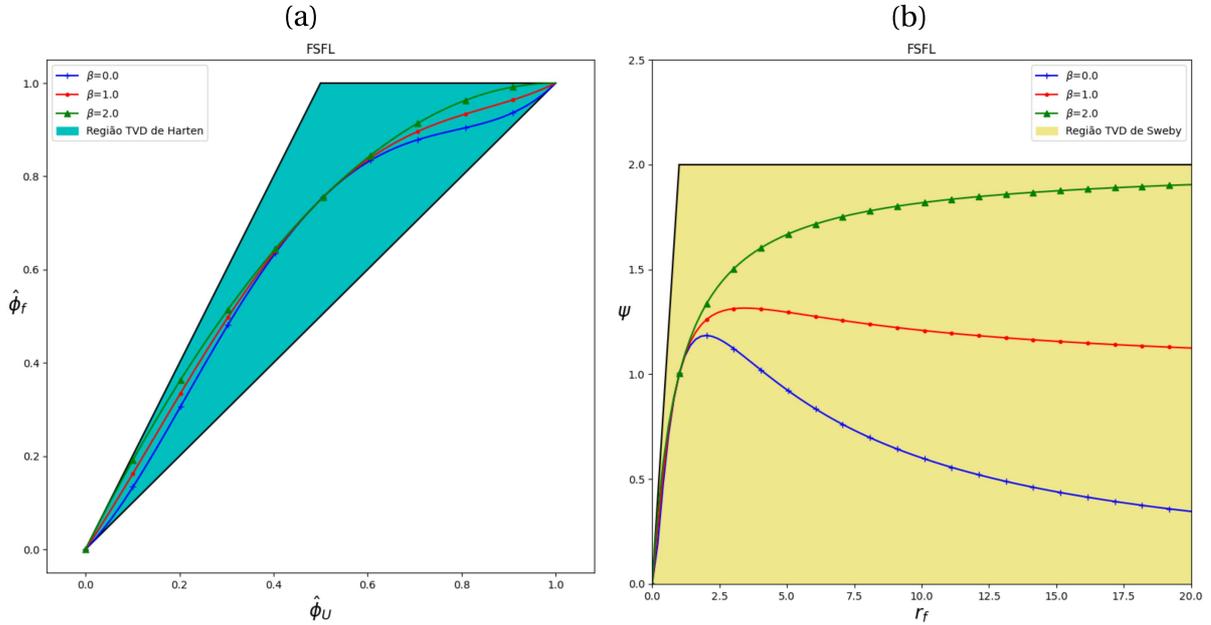


Figura 3.6: Curvas características do esquema FSFL: (a) região TVD de Harten, (b) limitador na região TVD de Sweby.

3.3.3 SDPUS-C1

O esquema SDPUS-C1 (“Six-Degree Polynomial Upwind Scheme of C1 Class”) foi proposto por Lima et al. [42]. Desde sua proposição, este esquema vem sendo muito utilizado na literatura em problemas de dinâmica de fluidos [41, 20, 55, 70], sendo um esquema polinomial de sexto grau bem robusto e que apresenta bons resultados nos trabalhos em que é utilizado.

Considerando a formulação geral de um esquema *upwind* polinomial (3.23), o processo de construção do esquema SDPUS-C1 [42] considera $n = 6$ e determina os coeficientes a_i empregando as condições (C1), (C2), (C3), (C4), (C5) e (C6) especificadas nas Equações (3.3), (3.4), (3.5), (3.6), (3.8) e (3.9), respectivamente. Além destas condições, estabelece-se $a_2 = \gamma$ com parâmetro livre do esquema.

Adotando também a recomendação (R1) definida em (3.7), tem-se que o esquema

SDPUS-C1 [42] é definido em variáveis normalizadas como sendo:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} (-24 + 4\gamma)\hat{\phi}_U^6 + (68 - 12\gamma)\hat{\phi}_U^5 + (-64 + 13\gamma)\hat{\phi}_U^4 + (20 - 6\gamma)\hat{\phi}_U^3 \\ + \gamma\hat{\phi}_U^2 + \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0, 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (3.35)$$

Logo, o grau do polinômio base deste esquema é $n = 6$ e seus coeficientes são $a_1 = 1$, $a_2 = \gamma$, $a_3 = 20 - 6\gamma$, $a_4 = -64 + 13\gamma$, $a_5 = 68 - 12\gamma$ e $a_6 = -24 + 4\gamma$.

Em variáveis não-normalizadas o esquema SDPUS-C1 [42] é escrito como:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_R + (\phi_D - \phi_R)[(-24 + 4\gamma)\hat{\phi}_U^6 + (68 - 12\gamma)\hat{\phi}_U^5 + (-64 + 13\gamma)\hat{\phi}_U^4 + (20 - 6\gamma)\hat{\phi}_U^3 \\ + \gamma\hat{\phi}_U^2 + \hat{\phi}_U], & \hat{\phi}_U \in [0, 1], \\ \phi_U, & \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (3.36)$$

Substituindo os coeficientes a_i ($i = 1, \dots, 6$), em que i denota a potência da variável $\hat{\phi}_U$, do esquema SDPUS-C1 [42] na equação (3.25), obtém-se a sua formulação em limitador de fluxo:

$$\psi(r_f) = \begin{cases} \frac{(-8 + 2\gamma)r_f^4 + (40 - 4\gamma)r_f^3 + 2\gamma r_f^2}{(1 + r_f)^5}, & r_f \geq 0, \\ 0, & r_f < 0. \end{cases} \quad (3.37)$$

Para a implementação computacional, reescreve-se esse limitador como

$$\psi(r_f) = \max \left\{ 0, \frac{0.5(|r_f| + r_f)((-8 + 2\gamma)r_f^3 + (40 - 4\gamma)r_f^2 + 2\gamma r_f)}{(1 + |r_f|)^5} \right\}. \quad (3.38)$$

A Figura 3.7 apresenta curvas características do esquema SDPUS-C1 [42] em variáveis normalizadas na região TVD de Harten e seu respectivo limitador de fluxo na região TVD de Sweby. Nota-se que este esquema está inteiramente contido nestas regiões quando se utiliza $\gamma \in [4, 12]$.

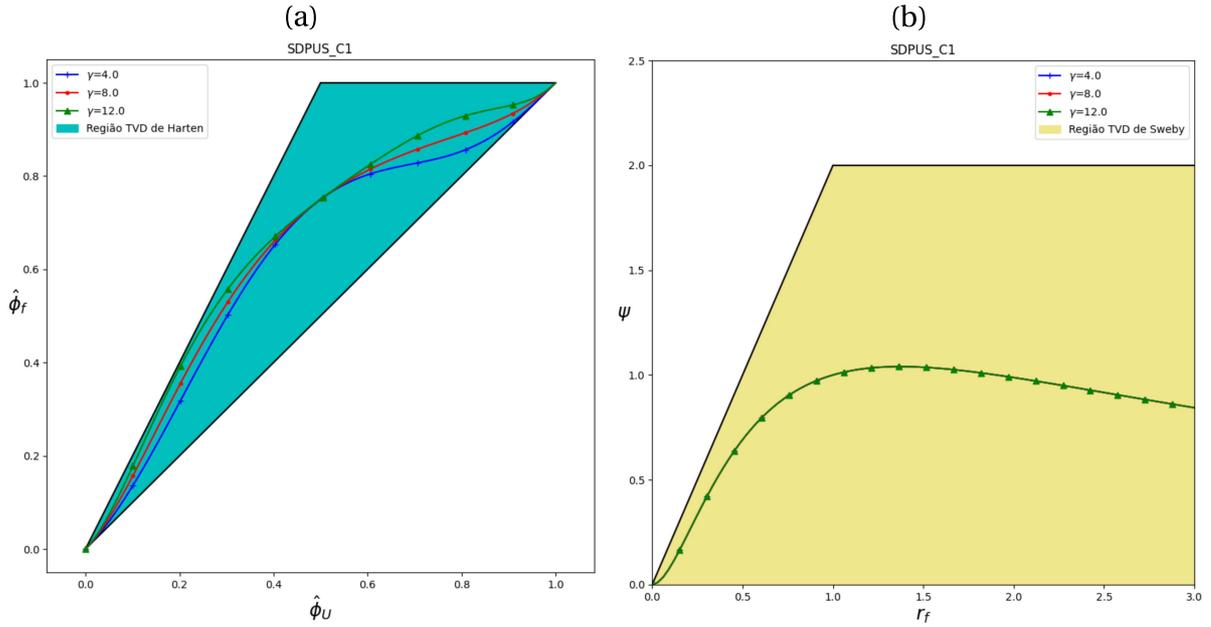


Figura 3.7: Curvas características do esquema SDPUS-C1: (a) região TVD de Harten, (b) limitador na região TVD de Sweby.

3.3.4 EPUS

O esquema EPUS (“Eight-degree Polynomial Upwind Scheme”) foi proposto por G. Lima [42], sendo utilizado na literatura em problemas de escoamento de fluidos não-lineares, como pode ser visto nos trabalhos [18, 42, 17].

Considerando a formulação geral de um esquema *upwind* polinomial (3.23), o processo de construção do EPUS [42] considera $n = 8$ e as mesmas condições do esquema SDPUS-C1 [42] para determinar seus coeficientes a_i . Além disso, emprega também as condições (C7) e (C8) especificadas em (3.10) e (3.11), respectivamente. Este esquema adota $a_3 = \lambda$ como parâmetro livre.

O esquema EPUS [42] é definido em termos de variáveis normalizadas como

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} -4(\lambda - 24)\hat{\phi}_U^8 + 16(\lambda - 23)\hat{\phi}_U^7 + (528 - 25\lambda)\hat{\phi}_U^6 + (19\lambda - 336)\hat{\phi}_U^5 \\ + (80 - 7\lambda)\hat{\phi}_U^4 + \lambda\hat{\phi}_U^3 + \hat{\phi}_U; & \hat{\phi}_U \in [0, 1] \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (3.39)$$

Desta forma, o grau do polinômio presente na formulação deste esquema é $n = 8$ e seus coeficientes são $a_1 = 1$, $a_2 = 0$, $a_3 = \lambda$, $a_4 = 80 - 7\lambda$, $a_5 = 19\lambda - 336$, $a_6 = 528 - 25\lambda$, $a_7 = 16(\lambda - 23)$ e $a_8 = 4(\lambda - 24)$.

em variáveis não-normalizadas tem-se o esquema EPUS [42]:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_R + (\phi_D - \phi_R) [-4(\lambda - 24)\hat{\phi}_U^8 + 16(\lambda - 23)\hat{\phi}_U^7 + (528 - 25\lambda)\hat{\phi}_U^6 + (19\lambda - 336)\hat{\phi}_U^5 \\ + (80 - 7\lambda)\hat{\phi}_U^4 + \lambda\hat{\phi}_U^3 + \hat{\phi}_U]; & \hat{\phi}_U \in [0, 1] \\ \phi_U, & \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (3.40)$$

Substituindo os coeficientes a_i ($i = 1, \dots, 8$), em que i denota a potência da variável $\hat{\phi}_U$, do esquema EPUS [42] na equação (3.25), obtém-se a sua formulação em limitador de fluxo:

$$\psi(r_f) = \begin{cases} \frac{(2\lambda - 32)r_f^5 + (160 - 4\lambda)r_f^4 + 2\lambda r^3}{(1 + r_f)^7}, & r_f \geq 0, \\ 0, & r_f < 0. \end{cases} \quad (3.41)$$

Para a implementação computacional, reescreve-se esse limitador como

$$\psi(r_f) = \max \left\{ 0, \frac{0.5(|r_f| + r_f)[(2\lambda - 32)r_f^4 + (160 - 4\lambda)r_f^3 + 2\lambda r^2]}{(1 + |r_f|)^7} \right\}. \quad (3.42)$$

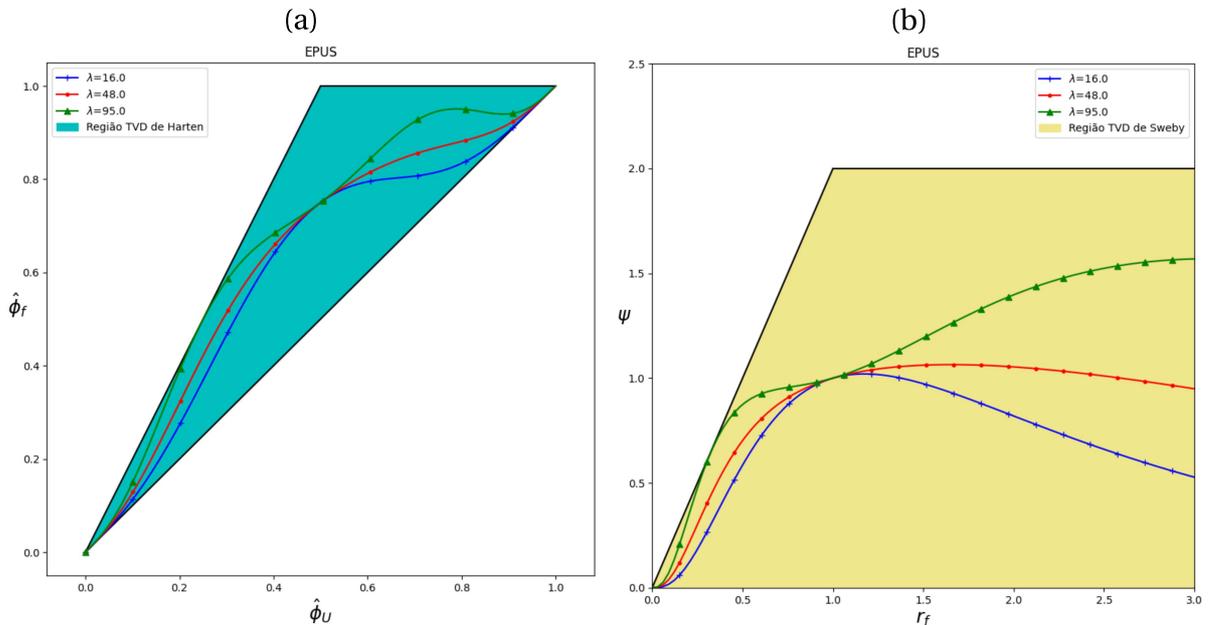


Figura 3.8: Curvas características do esquema EPUS: (a) região TVD de Harten, (b) limitador na região TVD de Sweby.

A Figura 3.8 apresenta curvas características do esquema EPUS [42] em variáveis normalizadas na região TVD de Harten e seu respectivo limitador de fluxo na região TVD de

Sweby. Nota-se que este esquema está inteiramente contido nestas regiões quando se utiliza $\lambda \in [16, 95]$.

4 Modelagem Computacional

Neste capítulo é discutida a discretização dos termos convectivos das equações de transporte (2.1), (2.12) e (2.14). Também são apresentados algoritmos/descrição para a solução computacional das equações de Navier-Stokes usando o OpenFOAM [3].

As equações 1D de advecção e da camada limite foram discretizadas pelo método de diferenças finitas [58]. Para discretização temporal foi considerado o método de Euler explícito [9]. As equações de Navier-Stokes foram discretizadas pelo método de volumes finitos [40, 63, 66].

No caso particular de escoamentos incompressíveis, foi utilizada uma malha deslocada (“staggered grid”) [7] para a discretização das equações Navier-Stokes. Neste tipo de malha, a pressão é aproximada no centro da célula e as componentes da velocidade u e v no caso 2D nas faces $(i + \frac{1}{2}, j)$ e $(i, j + \frac{1}{2})$, respectivamente. O sistema discreto de equações resultante é resolvido no sistema de simulação OpenFOAM. Este ambiente computacional calcula as equações de transporte e da continuidade baseado em [27].

O ambiente OpenFOAM aqui empregado para simulação de escoamento incompressíveis foi equipado neste trabalho com limitadores de fluxo dos esquemas *upwind* polinomiais descritos na Seção 3.3.

4.1 Discretização dos Termos Convectivos

Um representante típico para os termos convectivos das equações de transporte (2.1), (2.12) e (2.14) pode ser expresso na forma 1D por

$$\left. \frac{\partial(v\phi)}{\partial x} \right|_P, \quad (4.1)$$

em que ϕ é a variável convectada (por exemplo, componentes de velocidade, variáveis turbulentas etc.) e v a velocidade de convecção. O ponto P em (4.1) representa o nó central, onde o termo convectivo é avaliado. Por exemplo, a Figura 4.1 ilustra esse ponto P de avali-

ação bem como as posições D , R e U , e as faces f e g das células computacionais.

A derivada de (4.1) é aproximada no ponto P por

$$\left. \frac{\partial(v\phi)}{\partial x} \right|_P \approx \frac{(v\phi)\Big|_f - (v\phi)\Big|_g}{\delta x} = \frac{v_f\phi_f - v_g\phi_g}{\delta x}. \quad (4.2)$$

Por simplicidade e sem perda de generalidade, considera-se a variável $\phi = u$ em (4.2) transportada com velocidade v_f na direção x (ver Figura 4.1). Nesse caso, $P = (i)$, $f = i + \frac{1}{2}$, $g = i - \frac{1}{2}$, e aquela derivada é estimada como

$$\left. \frac{\partial(vu)}{\partial x} \right|_{(i)} = \frac{(v_f u_{i+\frac{1}{2}} - v_g u_{i-\frac{1}{2}})}{\delta x} \quad (4.3)$$

em que as velocidades v_f e v_g são aproximadas, respectivamente, utilizando-se as médias aritméticas:

$$\begin{aligned} v_f &= v_{i+\frac{1}{2}} = \frac{(v_{i+1} + v_i)}{2}, \\ v_g &= v_{i-\frac{1}{2}} = \frac{(v_{i-1} + v_i)}{2}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Para completar a aproximação, um esquema *upwind* polinomial em variáveis não normalizadas é empregado. Esse esquema está definido genericamente na equação (3.24). Para tanto, os valores da propriedade transportada u nas posições $(i + \frac{1}{2})$ e $(i - \frac{1}{2})$ são obtidos utilizando-se os pontos vizinhos D , R e U , os quais são definidos de acordo com a direção das velocidades de convecção (sinais de v_f e v_g). Em resumo, tem-se:

- Aproximações para $u_{i+\frac{1}{2}}$ quando $v_f \geq 0$; nesse caso as posições D , R e U assumem, respectivamente, os valores $D=(i+1)$, $R=(i-1)$ e $U=(i)$ como representadas na Figura 4.1.

O valor $u_{i+\frac{1}{2}}$ usando-se o esquema *upwind* polinomial é obtido como:

$$u_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i-1} + (u_{i+1} - u_{i-1}) \sum_{i=0}^n a_i \left(\frac{u_i - u_{i-1}}{u_{i+1} - u_{i-1}} \right)^i, & \hat{u}_U \in [0, 1], \\ u_i, & \hat{u}_U \notin [0, 1], \end{cases}$$

em que

$$\hat{u}_U = \hat{u}_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{u_{i+1} - u_{i-1}}.$$

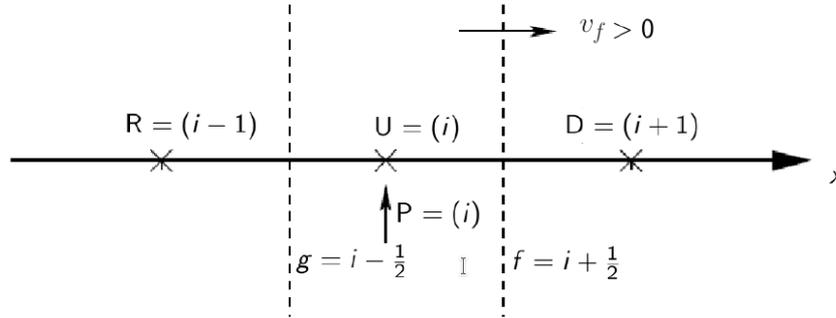


Figura 4.1: Posições D, R e U em relação a face computacional f para velocidade de convecção $v_f \geq 0$.

