

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS / FACULDADE DE ENGENHARIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM
COMPUTACIONAL**

Maicon William Niebus Odone

**MÉTODOS BASEADOS EM VOLUMES FINITOS APLICADOS A
PROBLEMAS DE DINÂMICA DOS FLUIDOS E DE MUDANÇA DE FASE**

Juiz de Fora
2020

Maicon William Niebus Odone

**MÉTODOS BASEADOS EM VOLUMES FINITOS APLICADOS A
PROBLEMAS DE DINÂMICA DOS FLUIDOS E DE MUDANÇA DE FASE**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal de Juiz de Fora, na área de concentração em Modelagem Computacional, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Modelagem Computacional.

Orientador: Prof. Dr. Elson Magalhães Toledo

Coorientador: Prof. Dr. Luis Paulo da Silva Barra

Juiz de Fora

2020

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

Odone, Maicon William Niebus.

Métodos baseados em volumes finitos aplicados a problemas de dinâmica dos fluidos e de mudança de fase /Maicon William Niebus Odone. -- 2020.

193 p. : il.

Orientador: Elson Magalhães Toledo

Coorientador: Luis Paulo da Silva Barra

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Juiz de Fora, ICE/Engenharia. Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, 2020.

1. Método dos Volumes Finitos. 2. Método de Volumes de Controle baseados em Elementos Finitos. 3. Métodos Numéricos. 4. Método dos Elementos Finitos. 5. OpenFOAM. I. Toledo, Elson Magalhães, orient. II. Silva Barra, Luis Paulo da, coorient. III. Título.

Maicon William Niebus Odone

**MÉTODOS BASEADOS EM VOLUMES FINITOS APLICADOS A
PROBLEMAS DE DINÂMICA DOS FLUIDOS E DE MUDANÇA DE FASE**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal de Juiz de Fora, na área de concentração em Modelagem Computacional, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Modelagem Computacional.

Aprovada em 18 de dezembro de 2020


BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Elson Magalhães Toledo - Orientador
Universidade Federal de Juiz de Fora



Professor Dr. Luis Paulo da Silva Barra - Coorientador
Universidade Federal de Juiz de Fora



Prof. Dr. Leonardo Goliatt da Fonseca - UFJF



Prof. Dr. Bernardo Martins Rocha - UFJF



Prof. Dr. Abimael Fernando Dourado Loula - LNCC



Prof. Dr. José Luis Drummond Alves -
COPPE/UFRJ

Aos meus pais, que sempre me apoiaram e incentivaram minha formação.

Aos meus orientadores, sem os quais este trabalho não existiria

As amizades que foram feitas ao longo dessa jornada.

AGRADECIMENTOS

Aos meu pais, que sempre fizeram sacrifícios e me incentivaram a seguir na carreira acadêmica

Aos meus orientadores, Elson e Luis Paulo, por toda dedicação e paciência que tiveram ao longo dos anos. Muitas vezes foram mais do que orientadores. Foram como pais. Sem vocês este trabalho não existiria.

Aos professores do PPGMC, que por muitas vezes ofereceram ajudas inestimáveis e também contribuíram para a realização deste trabalho.

Aos colegas e amigos do PPGMC, agradeço a amizade e o companheirismo.

Aos funcionários da pós, pela atenção e eficiência nos serviços prestados.

À UFJF e à CAPES pelo apoio financeiro concedido.

A todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho.

A Deus.

RESUMO

Diversas aplicações relacionadas com a mecânica do contínuo tratam de processos como solidificação e derretimento de materiais, convecção natural, tensões e deformações em sólidos, dentre outras. Na indústria bélica, por exemplo, a manufatura de materiais explosivos como granadas de grosso calibre, requer cuidadoso processo de manuseio, preenchimento e resfriamento adequado dos materiais energéticos fundidos em moldes. O monitoramento inadequado destas etapas podem resultar em contrações, trincas, bolhas de ar, e descolamento do material do seu molde, o que pode acarretar desde custos excessivos em sua produção à falhas catastróficas relacionadas ao produto final. Desta maneira, o desenvolvimento de modelos matemáticos, a implementação de técnicas e emprego de ferramentas computacionais existentes permitem o estudo, a previsão e a simulação destes fenômenos com baixo custo financeiro e com resultados tão confiáveis quanto a experimentação. No que tange a metodologias computacionais, técnicas como o Método dos Volumes Finitos e o Método dos Elementos Finitos são amplamente empregados nos processos de discretização e solução dos conjuntos de equações diferenciais parciais que governam os fenômenos encontrados nestes processos. Uma alternativa que reúne características do Método dos Elementos Finitos e do Método dos Volumes Finitos, conhecida por Método de Volumes de Controle Baseado em Elementos Finitos é um dos focos apresentados neste trabalho. Além disso, a ferramenta computacional OpenFOAM, um conjunto de aplicações de código aberto voltados a problemas gerais de mecânica do contínuo também será abordado. Diversos problemas das áreas de dinâmica dos fluidos e de mudança de fase serão apresentados para destacar tais aplicações.

Palavras-chave: Método dos Volumes Finitos. Método dos Elementos Finitos. Método de Volumes de Controle baseados em Elementos Finitos. Métodos Numéricos. OpenFOAM.

ABSTRACT

Several applications related to continuum mechanics deal with processes as such as solidification and melting of materials, natural convection, stress and strains in solids, among other phenomena. In the defense industry, for example, the manufacture of explosive materials such as large-caliber grenades, requires care in the handling process, proper filling and cooling of molten energetic materials in molds. Inadequate monitoring of these steps results in contractions, hot tearings, air bubbles, and material suppression from its mold, which can lead from excessive production costs to catastrophic failures related to the final product. In this way, the development of mathematical models, the implementation of techniques and use of existing computational tools allow the study, the prediction and simulation of these phenomena with low financial cost and with results as reliable as experimentation. Regarding to computational methodologies, techniques such as the Finite Volume Method and the Finite Element Method are widely used in discretization and solution processes of the partial differential equations sets that govern the phenomena found in these processes. An alternative that combines characteristics of both Finite Element Method and Finite Volume Method, known as Control Volume Finite Element Method is one of the focuses presented in this work. Besides, the computational tool OpenFOAM, a set of open source applications focused on general problems of continuum mechanics will also be addressed. Several problems in the areas of fluid dynamics and phase change will be presented to illustrate such applications.

Key-words: Finite Volume Methods. Finite Element Methods. Control Volume Finite Element Methods. Numerical Methods. OpenFOAM.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Volumes de controle: (I) - centrado na célula, (II) - centrado no nó . . .	26
Figura 2 – Volume de controle finito.	34
Figura 3 – Trajetória do volume de fluido.	35
Figura 4 – Dimensões e fluxos de massa em um elemento de fluido.	36
Figura 5 – Tensões atuando na direção x do elemento de fluido.	38
Figura 6 – Trabalho realizado sobre o elemento na direção x	42
Figura 7 – Fluxo de calor no elemento de fluido.	43
Figura 8 – Estêncil bidimensional para o Método dos Volumes Finitos clássico. . . .	48
Figura 9 – Campo de velocidades do problema de circulação (em m/s).	59
Figura 10 – Malha 20×20 , α_v e β ao longo das iterações.	60
Figura 11 – Malha 30×30 , α_v e β ao longo das iterações.	60
Figura 12 – Malha 40×40 , α_v e β ao longo das iterações.	61
Figura 13 – Valores de α_v e β ao longo das iterações para $Re = 1000$	62
Figura 14 – Valores de α_v e β ao longo das iterações para $Re = 2000$	62
Figura 15 – Campo de temperaturas para o problema de convecção natural (em $^{\circ}C$). .	63
Figura 16 – Malha 20×20 , α_v e β ao longo das iterações.	64
Figura 17 – Malha 30×30 , α_v e β ao longo das iterações.	64
Figura 18 – Malha 40×40 , α_v e β ao longo das iterações.	64
Figura 19 – Valores de α_v e β ao longo das iterações para $Re = 1000$	66
Figura 20 – Valores de α_v e β ao longo das iterações para $Re = 2000$	66
Figura 21 – Campo de velocidade para o problema de circulação com fluxos de entrada e saída (em m/s).	67
Figura 22 – Malha 20×20 , α_v e β ao longo das iterações.	68
Figura 23 – Malha 30×30 , α_v e β ao longo das iterações.	69
Figura 24 – Malha 40×40 , α_v e β ao longo das iterações.	69
Figura 25 – Valores de α_v e β ao longo das iterações para $Re = 1000$	70
Figura 26 – Valores de α_v e β ao longo das iterações para $Re = 2000$	70
Figura 27 – Volumes de controle obtidos pelo método das medianas.	74
Figura 28 – Volume de controle completo e parcial em um elemento.	75
Figura 29 – Semi-faces e vetores normais a estas faces.	78
Figura 30 – Sistema cartesiano local ao elemento.	79
Figura 31 – Elemento quadrilateral.	82
Figura 32 – Funções de aproximação para o cálculo de ψ	83
Figura 33 – Volume de controle associado ao nó i	88
Figura 34 – Nó pertencente ao contorno de um domínio.	91
Figura 35 – Solução no domínio bidimensional.	95
Figura 36 – Soluções analítica e numérica.	96

Figura 37 – Solução bidimensional para $t = 5s$	97
Figura 38 – Soluções numéricas e analíticas.	97
Figura 39 – Solução analítica bidimensional para $t = 5$ e $Pe = 0.5$	98
Figura 40 – Soluções analítica e numérica para $t = 5s$ e $Pe = 0.5$	98
Figura 41 – Solução analítica bidimensional para $t = 5$ e $Pe = 1$	99
Figura 42 – Soluções analítica e numérica para $t = 5s$ e $Pe = 1$	99
Figura 43 – Solução analítica bidimensional para $t = 5$ e $Pe = 2$	100
Figura 44 – Soluções analítica e numérica para $t = 5s$ e $Pe = 2$	100
Figura 45 – Geometria hexagonal.	101
Figura 46 – Campos de temperatura: 54 nós (à esquerda) e 180 nós (à direita). . .	101
Figura 47 – Campos de temperatura: 648 nós (à esquerda) e 2448 nós (à direita). .	102
Figura 48 – Geometria e malha em $1/4$ de anel.	102
Figura 49 – Solução numérica bidimensional em $1/4$ de anel.	103
Figura 50 – Soluções analítica e numérica.	104
Figura 51 – Geometria e condições de contorno.	105
Figura 52 – Solução exata.	105
Figura 53 – CVFEM - interpolação linear.	106
Figura 54 – CVFEM - upwind.	106
Figura 55 – CVFEM - interpolação exponencial (FLO).	107
Figura 56 – CVFEM - interpolação linear com estabilização.	107
Figura 57 – Upwind quadrático.	108
Figura 58 – SUPG - um ponto de integração.	108
Figura 59 – SUPG - dois pontos de integração.	109
Figura 60 – CVFEM - comparação ao longo de um corte para $\theta = 22,5^\circ$	109
Figura 61 – CVFEM - comparação ao longo de um corte para $\theta = 22,5^\circ$	110
Figura 62 – CVFEM - comparação ao longo de um corte para $\theta = 45^\circ$	110
Figura 63 – CVFEM - comparação ao longo de um corte para $\theta = 67,5^\circ$	110
Figura 64 – Geometria e condições de contorno para o problema de circulação em cavi- dade.	112
Figura 65 – Campos de velocidade e de pressão para $Re = 100$	112
Figura 66 – Valores das componentes vx e vy para $Re = 100$	113
Figura 67 – Campos de velocidade e de pressão para $Re = 400$	113
Figura 68 – Valores das componentes vx e vy para $Re = 400$	114
Figura 69 – Campos de velocidade e de pressão para $Re = 1000$	114
Figura 70 – Valores das componentes vx e vy para $Re = 1000$	115
Figura 71 – Campos de velocidade e de pressão para $Re = 3200$	115
Figura 72 – Valores das componentes vx e vy para $Re = 3200$	116
Figura 73 – Campos de velocidade e de pressão para $Re = 10000$	116
Figura 74 – Valores das componentes vx e vy para $Re = 10000$	117