- Aproximações para $u_{i+\frac{1}{2}}$ quando $v_f < 0$: as posições $D=(i)$, $R=(i+2)$ e $U=(i+1)$ representadas na Figura 4.2.

$$u_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+2} + (u_i - u_{i+2}) \sum_{i=0}^n a_i \left(\frac{u_{i+1} - u_{i+2}}{u_i - u_{i+2}} \right)^i, & \hat{u}_U \in [0, 1], \\ u_{i+1}, & \hat{u}_U \notin [0, 1], \end{cases}$$

em que

$$\hat{u}_U = \hat{u}_{i+1} = \frac{u_{i+1} - u_{i+2}}{u_i - u_{i+2}}.$$

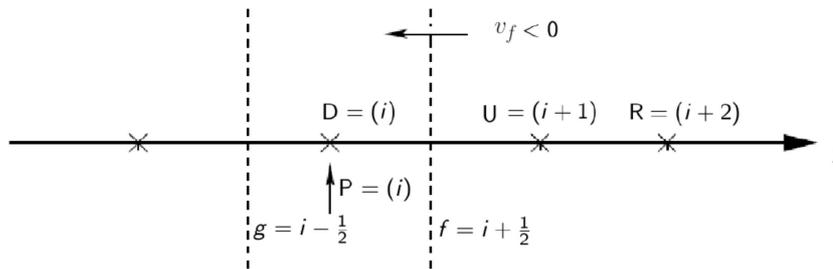


Figura 4.2: Posições D, R e U em relação a face computacional f para velocidade de convecção $v_f < 0$.

- Aproximações para $u_{i-\frac{1}{2}}$ quando $v_g \geq 0$: as posições $D=(i)$, $R=(i-2)$ e $U=(i-1)$ são representadas na Figura 4.3.

$$u_{i-\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i-2} + (u_i - u_{i-2}) \sum_{i=0}^n a_i \left(\frac{u_{i-1} - u_{i-2}}{u_i - u_{i-2}} \right)^i, & \hat{u}_U \in [0, 1], \\ u_{i-1}, & \hat{u}_U \notin [0, 1], \end{cases}$$

em que

$$\hat{u}_U = \hat{u}_{i-1} = \frac{u_{i-1} - u_{i-2}}{u_i - u_{i-2}}.$$

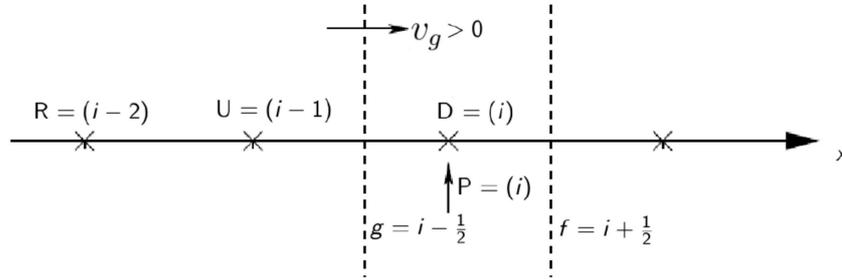


Figura 4.3: Posições D, R e U em relação a face computacional g para velocidade de convecção $v_g \geq 0$.

- Aproximações para $u_{i-\frac{1}{2}}$ quando $v_g < 0$: as posições $D=(i-1)$, $R=(i+1)$, $U=(i)$ são mostradas na Figura 4.4.

$$u_{i-\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+1} + (u_{i-1} - u_{i+1}) \sum_{i=0}^n a_i \left(\frac{u_i - u_{i+1}}{u_{i-1} - u_{i+1}} \right)^i, & \hat{u}_U \in [0, 1], \\ u_i, & \hat{u}_U \notin [0, 1], \end{cases}$$

em que

$$\hat{u}_U = \hat{u}_i = \frac{u_i - u_{i+1}}{u_{i-1} - u_{i+1}}.$$

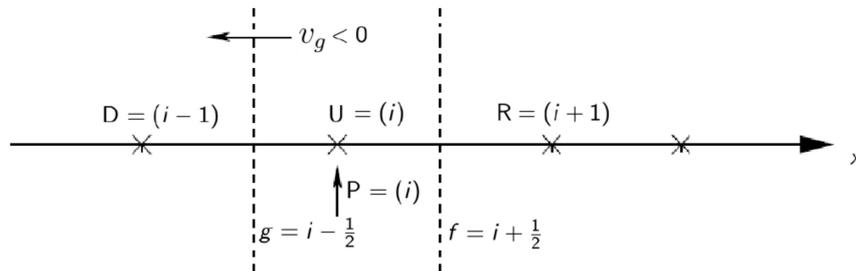


Figura 4.4: Posições D, R e U em relação a face computacional g para velocidade de convecção $v_g < 0$.

Acima, a discretização do termo convectivo foi realizada considerando a formulação genérica de um esquema *upwind* polinomial (3.24). No entanto, basta informar o grau do polinômio n e os coeficientes a_i para que seja escolhido um dos esquemas: EPUS, FSFL, SCDPUS-C1, TOPUS.

Para o termo difusivo foi considerada a discretização 1D:

$$\Delta u \Big|_P = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_P \approx \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{\delta x^2} \quad (4.5)$$

4.2 OpenFOAM

OpenFOAM [3] é um software livre e de código aberto para simulação computacional de escoamento de fluido, sendo muito utilizado tanto no meio acadêmico quanto comercial e industrial em diversas áreas das ciências e engenharias. O OpenFOAM utiliza o método de volumes finitos na solução numérica de equações diferenciais de problemas de escoamento de fluidos.

O método de volumes finitos [40, 63, 66] consiste em um esquema de discretização do domínio no qual as equações são aplicadas, comumente aplicado em problemas de escoamento de fluidos através das aproximação de solução de equações de transporte. O método de volumes finitos subdivide o domínio de escoamento em um número finito de volumes de controle contíguos. O método utiliza da forma integral do conjunto de equações como ponto de partida. Essas equações são integradas, geralmente utilizando a regra do ponto médio, além de outros esquemas de alta ordem. O teorema de Gauss também é comumente aplicado nas equações, como resultado tem-se um número finito de equações lineares que podem ser resolvidas através de métodos de solução de sistemas lineares. Os fluxos podem ser definidos em um ou mais locais dentro de cada volume: i) *Co-located grids* tem todas as suas grandezas e dinâmica em um único volume de controle; ii) *Staggered grids* define suas grandezas baseadas no volume (pressão, densidade e temperatura) em um único ponto no centro do volume, e grandezas baseadas no fluxo (velocidade) nas faces. Valores em outras regiões do espaço são obtidas através de interpolação. Ao utilizar da abordagem *Co-located grids* é necessário mais interpolações devido a todas as informações estarem centralizadas em um único volume de controle.

O OpenFOAM utiliza do método de volumes finitos em sua abordagem *Co-located grids* em uma malha não-estruturada na forma de poliedros com elementos arbitrários. Grandezas do escoamento são armazenadas no "centróide" dos volumes de controle. Existe

uma variedade de esquemas de interpolação, discretização e solução de sistemas lineares, que podem ser utilizados dentro do OpenFOAM. Além disso este ambiente computacional utiliza de várias abordagens dentro do contexto de volumes finitos na solução de diversos problemas de acordo com suas especificidades, utilizando algoritmos específicos para tratar cada tipo de problema.

No capítulo 6 desta dissertação são abordados problemas de escoamento de fluidos 2D utilizando a ferramenta OpenFOAM através de implementação e incorporação dos esquemas *upwind* TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 e EPUS.

Na Seção 6.1 é apresentado o problema do escoamento em uma cavidade e nesta seção são apresentados os resultados obtidos utilizando o OpenFoam com seu "solver" IcoFoam [2]. O IcoFoam resolve as equações de Navier-Stokes incompressíveis através do algoritmo PISO ("Pressure-Implicit with Splitting of Operators"). As equações são resolvidas de forma transiente, necessitando de uma condição inicial, que para o problema abordado na seção 6.1 é pressão zero e velocidade zero ao longo de todo o domínio, além de necessário condições de contorno. Uma boa análise e descrição do algoritmo PISO pode ser encontrada em [30] e nas referências [37, 54] são descritos o algoritmo e a implementação de forma mais próxima da implementação utilizada dentro do OpenFOAM.

Na seção 6.2 é apresentado o problema do escoamento de Poiseuille e será utilizado o OpenFOAM através do "solver" SimpleFoam [5]. O simpleFoam é um resolvedor para equações de Navier-Stokes incompressível utilizando o algoritmo SIMPLE ("Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations"). Mais detalhes do funcionamento e implementação deste algoritmo podem ser encontrados nos trabalhos [45, 30, 37].

5 Resolução Numérica de Problemas 1D

Neste capítulo, apresentam-se resultados numéricos obtidos empregando os esquemas *upwind* polinomiais TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 e EPUS em problemas 1D, que possuem soluções exatas. As soluções numéricas são comparadas com as soluções exatas para analisar a exatidão dos esquemas. Os parâmetros (tempo de simulação, espaçamentos temporais e espaciais) e condições iniciais e de contorno empregados nas simulações numéricas são os mesmos adotados em Queiroz [51].

Os problemas 1D escolhidos neste trabalho foram a equação da advecção linear (2.1) e da camada limite (2.12). Valores distintos para o parâmetro livre em cada um dos esquemas TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 e EPUS foram utilizados com o objetivo de verificar a influência de sua escolha na qualidade da solução numérica, bem como o erro em relação à solução exata da equação da advecção linear. Ademais, as taxas de convergência de cada esquema foram investigadas no experimento envolvendo a camada limite.

Todos os experimentos foram realizados em um notebook com processador core-i5 7300HQ (4-cores, 4-threads, 3.5 GHz) e 16 GB de memória RAM (dual-channel 2400 Mhz) em um sistema Operacional Linux Ubuntu 64 bits.

Os códigos desenvolvidos para os experimentos dessa seção estão todos disponíveis em um repositório aberto no Github através do link:

- <https://github.com/mateus96mt/InterpolationSchemes>

Além dos códigos dentro do repositório estão presentes uma documentação e orientação para utilização. As linguagens utilizadas foram a linguagem C++ [1] e a linguagem Python [4] (versão 3).

5.1 Advecção Linear

Nesta seção são apresentados os resultados numéricos obtidos na solução da equação da advecção linear (2.1) considerando a velocidade de transporte $a = 1$, condições iniciais da

forma (2.2) e diferentes tempos de simulação. A solução exata desta equação é definida por (2.4).

Em relação a malha computacional, fixaram-se 400 pontos ao longo do eixo x . Foi utilizado dois valores números de Courant (θ) distintos, a saber: 0,05 e 0,5. Logo, define-se um cenário mais favorável (θ mais baixo) e menos favorável (θ mais alto) para a solução numérica.

No tocante às condições iniciais, utilizaram-se três condições cujas expressões estão definidas (2.5), (2.6) e (2.7). Essas condições foram escolhidas pelo fato de serem funções contínuas por partes, apresentando regiões de descontinuidade, alto gradiente e picos, criando assim uma situação adversa para avaliar os esquemas e a qualidade da solução numérica. Os parâmetros utilizados para as simulações 1D são os mesmos utilizados por Queiroz [51].

Cada um dos esquemas foi simulado utilizando diferentes valores distintos para o parâmetro livre. Basicamente, foram adotados os valores extremos (mínimo e máximo) no qual cada esquema foi desenvolvido e valores intermediários obtidos pela média entre os valores extremos.

Para efeitos de visualização, as soluções numéricas e exatas mostradas nesta seção consideram os esquemas e seus respectivos valores do parâmetro livre: TOPUS – $\alpha \in \{-2; 0; 2\}$, FSFL – $\beta \in \{0; 1; 2\}$, SDPUS-C1 – $\gamma \in \{4; 8; 12\}$, EPUS – $\lambda \in \{16; 55, 5; 95\}$. No entanto, o comportamento das curvas de erro entre as soluções são apresentadas levando em conta mais valores intermediários para o parâmetro livre de cada esquema. Os parâmetros foram adotados de acordo com a literatura [51], onde o tempo final de simulação é suficiente para atingir o regime estacionário em cada cenário de teste.

Utilizando a condição inicial da equação (2.5), em que $x \in [0, 2]$ e o tempo final de simulação $t = 1$, os resultados numéricos obtidos, para $\theta = 0,05$ e $\theta = 0,5$, são apresentados nas Figuras 5.1 e 5.2. O gráfico de erro, equação (2.25), entre as soluções numérica e exata é mostrado nas Figuras e 5.3 e 5.4 para $\theta = 0,05$ e $\theta = 0,5$.

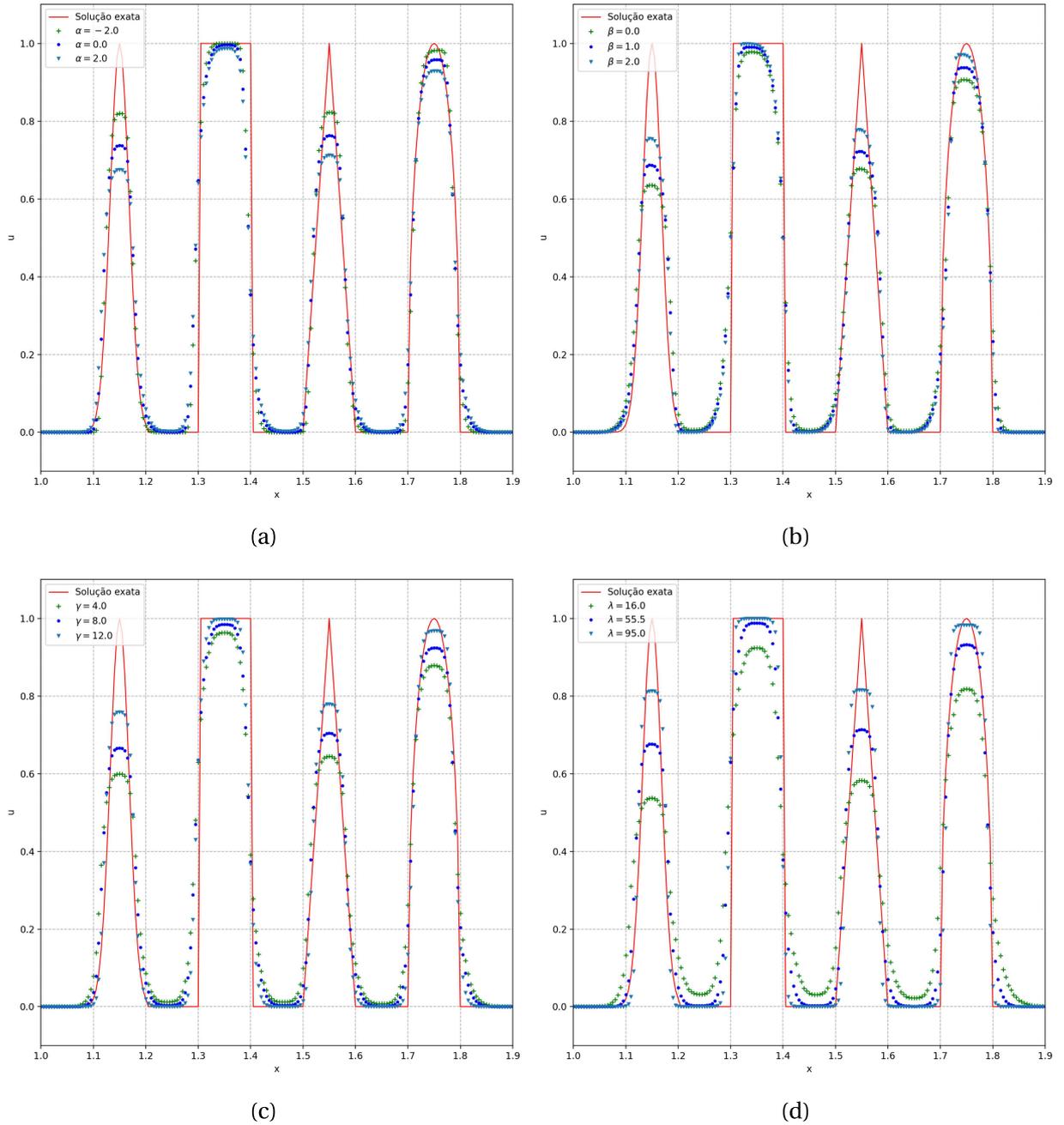


Figura 5.1: Resultados numéricos para $\theta = 0,05$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.5).

A solução numérica para a condição inicial CI1 (2.1) e $\theta = 0,05$ está mais próxima da solução analítica utilizando $\alpha = -2$, $\beta = 2$, $\gamma = 12$ e $\lambda = 95$ como parâmetro livre dos esquemas, o que pode ser observado na Figura 5.1, já para $\theta = 0,5$ temos os parâmetros $\alpha = -2$, $\beta = 2$, $\gamma = 12$ e $\lambda = 95$ (Figura 5.2). Pode-se observar a difusividade numérica da solução nas regiões de descontinuidade e picos bem como em suas proximidades, tanto para $\theta = 0,05$ quanto $\theta = 0,5$. Além disso é possível notar as oscilações presentes na solução do esquema TOPUS para $\alpha = -2$, $\alpha = 0$ e $\theta = 0,5$.

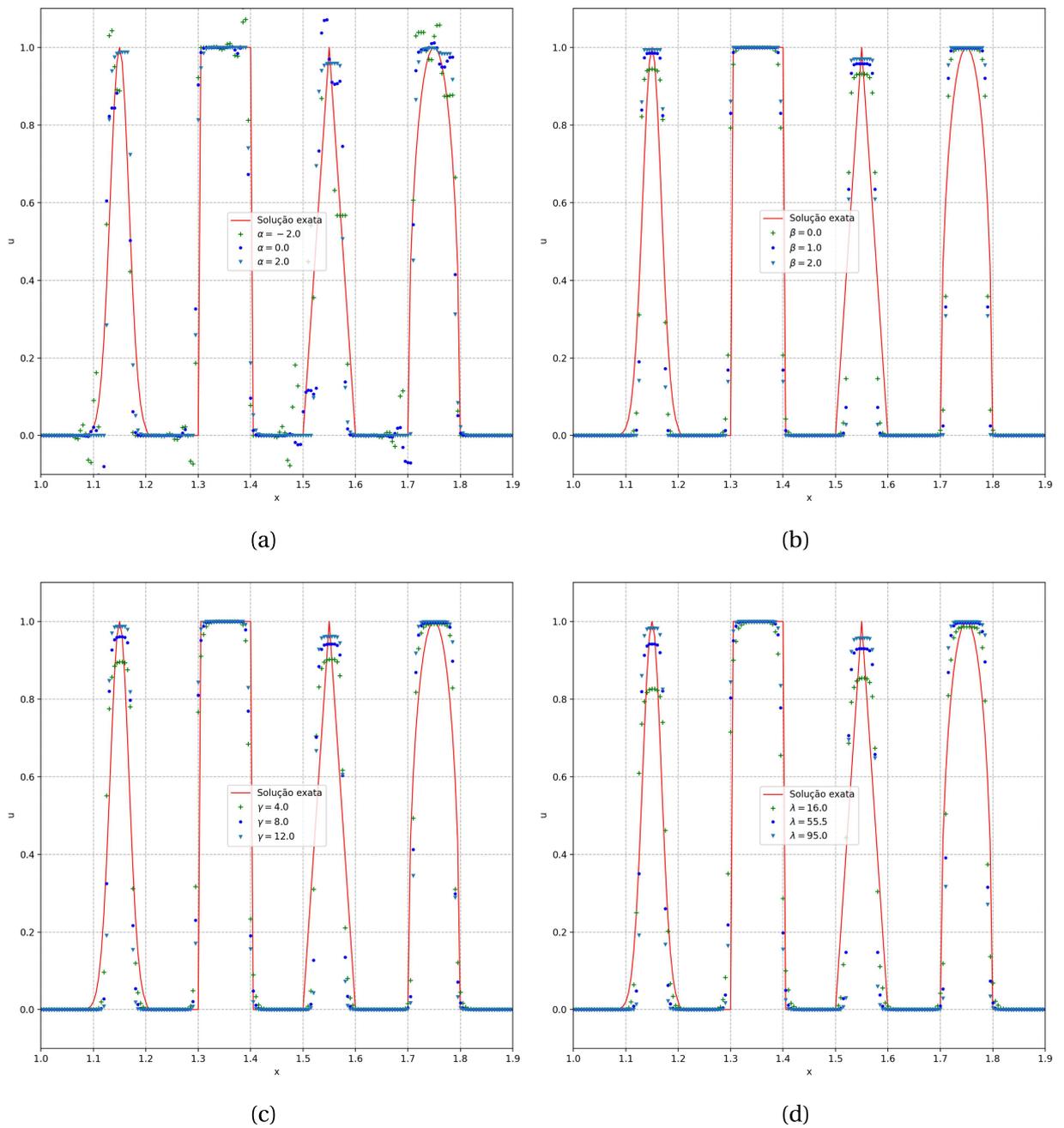


Figura 5.2: Resultados numéricos para $\theta = 0,5$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.5).