Figura 75 – Comparação das componentes da velocidade para diversos Reynolds.	117
Figura 76 – Campo de velocidades para $Re = 3200$, $t = 0,1s$, $t = 0,3s$ e $t = 0,6s$	118
Figura 77 – Campo de velocidades para $Re = 3200$, $t = 1,0s$, $t = 2,0s$ e $t = 3,0s$	118
Figura 78 – Campo de velocidades para $Re = 3200$, $t = 4,0s$ e $t = 5,0s$	119
Figura 79 – Componentes v_x e v_y para $Re = 3200$	119
Figura 80 – Contornos da pressão para $Re = 3200$	120
Figura 81 – Contornos da pressão para $Re = 3200$	120
Figura 82 – Contornos da pressão para $Re = 3200$	120
Figura 83 – Malha e condições de contorno para o problema de convecção natural.	122
Figura 84 – Isotermas e campo de temperaturas, $t = 2,5s$	122
Figura 85 – Isotermas e campo de temperaturas $t = 5s$	123
Figura 86 – Isotermas e campo de temperaturas, $t = 10s$	123
Figura 89 – Isotermas e campo de temperaturas, $t = 40s$	123
Figura 87 – Isotermas e campo de temperaturas, $t = 20s$	124
Figura 88 – Isotermas e campo de temperaturas, $t = 30s$	124
Figura 90 – Isotermas e campo de temperaturas, $t = 50s$	124
Figura 91 – Valores das componentes da velocidade.	125
Figura 92 – Malha e condições de contorno para o problema de mudança de fase.	129
Figura 93 – Temperatura, fração líquida e campo de velocidades em $t = 100s$	130
Figura 94 – Temperatura, fração líquida e campo de velocidades em $t = 250s$	130
Figura 95 – Temperatura, fração líquida e campo de velocidades em $t = 500s$	130
Figura 96 – Temperatura, fração líquida e campo de velocidades em $t = 750s$	131
Figura 97 – Temperatura, fração líquida e campo de velocidades em $t = 1000s$	131
Figura 98 – Componente v_x da velocidade em diversos instantes de tempo.	132
Figura 99 – Diagrama de um processo de carregamento.	133
Figura 100 – Equipamentos usados no processo de carregamento.	134
Figura 101 – Esquema de resfriamento no forno resfriador.	134
Figura 102 – Alguns defeitos no explosivo final solidificado.	135
Figura 103 – Estrutura típica de um diretório de caso no OpenFOAM.	137
Figura 104 – Implementação da equação de conservação de movimento no OpenFOAM.	140
Figura 105 – Selecionando a variável de solução da equação da energia.	140
Figura 106 – Implementação da equação da energia no OpenFOAM.	142
Figura 107 – Dicionário de controle do PIMPLE.	144
Figura 108 – Construtor com valores padrão para o PIMPLE.	144
Figura 109 – Função de leitura da classe pimpleControl.	145
Figura 110 – Função de leitura de parâmetros adicionais.	146
Figura 111 – Inicialização do campo de fração líquida.	147
Figura 112 – Condições iniciais e de contorno para a temperatura (esquerda) e velocidade (direita).	149

Figura 113–Campo de velocidades, frente de fusão e temperaturas em 19 min.	150
Figura 114–Perfis da frente de fusão em diversos instantes de tempo.	150
Figura 115–Comparação da frente de fusão entre Gau e Viskanta (1986) e o Open-FOAM.	151
Figura 116–Campo de velocidades, frente de fusão e temperaturas em 6825 s.	152
Figura 117–Comparação dos perfis de solidificação em diversos instantes de tempo.	152
Figura 118–Aspectos do TNT (à esquerda) e das composições (à direita).	153
Figura 119–Geometria tridimensional (à esquerda) e axi-simétrica (à direita).	155
Figura 120–Nomenclatura dos seguimentos que compõem a geometria.	155
Figura 121–Malha utilizada nos experimentos.	158
Figura 122–Experimentos E1-1 a E1-5: frente de solidificação nos instantes 1800s, 3600s, 5400s e 7200s.	159
Figura 123–Experimentos E1-1 a E1-5: frente de solidificação nos instantes 10800s, 14400s, 18000s e 21600s.	160
Figura 124–Experimentos E1-6 a E1-9: frente de solidificação nos instantes 1800s, 3600s, 5400s e 7200s.	162
Figura 125–Experimentos E1-6 a E1-9: frente de solidificação nos instantes 10800s, 14400s, 18000s e 21600s.	162
Figura 126–Experimentos E2-1 a E2-5: frente de solidificação nos instantes 1800s, 3600s, 5400s e 7200s.	163
Figura 127–Experimentos E2-1 a E2-5: frente de solidificação nos instantes 10800s, 14400s, 18000s e 21600s.	164
Figura 128–Experimentos E2-6 a E2-9: frente de solidificação nos instantes 1800s, 3600s, 5400s e 7200s.	164
Figura 129–Experimentos E2-6 a E2-9: frente de solidificação nos instantes 10800s, 14400s, 18000s e 21600s.	165
Figura 130–Condições iniciais e de contorno: arquivo p.	177
Figura 131–Condições iniciais e de contorno: arquivo p_rgh.	178
Figura 132–Condições iniciais e de contorno: arquivo solidificationMeltingSource1:alpha1.179	
Figura 133–Condições iniciais e de contorno: arquivo T.	180
Figura 134–Condições iniciais e de contorno: arquivo U.	181
Figura 135–Contornos da fração líquida - experimento E1-1.	183
Figura 136–Contornos da fração líquida - experimento E1-2.	183
Figura 137–Contornos da fração líquida - experimento E1-3.	184
Figura 138–Contornos da fração líquida - experimento E1-4.	184
Figura 139–Contornos da fração líquida - experimento E1-5.	185
Figura 140–Contornos da fração líquida - experimento E1-6.	185
Figura 141–Contornos da fração líquida - experimento E1-7.	186
Figura 142–Contornos da fração líquida - experimento E1-8.	186

Figura 143 – Contornos da fração líquida - experimento E1-9.	187
Figura 144 – Contornos da fração líquida - experimento E2-1.	187
Figura 145 – Contornos da fração líquida - experimento E2-2.	188
Figura 146 – Contornos da fração líquida - experimento E2-3.	188
Figura 147 – Contornos da fração líquida - experimento E2-4.	189
Figura 148 – Contornos da fração líquida - experimento E2-5.	189
Figura 149 – Contornos da fração líquida - experimento E2-6.	190
Figura 150 – Contornos da fração líquida - experimento E2-7.	190
Figura 151 – Contornos da fração líquida - experimento E2-8.	191
Figura 152 – Contornos da fração líquida - experimento E2-9.	191

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Tempos de execução relativos, malha 20×20 , $Re = 100$	59
Tabela 2 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 100$	59
Tabela 3 – Tempos de execução relativos, malha 40×40 , $Re = 100$	60
Tabela 4 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 1000$	61
Tabela 5 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 2000$	61
Tabela 6 – Tempos de execução relativos, malha 20×20 , $Re = 100$	63
Tabela 7 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 100$	63
Tabela 8 – Tempos de execução relativos, malha 40×40 , $Re = 100$	63
Tabela 9 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 1000$	65
Tabela 10 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 2000$	66
Tabela 11 – Tempos de execução relativos, malha 20×20 , $Re = 100$	67
Tabela 12 – Tempos de execução na malha 30×30 , $Re = 100$	68
Tabela 13 – Tempos de execução relativos, malha 40×40 , $Re = 100$	68
Tabela 14 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 1000$	69
Tabela 15 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 2000$	69
Tabela 16 – Dados para o problema de mudança de fase.	129
Tabela 17 – Propriedades do TNT.	154
Tabela 18 – Propriedades da Composição B.	154
Tabela 19 – Condições iniciais e de contorno das análises com o TNT e Composição B.	157
Tabela 20 – Experimentos executados.	158

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	25
2	EQUAÇÕES GOVERNANTES EM DINÂMICA DOS FLUIDOS	33
2.1	Introdução	33
2.2	Descrições espacial e material	33
2.3	A derivada material	34
2.4	A equação de conservação da massa	35
2.5	Equação da conservação da quantidade de movimento linear . .	36
2.6	As equações de Navier-Stokes	39
2.7	A equação de conservação da energia	42
3	OBTENÇÃO DE FATORES DE RELAXAÇÃO OTIMIZADOS	47
3.1	O Método dos Volumes Finitos clássico	47
3.1.1	Equações de conservação	47
3.1.2	Discretização pelo Método dos Volumes Finitos	47
3.2	O algoritmo SIMPLE	49
3.3	Método de variação dos fatores de relaxação	51
3.3.1	Introdução dos fatores de relaxação nas equações	51
3.3.2	Revisão bibliográfica sobre otimização de fatores de relaxação .	52
3.4	O método proposto	56
3.5	Testes numéricos	58
3.5.1	Problema de circulação	58
3.5.2	Problema de convecção natural	62
3.5.3	Problema de circulação com fluxos de entrada e saída	67
3.5.4	Conclusões	71
4	MÉTODO DOS VOLUMES DE CONTROLE BASEADO EM ELE- MENTOS FINITOS	73
4.1	Introdução	73
4.2	Construção dos volumes de controle para o CVFEM	74
4.3	Integração em um volume de controle e funções de interpolação	76
4.3.1	Interpolação para o termo difusivo	76
4.3.2	Interpolação para a pressão	77
4.3.3	Interpolações para o termo convectivo	78
4.3.3.1	<i>Upwind</i>	78
4.3.3.2	Interpolação orientada ao escoamento (FLO)	79
4.3.3.3	Estabilização da solução com uma função de interpolação linear	81
4.4	Aproximações algébricas dos termos das equações de conservação	84
4.4.1	Cálculos preliminares	84
4.4.2	Termo difusivo	85

4.4.3	Termo convectivo	85
4.4.3.1	upwind	85
4.4.3.2	Interpolação orientada ao escoamento (FLO)	86
4.4.4	Termo fonte	87
4.4.5	Discretização para a equação de advecção-difusão	88
4.4.6	Discretização para as equações de Navier-Stokes	88
4.4.7	Interpolação das componentes da velocidade nos fluxos de massa	89
4.4.8	Formulação e discretização da equação para a pressão	90
4.4.9	Condições de contorno	91
4.4.9.1	Condição de Dirichlet	92
4.4.9.2	Condição de Neumann	92
4.4.9.3	Condição de Robin	92
4.4.9.4	Outras prescrições de condições de contorno	93
4.4.10	Algoritmo e procedimentos de solução das equações	93
4.5	Testes e resultados numéricos	94
4.5.1	Problemas de advecção-difusão básicos	95
4.5.2	Estabilização da função de interpolação linear	104
4.5.3	Problema de circulação em cavidade	111
4.5.3.1	Implementação em estado estacionário	111
4.5.3.2	Implementação em estado transiente	117
4.5.4	Problema de convecção natural em cavidade	121
4.5.5	Problema de mudança de fase pelo método da entalpia-porosidade	125
5	O OPENFOAM E O PROBLEMA DE CARREGAMENTO DE GRANADAS	133
5.1	Motivação	133
5.2	O pacote OpenFOAM	135
5.2.1	O solver buoyantPimpleFoam e o módulo solidificationMelting-Source	138
5.2.2	implementação do buoyantPimpleFoam	139
5.2.3	Os algoritmos SIMPLE, PISO e PIMPLE no OpenFOAM . . .	142
5.2.3.1	O algoritmo SIMPLE	143
5.2.3.2	O algoritmo PISO	143
5.2.3.3	O algoritmo PIMPLE	144
5.2.4	O módulo solidificationMeltingSource	147
5.3	Comprovação do <i>buoyantPimpleFoam</i> em problemas de mudança de fase	148
5.4	Análise da solidificação de explosivos em granadas	153
5.4.1	Caracterização dos explosivos TNT e composição B	153
5.4.2	Descrição da geometria e das condições iniciais e de contorno .	154

5.4.3	Experimentos executados e condição de contorno de Robin . .	157
5.4.4	Procedimentos e resultados	158
6	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	167
	REFERÊNCIAS	171
	Condições iniciais e de contorno usadas nos experimentos de solidifi- cação de explosivos em projéteis	177
	Contornos da fração líquida de todos os testes executados . .	183

1 INTRODUÇÃO

Os principais objetivos deste trabalho constituem-se, em um sentido mais amplo, a pesquisa da Dinâmica dos Fluidos Computacional, englobando estudos nas áreas de métodos numéricos com ênfase no Método dos Volumes Finitos e algumas de suas variações. Muitos problemas da Dinâmica dos Fluidos são modelados matematicamente pelas equações de Navier-Stokes, conjunto de equações diferenciais parciais composto pelas equações de conservação da massa e da quantidade de movimento linear. A solução numérica destas equações, sobretudo quando modelam escoamentos incompressíveis, é uma questão bastante complexa pois, neste caso, existem mais variáveis do que equações no sistema, além de serem intrinsecamente acopladas. No contexto do Método dos Volumes Finitos, é comum o emprego de uma família de métodos baseada no algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) de Patankar (1980). O algoritmo SIMPLE já foi abordado em outras ocasiões, como em Odone et al. (2013), Odone et al. (2015) e Odone et al. (2014), sendo necessário em sua formulação o emprego de fatores de relaxação para garantir a estabilidade e convergência da solução das equações durante o processo iterativo. A escolha de valores adequados destes fatores de relaxação é uma questão fundamental pois pode tanto acelerar quanto diminuir o tempo necessário para a convergência do algoritmo. Diversos trabalhos, como Morii e Vierow (2000); Min e Tao (2007); Marek e Straub (1993a); Doormaal e Raithby (1984); Chatwani e Turan (1991); Ryou et al. (2005) abordam algumas técnicas que visam otimizar algoritmos como o SIMPLE, seja através de algumas modificações deste algoritmo ou por meio de formas de escolha automatizada dos fatores de relaxação. Sendo assim, um dos estudos realizados durante este trabalho foi o de implementar um algoritmo que pudesse ajustar e otimizar os valores destes fatores de relaxação durante o processo iterativo, baseado em Min e Tao (2007). A apresentação do método e seus resultados foram publicados em Odone et al. (2016) e será tema do Capítulo 3, juntamente com uma revisão do algoritmo SIMPLE.