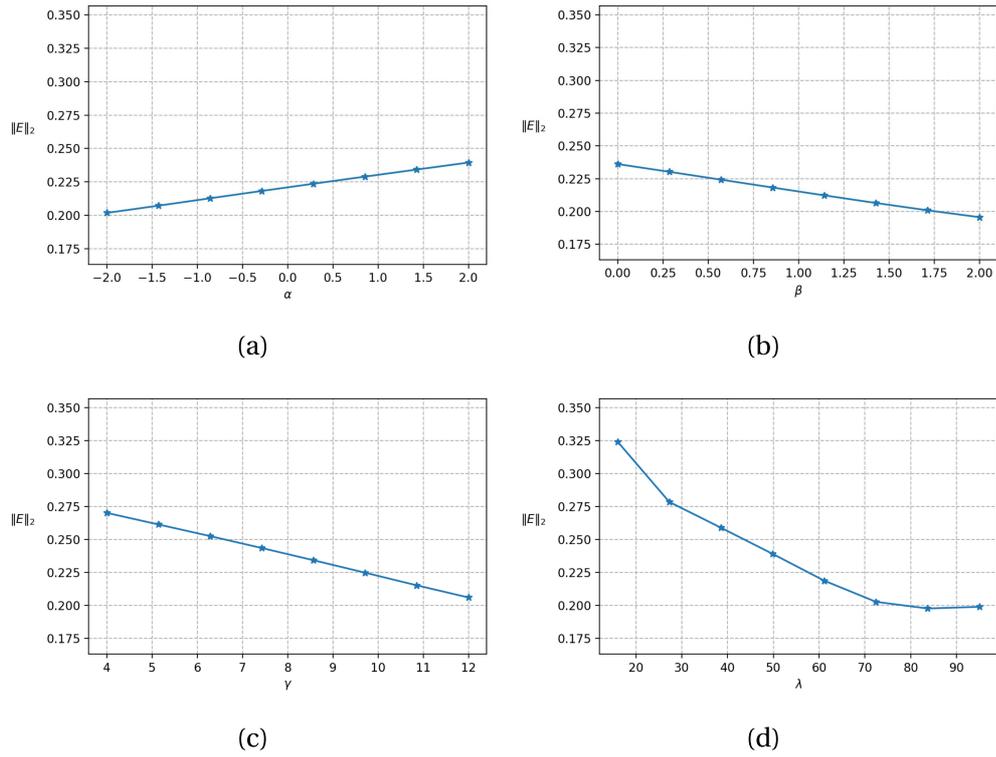


Figura 5.3: Erros obtidos $\|E\|_2$ (equação 2.25) para $\theta = 0,05$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.5).

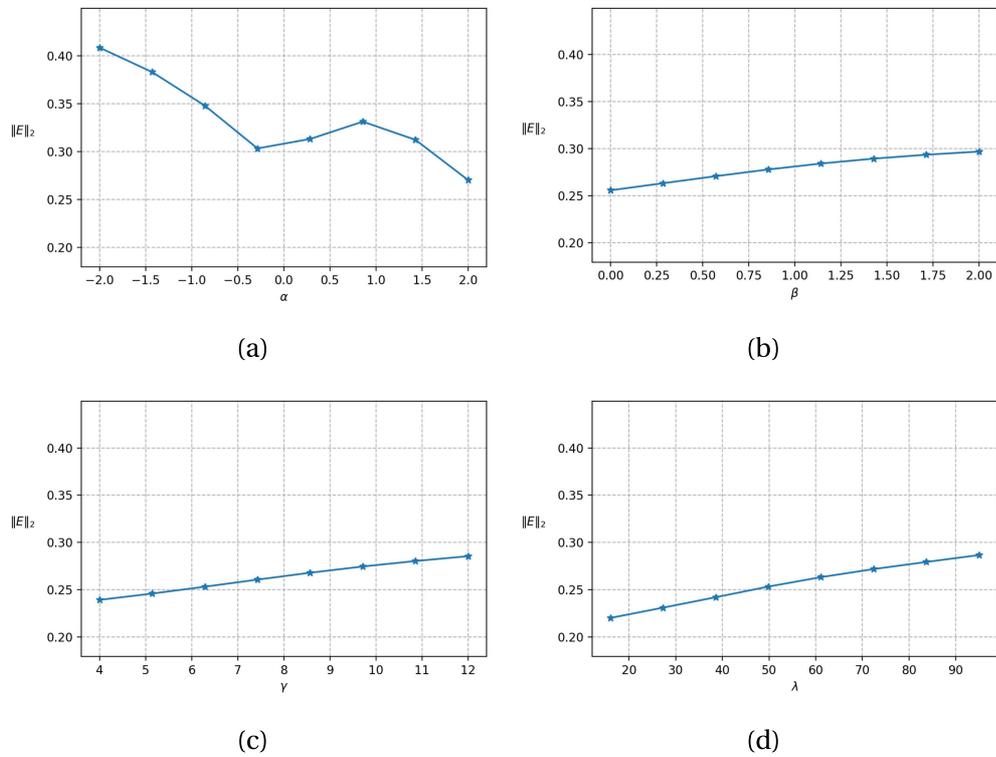


Figura 5.4: Erros obtidos $\|E\|_2$ (equação 2.25) para $\theta = 0,5$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.5).

Agora, adotando condição inicial (2.6) em que $x \in [-1, 1]$ e o tempo final de simulação $t = 0,25$, os resultados numéricos e o erro entre a solução numérica e exata podem ser observados nas Figuras 5.5 até 5.8, para $\theta = 0,05$ e $\theta = 0,5$.

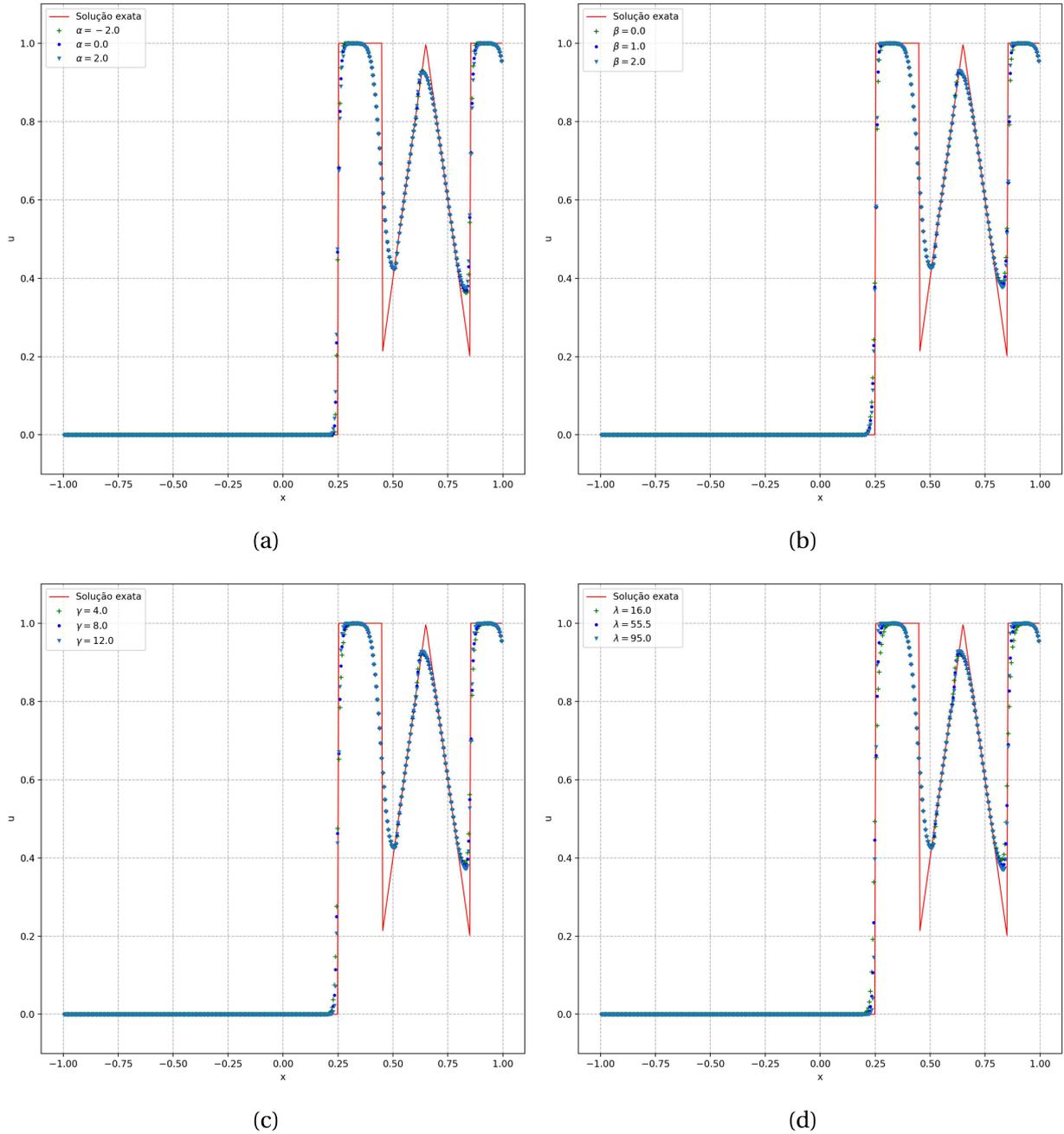


Figura 5.5: Resultados numéricos para $\theta = 0,05$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.6).

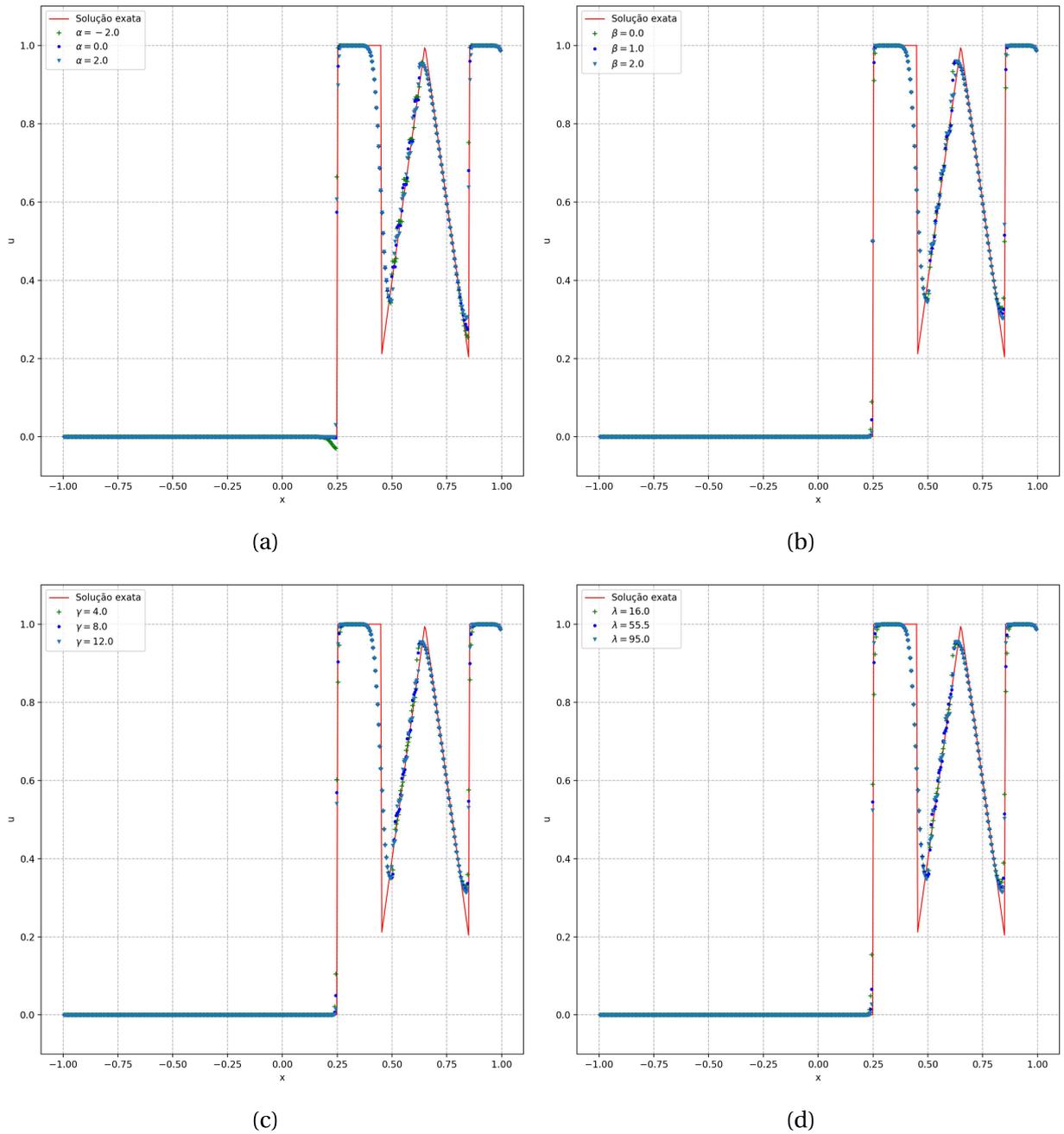


Figura 5.6: Resultados numéricos para $\theta = 0,5$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.6).

Para a condição inicial CI2 (2.2), observando a Figura 5.5 percebe-se que as soluções numéricas estão muito próximas independente do valor do parâmetro livre, com exceção do esquema EPUS no qual a solução numérica com $\lambda = 16$ está mais distante da solução analítica. Salienta-se que a ocorrência da difusividade numérica nas regiões de descontinuidade e picos tanto no caso $\theta = 0,05$ quanto $\theta = 0,5$, este último apresentando difusividade numérica menor porém oscilações mais presentes, principalmente no esquema TOPUS com $\alpha = -2$.

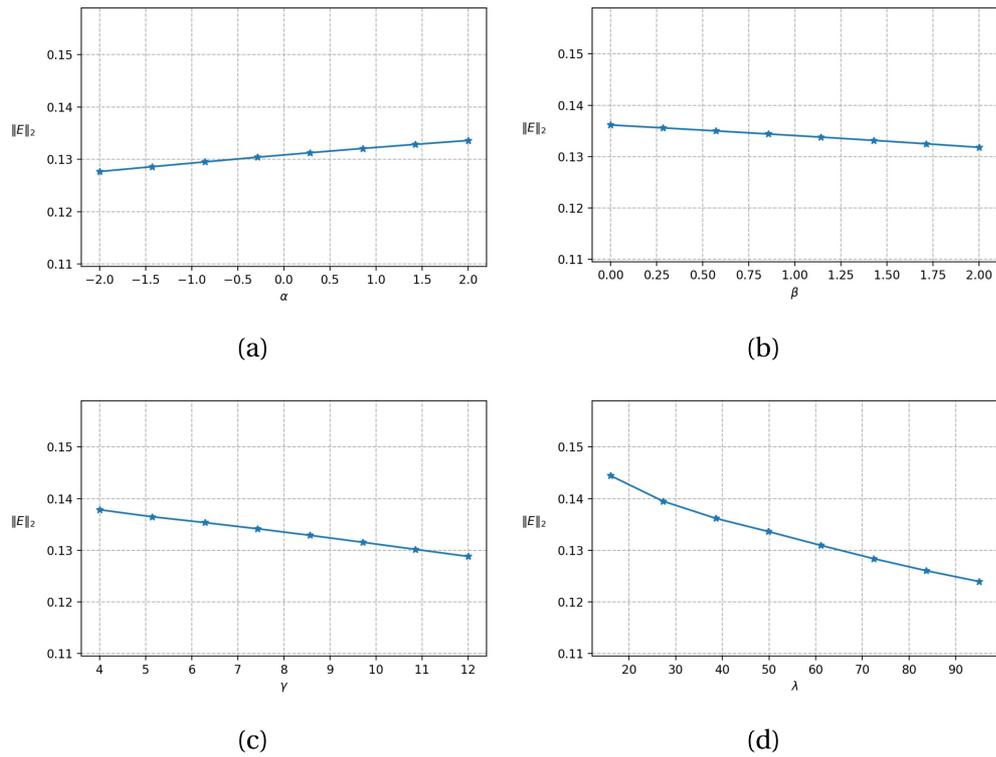


Figura 5.7: Erros obtidos $\|E\|_2$ (equação 2.25) para $\theta = 0,05$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.6).

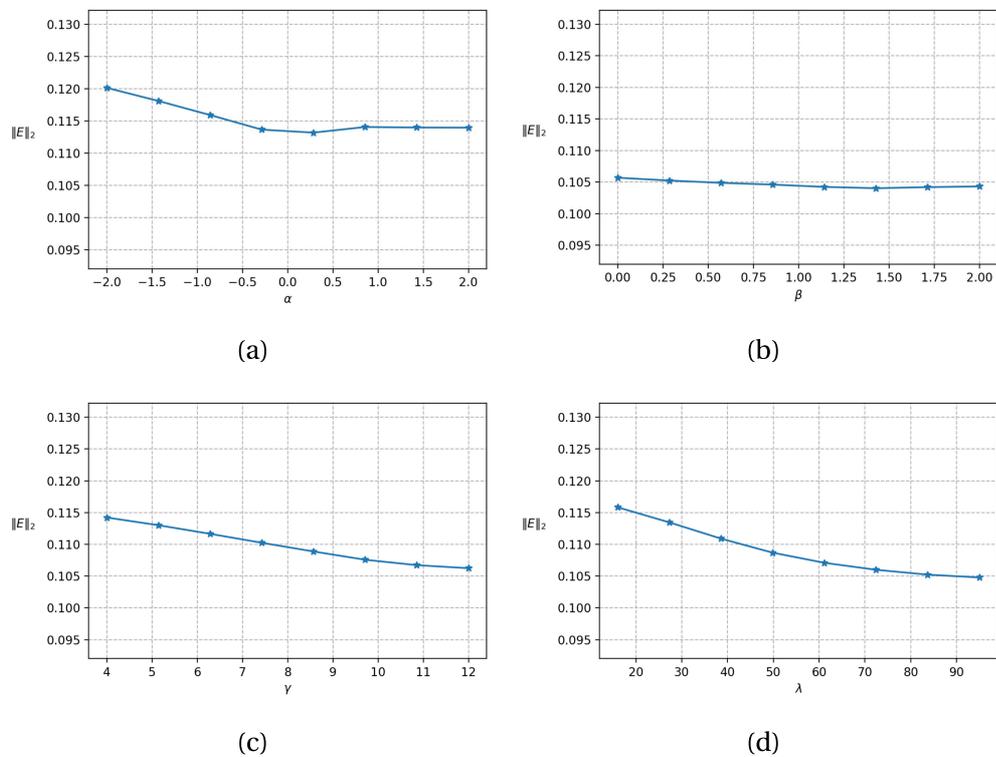


Figura 5.8: Erros obtidos $\|E\|_2$ (equação 2.25) para $\theta = 0,5$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.6).