O Método dos Volumes Finitos, cuja principal característica é a conservatividade, é amplamente empregado no processo de discretização das equações diferenciais que modelam processos de transferência de calor ou massa e em mecânica dos fluidos. Em sua forma clássica, o processo de discretização é realizado em malhas estruturadas e com geometrias regulares e relativamente simples (Odone et al., 2014). Entretanto, modelar problemas com geometrias complexas é impraticável empregando-se malhas ortogonais e estruturadas. Essa necessidade levou a formulação de variantes do Método dos Volumes Finitos para malhas não-estruturadas que, de acordo com Versteeg e Malalasekera (2007), são classificadas em dois grupos: métodos para malhas curvilineares estruturadas e para malhas não-estruturadas. No contexto dos métodos para malhas não-estruturadas, existem basicamente duas formas de definir os volumes de controle: centrados na célula e centrados no nós, de acordo com a Figura 1.

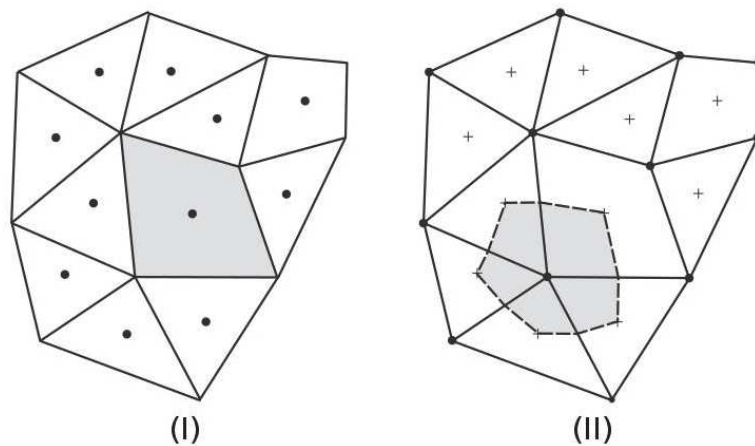


Figura 1 – Volumes de controle: (I) - centrado na célula, (II) - centrado no nó

No caso dos métodos baseados em volumes de controle centrados nos nós, os volumes são construídos em torno dos pontos nodais de uma malha de elementos finitos não-estruturada. Os fluxos difusivos e convectivos através das faces dos volumes de controle podem ser aproximados por meio de funções de interpolação similares as empregadas pelo Método dos Elementos Finitos. Um dos métodos baseados neste tipo de construção é o Método dos Volumes de Controle baseados em Elementos Finitos (Saabas, 1991; Venditti, 1998; Saabas e Baliga, 1994a,b; Shurina et al., 2002) ou Control Volume Finite Element Method - CVFEM, em inglês - que visa tirar proveito da flexibilidade de construção de malhas de elementos finitos para domínios arbitrários com as características de conservatividade do método dos volumes finitos tradicional (Voller, 2009). Neste sentido, um dos focos do trabalho foi a compreensão de detalhes desta técnica visando uma implementação computacional capaz de simular desde simples problemas de advecção-difusão a problemas mais complexos como de escoamentos incompressíveis e de mudança de fase. Além disso, um dos grandes desafios na implementação de esquemas de aproximação para as equações diferenciais é o tratamento do termo convectivo. A principal dificuldade aparece quando o número de Peclet, definido como a razão entre efeitos convectivos e difusivos, se torna muito grande, ou seja, quando a natureza do problema é dominada pela convecção. O motivo da dificuldade é que muitos métodos propostos para a discretização do termo convectivo apresentam fragilidades como oscilações espúrias ou serem muito difusivos no sentido de suavizarem muito o comportamento das soluções. No âmbito do Método dos Elementos Finitos, o Streamline Upwind/Petrov-Galerkin - SUPG (Brooks e Hughes, 1982) é uma alternativa ao método de Galerkin, visando estabilizar a aproximação deste método. No caso do CVFEM, o emprego de funções de interpolação lineares para o termo convectivo são impraticáveis para valores altos do número de Peclet, pois geram resultados com muitas oscilações que não representam em nenhum aspecto a solução real do problema. Assim, neste trabalho, foi estudado e implementado um esquema de estabilização quando uma função de interpolação linear é usada para o termo convectivo no CVFEM, aos moldes do

SUPG. A implementação segue passos similares àqueles apresentados por [Brooks e Hughes \(1982\)](#), sendo aqui empregado no contexto de malhas de elementos finitos triangulares, cujos detalhes serão abordados ao longo do Capítulo 4.

Em diversas aplicações industriais, muitos processos envolvem fenomenologias relacionadas com mudança de fase. Na indústria bélica, por exemplo, a manufatura de materiais explosivos como granadas de grosso calibre, requer cuidadoso processo de manuseio, preenchimento e resfriamento adequado dos materiais energéticos fundidos em moldes. O monitoramento inadequado destas etapas pode resultar em contrações, trincas, bolhas de ar, e descolamento do material do seu molde, o que pode acarretar desde custos excessivos em sua produção à falhas catastróficas relacionadas ao produto final. Deste modo, com o intuito de obter uma melhor compreensão da evolução dos fenômenos envolvidos durante um processo de preenchimento de moldes com material energético, foi realizado um estudo desse processo de solidificação com auxílio do conjunto de ferramentas para Dinâmica dos Fluidos Computacional, OpenFOAM. Um breve estudo sobre o OpenFOAM foi apresentado em [Odone et al. \(2019\)](#) juntamente com um conjunto de problemas resolvidos com esta ferramenta, visando obter familiaridade sobre o funcionamento do código, bem explorar algumas vantagens e desvantagens em seu uso. No presente trabalho, o OpenFOAM será empregado para simular a imposição de diferentes tipos de condições de contorno e a implicação que essas condições têm desde instantes intermediários até a solidificação completa do material energético em seu molde.

A Dinâmica dos Fluidos Computacional (ou Computational Fluid Dynamics - CFD em inglês), está relacionada com a análise de fenômenos e processos que envolvem escoamento de fluidos, transferência de calor e outros fenômenos relacionados, por meio de implementações e simulações computacionais. Aplicações que envolvem o uso de CFD podem estar ou não relacionadas a indústrias e alguns exemplos de aplicações são: aerodinâmica de aeronaves e veículos; hidrodinâmica de navios; engenharia biomédica; meteorologia e muitas outras ([Versteeg e Malalasekera, 2007](#); [Ferziger e Peric, 2002](#)).

Com a rápida evolução dos sistemas computacionais ao longo dos últimos anos, as aplicações de CFD vêm ganhando cada vez mais espaço em comparação a realização de experimentos laboratoriais ou em campo. Um dos grandes motivos para isso deve-se ao fato que tais experimentos por vezes acarretam em altos custos para serem elaborados e executados. Estes custos não só são financeiros, como também demandam de especialistas, equipamentos adequados, coleta e análise de dados, matérias-primas e longo tempo para realização desses experimentos. Assim, o emprego das simulações computacionais permite, na maioria dos casos, uma redução significativa nestes custos relacionados, visto que praticamente todas as etapas realizadas em um experimento real podem ser executadas por meio de simulações computacionais adequadas. Além disso, resultados obtidos computacionalmente podem ser tão precisos e confiáveis quanto a realização de experimentos, uma vez que se tenha em mente as limitações dos computadores.

Uma das ideias centrais da CFD é a tradução de um problema do mundo real para a linguagem matemática, formulando um conjunto de equações que descreve o comportamento do sistema analisado. Uma vez realizada esta etapa de modelagem do problema, o próximo passo é a transcrição destes modelos para a linguagem computacional, sendo esta uma das etapas mais importantes do processo. A transcrição do modelo matemático para o modelo computacional parte do pressuposto de que a solução do problema possa ser obtida e interpretada em um número finito de pontos do contínuo que representa o problema real. Esta etapa de tradução do modelo matemático para o modelo computacional é conhecida como discretização.

Uma das primeiras etapas do processo de discretização é a identificação da geometria de interesse juntamente com os dados dos fenômenos que ocorrem nas suas fronteiras e do seu estado inicial. Estes dados iniciais e de fronteira são traduzidos matematicamente e numericamente como condições iniciais e de contorno, respectivamente, sendo essenciais para o correto fechamento do problema. A geometria de interesse então é decomposta em um número finito de pontos que cobre todo seu entorno e interior, sendo assim a geometria representada por uma malha de nós e elementos que pode ou não apresentar uma relação topológica básica entre suas entidades.

Tendo as etapas de definição da geometria, malha computacional, condições iniciais e de contornos definidas, pode-se então traduzir as equações do contínuo para a linguagem discreta computacional. Esta etapa envolve escrever uma equação algébrica que descreve a variação ou comportamento de uma dada propriedade em cada ponto da malha. Estas equações normalmente envolvem informações de seus pontos vizinhos e devem ser resolvidas simultaneamente para obter o conjunto solução em todos os pontos do domínio computacional. Uma vez que esse conjunto tenha sido obtido, é possível obter a solução do problema em outros pontos do domínio por meio de interpolação desses valores conhecidos.

O processo de discretização de uma equação requer a aproximação de seus termos por meio de relações que envolvam apenas pontos pertencentes a malha definida anteriormente. Para este objetivo, tem-se o emprego de técnicas bastante conhecidas no âmbito computacional. O Método das Diferenças Finitas (FDM), Método dos Volumes Finitos (FVM), Método dos Elementos Finitos (FEM) e o Método de Volumes de Controle baseados em Elementos Finitos (CVFEM) são algumas dessas técnicas, com a função de transcrever as equações descritas no contínuo para a descrição discreta computacional. Historicamente, o FDM, FVM e o CVFEM são os métodos usualmente empregados para CFD, ao passo que o FEM é normalmente empregado em problemas estruturais, embora algumas vezes seja usado no CFD.

Na última etapa da solução computacional de um problema tem-se a resolução de sistemas de equações algébricas e sua interpretação e representação. De acordo com informações relacionadas às equações matemáticas, topologia da malha, e outras

características do problema, pode-se empregar uma gama de métodos para a solução dos sistemas de equações algébricas. A resolução desses sistemas fornece o valor de cada propriedade estudada em cada um dos pontos da malha empregada para a geometria do problema. Para a análise e visualização, pode-se realizar algum tipo de interpolação desses valores e empregar algum programa capaz de representar visualmente esses resultados. As principais equações governantes da Dinâmica dos Fluidos Computacional de interesse nestes trabalho serão formuladas e apresentadas no Capítulo 2. Estas equações representam a conservação da massa, conservação da quantidade de movimento linear, e conservação da energia.

O Método dos Volumes Finitos é um método de discretização de um conjunto de equações diferenciais que expressam matematicamente a conservação ou balanço de alguma propriedade em um volume de controle (Odone et al., 2014). Em sua formulação clássica, tal como encontrada em Patankar (1980) ou Versteeg e Malalasekera (2007), faz-se o emprego de malhas do tipo estruturada, em que os pontos nodais e os volumes de controle possuem estruturação simples, normalmente envolvendo igual espaçamento entre todos os seus nós. O conjunto de equações discretas pode então ser obtido por meio do balanço dos fluxos através das faces dos volumes de controle, aproximados por meio de expansões em série de Taylor. Os tipos de elementos e volumes de controle geralmente são quadrados ou retângulos, o que simplifica bastante o processo de integração e aproximação das equações diferenciais, porém sacrifica a flexibilidade geométrica, visto que malhas estruturadas só conseguem representar bem problemas com geometrias relativamente simples. Por outro lado, um dos aspectos fundamentais do Método dos Volumes Finitos é a conservatividade, uma vez que, tanto as equações diferenciais a serem discretizadas partem do princípio de balanço de fluxos sobre volumes elementares, assim como o Método dos Volumes Finitos tem esse mesmo aspecto ao se efetuar a integração e aproximação dos fluxos nos volumes de controle finitos (Voller, 2009). No Método dos Elementos Finitos, porém, não existe tal restrição quanto a estruturação da malha, o que flexibiliza bastante os tipos de geometrias que podem ser trabalhadas. Outro ponto é a estimativa dos termos das equações, que podem ser aproximados por meio de funções de interpolação dos valores nodais sobre os elementos.