Por fim, adotam-se para simulação a condição inicial (2.7) em que $x \in [-1, 1]$ e o tempo $t = 0,125$. Os resultados obtidos são apresentados nas Figuras 5.9 até 5.12, para $\theta = 0,05$ e $\theta = 0,5$.

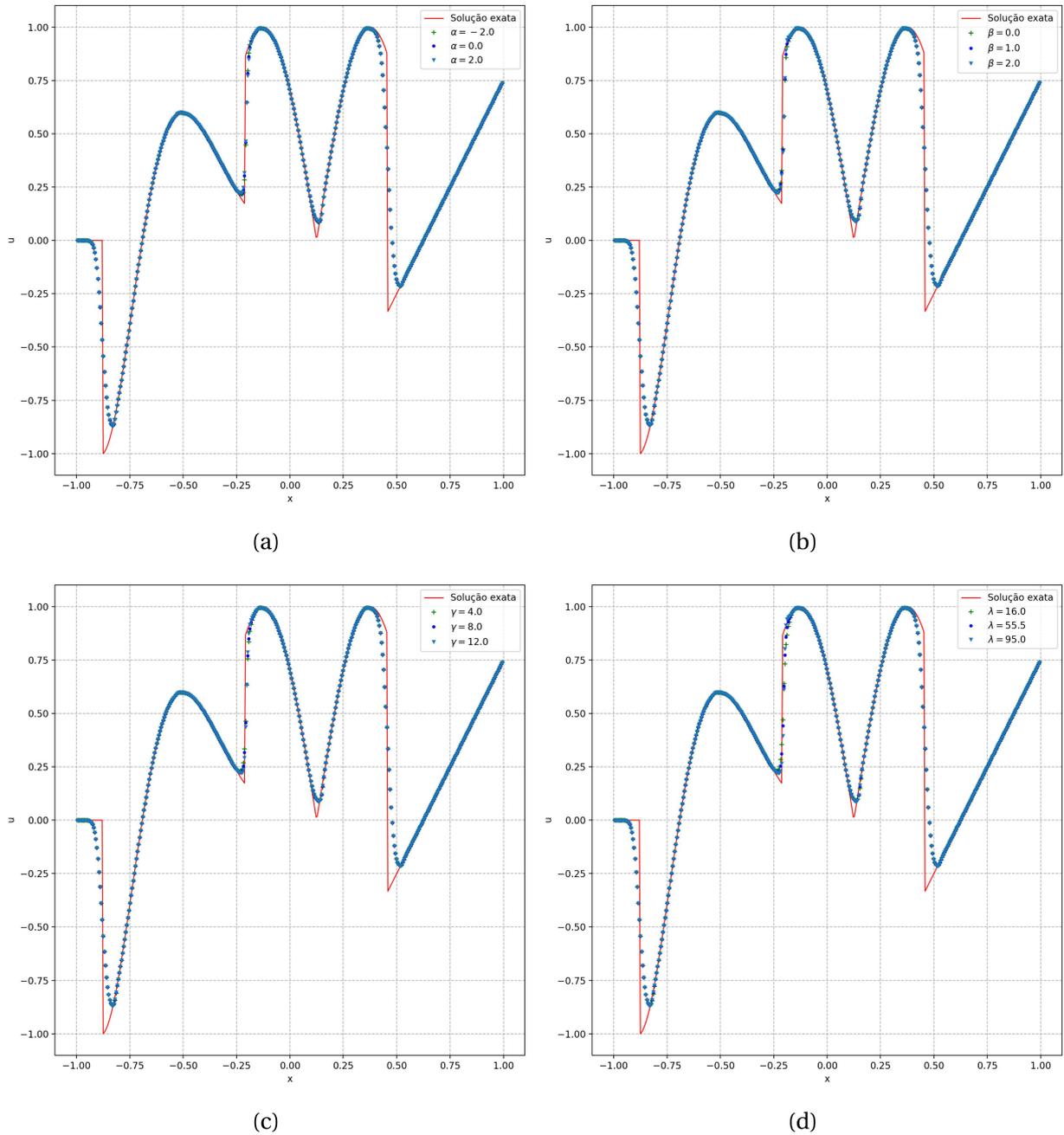


Figura 5.9: Resultados numéricos para $\theta = 0,05$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.7).

A partir das Figuras 5.9 e 5.10 tem-se que as soluções numéricas estão muito próximas entre si ao variar o parâmetro livre dos esquemas tanto para $\theta = 0,05$ quanto $\theta = 0,5$, ambos os casos apresentando leve difusividade numérica nas regiões de descontinuidade e suas proximidades.

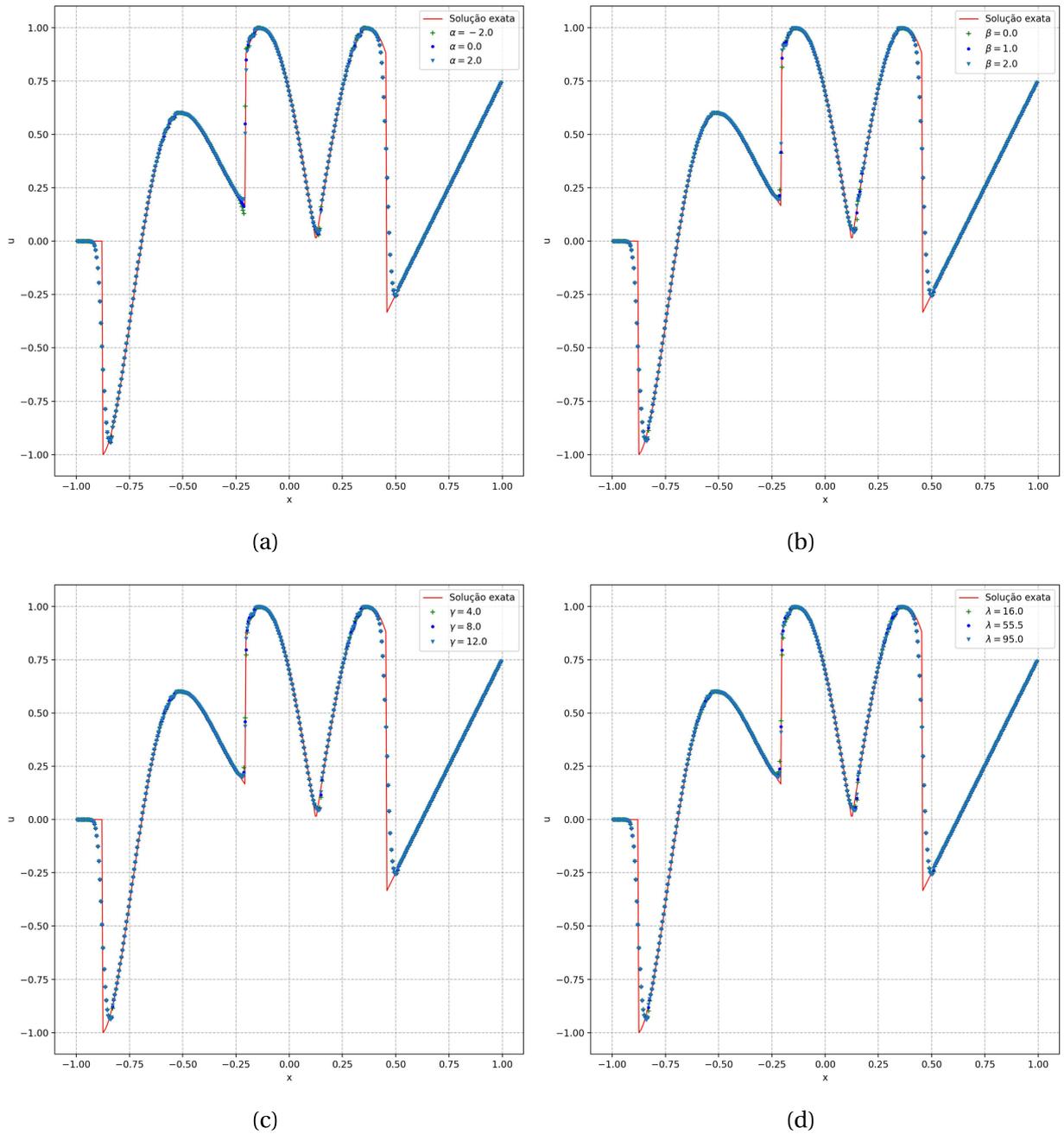


Figura 5.10: Resultados numéricos para $\theta = 0,5$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.7).

Na maioria dos casos, tem-se que as curvas de erro para o esquema FSFL são decrescentes conforme o parâmetro livre β aumenta tendo assim o valor de $\beta = 2$ como uma adequada escolha para se resolver o problema numérico tratado nesta seção.

Salienta-se ainda que os resultados dos esquemas SDPUS-C1 e EPUS estão em concordância com os trabalhos de Lima et al. [43] e Corrêa et al. [16], que também obtiveram os parâmetros $\gamma = 12$ e $\lambda = 95$ como sendo os mais adequados para resolver o problema abordado aqui de transporte de condições iniciais descontínuas.

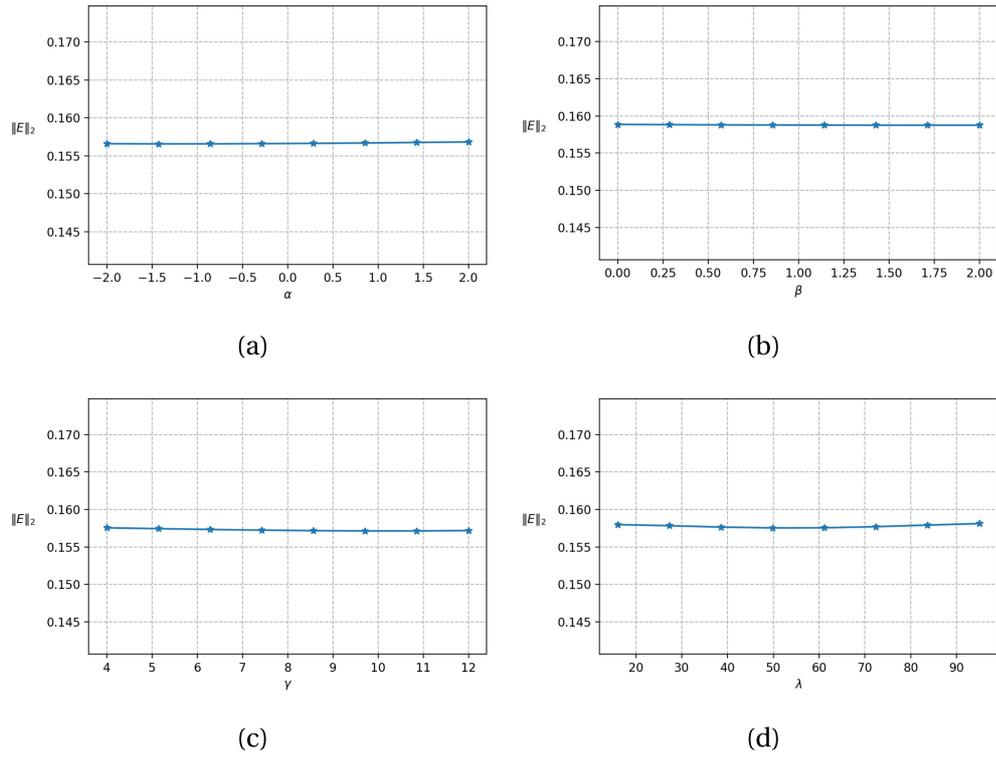


Figura 5.11: Erros obtidos $\|E\|_2$ (equação 2.25) para $\theta = 0,05$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.7).

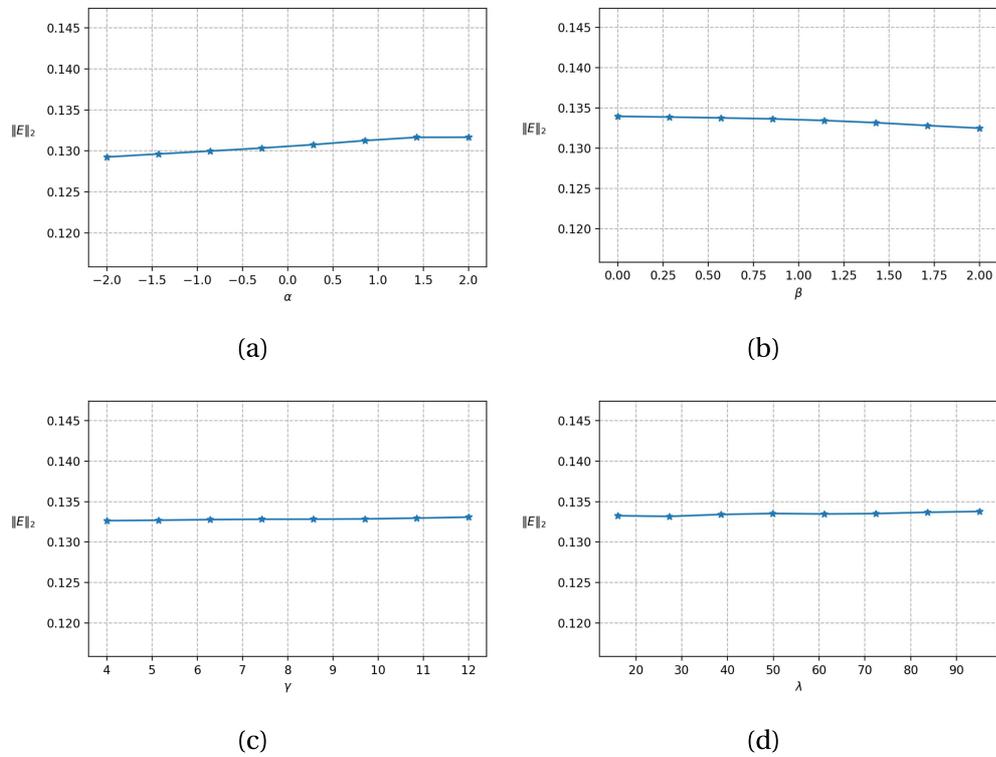


Figura 5.12: Erros obtidos $\|E\|_2$ (equação 2.25) para $\theta = 0,5$ variando o parâmetro livre dos esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), para a condição inicial (2.7).

A Tabela 5.1 mostra os esquemas que obtiveram melhores resultados para cada um dos experimentos dessa seção bem como o parâmetro livre utilizado.

Condição inicial	$\theta = 0,05$	$\theta = 0,5$
CI1 (Equação 2.5)	FSFL $\beta = 2$	EPUS $\lambda = 16$
CI2 (Equação 2.6)	EPUS $\lambda = 95$	FSFL $\beta = 2$
CI3 (Equação 2.7)	TOPUS $\alpha = 2$	TOPUS $\alpha = -2$

Tabela 5.1: Esquema e valor de parâmetro livre que apresentou resultados mais próximos da solução analítica (menor erro) para cada condição inicial e número de Courant.

Para as condições iniciais (2.5) e (2.6), utilizando número de Courant $\theta = 0,5$, nota-se que o esquema TOPUS apresenta uma melhoria de desempenho, em termos de exatidão, com $\alpha = 2$. Destacam-se que os resultados obtidos aqui usando o esquema TOPUS estão condizentes com aqueles já alcançados por Queiroz [51].

Ao observar os gráficos de erro das Figuras 5.3, 5.4, 5.7, 5.8, 5.11, 5.12 nota-se um valor elevado para o erro numérico entre as soluções obtidas e a solução analítica. O erro elevado se justifica pelas condições iniciais utilizadas, estas que apresentam regiões de picos e descontinuidades que são difíceis de capturar, sendo necessário uma malha refinada com um maior número de pontos. Tomando como exemplo a Figura 5.1, a região compreendida entre $x \in [1, 1; 1, 2]$ e $x \in [1, 5; 1, 6]$ são regiões de pico que cresce rapidamente do valor 0 para o valor 1 em seu centro. Na região central nota-se que as soluções numéricas apresentam valores entre 0,6 e 0,8 onde a solução analítica tem o valor 1, ao calcular o erro e somar todas essas diferenças tem-se um erro total elevado.

5.2 Camada Limite

Nesta seção, aborda-se a resolução do problema da camada limite (2.12) empregando os esquemas *upwind* polinomiais em análise neste trabalho. Pretende-se com esse experimento calcular a ordem de exatidão dos esquemas.

Para resolver este problema numericamente, adotam-se $a = 1$ e as condições iniciais e de contorno de modo que possa considerar solução exata (2.13). Os esquemas *upwind* são empregados fixando os esquemas TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 e EPUS com $\alpha = 2$, $\beta = 2$, $\gamma = 12$ e $\lambda = 95$, respectivamente. Fixaram-se estes parâmetros, pois com eles os esquemas

apresentaram resultados satisfatórios no problema anterior investigado (seção 5.1) e em outros experimentos numéricos da literatura [51, 42, 15, 41, 24, 11, 18].

Inicialmente, consideram-se três valores do número de Reynolds $Re = 1, 10, 100$ e, respectivamente, as malhas com 10, 80 e 640 pontos ao longo do eixo $x \in [0, 1]$. O tempo final de simulação foi $t = 0,5$. Sendo N o número de pontos, o espaçamento da malha em relação ao domínio espacial é $\delta x = 1/N$. O espaçamento temporal aqui adotado é $\delta t = 0,01\delta x$. Estes parâmetros foram os mesmos utilizados por Queiroz [51], escolhidos de forma a simular um escoamento laminar utilizando valores pequenos para o número de Reynolds e tempo final de simulação suficiente para atingir um regime estacionário.

A Figura 5.13 mostra os resultados numéricos e soluções exatas deste problema 1D.

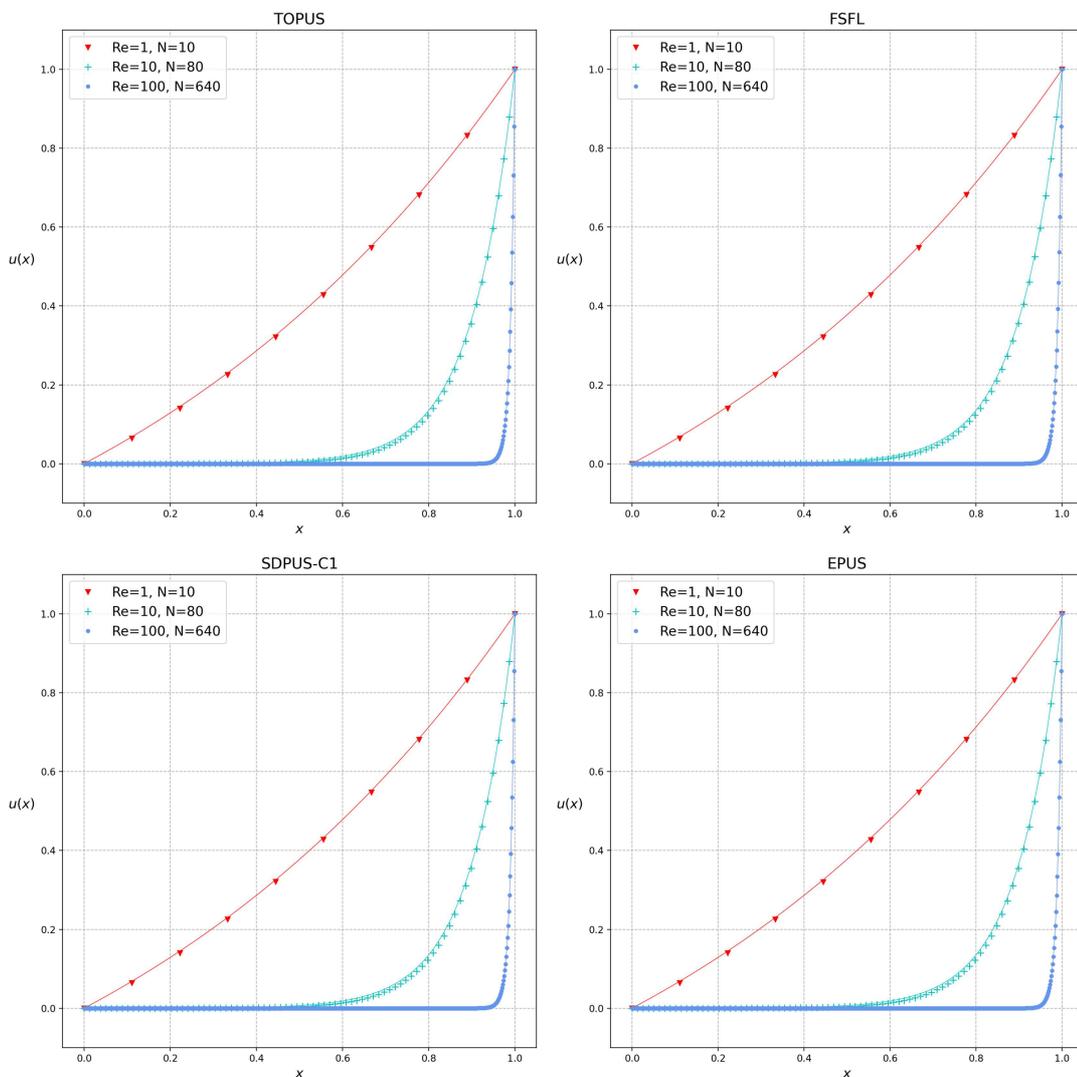


Figura 5.13: Soluções numéricas obtidas comparado com solução analítica (linhas contínuas) para diferentes números de Reynolds e suas respectivas malhas.

Agora, a fim de verificar as ordens de exatidão de cada esquema, resolve-se a equação da camada limite (2.12) fixando $Re = 50$ e as outras condições já empregadas são mantidas. O valor de Reynolds 50 foi escolhido para simular um escoamento laminar bem comportado, facilitando a aproximação numérica da equação da camada limite (2.12) gerando erros menores entre solução numérica e analítica para obter ordens de exatidão com uma boa precisão.

A Tabela (5.2) mostra o número de pontos (N) utilizados na malha, bem como, os erros e as ordens de exatidão calculados usando diferentes normas. A partir desta tabela, nota-se que conforme a malha de pontos é refinada, as ordens de exatidão se aproximam cada vez mais do esperado que é segunda ordem de convergência para o esquema FSFL e terceira ordem para os demais esquemas. Os resultados obtidos nesta tabela estão condizentes com resultados da literatura para estes esquemas [18, 51].

Esquema	N	$\ E\ _1$	Ordem $\ E\ _1$	$\ E\ _2$	Ordem $\ E\ _2$	$\ E\ _\infty$	Ordem $\ E\ _\infty$
TOPUS	80	0,0275	—	0,0202	—	0,0135	—
	160	0,0063	2,1022	0,0045	2,1346	0,0027	2,2868
	320	0,0013	2,2515	0,0009	2,2496	0,0005	2,3446
	640	0,0003	2,3511	0,0002	2,2990	0,0001	2,3164
	1280	0,00004	2,6296	0,00003	2,6994	0,00002	2,5723
FSFL	80	0,0434	—	0,0316	—	0,0211	—
	160	0,0136	1,6565	0,0097	1,6850	0,0058	1,8371
	320	0,0037	1,8663	0,0026	1,8706	0,0015	1,9683
	640	0,0009	1,9871	0,0007	1,9720	0,0004	2,0134
	1280	0,00021	2,1761	0,00015	2,1158	0,00008	2,1013
SDPUS-C1	80	0,0476	—	0,0346	—	0,0231	—
	160	0,0105	2,1651	0,0075	2,1896	0,0045	2,3389
	320	0,0019	2,4188	0,0014	2,4191	0,0008	2,5147
	640	0,0003	2,5053	0,0003	2,4619	0,0001	2,4863
	1280	0,00005	2,7765	0,00003	2,7758	0,00002	2,6594
EPUS	80	0,0631	—	0,0456	—	0,0304	—
	160	0,0141	2,1441	0,0100	2,1625	0,0060	2,3094
	320	0,0025	2,4794	0,0018	2,4803	0,0010	2,5756
	640	0,0004	2,5825	0,0003	2,5453	0,0002	2,5742
	1280	0,00005	2,8542	0,00004	2,8159	0,00002	2,7115

Tabela 5.2: Ordem de convergência para os esquemas TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 e EPUS,

Com os experimentos realizados neste capítulo pode-se observar que mesmo problemas simples 1D conseguem ser desafiadores numericamente quando tratados sob condições adversas como regiões de descontinuidade, alto gradiente, número de Courant eleva-

dos. Com os experimentos realizados é possível observar que a escolha do parâmetro livre influencia na qualidade da solução numérica obtida e que existe diferença entre as soluções numéricas de cada esquema quando comparados entre si. Além disso através da Tabela 5.2 foi possível obter ordens de convergência próximas das ordens teóricas para cada esquema.

6 Escoamentos 2D de Fluidos Incompressíveis

No Capítulo 5 foram abordados vários problemas 1D com o objetivo de verificar a validade dos esquemas *upwind* polinomiais em estudo, bem como comparar os esquemas entre si e diferentes valores de parâmetro livre dos esquemas. Até então os problemas abordados foram tratados utilizando o método de diferenças finitas através de implementação própria. Neste capítulo são abordados problemas de escoamento de fluidos incompressíveis 2D através do método de volumes finitos utilizando a ferramenta OpenFOAM. Problemas de escoamento de fluidos incompressíveis podem ser representados matematicamente pelas equações de Navier-Stokes expressas em (2.14) e (2.15).

Aqui, são abordados dois problemas de escoamento de fluidos 2D clássicos e muito utilizados na literatura para validação numérica: problema da cavidade [10] e o escoamento de Poiseuille [62].

O problema da cavidade consiste no confinamento de um fluido em uma caixa na qual sua parede superior se desloca com velocidade constante ao longo de um eixo gerando um movimento circular de fluido no interior da caixa. O problema de Poiseuille consiste em um escoamento transiente ao longo de duas placas, inicialmente movimentado por um gradiente de pressão e depois escoando até atingir o regime estacionário.

Cada problema abordado é descrito com mais detalhes nas seções seguintes, bem como os parâmetros utilizados em cada simulação. Os esquemas TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 e EPUS foram utilizados valores fixos do parâmetro livre levando em consideração resultados mostrados no Capítulo 5 e os resultados da literatura [42, 42, 41, 18]. Nesse sentido, foi utilizado o esquema TOPUS com $\alpha = 2$, FSFL com $\beta = 2$, SDPUS-C1 com $\gamma = 12$ e EPUS com $\lambda = 95$.

Para o problema da cavidade são realizados experimentos em condições adversas, tais como número de Reynolds elevado e malhas computacionais grosseiras, afim de verificar o comportamento de cada esquema bem como comparar os esquemas entre si. Já o problema do escoamento de Poiseuille, por ser um escoamento laminar mais simples, é utilizado para calcular as taxas de convergência do método numérico, que adota o esquema

upwind polinomial, utilizando valores pequenos para o número de Reynolds.

6.1 Escoamento em uma Cavidade

O escoamento laminar incompressível em uma região quadrada no qual sua parede superior se desloca com uma velocidade uniforme vem sendo utilizado constantemente como um problema modelo para testar e avaliar métodos numéricos [32, 33, 46, 53, 59].

A Figura 6.1 ilustra o problema 2D em questão. As condições de contorno e inicial são apresentadas em (2.23) e (2.21), respectivamente. Consideram-se como parâmetros da geometria e velocidade tais valores: $d = 1\text{ m}$ e $U_x = 1\text{ m/s}$.

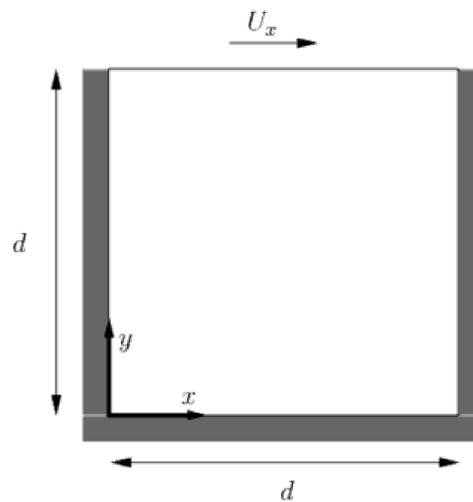


Figura 6.1: Ilustração do problema do escoamento em uma cavidade.

Com a finalidade de validar e comparar os esquemas TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 e EPUS entre si, foram realizados diversos experimentos computacionais e comparações com a literatura. Foram considerados diversos números de Reynolds, variando entre 1000 a 21000 e malhas grosseiras de 128×128 , 64×64 e 32×32 . O trabalho de Ghia et al. [34] é um artigo clássico muito utilizado na literatura para comparação de resultados abordando o problema em termos de função corrente e vorticidade que considera números de Reynolds de 1000 a 10000. Outro trabalho que também aborda o problema em termos de vorticidade e função corrente é o de Erturk et al. [26], considerando números de Reynolds ainda mais altos chegando até 21000. Em ambos os trabalhos os resultados são apresentados em forma de tabelas e gráficos para as componentes x e y da velocidade \mathbf{u} no centro da região de escoamento e são utilizados como principais referência nos experimentos seguintes.

Os experimentos computacionais realizados podem ser divididos em 3 partes:

- primeiro utilizando o trabalho [34] como referência, considerando Reynolds de 1000 e 7500 no tempo final de 300 segundos e utilizando malhas de 128×128 , 64×64 e 32×32
- segundo utilizando a referência [26] para Reynolds variando de 1000 à 21000 e uma malha fixa de 128×128 e também no tempo final de 300 segundos
- em terceiro lugar utilizando novamente o artigo [26] e mesmos valores de Reynolds porém utilizando como critério de parada o resíduo temporal da solução numérica e o número de iterações para se atingir um resíduo mínimo estipulado

Para o primeiro experimento tem-se que a Figura 6.2 mostra a magnitude da velocidade \mathbf{u} e linhas de corrente para Reynolds 1000 (a esquerda) e 7500 (a direita). Observando os resultados da Figura 6.2, nota-se que todos os esquemas testados obtiveram resultados muito próximos entre si e qualitativamente condizentes com o esperado, tanto para Reynolds 1000 quanto para 7500. Resultados numéricos e comparações matemáticas serão feitas a seguir para validar os resultados. Além disso pode-se notar o aumento do diâmetro da região de recirculação ao aumentar o número de Reynolds de 1000 para 7500.

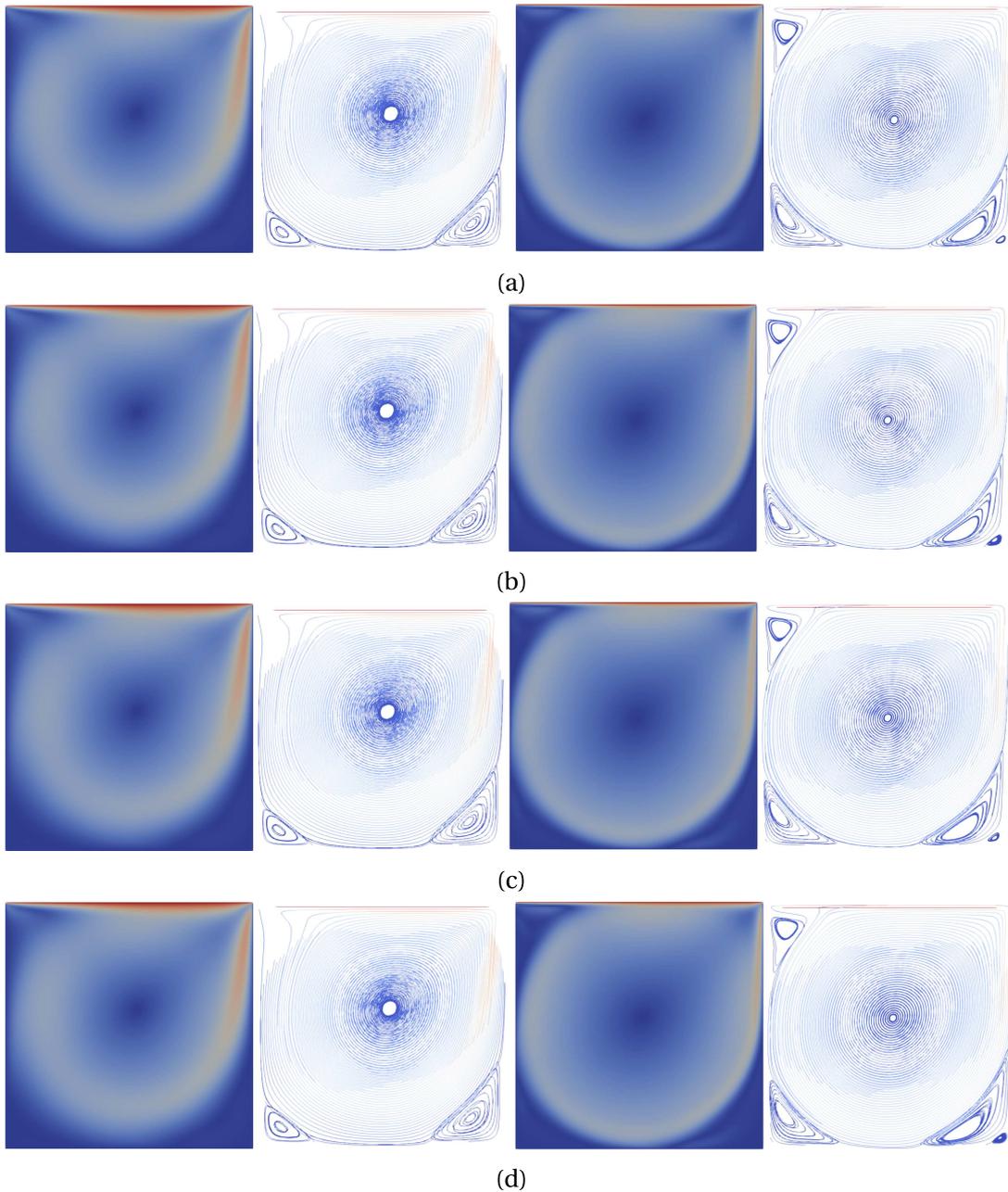


Figura 6.2: Magnitude da velocidade \mathbf{u} (valores entre 0 e 1 m/s , do azul ao vermelho) e linhas de corrente para Reynolds 1000 (a esquerda) e 7500 (a direita), para os esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d), tempo final de 300 segundos.

As Figuras 6.3 e 6.4 mostram a componente x e y da velocidade \mathbf{u} , respectivamente, para Reynolds igual a 1000, tomadas no centro do canal, $x = 0.5$ ao longo do eixo y e $y = 0.5$ ao longo do eixo x . Os mesmos resultados são mostrados nas Figuras 6.5 e 6.6 para Reynolds 7500. Em linhas contínuas estão os resultados numéricos obtidos para cada esquema, considerando uma malha de 128×128 , e os pontos marcados são os resultados das tabelas I e II do artigo de referência [34].

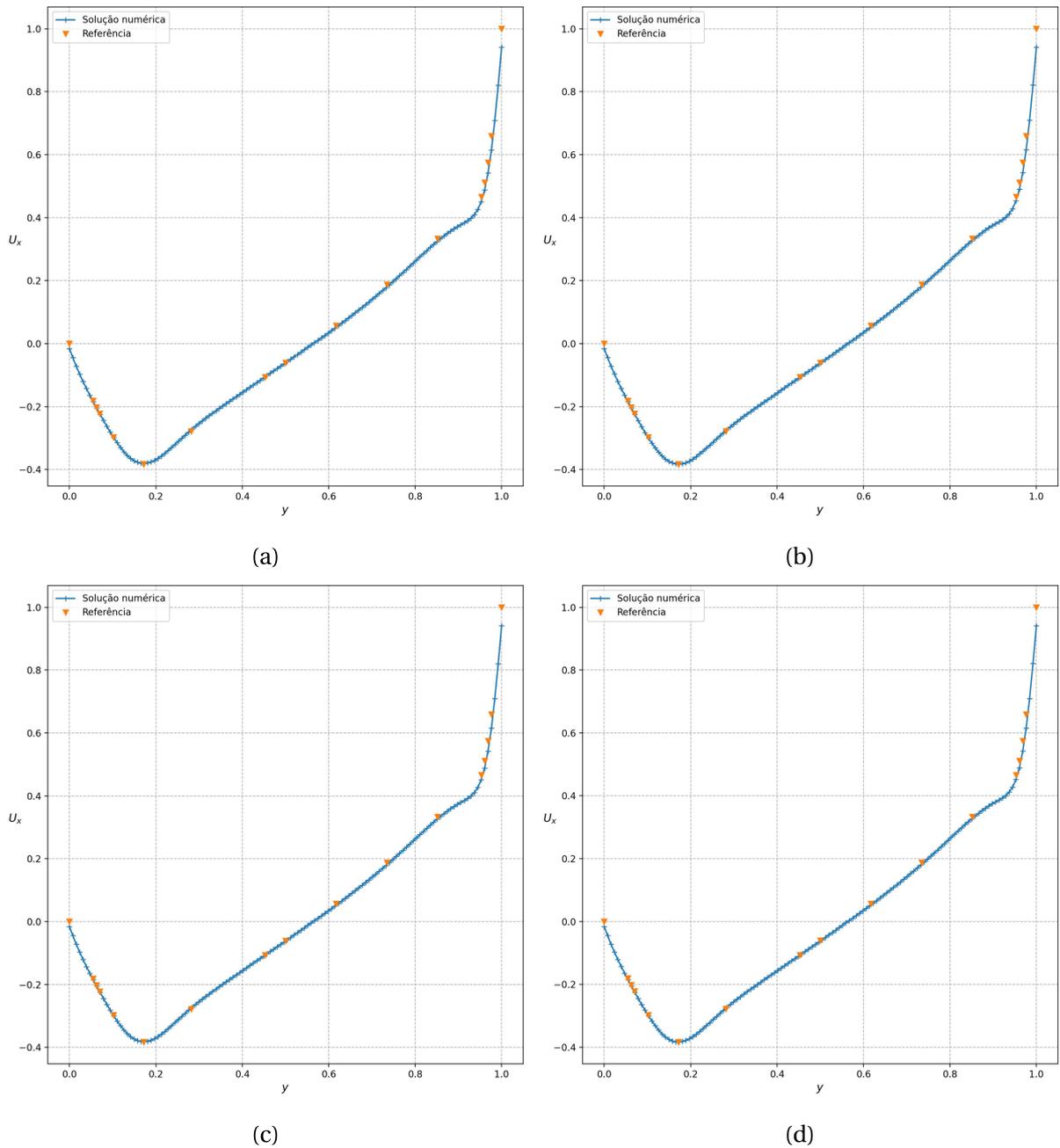


Figura 6.3: Solução numérica (linhas contínuas) e solução de referência [34] (pontos) da componente x da velocidade em $x = 0,5$ ao longo do eixo y para Reynolds 1000: (a) TOPUS, (b) FSFL, (c) SDPUS-C1 e (d) EPUS, utilizando uma malha de 128×128 pontos, tempo final de 300 segundos.

Ao observar as Figuras 6.3-6.6 tem-se que os resultados numéricos para todos os esquemas estão muito próximos dos resultados de referência para Reynolds igual a 1000 e mais distantes para Reynolds fixado em 7500, além disso os resultados numéricos para a componente x da velocidade \mathbf{u} estão mais próximos do que os resultados da componente y .