Assim, o Método dos Volumes de Controle baseados em Elementos Finitos (Saabas, 1991; Venditti, 1998; Saabas e Baliga, 1994a,b; Shurina et al., 2002; Prakash e Patankar, 1985; Baliga e Patankar, 1980, 1983; Zhou, 1997; Schneider, 1998) tem por objetivo agregar as características de conservatividade do Método dos Volumes Finitos clássico com a grande flexibilidade geométrica encontrada no Método dos Elementos Finitos. Deste o modo, é reconhecido que os volumes de controle podem ser construídos em torno dos pontos nodais de uma malha de elementos finitos de formas arbitrárias. Com essa construção, os fluxos através das faces dos volumes de controle podem ser aproximados com o emprego de funções de interpolação.

No contexto do Método dos Volumes Finitos, frequentemente empregam-se métodos numéricos iterativos para a resolução de problemas de natureza incompressível. Nestes casos, o conjunto composto pelas equações de conservação da quantidade de movimento linear e pela equação de conservação da massa possui características de não-linearidade além destas equações serem intrinsecamente acopladas por causa da pressão e das velocidades. Desta, algoritmos como o SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations) e algumas de suas variantes como o SIMPLER (SIMPLE Consistent), SIMPLER (SIMPLE Revised) e PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators), podem ser empregados pois tratam de forma iterativa a resolução das equações além de resolverem de modo satisfatório os problemas da não-linearidade e do acoplamento pressão-velocidade. Por outro lado, devido a certas aproximações e simplificações na formulação de algoritmos como o SIMPLE, faz-se necessário o emprego de fatores de relaxação durante a resolução a fim de se acelerar o processo e evitar problemas como instabilidades numéricas. Valores fixos para estes fatores podem ser empregados porem a escolha destes valores pode não ser trivial. Assim, no Capítulo 3 é proposto e apresentado um método variação dos fatores de relaxação em tempo de execução, visando manter a estabilidade e acelerando a convergência do método ao diminuir o número de iterações necessárias para isso.

No Capítulo 4 será apresentado a fundamentação do Control Volume Finite Element Method, CVFEM, descrevendo-se a forma de construção dos volumes de controle em torno dos nós de uma malha de elementos finitos triangulares, a integração e discretização das equações diferenciais nestes volumes, aproximações e funções de interpolação para os termos das equações, e diferentes tratamentos para os termos convectivos. Além disso, será apresentado um método de estabilização para o emprego de funções de interpolação lineares para os termos convectivos discretizados pelo CVFEM, baseado no esquema Streamline Upwind/Petrov-Galerkin - SUPG de (Brooks e Hughes, 1982) no contexto do Método dos Elementos Finitos. Diversos problemas serão estudados demonstrando a aplicação do CVFEM e da estabilização proposta.

Por fim, no Capítulo 5 será abordado o problema de carregamento de granadas, uma aplicação de vital importância em campos militares modernos. Um processo de carregamento de granadas consiste no preenchimento de moldes de granada com materiais energéticos fundidos para posterior resfriamento e solidificação do material, compondo assim o produto explosivo final. Este processo é dividido em diversas etapas, sendo uma das fundamentais o processo de resfriamento e solidificação do explosivo. São necessárias imposições adequadas de resfriamento através dos contornos dos moldes e um monitoramento adequado desta etapa, visando a prevenção de falhas no produto final que podem gerar sérias consequências. Para este estudo será apresentado e utilizado o pacote de aplicações voltadas à resolução de problemas de dinâmica dos fluidos OpenFOAM (Open Field Operation And Manipulation). Um estudo detalhado do solver *buoyantPimpleFoam* e o módulo *solidificationMeltingSource*, empregados na resolução do problema de carregamento

de granadas, será apresentado, visando identificar algumas particularidades deste solver. Resultados numéricos para um tipo de granada preenchida com dois tipos explosivos serão estudados, visando avaliar o impacto de diferentes imposições de condições de contorno no processo de resfriamento.

2 EQUAÇÕES GOVERNANTES EM DINÂMICA DOS FLUIDOS

2.1 Introdução

As equações que governam a dinâmica dos fluidos representam formulações matemáticas de leis de conservação físicas. Matematicamente, escoamentos são governados por um conjunto de equações diferenciais altamente não lineares de segunda ordem, conhecido como equações de Navier-Stokes que representam os seguintes princípios:

- A massa de um fluido é conservada;
- A segunda Lei de Newton - a taxa de variação temporal do movimento é igual à resultante do somatório das forças agindo sobre o fluido;
- A primeira lei da termodinâmica - a taxa de variação temporal da energia é igual a soma da taxa de adição de calor e a taxa de trabalho exercido em uma partícula de fluido.

Diferentemente dos sólidos, fluidos são substâncias que não resistem à tensões tangenciais, sofrendo deformações e sendo colocados em movimento. Do ponto de vista estrutural, o fluido é considerado um contínuo de massa, de modo que suas propriedades físicas e de escoamento são bem definidas em todo ponto do espaço. Em geral, apenas propriedades macroscópicas do fluido como velocidade, pressão, densidade e temperatura são usadas na caracterização do escoamento.

O comportamento de escoamento de um fluido pode ser categorizado como newtonianos e não-newtonianos. Fluidos newtonianos apresentam uma relação linear entre as tensões tangenciais (ou de cisalhamento) e a taxa de deformação. A viscosidade dinâmica, que fornece uma medida da capacidade de um fluido submetido à tensões resistir à deformações, é representada por uma função linear. Já em fluidos não-newtonianos, esta relação é não-linear.

Outras caracterizações do escoamento de um fluido podem ser: de fase única ou multifásicos, estacionários ou transientes, viscosos ou inviscidos, compressíveis ou incompressíveis, turbulentos ou laminares, rotacionais ou irrotacionais, dentre outros. Estas classificações visam simplificações na modelagem do fenômeno de escoamento.

2.2 Descrições espacial e material

Considere um campo de escoamento geral como ilustrado pelas linhas de corrente na Figura 2 e considere um volume fechado arbitrário tomado dentro deste escoamento.

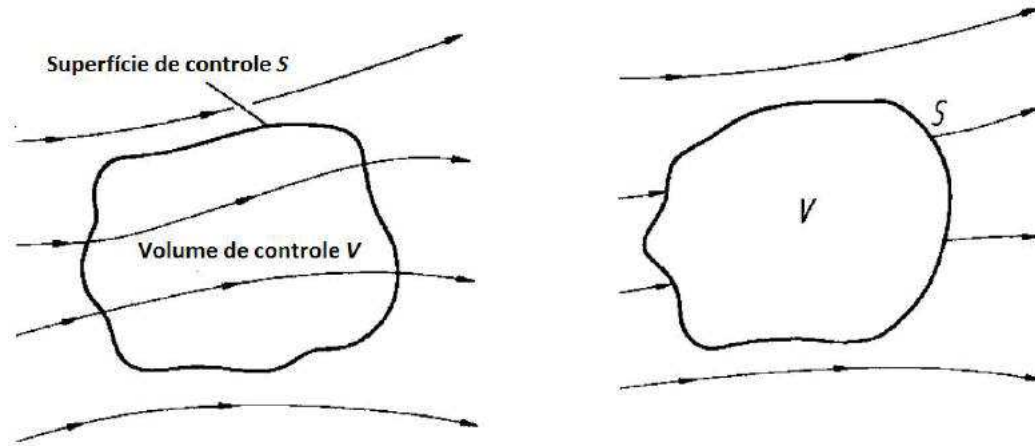


Figura 2 – Volume de controle finito.

Este volume define um *volume de controle*, V , e uma *superfície de controle*, S , que contorna o volume. Este volume de controle (VC) pode ser tomado como fixo no espaço enquanto o fluido se move através dele (Figura 2 à esquerda) ou movendo-se com o fluido de modo que as partículas de fluido dentro deste são sempre as mesmas (Figura 2 à direita). As leis de conservação da física são aplicadas ao fluido contido dentro de um VC e ao fluido atravessando a superfície de controle (SC), limitando assim a análise a uma região finita do escoamento.

Para um material em movimento, tal como um fluido em escoamento, seja ϕ uma variável genérica que possa representar sua temperatura, velocidade ou seu estado de tensão variando com o tempo. A descrição dessas variações pode ser feitas como a seguir.

- 1 - Seguindo partículas específicas, definidas por sua coordenada material $\vec{X} = (X, Y, Z)$ ao longo do tempo t . Ou seja, expressando ϕ como

$$\phi = \phi(X, Y, Z, t) \quad (2.1)$$

Tal forma de expressar essas variações é conhecida como *descrição material* ou *descrição lagrangiana*.

- 2 - Observando as variações em posições fixas no espaço, ou seja, expressando as variações de ϕ como funções de uma posição fixa $\vec{x} = (x, y, z)$ e do tempo:

$$\phi = \phi(x, y, z, t) \quad (2.2)$$

Esta descrição é conhecida como *descrição espacial* ou *descrição Euleriana*.

2.3 A derivada material

Seja $\phi(\vec{x}(t), t)$ uma quantidade como densidade, velocidade, ou temperatura. A taxa de variação ou derivada de ϕ acompanhando um dado volume de fluido se movendo

ao longo do espaço é conhecida como derivada lagrangiana, material, substancial ou total. A derivada material pode ser obtida por meio da regra da cadeia, levando-se em conta as variações de todas as variáveis independentes ao longo da trajetória do volume de fluido da posição \vec{x} no instante t para a posição $\vec{x} + \delta\vec{x}$ ou $\vec{x} + \vec{V}\delta t$ no instante $t + \delta t$ (Figura 3).

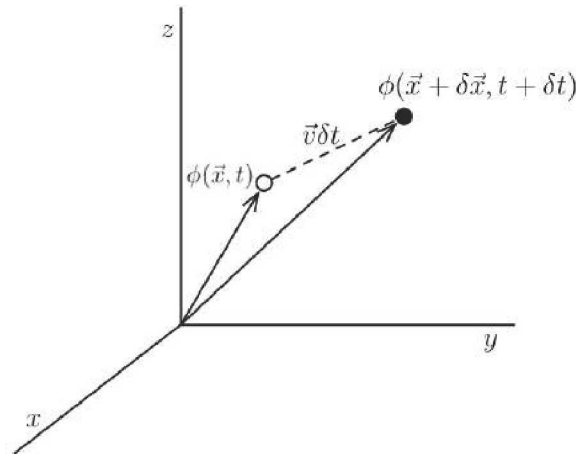


Figura 3 – Trajetória do volume de fluido.

Denotando a derivada material por D e sendo $\vec{V} = (u, v, w)$ o vetor velocidade, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{D\phi}{Dt} &= \frac{\partial\phi}{\partial t} \frac{dt}{dt} + \frac{\partial\phi}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial\phi}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial\phi}{\partial z} \frac{dz}{dt} \\ &= \frac{\partial\phi}{\partial t} + u \frac{\partial\phi}{\partial x} + v \frac{\partial\phi}{\partial y} + w \frac{\partial\phi}{\partial z} \end{aligned} \quad (2.3)$$

Ou ainda,

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla\phi \quad (2.4)$$

onde na Equação (2.4), o primeiro termo do lado direito da igualdade representa a taxa de variação local e o segundo termo a taxa de variação convectiva de ϕ .

2.4 A equação de conservação da massa

O princípio de conservação da massa estabelece que, na ausência de fontes ou sorvedouros de massa, se o movimento de um volume infinitesimal de material for observado através do tempo, então seu volume e sua massa específica podem variar mas a sua massa total deve permanecer inalterada. Assim, um balanço de massa em elemento de fluido estabelece que: *a variação temporal da quantidade de massa no elemento é igual ao fluxo de massa através das fronteiras do elemento*. De acordo com a Figura 4, sendo δx , δy e δz as dimensões infinitesimais do elemento de fluido, a variação da quantidade total de massa dentro do elemento é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\delta x\delta y\delta z) = \frac{\partial\rho}{\partial t}(\delta x\delta y\delta z) \quad (2.5)$$

O fluxo de massa através das faces dos elementos pode ser calculada pelo produto da massa específica, área e velocidade normais às áreas, de acordo com a Figura 4, por

$$\begin{aligned} & \rho u \delta y \delta z - \left(\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \delta x \right) \delta y \delta z + \\ & \rho v \delta x \delta z - \left(\rho v + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \delta y \right) \delta x \delta z + \\ & \rho w \delta x \delta y - \left(\rho w + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \delta z \right) \delta x \delta y \end{aligned} \quad (2.6)$$

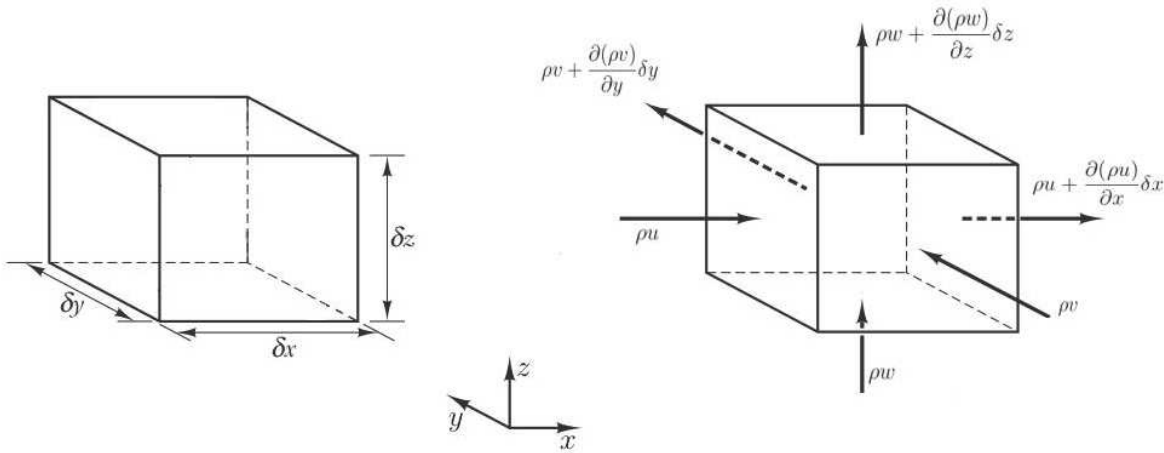


Figura 4 – Dimensões e fluxos de massa em um elemento de fluido.

Igualando as Equações (2.5) e (2.5), reagrupando todos os termos no lado esquerdo da igualdade e dividindo a expressão pelo volume do elemento de fluido, $\delta x \delta y \delta z$, tem-se

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (2.7)$$

ou ainda, em notação vetorial,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (2.8)$$

As Equações (2.7) ou (2.8) representam a *equação da conservação da massa* ou *equação da continuidade* em um ponto para um escoamento compressível. Para um fluido for incompressível, onde a massa específica é constante, a equação da conservação da massa é reduzida a

$$\nabla \cdot \vec{V} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (2.9)$$

2.5 Equação da conservação da quantidade de movimento linear

A segunda lei de Newton estabelece que a taxa de variação da quantidade de movimento de uma partícula de fluido (ou de um volume de fluido) é igual ao somatório

das forças que atuam sobre esta partícula (sobre este volume). A taxa de variação das componentes x , y e z da quantidade de movimento (momento linear) de um volume de fluido são dadas por respectivamente por:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \vec{V}) = a_x \quad (2.10)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \vec{V}) = a_y \quad (2.11)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho w \vec{V}) = a_z \quad (2.12)$$

que correspondem às três componentes da aceleração, $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$. Em forma vetorial, a aceleração pode ser escrita como:

$$\vec{a} = \frac{\partial(\rho \vec{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} \otimes \vec{V}) \quad (2.13)$$

As forças que atuam sobre o fluido podem ser de dois tipos:

- 1 - *forças de campo*, que atuam diretamente em cada ponto do fluido tais como a gravidade, forças eletromagnéticas, centrífuga e de Coriolis. Normalmente, por não influenciarem significativamente o comportamento do escoamento, estas forças são agrupadas como termos fonte nas equações de movimento.
- 2 - *forças de superfície*, que atuam apenas sobre a superfície do elemento de fluido, decorrendo da pressão exercida sobre o elemento pelo exterior e das tensões viscosas normais e tangenciais por causa do atrito entre os elementos de fluidos adjacentes em movimento. Dada a natureza intrínseca dessas forças, elas são tratadas como termos constitutivos das equações de movimento.

As tensões que agem sobre um elemento de fluido podem ser classificadas como tensões normais - tendendo a esticar ou comprimir o elemento, sendo proporcionais à variação temporal do volume do elemento de fluido; e tensões de cisalhamento ou tangenciais - proporcionais à taxa de deformação do elemento, sendo responsáveis pela deformação do mesmo.

Para calcular o estado de tensão sobre um elemento de fluido, considere na Figura 5 as tensões que agem na direção x :

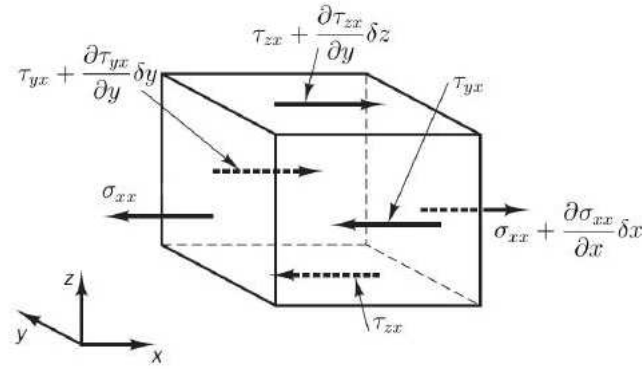


Figura 5 – Tensões atuando na direção x do elemento de fluido.

Seja $\vec{B} = (B_x, B_y, B_z)$ a resultante das forças de corpo. A expressão geral destas forças agindo sobre o elemento de fluido é:

$$\rho \vec{B} \delta_x \delta_y \delta_z \quad (2.14)$$

Fazendo o balanço das tensões sobre o elemento que atuam na direção x , tem-se:

$$\begin{aligned} & \left(\sigma_{xx} + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} \delta x \right) \delta y \delta z - \sigma_{xx} \delta y \delta z + \\ & \left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \delta y \right) \delta x \delta z - \tau_{yx} \delta x \delta z + \\ & \left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \delta z \right) \delta x \delta y - \tau_{zx} \delta x \delta y \end{aligned} \quad (2.15)$$

Fazendo o balanço das tensões para as direções y e z de forma análoga feita para a direção x , o balanço de tensões para a direção y é:

$$\begin{aligned} & \left(\tau_{xy} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} \delta x \right) \delta y \delta z - \tau_{xy} \delta y \delta z + \\ & \left(\sigma_{yy} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} \delta y \right) \delta x \delta z - \sigma_{yy} \delta x \delta z + \\ & \left(\tau_{zy} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \delta z \right) \delta x \delta y - \tau_{zy} \delta x \delta y \end{aligned} \quad (2.16)$$

e o balanço de tensões para a direção z é:

$$\begin{aligned} & \left(\tau_{xz} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} \delta x \right) \delta y \delta z - \tau_{xz} \delta y \delta z + \\ & \left(\tau_{yz} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} \delta y \right) \delta x \delta z - \tau_{yz} \delta x \delta z \\ & \left(\sigma_{zz} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \delta z \right) \delta x \delta y - \sigma_{zz} \delta x \delta y + \end{aligned} \quad (2.17)$$

Compondo as Equações (2.10), (2.11) e (2.12) com suas correspondentes componentes das forças de corpo (Equação (2.14)) e de superfície (Equações (2.15), (2.16) e (2.17)), e dividindo todos os termos pelo volume do elemento de fluido $\delta_x\delta_y\delta_z$, tem-se:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho B_x \quad (2.18)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho B_y \quad (2.19)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} + \rho B_z \quad (2.20)$$

As Equações (2.18), (2.19) e (2.20) correspondem às equações da conservação da quantidade de movimento, sendo satisfeitas para qualquer material, seja fluido ou sólido. Estas equações podem ser escritas de forma compacta em notação vetorial como:

$$\nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \vec{B} = \rho \vec{a} \quad (2.21)$$

sendo

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

o tensor de tensões.

2.6 As equações de Navier-Stokes

Em um fluido newtoniano isotrópico, o tensor de tensões pode ser decomposto em duas parcelas:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \mathbf{T}' \quad (2.23)$$

onde p é a pressão hidrostática e o tensor \mathbf{T}' depende apenas da taxa de deformação tal que é zero quando o fluido está em movimento de corpo rígido ou em repouso. Assim, para cada ponto material, os valores das componentes de \mathbf{T}' em um instante de tempo t dependem linearmente das componentes do tensor taxa de deformação \mathbf{D} no mesmo instante. As componentes o tensor taxa de deformação estão relacionadas às componentes

do gradiente de velocidade por

$$\begin{aligned}
 D_{xx} &= \frac{\partial u}{\partial x} \\
 D_{yy} &= \frac{\partial v}{\partial y} \\
 D_{zz} &= \frac{\partial w}{\partial z} \\
 D_{xy} &= D_{yx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\
 D_{yz} &= D_{zy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\
 D_{xz} &= D_{zx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

O tensor isotrópico \mathbf{T}' pode ser escrito como:

$$\mathbf{T}' = \lambda(\nabla \cdot \vec{V})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D} \tag{2.25}$$

sendo

$$\nabla \cdot \vec{V} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \tag{2.26}$$

a taxa de deformação volumétrica, a constante μ é a chamada primeira viscosidade (dinâmica), que relaciona as tensões com as deformações lineares, e a contante λ é a segunda viscosidade, que relaciona as tensões com a deformação volumétrica. Deste modo, o tensor de tensão total \mathbf{T} para um fluido newtoniano é dado por

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \lambda(\nabla \cdot \vec{V})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D} \tag{2.27}$$

Para um fluido incompressível tem-se

$$\nabla \cdot \vec{V} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \tag{2.28}$$

em todos os instantes de tempo de modo que a equação constitutiva (2.27) é simplificada para

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \mu\mathbf{D} \tag{2.29}$$

A partir da Equação (2.29) pode-se escrever:

$$\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz} = -3p + 2\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \tag{2.30}$$

que devido a incompressibilidade permite escrever

$$p = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \tag{2.31}$$

sendo, portanto, para um fluido incompressível, a pressão p interpretada como a tensão média normal, não dependendo explicitamente de outras quantidades cinemáticas.

Dados os valores das componentes do tensor taxa de deformação de \mathbf{D} na Equação (2.24), então as componentes da equação constitutiva de \mathbf{T} podem ser escritas como

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx} &= -p + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \\
\sigma_{yy} &= -p + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \\
\sigma_{zz} &= -p + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \\
\tau_{xy} = \tau_{yx} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\
\tau_{xz} = \tau_{zx} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\
\tau_{yz} = \tau_{zy} &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)
\end{aligned} \tag{2.32}$$

Considerando a aceleração dada pela Equação (2.13), as Navier-Stokes pode ser escritas em termos das componentes da velocidade do fluido. Combinando as Equações (2.13) e (2.21) tem-se

$$\frac{\partial(\rho\vec{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{V} \otimes \vec{V}) = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho\vec{B} \tag{2.33}$$

Substituindo a equação constitutiva do tensor de tensões para um fluido newtoniano incompressível, Equação (2.29) na equação (2.33), tem-se

$$\frac{\partial(\rho\vec{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{V} \otimes \vec{V}) = \nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \mu\mathbf{D}) + \rho\vec{B} \tag{2.34}$$

que em componentes pode ser escrita como:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \rho B_x \tag{2.35}$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \rho B_y \tag{2.36}$$

$$\rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + \rho B_z \tag{2.37}$$

A Equação (2.34) ainda ser colocada em um forma vetorial mais compacta, sendo escrita como:

$$\frac{\partial(\rho\vec{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{V} \otimes \vec{V}) = \nabla p + \mu \nabla^2 \vec{V} + \rho\vec{B} \tag{2.38}$$

As equações (2.38) são as equações de Navier-Stokes para um fluido Newtoniano incompressível em termos de quatro incógnitas, u , v , w e p e apenas três equações, (2.35), (2.36) e (2.37). A quarta equação necessária para o fechamento do sistema é a equação da continuidade:

$$\nabla \cdot \vec{V} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \tag{2.39}$$

2.7 A equação de conservação da energia

A equação da energia é obtida a partir da primeira lei da termodinâmica para um elemento de fluido que estabelece: *a variação temporal da energia no elemento de fluido é igual ao fluxo resultante de calor para dentro do elemento com o trabalho realizado sobre o elemento pelas forças de corpo e de superfície.*

A variação temporal da energia total E de um elemento de fluido é dado pelo produto da densidade e a taxa de variação de E , ou seja,

$$\rho \frac{\partial E}{\partial t} \delta_x \delta_y \delta_z \quad (2.40)$$

O calculo da taxa de trabalho realizado sobre o elemento de fluido pelas forças de superfície é dado pelo produto entre as tensões e as componentes da velocidade. Assim, considere na Figura 6 o produto entre a componente u da velocidade e as tensões normais viscosas, σ_{xx} , e as tensões tangenciais viscosas, τ_{yx} e τ_{zx} .

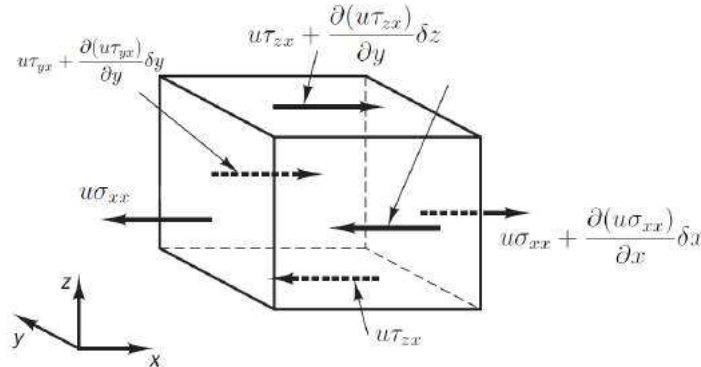


Figura 6 – Trabalho realizado sobre o elemento na direção x .