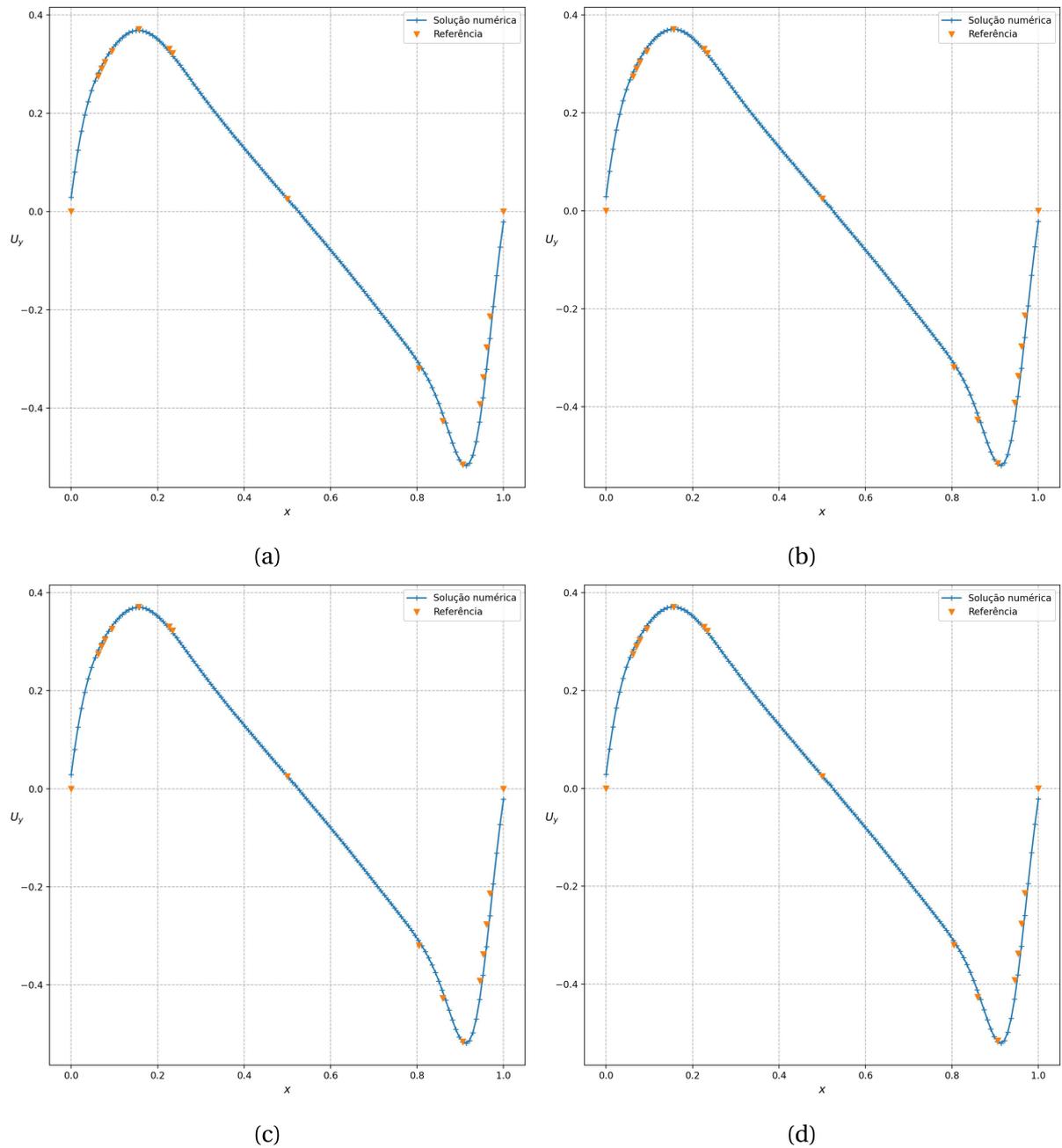


Figura 6.4: Solução numérica (linhas contínuas) e solução de referência [34] (pontos) da componente y da velocidade em $y = 0,5$ ao longo do eixo x para Reynolds 1000: (a) TOPUS, (b) FSFL, (c) SDPUS-C1 e (d) EPUS, utilizando uma malha de 128×128 pontos, tempo final de 300 segundos.

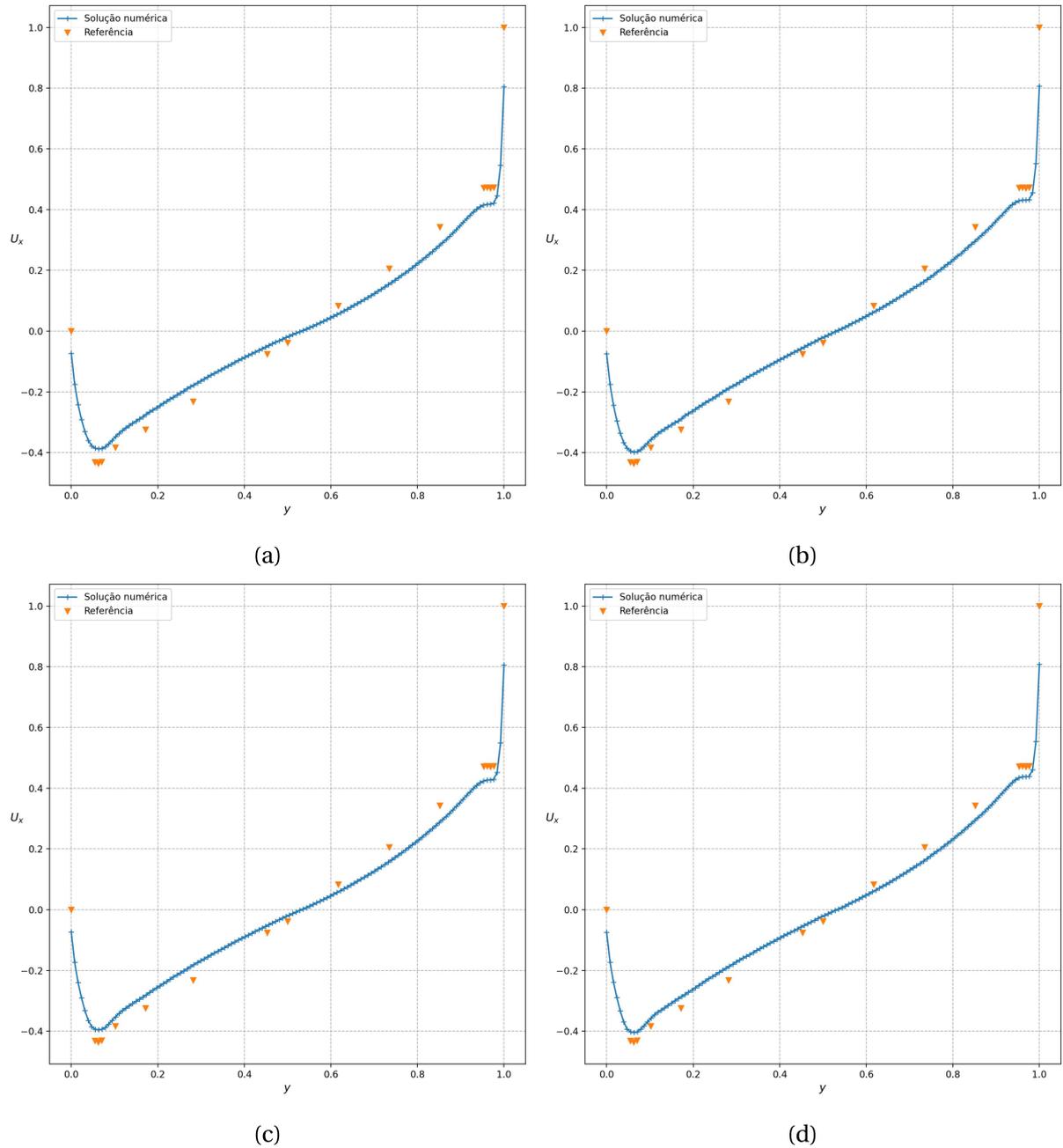


Figura 6.5: Solução numérica (linhas contínuas) e solução de referência [34] (pontos) da componente x da velocidade em $x = 0,5$ ao longo do eixo y para Reynolds 7500: (a) TOPUS, (b) FSFL, (c) SDPUS-C1 e (d) EPUS, utilizando uma malha de 128×128 pontos, tempo final de 300 segundos.

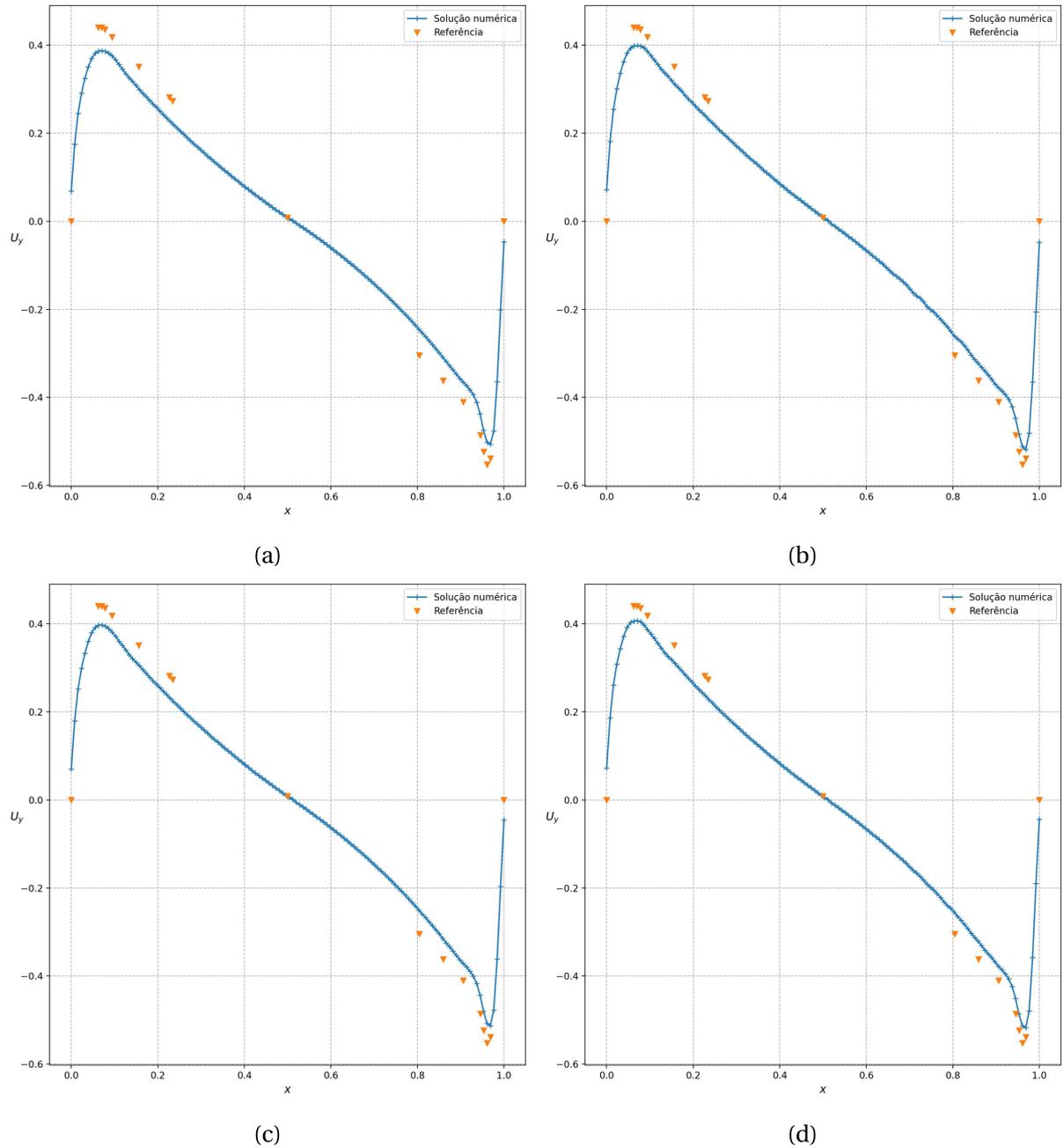


Figura 6.6: Solução numérica (linhas contínuas) e solução de referência [34] (pontos) da componente y da velocidade em $y = 0,5$ ao longo do eixo x para Reynolds 7500: (a) TOPUS, (b) FSFL, (c) SDPUS-C1 e (d) EPUS, utilizando uma malha de 128×128 pontos, tempo final de 300 segundos.

A fim de melhor comparar os esquemas entre si e em relação aos resultados de referência, foi calculado o erro $\|E\|_2$ entre a solução numérica obtida em cada esquema e a solução de referência [26]. A Tabela 6.1 mostra os resultados obtidos.

Esquema \ Malha		Componente x			Componente y		
		128×128	64×64	32×32	128×128	64×64	32×32
Re 1000	TOPUS	0,03401	0,07730	0,19362	0,01448	0,04644	0,17337
	FSFL	0,03360	0,07393	0,18639	0,01358	0,03337	0,15063
	SDPUS-C1	0,03380	0,07493	0,18799	0,01405	0,03945	0,15984
	EPUS	0,03359	0,07386	0,18390	0,01387	0,03437	0,14811
Re 7500	TOPUS	0,11144	0,26277	0,40798	0,06719	0,22617	0,41214
	FSFL	0,10438	0,24907	0,39522	0,05118	0,19345	0,38953
	SDPUS-C1	0,10655	0,25210	0,39576	0,05537	0,20153	0,38591
	EPUS	0,10152	0,24401	0,38450	0,04411	0,18406	0,36894

Tabela 6.1: Erro $\|E\|_2$ entre as solução numérica e dados de referência [34] no tempo final de 300 segundos.

Neste experimento foram utilizadas malhas mais grosseiras de 32×32 e 64×64 , além da malha mais refinada de 128×128 pontos, com o objetivo de validar a redução do erro numérico entre solução numérica e analítica conforme a malha é refinada. Ao observar os resultados numéricos com as malhas mais grosseiras, principalmente a 32×32 pontos, nota-se com maior facilidade a diferença entre as soluções numéricas obtidas para cada esquema. A Tabela 6.1 mostra os valores obtidos para o erro $\|E\|_2$ entre as soluções numéricas e de referência. Ao observar os resultados tem-se que o esquema EPUS tem melhor exatidão que os demais esquemas em todos os cenários, apresentando um erro menor em relação as soluções de referência quando comparado aos demais esquemas. Tal observação fica mais ainda evidente considerando malhas mais grosserias de 32×32 e número de Reynolds mais alto 7500. Ao se comparar os esquemas EPUS e TOPUS, em termos de suas formulações e forma como foram construídos, tem-se que o esquema EPUS é um polinômio de maior grau, conseqüentemente necessitando de mais condições para ser construído, como a continuidade da derivada segunda, o que torna o esquema EPUS mais robusto que os demais esquemas.

Os resultados também podem ser observados graficamente na Figura 6.7.

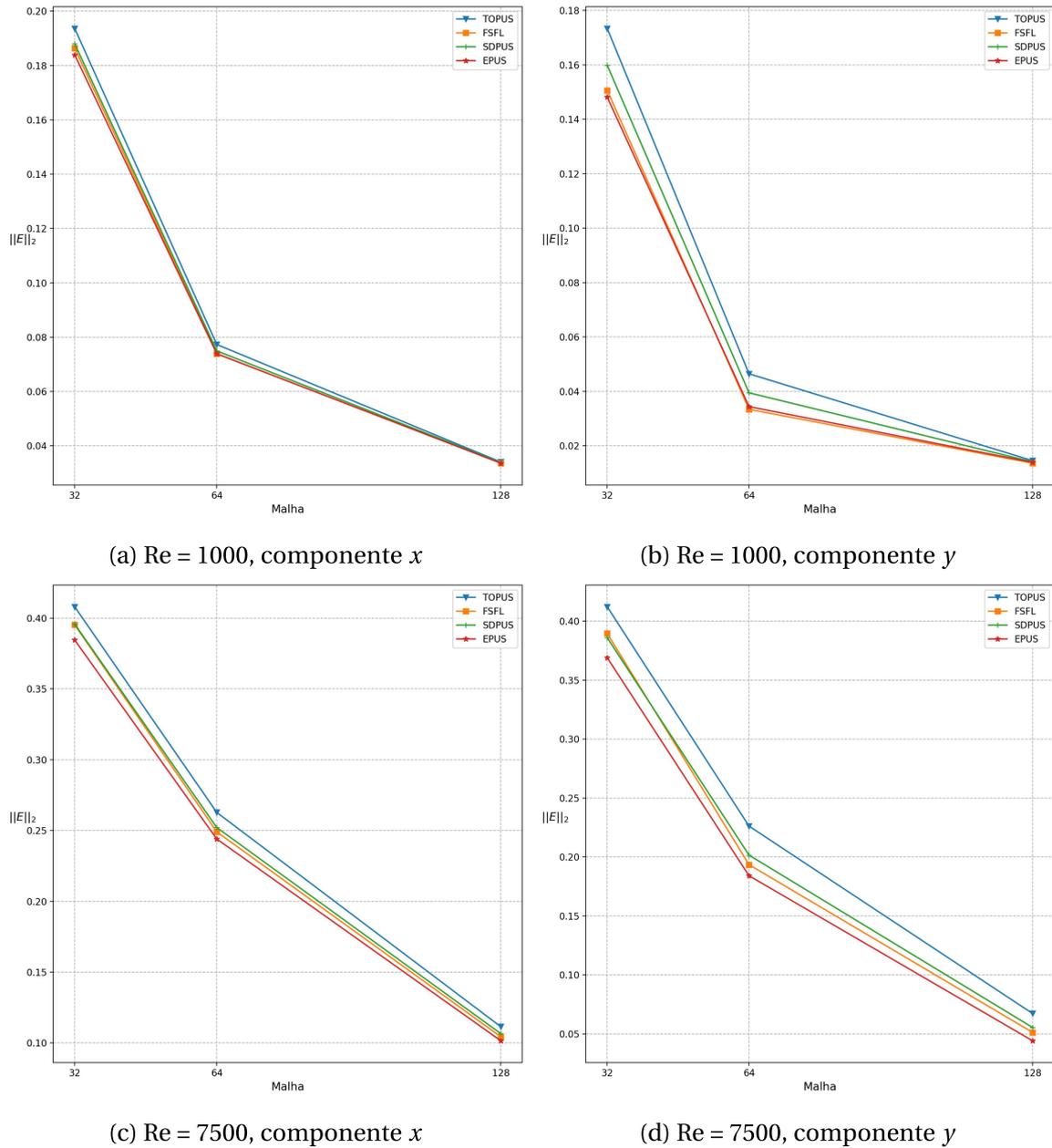


Figura 6.7: Erro $\|E\|_2$ entre solução numérica e os dados de referência [34] no tempo final de 300 segundos.

Com a finalidade de reforçar os resultados dos experimentos anteriores um segundo experimento foi realizado considerando números de Reynolds mais elevados. Foi utilizado valores entre 1000 e 21000 para o número de Reynolds considerando uma malha fixa de 128×128 células computacionais e um tempo final de 300 segundos. A Figura 6.8 mostra os resultados obtidos para o erro $\|E\|_2$ entre as soluções numéricas e de referência [26] para as componentes x e y , respectivamente.