O trabalho realizado pelas tensões na direção x é

$$\begin{aligned} & \left(u\sigma_{xx} + \frac{\partial(u\sigma_{xx})}{\partial x} \delta x \right) \delta y \delta z - u\sigma_{xx} \delta y \delta z + \\ & \left(u\tau_{yx} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} \delta y \right) \delta x \delta z - u\tau_{yx} \delta x \delta z + \\ & \left(u\tau_{zx} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \delta z \right) \delta x \delta y - u\tau_{zx} \delta x \delta y = \\ & \frac{\partial(u\sigma_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \end{aligned} \quad (2.41)$$

De modo análogo, o trabalho sobre o elemento de fluido na direção y é

$$\begin{aligned}
 & \left(v\tau_{xy} + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x}\delta x \right) \delta y\delta z - v\tau_{xy}\delta y\delta z + \\
 & \left(v\sigma_{yy} + \frac{\partial(v\sigma_{yy})}{\partial y}\delta y \right) \delta x\delta z - v\sigma_{yy}\delta x\delta z + \\
 & \left(v\tau_{zy} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z}\delta z \right) \delta x\delta y - v\tau_{zy}\delta x\delta y = \\
 & \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\sigma_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z}
 \end{aligned} \tag{2.42}$$

e o trabalho na direção z é:

$$\begin{aligned}
 & \left(w\tau_{xz} + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x}\delta x \right) \delta y\delta z - w\tau_{xz}\delta y\delta z + \\
 & \left(w\tau_{yz} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y}\delta y \right) \delta x\delta z - w\tau_{yz}\delta x\delta z + \\
 & \left(w\sigma_{zz} + \frac{\partial(w\sigma_{zz})}{\partial z}\delta z \right) \delta x\delta y - w\sigma_{zz}\delta x\delta y = \\
 & \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\sigma_{zz})}{\partial z}
 \end{aligned} \tag{2.43}$$

O fluxo de calor para dentro do elemento de fluido é dado fazendo-se um balanço deste fluxo através das faces do elemento. De acordo com a Figura 7 e denotando-se o fluxo de calor por $\vec{Q} = (q_x, q_y, q_z)$, o balanço no elemento resulta em:

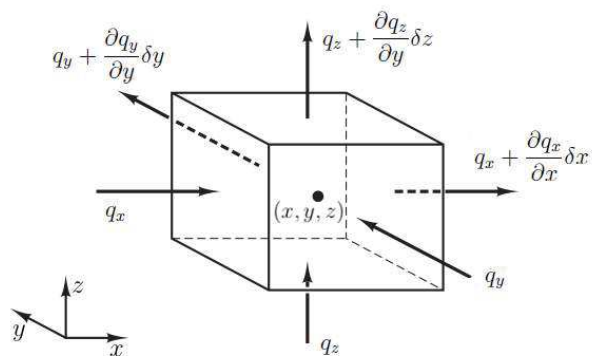


Figura 7 – Fluxo de calor no elemento de fluido.

$$\begin{aligned}
& q_x \delta y \delta z - \left(q_x + \frac{\partial q_x}{\partial x} \delta x \right) \delta y \delta z + \\
& q_y \delta x \delta z - \left(q_y + \frac{\partial q_y}{\partial y} \delta y \right) \delta x \delta z + \\
& q_z \delta x \delta y - \left(q_z + \frac{\partial q_z}{\partial z} \delta z \right) \delta x \delta y = \\
& - \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right)
\end{aligned} \tag{2.44}$$

Combinado a taxa de variação temporal da energia (Equação (2.40)) com o trabalho realizado sobre o elemento de fluido pelas tensões (Equações (2.41), (2.42) e (2.43)) e o fluxo de calor resultante (Equação (2.44)), tem-se:

$$\begin{aligned}
\rho \frac{\partial E}{\partial t} = & \frac{\partial(u\sigma_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(v\sigma_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(w\sigma_{zz})}{\partial z} + \\
& \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} - \\
& \frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y} - \frac{\partial q_z}{\partial z}
\end{aligned} \tag{2.45}$$

A Equação (2.45) pode ser considerada uma das formas da equação de conservação da energia.

O fluxo de calor \vec{q} pode ser escrito em termos da Lei de Fourier de condução de calor, relacionando o fluxo de calor com o gradiente de temperatura local. Ou seja, podemos escrever

$$\vec{q} = (q_x, q_y, q_z) = \left(-k \frac{\partial T}{\partial x}, -k \frac{\partial T}{\partial y}, -k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \tag{2.46}$$

onde k é a condutividade térmica e T a temperatura. Já os efeitos das tensões viscosas podem ser escritos em termos de uma função de dissipação Φ como

$$\begin{aligned}
\Phi = & \frac{\partial(u\sigma_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(v\sigma_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(w\sigma_{zz})}{\partial z} + \\
& \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y}
\end{aligned} \tag{2.47}$$

Com estas duas considerações e aplicando a equação constitutiva (2.29) para o tensor de tensões, a equação da energia (2.45) pode ser rescrita como

$$\rho \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \frac{\partial(up)}{\partial x} - \frac{\partial(vp)}{\partial y} - \frac{\partial(wp)}{\partial z} + \Phi \tag{2.48}$$

A energia específica E de um fluido pode ser definida como a soma da energia interna e , energia cinética e energia potencial gravitacional. A energia potencial gravitacional

pode ser tratada como força de corpo e, portanto, incluída como termo fonte. Assim, a energia específica E pode ser escrita como

$$E = e + \frac{1}{2} (u^2 + v^2 + w^2) \quad (2.49)$$

Em fluidos compressíveis, pode-se rescrever a Equação (2.49) em termos da entalpia. A entalpia específica, h , e a entalpia total, H , são definidas como

$$h = e + \frac{p}{\rho} \quad \text{e} \quad H = h + \frac{1}{2} (u^2 + v^2 + w^2) \quad (2.50)$$

Assim, a energia específica dada pela Equação (2.49) pode ser escrita em termos da entalpia total como

$$H = e + \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} (u^2 + v^2 + w^2) = E + \frac{p}{\rho} \quad (2.51)$$

Por fim, considerando um fluido incompressível e desprezando-se os efeitos da energia cinética, a entalpia pode ser reduzida para $H = cT$, sendo c o calor específico considerado constante. Assim, a equação da energia pode ser escrita em termos da temperatura como

$$\rho c \frac{DT}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{\partial p}{\partial t} + \Phi \quad (2.52)$$

Para muitos problemas a derivada local da pressão $\frac{\partial p}{\partial t}$ e a função de dissipação Φ podem ser desprezados. Logo a Equação (2.52) pode ser escrita como

$$\rho c \frac{DT}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (2.53)$$

Considerando-se a densidade ρ , o calor específico c e a condutividade térmica k constantes e aplicando-se a definição da derivada material (Equação (2.3)):

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{k}{\rho c} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (2.54)$$

ou, em notação vetorial,

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla T = k \nabla^2 T \quad (2.55)$$

Estas são as equações governantes empregadas na termodinâmica e dinâmica dos fluidos computacional. Adaptações, simplificações e adições de termos do tipo fonte podem ser necessárias de acordo com o tipo de problema estudado.

3 OBTENÇÃO DE FATORES DE RELAXAÇÃO OTIMIZADOS

3.1 O Método dos Volumes Finitos clássico

O Método dos Volumes Finitos em sua forma tradicional, utilizando-se de malhas estruturadas e de aproximações baseadas em série de Taylor para os fluxos através das faces dos volumes de controle, já foi objeto de estudo de vários autores, como [Odone et al. \(2014\)](#) e [Versteeg e Malalasekera \(2007\)](#). Porém, para uma apresentação adequada do esquema para obtenção dos fatores de relaxação, cabe aqui fazer uma breve revisão deste método.

3.1.1 Equações de conservação

Para os problemas abordados neste capítulo, serão considerados escoamentos de fluidos newtonianos incompressíveis em regiões bidimensionais e em regime permanente (estacionário). Estes escoamentos podem ser modelados pelas equações de conservação da quantidade de movimento linear (equações de movimento) com as componentes da velocidade restritas à equação da continuidade (ou equação de conservação da massa) que, para problemas bidimensionais, podem ser escritas como ([Odone et al., 2013, 2015](#))

$$\nabla \cdot (\rho \vec{V}u) - \nabla \cdot (\mu \nabla u) = -\frac{\partial p}{\partial x} + S_u \quad (3.1)$$

$$\nabla \cdot (\rho \vec{V}v) - \nabla \cdot (\mu \nabla v) = -\frac{\partial p}{\partial y} + S_v \quad (3.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0, \quad (3.3)$$

onde u e v são as componentes do vetor velocidade \vec{V} , ρ é a densidade, μ a viscosidade, p a pressão e S_u e S_v representam termos fonte em suas respectivas equações.

Em problemas termodinâmicos, que envolvem a variação de temperatura além do escoamento, é necessário o emprego da equação de conservação da energia que pode ser escrita como:

$$\nabla \cdot (\rho c \vec{V}T) - \nabla \cdot (k \nabla T) = S_T, \quad (3.4)$$

onde T é a temperatura, c é o calor específico, k a condutividade térmica e S_T representa termos fonte. Modificações na Equação (3.4), como escrevê-la em função da entalpia ou a adição de termos fonte adequados, podem ser necessárias dependendo do modelo estudado.

3.1.2 Discretização pelo Método dos Volumes Finitos

A técnica de solução numérica do sistema de Equações (3.1) a (3.4), pelo Método dos Volumes Finitos, constitui na integração de cada uma das equações em volumes de controle como ilustrado na Figura 8.

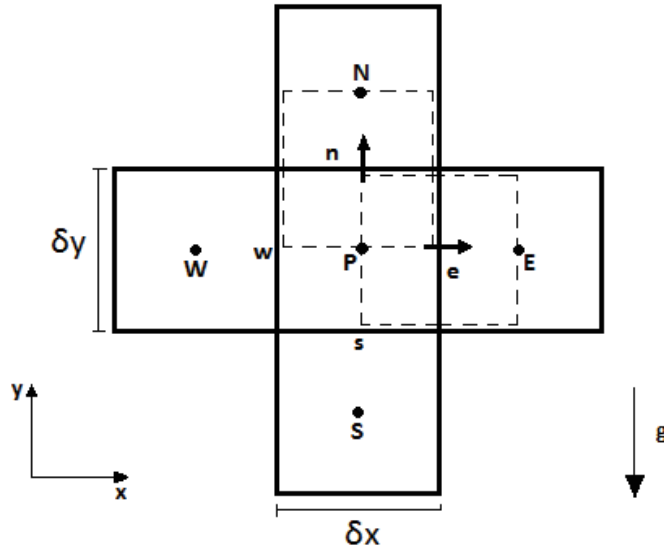


Figura 8 – Estêncil bidimensional para o Método dos Volumes Finitos clássico.

Alocação deslocada (staggered) das variáveis é empregada (Versteeg e Malalasekera, 2007; Moukalled et al., 2016). Assim, as equações de movimento bem como a equação da continuidade são integradas nos volumes de controle em torno de pontos como e e n para as componentes da velocidade u e v , respectivamente. Variáveis escalares, como a temperatura e a pressão são alocadas em pontos como P e a equação da energia é integrada nos volumes de controle ao redor de tais pontos. Aproximação dos termos difusivos é feita usando esquema de diferenças centrais enquanto que os termos convectivos são aproximados por esquemas como *upwind* ou híbrido (Patankar, 1980; Versteeg e Malalasekera, 2007).

Deste modo, fazendo-se o processo de integração das Equações (3.1), (3.2) e (3.4) nos seus correspondentes volumes de controle, aproximando-se os fluxos difusivos e convectivos através das faces dos volumes, agrupando e reordenando os termos pode-se escrever as seguintes equações algébricas discretas para as equações do movimento e da energia, respectivamente:

$$a_e u_e - \sum a_{nb} u_{nb} = (p_P - p_E) A_e + b_e \quad (3.5)$$

$$a_n v_n - \sum a_{nb} v_{nb} = (p_P - p_N) A_n + b_n \quad (3.6)$$

$$a_T T_P - \sum a_{nb} T_{nb} = b_P, \quad (3.7)$$

onde a_i são os coeficientes, que contêm combinações da discretização dos termos difusivo e convectivo, $(p_P - p_E) A_e$ e $(p_P - p_N) A_n$ representam a integração do gradiente de pressão em cada uma das equações do movimento e cada somatório se dá sobre cada um dos pontos vizinhos para cada respectiva variável (Odone et al., 2013, 2015).

3.2 O algoritmo SIMPLE

O Algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations), de Patankar (1980) e Versteeg e Malalasekera (2007), é a base para uma série de algoritmos similares, tais como o SIMPLER (SIMPLE-Revised), de Patankar (1980), SIMPLEC (SIMPLE-Consistent), de Doormaal e Raithby (1984), PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators), de Issa (1986), dentre outros, com o propósito de resolver iterativamente um problema de escoamento incompressível. No que segue, apresenta-se a formulação do algoritmo SIMPLE para o regime permanente.

Arbitrando-se um valor p^* para o campo de pressões e admitindo que os fluxos de massa $F_x = \rho u$ e $F_y = \rho v$ através das faces dos volumes de controle tenham sido calculados a partir de uma estimativa para o campo de velocidades (Versteeg e Malalasekera, 2007), as componentes intermediárias u^* e v^* da velocidade podem ser obtidas resolvendo as equações discretas do movimento, tais que:

$$a_e u_e^* - \sum a_{nb} u_{nb}^* = (p_P^* - p_E^*) A_e + b_e \quad (3.8)$$

$$a_n v_n^* - \sum a_{nb} v_{nb}^* = (p_P^* - p_N^*) A_n + b_n. \quad (3.9)$$

Definindo-se a correção para a pressão, p' , como a diferença entre o valor correto da pressão p e do valor estimado p^* , e definindo-se correções análogas para as componentes da velocidade, pode-se escrever:

$$p = p^* + p', \quad u = u^* + u', \quad e \quad v = v^* + v'. \quad (3.10)$$

A substituição do campo de pressões correto nas Equações (3.5) e (3.6) levam ao cálculo das componentes u e v corretas dadas por:

$$a_e u_e - \sum a_{nb} u_{nb} = (p_P - p_E) A_e + b_e \quad (3.11)$$

e

$$a_n v_n - \sum a_{nb} v_{nb} = (p_P - p_N) A_n + b_n. \quad (3.12)$$

Subtraindo a Equação (3.11) da Equação (3.8) e subtraindo a Equação (3.12) da Equação (3.9) fornece:

$$a_e u_e' - \sum a_{nb} u_{nb}' = (p_P' - p_E') A_e \quad (3.13)$$

e

$$a_n v_n' - \sum a_{nb} v_{nb}' = (p_P' - p_N') A_n. \quad (3.14)$$

Neste momento, a principal aproximação do algoritmo SIMPLE é realizada e consiste em desprezar os termos sob os somatórios, permitindo escrever:

$$u_e' = d_e (p_P' - p_E') \quad e \quad v_n' = d_n (p_P' - p_N'), \quad (3.15)$$

onde $d_e = A_e/a_e$ e $d_n = A_n/a_n$. As expressões em (3.15) definem as expressões de correção para as componentes da velocidade que, empregadas na Equação (3.10), fornece

$$u_e = u_e^* + d_e(p'_P - p'_E), \quad e \quad v_n = v_n^* + d_n(p'_P - p'_N). \quad (3.16)$$

No tratamento de escoamentos incompressíveis, as equações de movimento ficam restritas à equação da continuidade (3.3). Integrando-se a equação da continuidade em um volume de controle em torno do ponto P (Figura 8) e substituindo as componentes da velocidade pelas expressões dadas na Equação (3.16), permite escrever:

$$a_P p'_P - (a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S) = b'_P \quad (3.17)$$

com os coeficientes dados por

$$\begin{aligned} a_E &= (\rho dA)_e \\ a_W &= (\rho dA)_w \\ a_N &= (\rho dA)_n \\ a_S &= (\rho dA)_s \\ a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S \\ b'_P &= (\rho u^* A)_w - (\rho u^* A)_e + (\rho v^* A)_s - (\rho v^* A)_n. \end{aligned} \quad (3.18)$$

A Equação (3.17) é a discretização da equação da continuidade escrita como uma equação para a correção da pressão p' . A solução desta equação fornece correções para a pressão em todos os pontos e são empregadas para atualizar tanto as pressões quanto as componentes da velocidade por meio das expressões dadas pelas Equações (3.10) e (3.16).

Estas etapas fornecem todos os elementos para a formulação do algoritmo SIMPLE, cujas principais etapas são descritas a seguir.

- Repita até a convergência de u , v e p :

1 - Resolva as equações de movimento discretas, obtendo u^* e v^* :

$$\begin{aligned} a_e u_e^* - \sum a_{nb} u_{nb}^* &= (p_P^* - p_E^*) A_e + b_e \\ a_n v_n^* - \sum a_{nb} v_{nb}^* &= (p_P^* - p_N^*) A_n + b_n \end{aligned}$$

2 - Resolva a equação de correção da pressão, obtendo p' :

$$a_P p'_P - (a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S) = b'_P$$

3 - Corrija as pressões e velocidades, obtendo u , v e p :

$$p = p^* + p' \quad u_e = u_e^* + d_e(p'_P - p'_E) \quad v_n = v_n^* + d_n(p'_P - p'_N)$$

4 - Resolva outras equações discretas, obtendo ϕ :

$$a_P\phi_P - (a_E\phi_E + a_W\phi_W + a_N\phi_N + a_S\phi_S) = b_\phi$$

5 - Defina as estimativas para a próxima iteração:

$$p^* = p \quad u^* = u \quad v^* = v.$$

No passo 4, ϕ representa qualquer outra variável escalar como, por exemplo, a temperatura (Odone et al., 2013, 2015; Versteeg e Malalasekera, 2007).

Algoritmos como o SIMPLER, SIMPLEC e PISO são obtidos a partir de mudanças no SIMPLE. Detalhes da formulação dessas variações podem ser obtidos em Versteeg e Malalasekera (2007) e outros.

3.3 Método de variação dos fatores de relaxação

O algoritmo SIMPLE tal como apresentado na seção anterior é suscetível à divergência devido as não-linearidades e o acoplamento do campo de pressões e velocidade com a equação da continuidade. Assim, fatores de relaxação devem ser empregados para garantir a estabilidade e convergência do algoritmo.

3.3.1 Introdução dos fatores de relaxação nas equações

Fatores de relaxação são frequentemente adotados tanto para a correção da pressão quanto para o cálculo das componentes da velocidade. Usualmente, um mesmo valor é usado para os fatores de relaxação de ambas as componentes u e v da velocidade. Representando o fator de relaxação da pressão por α_p e das componentes da velocidade por α_v , de acordo com Moukalled et al. (2016) e Min e Tao (2007) seus valores podem ser tais que

$$\alpha_v + \alpha_p = 1. \quad (3.19)$$

De acordo com Versteeg e Malalasekera (2007), fatores de relaxação para a pressão e para as componentes da velocidade podem ser inseridos diretamente nas expressões de correção da pressão e da velocidade dadas em (3.10), reescrevendo como:

$$p = p^* + \alpha_p p', \quad u = u^* + \alpha_v u', \quad e \quad v = v^* + \alpha_v v' \quad (3.20)$$

Ainda, de acordo com Patankar (1980), a partir das equações do movimento, (3.5) e (3.6), pode-se escrever:

$$u_e = \frac{\sum a_{nb}u_{nb} + (p_P - p_E)A_e + b_e}{a_e} \quad (3.21)$$

$$v_n = \frac{\sum a_{nb}v_{nb} + (p_P - p_N)A_n + b_n}{a_n}. \quad (3.22)$$

Denotando os valores das componentes da velocidade obtidos em uma iteração passada por $u^{(n-1)}$ e $v^{(n-1)}$, pode-se adicionar e subtrair $u_e^{(n-1)}$ e $v_n^{(n-1)}$ em suas respectivas Equações (3.21) e (3.22), obtendo-se

$$u_e = u_e^{(n-1)} + \left[\frac{\sum a_{nb}u_{nb} + (p_P - p_E)A_e + b_e}{a_e} - u_e^{(n-1)} \right] \quad (3.23)$$

$$v_n = v_n^{(n-1)} + \left[\frac{\sum a_{nb}v_{nb} + (p_P - p_N)A_n + b_n}{a_n} - v_n^{(n-1)} \right]. \quad (3.24)$$

Os termos entre colchetes nas Equações (3.23) e (3.24) representam as variações em u_e e v_n obtidas na iteração atual. Esta variação pode ser modificada introduzindo-se o fator de relaxação α_v , obtendo:

$$u_e = u_e^{(n-1)} + \alpha_v \left[\frac{\sum a_{nb}u_{nb} + (p_P - p_E)A_e + b_e}{a_e} - u_e^{(n-1)} \right] \quad (3.25)$$

$$v_n = v_n^{(n-1)} + \alpha_v \left[\frac{\sum a_{nb}v_{nb} + (p_P - p_N)A_n + b_n}{a_n} - v_n^{(n-1)} \right], \quad (3.26)$$

ou ainda,

$$\frac{a_e}{\alpha_v}u_e - \sum a_{nb}u_{nb} = (p_P - p_E)A_e + b_e + (1 - \alpha_v)\frac{a_e}{\alpha_v}u_e^{(n-1)} \quad (3.27)$$

$$\frac{a_n}{\alpha_v}v_n - \sum a_{nb}v_{nb} = (p_P - p_N)A_n + b_n + (1 - \alpha_v)\frac{a_n}{\alpha_v}v_n^{(n-1)}. \quad (3.28)$$

Ainda, de acordo com as Equações (3.27) e (3.28), pode-se mostrar que a equação de correção da pressão é modificada pelo fator de relaxação da velocidade nos termos $d_e = A_e/a_e$ e $d_n = A_n/a_n$ da seguinte forma (Versteeg e Malalasekera, 2007):

$$d_e = \frac{A_e\alpha_v}{a_e} \quad e \quad d_n = \frac{A_n\alpha_v}{a_n} \quad (3.29)$$

Assim, para a efetividade do algoritmo SIMPLE, as equações do movimento devem ser resolvidas com os fatores de relaxação já inseridos em sua formulação, como mostrado nas Equações (3.27) e (3.28), a equação de correção da pressão deve ser resolvida empregando as expressões dadas em (3.29) e a correção da pressão deve ser realizada por meio de sua correspondente expressão dada pela Equação (3.20).

3.3.2 Revisão bibliográfica sobre otimização de fatores de relaxação

Algoritmos iterativos como o SIMPLE estão sujeitos a problemas de convergência e instabilidade numérica se fatores de relaxação não forem empregados durante o ciclo iterativo. Além disso, quando a escolha desses valores é feita de forma adequada, pode-se obter significativa redução no número de iterações do algoritmo e, conseqüentemente, um tempo de execução menor. Na literatura é possível encontrar diversas técnicas e

modificações de algoritmos visando a otimização dos fatores de relaxação empregados nestes algoritmos. Algumas destas técnicas serão resumidamente apresentadas a seguir.

No trabalho de [Marek e Straub \(1993b\)](#) é apresentado o algoritmo MAPLE (Modified Algorithm for Pressure-Linked Equations) baseado no algoritmo SIMPLE, tratando-se de uma hibridização entre subrelaxação e sobre-relaxação. De acordo com [Marek e Straub \(1993b\)](#), a ideia da relaxação híbrida é selecionar o fator de relaxação α para o passo de iteração seguinte de acordo com o fator de convergência μ do passo de iteração atual, com μ sendo definido como a razão entre os máximos das fontes de massa de duas iterações consecutivas:

$$\mu = \frac{M_{max}^{(n-1)}}{M_{max}^n} \quad (3.30)$$

onde M_{max} são as fontes de massa e n e $n - 1$ indicam dois passos de iteração consecutivos. Se em uma determinada iteração ocorre divergência ($\mu > 1$), então a iteração seguinte deverá ser sub-relaxada ($\alpha < 1$). Caso ocorra convergência ($\mu < 1$), então a iteração seguinte é sobre-relaxada ($\alpha > 1$). Ou seja, enquanto as iterações convergirem, processo de sobre-relaxação é usado para acelerar a taxa global de convergência do algoritmo. Quando ocorrer divergência, processo de sub-relaxação é empregado para amortecer os efeitos de instabilidade iniciais. Voltando a ocorrer convergência, novamente o processo de sobre-relaxação é empregado. O algoritmo MAPLE segue passos similares ao SIMPLE descrito anteriormente e os detalhes de sua implementação podem ser encontrados em [Marek e Straub \(1993b\)](#).