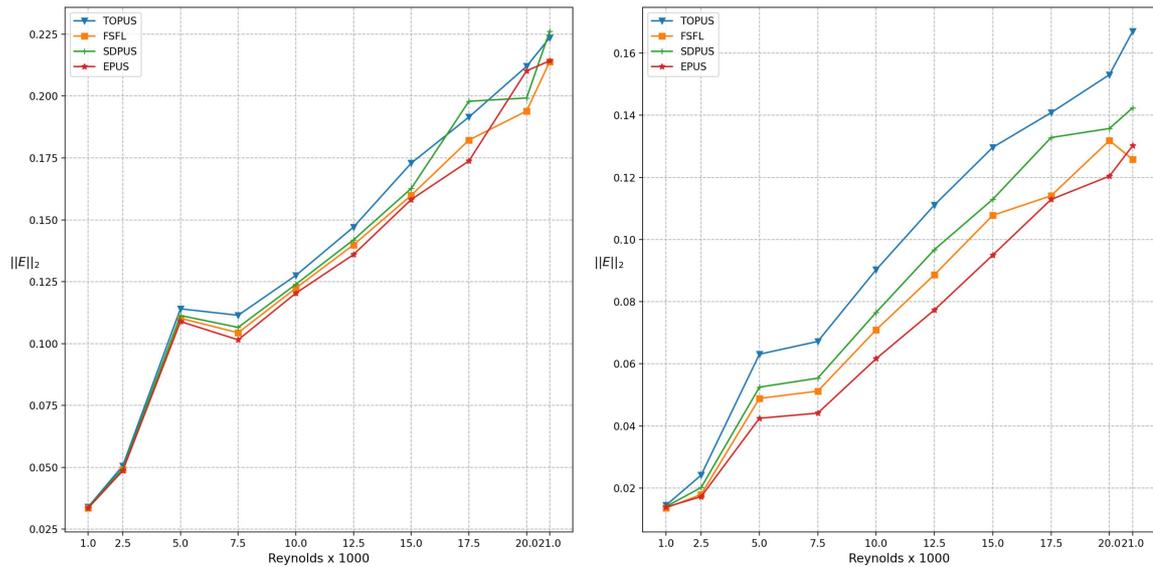


Figura 6.8: Erro entre solução numérica e solução de referência [26] para a componente x (a) e y (b) da velocidade ao variar o número de Reynolds mantendo uma malha fixa de 128×128 no tempo final de 300 segundos.

Observando os resultados nota-se que conforme o número de Reynolds aumenta o erro aumenta de forma significativa para todos os esquemas considerados, pois o escoamento se torna menos viscoso e mais turbulento dificultando ainda mais a solução numérica, além de exigir um tempo de simulação maior para atingir o regime estacionário (ou nem mesmo o atingir). Além disso, com o aumento do número de Reynolds é necessário um refinamento de malha para se obter resultados numéricos precisos, capturar regiões de recirculação e outros efeitos inerentes ao escoamento, os resultados mostrados consideram uma malha fixa de 128×128 pontos o que aumenta consideravelmente o erro conforme o número de Reynolds aumenta. Tem-se que os esquemas EPUS e SDPUS-C1 são os que apresentam menor erro em comparação com os demais neste experimento de forma que suas curvas de erro estão abaixo dos demais esquemas conforme o número de Reynolds aumenta, tanto para a componente x quanto y da velocidade. No entanto, como mencionado anteriormente, é necessário um refinamento de malha à medida que o número de Reynolds aumenta para garantir maior embasamento na comparação entre os esquemas para Reynolds elevados. Para uma malha fixa de 128×128 , nota-se uma vantagem para o esquema EPUS que apresenta menor erro $\|E\|_2$ em comparação com os demais esquemas o que fica mais evidente conforme o número de Reynolds aumenta para valores mais elevados.

A Figura 6.9 mostra os resultados obtidos para a magnitude de velocidade utilizando o esquema EPUS conforme o número de Reynolds aumenta até 21000. É possível notar regiões de recirculação maiores para Reynolds mais altos.

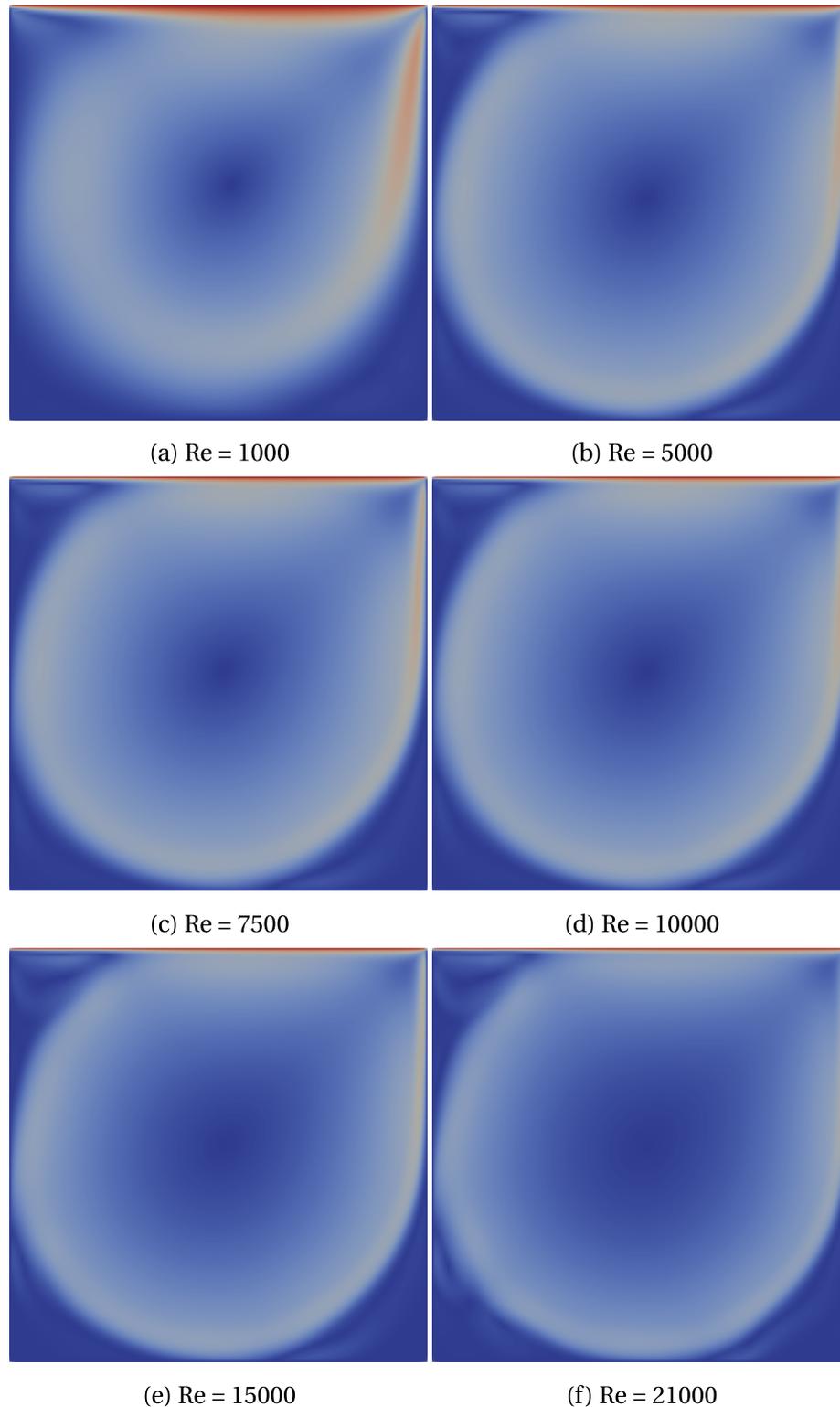


Figura 6.9: Esquema EPUS para vários números de Reynolds. Magnitude de velocidade de 0 a 1 m/s no tempo final de 300 segundos.

Um terceiro experimento computacional foi realizado envolvendo este problema da cavidade, desta vez com o intuito de utilizar outro critério de comparação entre os esquemas, além do erro $\|E\|$ entre as soluções numéricas e de referência. Neste experimento é utilizado como critério o número de iterações que cada esquema precisa para se atingir um valor fixo de resíduo temporal. Considerando o valor 10^{-3} como o valor mínimo de resíduo temporal a ser atingido para a componente y da velocidade, a Figura 6.10 mostra o número de iterações que cada esquema precisou para atingir este valor de resíduo para cada valor de Reynolds. Ao observar os resultados obtidos, nota-se que o esquema TOPUS é o que necessita de menos iterações para atingir o resíduo mínimo estabelecido para a componente y da velocidade e o esquema SDPUS-C1 ficando bem próximo. Apesar dos experimentos anteriores o esquema EPUS ter melhor exatidão em comparação com os demais esquemas, no entanto, tem-se que o mesmo necessita de mais iterações do que os demais esquemas para se atingir o critério de resíduo mínimo definido. O esquema SDPUS-C1 por sua vez fica mais próximo do esquema TOPUS nessa comparação e também apresenta bons resultados nos experimentos anteriores com relação ao erro da solução numérica obtida.

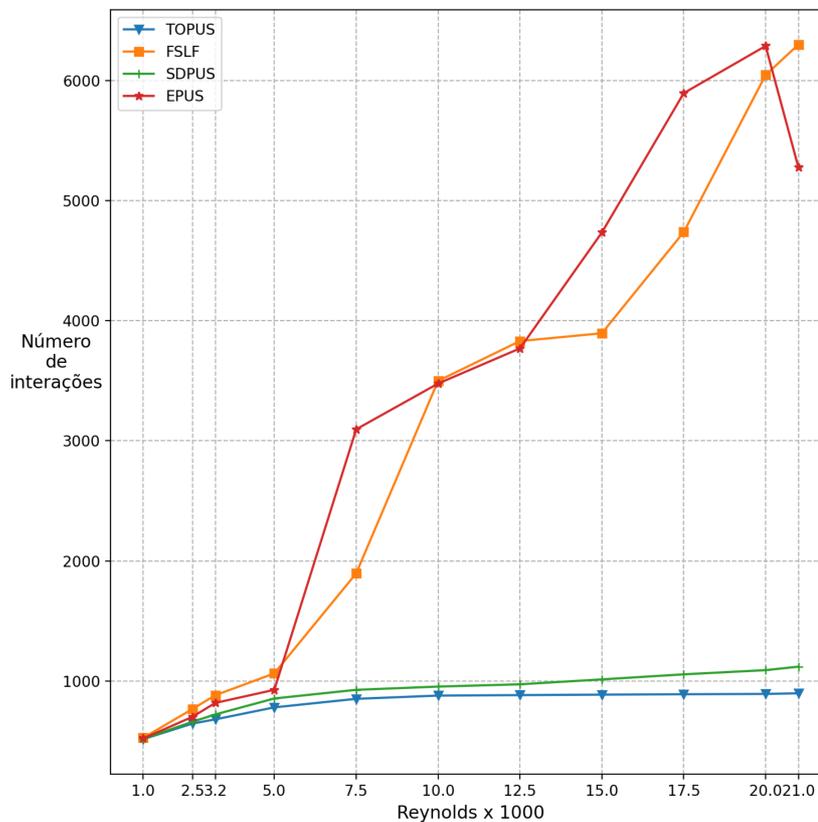


Figura 6.10: Número de iterações considerando um resíduo inicial mínimo de 10^{-3} para cada esquema em diferentes valores de Reynolds, 128×128 .

Com os experimentos realizados, nota-se a dificuldade numérica em se obter soluções numéricas de boa qualidade para o problema do escoamento em uma cavidade quando são utilizados número de Reynolds elevados e malhas grosseiras. Ao considerar como critério o erro da solução numérica obtida, os esquemas SDPUS-C1 e EPUS apresentaram os melhores resultados. Já ao considerar como critério o número de iterações para se atingir um valor mínimo de resíduo temporal, temos uma vantagem nítida para o esquema TOPUS e também para o esquema SDPUS-C1 em relação aos demais esquemas. Considerando ambos os critérios utilizados, tem-se que o esquema SDPUS-C1 é um esquema interessante que combina bons resultados numéricos e um número menor de iterações para se atingir um resíduo temporal. De forma geral, todos os esquemas apresentaram resultados satisfatórios para a solução numérica, não apresentando oscilações bruscas ou anomalias mesmo em situações adversas onde o número de Reynolds é elevado, bem como com malhas simples e com poucos elementos.

6.2 Escoamento de Poiseuille

O escoamento de Poiseuille [62] consiste no escoamento transiente entre duas placas situadas a uma distância D entre si formando um tubo de comprimento L . Inicialmente o fluido é movimentado por um gradiente de pressão e escoar através do canal até atingir o regime estacionário. Este problema é clássico na literatura e muito utilizado em experimentos computacionais com diversos métodos numéricos e aplicações [13, 47, 67, 57, 56].

Para o problema em questão, têm-se as condições iniciais de velocidade e pressão nulas, $\mathbf{u} = (0, 0)$ e $p = 0$, e como condições de contorno têm-se velocidade constante e gradiente de pressão nulo na parede esquerda do tubo ("inflow") $\mathbf{u} = (1, 0)$ e $\nabla p = 0$, pressão e gradiente de velocidade nula na parede da direita $p = 0$ e $\nabla \mathbf{u} = 0$, nas demais paredes velocidade e gradiente de pressão nula $\mathbf{u} = (0, 0)$ e $\nabla p = 0$.

Para este problema o número de Reynolds é definido como $Re = \frac{D|U|}{\nu}$, onde $|U|$ é a velocidade máxima do escoamento, D o diâmetro do canal e ν a viscosidade. A figura 6.11 ilustra o problema.

Sabe-se que para esse problema [25], a velocidade máxima no centro do canal é



Figura 6.11: Escoamento de Poiseuille em Regime Laminar

dada por:

$$U_x(y) = 4U_c \frac{y}{D} \left(1 - \frac{y}{D}\right) \quad (6.1)$$

Onde U_x é a velocidade no eixo x , D é o diâmetro do canal e U_c é a velocidade máxima no canal.

Para os experimentos computacionais descritos nesta seção foi considerado dimensões $L \times 10L$, espaço de tempo $\delta t = 1$, ao longo de 1000 segundos, com velocidade de escoamento inicial e máxima de $U_x = 1,468 m/s$. Com esses parâmetros, considerando $L = 10$, ou seja, uma malha de 10×100 pontos, cada esquema foi executado e ao final da execução foi obtido a componente x da velocidade no centro do canal e comparado com a solução da equação 6.1. A figura 6.12 mostra os resultados obtidos.

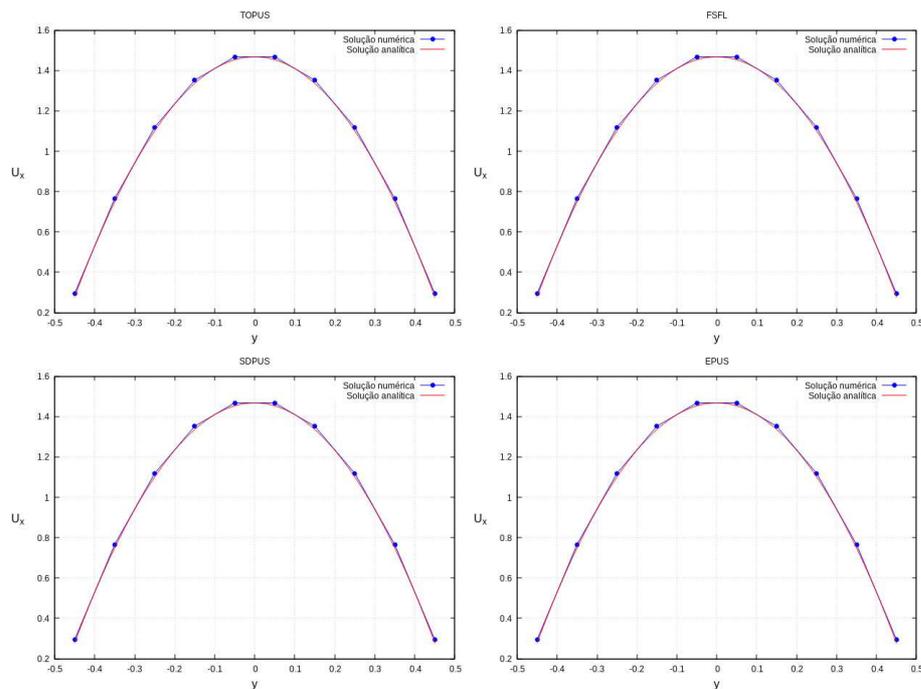


Figura 6.12: Magnitude da velocidade no centro do canal, Reynolds 100, malha de 100×10 pontos.

A figura 6.13 mostra a magnitude de velocidade obtida em cada simulação realizada empregando os esquemas.

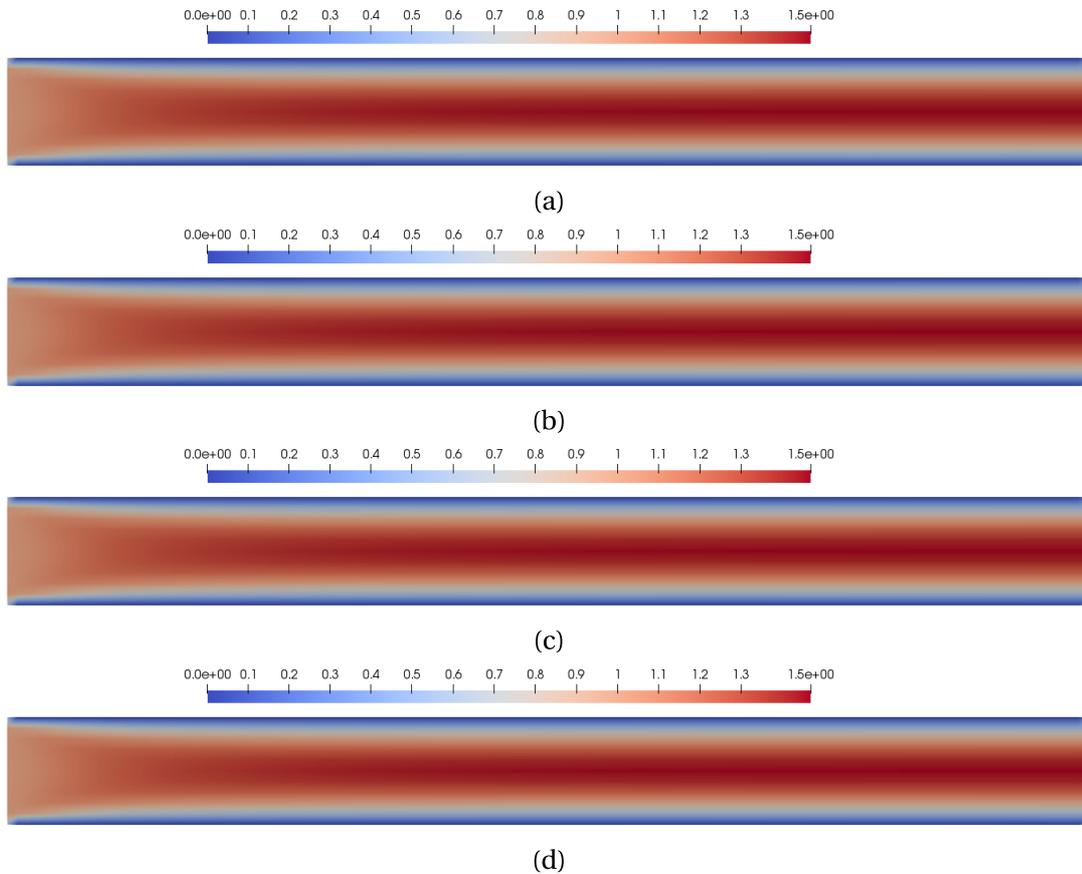


Figura 6.13: Magnitude da velocidade \mathbf{u} para os esquemas TOPUS (a), FSFL (b), SDPUS-C1 (c) e EPUS (d).

Ao observar a Figura 6.13, tem-se os esquemas apresentam resultados consistentes e muito próximos entre si com nenhuma diferença qualitativa. Uma diferença entre os esquemas poderá ser notada ao calcular o erro entre a solução de referência e suas ordens de convergência ao refinar a malha, o que é feito a seguir.

Com a finalidade de se estimar a ordem de convergência dos esquemas o experimento anterior foi executado utilizando diferentes malhas cada vez mais refinadas e ao final da execução calculado o erro em diferentes normas. A Tabela 6.2 mostra os resultados obtidos.

Esquema	L x D	$\ E\ _1$	Ordem $\ E\ _1$	$\ E\ _2$	Ordem $\ E\ _2$	$\ E\ _\infty$	Ordem $\ E\ _\infty$
TOPUS	100 × 10	0,0275	—	0,0202	—	0,0135	—
	200 × 20	0,0063	2,1022	0,0045	2,1346	0,0027	2,2868
	400 × 40	0,0013	2,2515	0,0009	2,2496	0,0005	2,3446
	800 × 80	0,0003	2,3511	0,0002	2,2990	0,0001	2,3164
FSFL	100 × 10	0,0434	—	0,0316	—	0,0211	—
	200 × 20	0,0136	1,6565	0,0097	1,6850	0,0058	1,8371
	400 × 40	0,0037	1,8663	0,0026	1,8706	0,0015	1,9683
	800 × 80	0,0009	1,9871	0,0007	1,9720	0,0004	2,0134
SDPUS-C1	100 × 10	0,0476	—	0,0346	—	0,0231	—
	200 × 20	0,0105	2,1651	0,0075	2,1896	0,0045	2,3389
	400 × 40	0,0019	2,4188	0,0014	2,4191	0,0008	2,5147
	800 × 80	0,0003	2,5053	0,0003	2,4619	0,0001	2,4863
EPUS	100 × 10	0,0631	—	0,0456	—	0,0304	—
	200 × 20	0,0141	2,1441	0,0100	2,1625	0,0060	2,3094
	400 × 40	0,0025	2,4794	0,0018	2,4803	0,0010	2,5756
	800 × 80	0,0004	2,5825	0,0003	2,5453	0,0002	2,5742

Tabela 6.2: Ordem de convergência para os esquemas TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 e EPUS.

Ao observar os resultados obtidos nesta seção tem-se que ambos os esquemas conseguiram obter soluções consistentes para o problema em questão, ficando muito próximos da solução de referência. Além disso as ordens de convergência obtidas estão de acordo com o esperado, segunda ordem para o esquema FSFL e terceira ordem para os demais esquemas.

6.3 Códigos implementados

Os códigos desenvolvidos para os experimentos realizados estão disponíveis em repositórios abertos no github através dos links:

- <https://github.com/mateus96mt/OpenFoam-CFD-problems>
- <https://github.com/mateus96mt/openFoamFluxLimiters>
- <https://github.com/mateus96mt/InterpolationSchemes>

O primeiro repositório contém o código dos problemas simulados nesta seção e o segundo repositório o código da implementação dos esquemas *upwind* para implementação no OpenFoam, o terceiro repositório contém os códigos desenvolvidos na parte 1D. Além

dos códigos, dentro dos repositórios foi escrito uma pequena documentação com orientações para utilização e instalação dos esquemas *upwind* no ambiente OpenFOAM.

7 Conclusões

Neste trabalho foi apresentado o conceito de esquemas *upwind* e suas formulações em variáveis normalizadas e limitadores de fluxo, com foco em esquemas de formulação polinomial. Foram implementados e realizados experimentos computacionais 1D e 2D para os esquemas polinomiais TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 e EPUS utilizando tanto a formulação em variáveis normalizadas quanto a formulação em limitador de fluxo.

Experimentos computacionais 1D utilizando o método de diferenças finitas e a formulação em variáveis normalizadas foram realizados com cada esquema *upwind* em situações adversas tais como com número de Courant moderado, malhas grosseiras, condições iniciais com regiões de descontinuidade brusca e picos. Estes experimentos mostraram que mesmo problemas 1D simples podem representar um grande desafio numérico para o tratamento do termo convectivo nas equações quando submetidos à condições adversas. Nestes experimentos foram testados diferentes valores para o parâmetro livre de cada esquema *upwind*, além da comparação dos esquemas entre si. Foi utilizado como critério o erro entre as soluções numéricas obtidas e soluções analíticas conhecidas para os problemas simulados. Os resultados obtidos direcionam para a escolha do melhor valor de parâmetro livre para cada esquema, de acordo com o problema a ser resolvido. Além disso, nota-se que todos os esquemas testados conseguem obter soluções numéricas de boa qualidade mesmo sob tais condições adversas. Na comparação dos esquemas entre si através dos experimentos realizados, de forma geral, o esquema EPUS teve melhor desempenho apresentando um erro menor entre a solução numérica obtida e as soluções analíticas consideradas. Vale destacar que um refinamento de malha é necessário quando considerado número de Reynolds mais elevados nos experimentos, os resultados, comparações e conclusões deste trabalho consideram os experimentos realizados e malhas fixas para Reynolds elevados.

Além dos experimentos 1D com a finalidade de comparação entre esquemas e valores de parâmetro livre também foi utilizado o problema da camada limite com o objetivo de se obter as ordens de convergência de cada esquema. As ordens de convergência obtidas foram próximas dos valores teóricos esperados, uma vez que a ordem de convergência obtida

tem influência direta da aproximação de todos os termos das equações resolvidas, como o termo difusivo e outros erros numéricos.

Experimentos computacionais 2D utilizando o método de volumes finitos com a ferramenta OpenFOAM e a formulação por limitadores de fluxo também foram realizados. Nestes experimentos foram adotados números de Reynolds elevados e um refinamento de malha. Foi utilizado o problema do escoamento em uma cavidade considerando como referência soluções clássicas da literatura com resultados refinados. As soluções de referência foram comparadas com os resultados numéricos obtidos empregando os esquemas *upwind* testados considerando diferentes níveis de refinamento de malha. Como critério de avaliação da qualidade da solução numérica obtida por cada esquema, foi utilizado normas de erro entre a solução obtida e as soluções de referência, Além disso, o número de interações até se atingir um resíduo temporal mínimo foi adotado como condição de parada. Ao observar os resultados obtidos tem-se que todos os esquemas testados conseguem obter soluções de boa qualidade quando comparado com as soluções de referência, mesmo utilizando malhas grosseiras e número de Reynolds elevados. Ao compararmos os esquemas entre si, considerando como critério o erro entre a solução obtida e a solução de referência, nota-se uma vantagem para o esquema EPUS, este apresentando um erro menor quando comparado com os demais esquemas, o que fica mais evidente conforme o número de Reynolds aumenta. Novamente vale destacar, para um maior embasamento nas comparações, a necessidade de um refinamento de malha ao utilizar número de Reynolds elevados, as comparações feitas aqui consideram uma malha fixa de 128×128 pontos. Ao analisar o número de interações necessário que cada esquema necessita para se atingir um critério de parada baseado no resíduo temporal tem-se uma vantagem nítida para o esquema TOPUS, que necessita de menos interações para atingir tal critério de parada. Ao utilizar ambos os critérios, tanto erro quanto número mínimo de interações para atingir o resíduo mínimo, tem-se que o esquema SDPUS-C1 se sai muito bem em ambas as situações, podendo ser utilizado.

O problema do escoamento de Poiseuille também foi utilizado mas desta vez somente com a finalidade de se obter as ordens de convergência de cada esquema, reforçando os resultados já obtidos nos problemas 1D e condizentes com o esperado.

Em resumo os resultados apresentados neste trabalho tem como objetivo principal

a comparação direta entre os esquemas TOPUS, FSFL, SDPUS-C1 e EPUS entre si e também a melhor escolha de parâmetro livre para cada esquema. Este trabalho contribui com uma análise sistemática, através de experimentos computacionais com variação de parâmetros, de esquemas *upwind* polinomiais utilizando experimentos 1D e 2D. Nestes experimentos, tanto nos problemas 1D quanto 2D, todos os esquemas apresentam soluções de boa qualidade dadas as circunstâncias, porém nota-se uma vantagem para o esquema EPUS em relação aos demais, apresentados de forma geral menor erro nos resultados obtidos. Além disso, este trabalho visa contribuir na implementação e incorporação dos esquemas estudados na ferramenta OpenFOAM, visto que tais esquemas são relativamente recentes e não estão incorporados em tal ferramenta. Os códigos desenvolvidos e implementados neste trabalho na geração de todos os resultados obtidos também ficará disponível de forma gratuita e aberta em repositórios no Github:

- <https://github.com/mateus96mt/OpenFoam-CFD-problems>
- <https://github.com/mateus96mt/openFoamFluxLimiters>
- <https://github.com/mateus96mt/InterpolationSchemes>

Além dos códigos instruções de uso e contextualizações já estão presentes nos repositórios, e tanto o código quanto a documentação pode ser melhorada conforme necessário.

Com trabalhos futuros desta pesquisa, destacam-se:

- Realização de simulações 3D de escoamentos incompressíveis;
- Realizar uma análise de desempenho em termos de tempo computacional necessário na simulação quando se utiliza um esquema *upwind* polinomial.

Bibliografia

- [1] C++. <https://www.cplusplus.com/>. Acessado: 04/12/2021.
- [2] IcoFoam. <https://openfoamwiki.net/index.php/IcoFoam>. Acessado: 04/12/2021.
- [3] OpenFOAM. <https://www.openfoam.com/> ou <https://openfoam.org/>. Acessado: 04/12/2021.
- [4] Python. <https://www.python.org/>. Acessado: 04/12/2021.
- [5] SimpleFoam. <https://openfoamwiki.net/index.php/SimpleFoam>. Acessado: 04/12/2021.
- [6] M. Alves, P. Oliveira, and E. Pinho. A convergent and universally bounded interpolation for the treatment of advection. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 41:47–75, 2003.
- [7] S. Armfield. Finite difference solutions of the Navier-Stokes equations on staggered and non-staggered grids. Computers & Fluids, 20:1–17, 1991.
- [8] M. Arora and P. Roe. A well-behaved TVD limiter for high-resolution calculations of unsteady flow. Journal of Computational Physics, 132:3–11, 1997.
- [9] U. M. Ascher and L. R. Petzold. Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations, volume 61. Siam, 1998.
- [10] J. D. Bozeman and C. Dalton. Numerical study of viscous flow in a cavity. Journal of Computational Physics, 12(3):348–363, 1973.
- [11] M. Candezano, L. Corrêa, E. Cirilo, and R. de Queiroz. Numerical simulation of upwinding schemes applied to complex fluid dynamics equations. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, 41(10):1–15, 2019.
- [12] M. A. C. Candezano, P. Sartori, A. L. A. Simões, and V. G. Ferreira. Numerical solutions of shallow water equations with source term using high-resolution bounded upwind schemes. X Conferência Brasileira de Dinâmica, Controle e Aplicações, page 487, 2011.
- [13] A. Cavaliere, G. De Felice, F. Denaro, and C. Meola. Eulerian and Lagrangian simulation of transport phenomena in multiple or periodical interacting planar jets and wakes versus experimental results. WIT Transactions on Modelling and Simulation, 4, 1970.
- [14] C. Corre and A. Lerat. High-order residual-based compact schemes for advection-diffusion problems. Computers & Fluids, 37:505–519, 2008.
- [15] L. Corrêa. Um novo esquema upwind de alta resolução para equações de conservação não estacionárias dominadas por convecção. Master's thesis, Universidade de São Paulo, 2011.
- [16] L. Corrêa, G. A. B. de Lima, and V. G. Ferreira. Solving fluid dynamics problems using a new polynomial upwind convection scheme. In Dincon'10 9th Brazilian Conference on Dynamics Control and their Applications, 2010.

- [17] L. Corrêa and V. G. Ferreira. Numerical simulation of the fluid dynamics of 3D free surface flows with an upwind convection scheme. Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, 2012.
- [18] L. Correa, G. B. Lima, M. C. Candezano, M. S. Braun, C. Oishi, H. Navarro, and V. Ferreira. A C2-continuous high-resolution upwind convection scheme. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 72(12):1263–1285, 2013.
- [19] M. Darwish. A new high-resolution scheme based on the normalized variable formulation. Numerical Heat Transfer, Part B Fundamentals, 24(3):353–371, 1993.
- [20] G. A. B. de Lima and V. G. Ferreira. Novo esquema convectivo para a computação de problemas em dinâmica dos fluidos. Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, 2010.
- [21] R. de Queiroz, F. Kurokawa, M. Candezano, and L. Corrêa. Numerical investigations of turbulent free surface flows using TOPUS scheme. Computational and Applied Mathematics, 36(3):1145–1160, 2017.
- [22] R. A. De Queiroz, F. A. Kurokawa, and V. G. Ferreira. A polynomial upwind scheme for convection discretization. Departamento de Matemática Aplicada e Estatística, ICMC, USP, 2022.
- [23] R. A. B. de Queiroz. Numerical investigations of turbulent free surface flows using TOPUS scheme and realizable Reynolds stress algebraic model. Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, 3(1), 2015.
- [24] R. A. B. de Queiroz and B. M. Rocha. A high order polynomial upwind scheme for numerical solution of conservation laws and fluid dynamics problems. XI Simpósio de Mecânica Computacional, II Encontro Mineiro de Modelagem Computacional, 2014.
- [25] A. Dupuis. From a lattice Boltzmann model to a parallel and reusable implementation of a virtual river. PhD thesis, Citeseer, 2002.
- [26] E. Erturk, T. C. Corke, and C. Gökçöl. Numerical solutions of 2-d steady incompressible driven cavity flow at high Reynolds numbers. International journal for Numerical Methods in fluids, 48(7):747–774, 2005.
- [27] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Finite volume methods. Handbook of numerical analysis, 7:713–1018, 2000.
- [28] V. Ferreira, F. Kurokawa, R. Queiroz, M. Kaibara, C. Oishi, J. Cuminato, A. Castelo, M. Tomé, and S. McKee. Assessment of a high-order finite difference upwind scheme for the simulation of convection–diffusion problems. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 60(1):1–26, 2009.
- [29] V. G. Ferreira, R. A. de Queiroz, M. A. C. Candezano, G. A. Lima, L. Corrêa, C. M. Oishi, and F. L. Santos. Simulation results and applications of an advection bounded scheme to practical flows. Computational & Applied Mathematics, 31:591–616, 2012.
- [30] J. H. Ferziger, M. Perić, and R. L. Street. Computational methods for fluid dynamics, volume 3. Springer, 2002.

- [31] P. Gaskell and A. Lau. Curvature-compensated convective transport: SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm. International Journal for numerical methods in fluids, 8(6):617–641, 1988.
- [32] K. Ghia, W. HANKEY, JR, and J. Hodge. Study of incompressible Navier-Stokes equations in primitive variables using implicit numerical technique. In 3rd Computational Fluid Dynamics Conference, page 648, 1977.
- [33] K. GHIA, C. SHIN, and U. Ghia. Use of spline approximations for higher-order accurate solutions of Navier-Stokes equations in primitive variables. In 4th Computational Fluid Dynamics Conference, page 1467, 1979.
- [34] U. Ghia, K. N. Ghia, and C. Shin. High-resolutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. Journal of computational physics, 48(3):387–411, 1982.
- [35] A. Harten. ENO schemes with subcell resolution. Journal of Computational Physics, 83(1):148–184, 1989.
- [36] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. Journal of computational physics, 135(2):260–278, 1997.
- [37] H. Jasak. Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows. PhD thesis, 1996.
- [38] F. Kurokawa, V. Ferreira, C. Oishi, and M. Kaibara. A comparison of high order upwind schemes for solving strong convection problems. In Proceedings of the XXVIII CILAMCE-Congresso Ibero Latino-Americano sobre Métodos Computacionais em Engenharia, Porto, Portugal, 2007.
- [39] B. P. Leonard. Simple high-accuracy resolution program for convective modelling of discontinuities. International journal for numerical methods in fluids, 8(10):1291–1318, 1988.
- [40] R. LeVeque. Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. Cambridge Texts in Applied Mathematics, 2002.
- [41] G. Lima, V. G. Ferreira, E. R. Cirilo, A. Castelo, M. A. C. Candezano, I. V. M. Tasso, D. Sano, and L. V. d. A. Scalvi. A continuously differentiable upwinding scheme for the simulation of fluid flow problems. Applied Mathematics and Computation, 218(17):8614–8633, 2012.
- [42] G. A. Lima, L. Corrêa, and V. G. Ferreira. Two upwinding schemes for nonlinear problems in fluid dynamics. In Journal of Physics: Conference Series, volume 285, page 012034. IOP Publishing, 2011.
- [43] G. A. B. d. Lima. Desenvolvimento de estratégias de captura de discontinuidades para leis de conservação e problemas relacionados em dinâmica de fluídos. Master's thesis, Universidade de São Paulo, 2010.
- [44] K. Morton and D. Mayers. Numerical Solution of Partial Differential Equations. Cambridge University Press, second edition, April 2005.
- [45] F. Moukalled, L. Mangani, M. Darwish, et al. The finite volume method in computational fluid dynamics, volume 113. Springer, 2016.

- [46] M. Nallasamy and K. K. Prasad. On cavity flow at high Reynolds numbers. Journal of Fluid Mechanics, 79(2):391–414, 1977.
- [47] A. Naveenraj, M. Karthe, R. S. Kumar, S. Sivaprasath, and M. Vignesh. Computational analysis of developing laminar flow in a pipe. Annals of the Romanian Society for Cell Biology, pages 2064–2076, 2021.
- [48] L. Quartapelle. Numerical solution of the incompressible Navier-Stokes equations, volume 113. Springer Science & Business Media, 1993.
- [49] A. Quarteroni, R. Sacco, and F. Saleri. Numerical mathematics, volume 37. Springer Science & Business Media, 2010.
- [50] R. Queiroz, V. Ferreira, and R. Cuenca. A new high resolution TVD scheme for unsteady flows with shock waves. Trends in Computational and Applied Mathematics, 9(2):311–320, 2008.
- [51] R. A. B. d. Queiroz. Desenvolvimento e teste de esquemas upwind de alta resolução e suas aplicações em escoamentos incompressíveis com superfícies livres. Master's thesis, Universidade de São Paulo, 2009.
- [52] L. Rosenhead. Laminar boundary layers. Clarendon Press, 1963.
- [53] S. Rubin and P. Khosla. Polynomial interpolation methods for viscous flow calculations. Journal of Computational Physics, 24(3):217–244, 1977.
- [54] H. Rusche. Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions. PhD thesis, Imperial College London (University of London), 2003.
- [55] P. Sartori, G. A. Lima, L. Corrêa, M. A. Candezano, and V. G. Ferreira. Avaliação computacional de três esquemas upwind originais. Nono Simposio de Mecânica Computacional, 2010.
- [56] A. Shah, H. Guo, and L. Yuan. A third-order upwind compact scheme on curvilinear meshes for the incompressible Navier-Stokes equations. Commun. Comput. Phys., 5(2–4):712–729, 2009.
- [57] A. Shah and L. Yuan. Flux-difference splitting-based upwind compact schemes for the incompressible Navier–Stokes equations. International journal for numerical methods in fluids, 61(5):552–568, 2009.
- [58] G. Smith. Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods. Clarendon Press, third edition, 1999.
- [59] R. E. Smith Jr and A. Kidd. Comparative study of two numerical techniques for the solution of viscous flow in a driven cavity. NASA Special Publication, 378:61, 1975.
- [60] B. Song, G. Liu, K. Lam, and R. S. Amano. On a higher-order bounded discretization scheme. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 32:881–897, 2000.
- [61] P. K. Sweby. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. SIAM journal on numerical analysis, 21(5):995–1011, 1984.
- [62] L. Thomas. The stability of plane Poiseuille flow. Physical Review, 91(4):780, 1953.

- [63] E. Toro. Riemann Solvers and Numerical methods for fluid Dynamics. Springer, a practical introduction edition, 1991.
- [64] T.-P. Tsai. Lectures on Navier-Stokes equations, volume 192. American Mathematical Soc., 2018.
- [65] A. Varonos and G. Bergeles. Development and assessment of a variable-order non-oscillatory scheme for convection term discretization. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 26:1–16, 1998.
- [66] H. K. Versteeg and W. Malalasekera. An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method. Pearson education, 2007.
- [67] P. Wang, M. T. Ho, L. Wu, Z. Guo, and Y. Zhang. A comparative study of discrete velocity methods for low-speed rarefied gas flows. Computers & Fluids, 161:33–46, 2018.
- [68] N. P. Waterson and H. Deconinck. Design principles for bounded higher-order convection schemes—a unified approach. Journal of Computational Physics, 224(1):182–207, 2007.
- [69] G. Wei and Y. Gu. Conjugate filter approach for solving Burgers’ equation. Journal of Computational and Applied mathematics, 149(2):439–456, 2002.
- [70] Y. V. Yudov, I. G. Danilov, and S. S. Chepilko. Implementation of cfd module in the KOR-SAR thermal-hydraulic system code. Kerntechnik, 80(4):359–365, 2015.