No trabalho de [Chatwani e Turan \(1991\)](#), é proposto um algoritmo para calcular de forma automatizada o fator de relaxação para a pressão em algoritmos como o SIMPLE e SIMPLEC baseado na minimização da norma do resíduo global. O resíduo em um ponto para a componente u da velocidade pode ser definido a partir das Equações (3.5) e (3.20) e escrito como

$$\begin{aligned} R_u &= a_e u_e - \sum a_{nb} u_{nb} - (p_P - p_E) A_e - b_e \\ &= a_e u_e - \sum a_{nb} u_{nb} - [(p_P^* + \alpha_P p'_P) - (p_E^* + \alpha_P p'_E)] A_e - b_e \\ &= R_{u,old} - \alpha_P A_e (p'_P - p'_E) \end{aligned} \quad (3.31)$$

sendo $R_{u,old}$ o resíduo calculado a partir da velocidade corrigida e da pressão arbitrada. Expressão similar pode ser obtida para a equação da componente v da velocidade. Assim, o resíduo global é dada por

$$G = \sum (R_u^2 + R_v^2) \quad (3.32)$$

Minimizando G em relação ao fator de relaxação, α_p pode ser calculado a partir de

$$\alpha_p = \frac{\sum [R_{u,old} A_e (p'_P - p'_E) + R_{v,old} A_n (p'_P - p'_N)]}{\sum [A_e^2 (p'_P - p'_E)^2 + A_n^2 (p'_P - p'_N)^2]} \quad (3.33)$$

Empregando esse procedimento de cálculo do fator de relaxação no algoritmo SIMPLE, α_p é calculado no fim de cada iteração do algoritmo.

O SOAR (SIMPLE Optimized and Automated Relaxation Factors), encontrado em [Morii e Vierow \(2000\)](#), é um método proposto para determinar automaticamente valores ótimos para os fatores de relaxação do Algoritmo SIMPLE e melhorar suas características de convergência. Os fatores de relaxação para a pressão e para as componentes da velocidade são calculados para cada volume de controle a cada iteração a partir de um termo representando a diferença entre as equações aproximadas para o algoritmo SIMPLE e as equações exatas do método direto Newton-Raphson. De acordo com [Morii e Vierow \(2000\)](#), a diferença entre as equações de movimento do algoritmo SIMPLE e as equações de movimento do método de Newton-Raphson permite calcular os fatores de relaxação α_u e α_v em cada volume de controle para as equações de movimento através de:

$$a_e^u \delta u_e \alpha_e^u - \sum a_{nb,e}^u \delta u_{nb} \alpha_{nb}^u + r_u^k + \sum d_{nb}^u \nabla_x^{nb,P} p'(\alpha_u, \alpha_v) = 0 \quad (3.34)$$

$$a_n^v \delta v_n \alpha_n^v - \sum a_{nb,n}^v \delta v_{nb} \alpha_{nb}^v + r_v^k + \sum d_{nb}^v \nabla_y^{nb,P} p'(\alpha_u, \alpha_v) = 0 \quad (3.35)$$

onde

$$r_u^k = a_e^u u_e^k - \sum a_{nb,e}^u u_{nb}^k + A_e^u \nabla_x^P p^k - b_u \quad (3.36)$$

$$r_v^k = a_n^v v_n^k - \sum a_{nb,n}^v v_{nb}^k + A_n^v \nabla_y^P p^k - b_v \quad (3.37)$$

$$\delta u \equiv \tilde{u} - u^k, \quad \delta v \equiv \tilde{v} - v^k, \quad d_{nb}^u \equiv a_{nb}^u \frac{A_{nb}^u}{a_{nb}^u}, \quad d_{nb}^v \equiv a_{nb}^v \frac{A_{nb}^v}{a_{nb}^v} \quad (3.38)$$

Ainda, com relação as expressões 3.34 a 3.35, k representa valores da iteração passada, e \tilde{u} e \tilde{v} são valores intermediários das componentes u e v obtidos após a solução das equações de movimento com uma estimativa para o campo de pressões. O algoritmo SOAR requer uma relação direta entre as velocidades relaxadas e as velocidades calculadas pela solução das equações de movimento. Assim, as componentes da velocidade relaxadas são calculadas por

$$u^* = (1 - \alpha_u) u^k + \alpha_u \tilde{u} = u^k + \alpha_u (\tilde{u} - u^k) \quad (3.39)$$

$$v^* = (1 - \alpha_v) v^k + \alpha_v \tilde{v} = v^k + \alpha_v (\tilde{v} - v^k) \quad (3.40)$$

De acordo com [Morii e Vierow \(2000\)](#), pode-se mostrar que o fator de relaxação da correção de pressão, α'_p , em cada ponto é obtido da solução da equação

$$4p'_P \alpha'_p = p'_E \alpha'_E + p'_W \alpha'_W + p'_N \alpha'_N + p'_S \alpha'_S - \left(\frac{\delta_e^u}{A_e^u} - \frac{\delta_W^u}{A_W^u} \right) - \left(\frac{\delta_n^u}{A_n^u} - \frac{\delta_S^u}{A_S^u} \right) \quad (3.41)$$

Uma vez que α'_p tenha sido calculado por meio da Equação (3.41), o fator de relaxação da pressão, α_p pode ser calculado por meio de

$$\alpha_p = 1 - \alpha'_p \quad (3.42)$$

O algoritmo SOAR tem implementação similar ao algoritmo SIMPLE e suas principais etapas são descritas a seguir.

- Repita até a convergência:
 - 1 - calcular \tilde{u} e u^* pelas expressões (3.5) e (3.39);
 - 2 - calcular \tilde{v} e v^* pelas expressões (3.6) e (3.40);
 - 3 - calcular p' pela Equação (3.17);
 - 4 - calcular α_u e α_v (juntamente com δ_u e δ_v) a partir das Equações (3.34) a (3.38);
 - 5 - atualizar u^* e v^* por meio de (3.39) e (3.40) com α_u e α_v calculados no passo 4;
 - 6 - repetir os passos 3 a 5 até que δ_u e δ_v sejam suficientemente pequenos;
 - 7 - calcular α'_p por meio da Equação (3.41);
 - 8 - calcular α_p por meio da Equação (3.42);
 - 9 - calcular $u^{(k+1)}$, $v^{(k+1)}$ e $p^{(k+1)}$ por meio da Equação (3.16).

Em [Min e Tao \(2007\)](#), é apresentado um método de cálculo de fatores de relaxação ótimos, baseado na equivalência das normas dos resíduos globais das equações de movimento. A partir da Equação (3.33), supondo que a diferença entre as correções de pressões de dois nós adjacentes são iguais e denotando por $\Delta p'$, pode-se reescrever a Equação (3.33) como

$$\alpha_p = \frac{\sum(R_{u,old}A_e + R_{v,old}A_n)}{\sum(A_e^2\Delta p' + \sum A_n^2\Delta p')} \quad (3.43)$$

Combinando os resíduos de ambas as equações de movimento com a Equação (3.33), pode-se escrever as seguintes relações:

$$R_u = \frac{R_{u,old}A_e^2 - A_e \sum(R_{u,old}A_e) + R_{u,old}A_n^2 - A_e \sum(R_{v,old}A_n)}{\sum(A_e^2 + A_n^2)} \quad (3.44)$$

$$R_v = \frac{R_{v,old}A_n^2 - A_n \sum(R_{v,old}A_n) + R_{v,old}A_e^2 - A_n \sum(R_{u,old}A_e)}{\sum(A_e^2 + A_n^2)} \quad (3.45)$$

Assumindo que $A_e = A_n$ e que os valores de $R_{u,old}$ e $R_{v,old}$ são iguais em todos os pontos, pode-se obter a seguinte relação

$$R_u = -R_v = \frac{\sum(R_{u,old}A_n^2) - \sum(R_{v,old}A_eA_n)}{\sum(A_e^2 + A_n^2)} \quad (3.46)$$

implicando que

$$G_u = G_v \quad (3.47)$$

ou seja, o fator de relaxação definido pela Equação (3.33) pode resultar na equivalência das normas dos resíduos globais das equações de movimento sob certas condições. Então, de acordo com [Min e Tao \(2007\)](#), se os resíduos das equações de movimento forem aproximadamente iguais, a convergência do processo iterativo será acelerada. Assim, em

Min e Tao (2007) é proposto um método de cálculo dos fatores de relaxação para as componentes da velocidade de modo a tornar os resíduos das equações de movimento aproximadamente iguais.

Definindo a razão entre os resíduos das equações de movimento como

$$\beta = \frac{G_v}{G_u} \quad (3.48)$$

o fator de relaxação ótimo pode ser obtido, de acordo com Min e Tao (2007), por uma das seguintes relações:

- β é menor que 1 quando o fator de relaxação é pequeno, ou β é maior que 1 quando o fator de relaxação é grande. Neste caso:

$$\alpha_v = (\alpha_v^0)^\beta \quad (3.49)$$

- β é maior que 1 quando o fator de relaxação é pequeno, ou β é menor que 1 quando o fator de relaxação é grande. Neste caso:

$$\alpha_v = (\alpha_v^0)^{1/\beta} \quad (3.50)$$

- Se uma das relações acima variar bruscamente o fator de relaxação, então a outra relação é empregada

Nas relações acima, α_v^0 refere-se ao fator de relaxação empregado na iteração anterior, enquanto que α_v é o fator de relaxação a ser calculado na iteração atual.

3.4 O método proposto

A utilização de fatores de relaxação durante o processo iterativo do algoritmo SIMPLE permanece uma questão em aberto uma vez que valores ótimos que acelerem a convergência dependem de cada problema a ser resolvido e valores fixos podem não ser ideais para todas as iterações (Versteeg e Malalasekera, 2007).

Alguns métodos visando a otimização dos fatores de relaxação foram apresentados na seção anterior. Nesta seção, um método de otimização dos fatores de relaxação para as equações do movimento no algoritmo SIMPLE baseado no trabalho de Min e Tao (2007) é apresentado.

De acordo com Min e Tao (2007), as normas dos resíduos N_u e N_v para as suas respectivas equações do movimento (3.5) e (3.6), podem ser escritas como:

$$R_u = \frac{(\sum_{nos} (a_e u_e - \sum a_{nb} u_{nb} - (p_P - p_E) A_e - b_e)^2)^{1/2}}{\rho u_{ref}^2} \quad (3.51)$$

$$R_v = \frac{(\sum_{nos}(a_n v_n - \sum a_{nb} v_{nb} - (p_P - p_N)A_n - b_n)^2)^{1/2}}{\rho v_{ref}^2}, \quad (3.52)$$

sendo que um critério de parada usual para o processo iterativo é

$$\max(R_u, R_v) \leq \epsilon, \quad (3.53)$$

onde ϵ é uma dada tolerância.

Para este trabalho, é proposto e usado como critério de parada e verificação de convergência que o valor máximo da norma da diferença entre as componentes da velocidade calculadas entre duas iterações consecutivas seja menor que uma dada tolerância. Ou seja,

$$N_u = \max(|u_e - u_e^{(n-1)}|) \leq \epsilon \quad \text{e} \quad N_v = \max(|v_n - v_n^{(n-1)}|) \leq \epsilon. \quad (3.54)$$

Dadas as normas definidas pelas expressões em (3.54), define-se a razão entre N_v e N_u por

$$\beta = \frac{N_v}{N_u}. \quad (3.55)$$

A ideia do método é baseada no fato de que se as normas de cada uma das equações do movimento forem aproximadamente iguais, a convergência do processo iterativo será acelerada, de acordo com a ideia proposta por [Min e Tao \(2007\)](#). Assim, pela expressão dada em (3.34), as normas serão aproximadamente iguais quando

$$\beta \approx 1. \quad (3.56)$$

O algoritmo de cálculo para o novo fator de relaxação é descrito como segue.

Baseado nos fatores de relaxação calculados pelo algoritmo em uma dada iteração ou na estimativa inicial ($\alpha_v = 0.6$ e $\alpha_p = 0.4$ são os valores iniciais empregados neste trabalho), o valor de β é calculado. O novo valor do fator de relaxação da velocidade é calculado em função do valor de β e de uma variável *flag* por uma das seguintes expressões:

$$\alpha_v = (\alpha_0)^{\beta^\gamma}, \quad \text{se} \quad \beta \leq 1 \quad \text{e se} \quad \textit{flag} = 0 \quad (3.57)$$

$$\alpha_v = (\alpha_0)^{(1/\beta)^\gamma}, \quad \text{se} \quad \beta \leq 1 \quad \text{e se} \quad \textit{flag} = 1 \quad (3.58)$$

$$\alpha_v = (\alpha_0)^{\beta^\gamma}, \quad \text{se} \quad \beta > 1 \quad \text{e se} \quad \textit{flag} = 1 \quad (3.59)$$

$$\alpha_v = (\alpha_0)^{(1/\beta)^\gamma}, \quad \text{se} \quad \beta > 1 \quad \text{e se} \quad \textit{flag} = 0. \quad (3.60)$$

Nas expressões (3.57) a (3.60), *flag* é uma variável que indica se o novo valor do fator de relaxação da velocidade calculado é maior (*flag* = 1) ou menor (*flag* = 0) que o fator de

relaxação anterior. Caso o valor do fator de relaxação calculado por uma dessas expressões seja superior ao valor limite dado ($\alpha_{lim} = 0.98$ é empregado neste trabalho), a expressão alternativa é imediatamente empregada para atualizar este valor. Por exemplo, se o valor calculado por $\alpha_v = (\alpha_0)^{\beta\gamma}$ for maior que α_{lim} , então a expressão $\alpha_v = (\alpha_0)^{(1/\beta)\gamma}$ é usada. Uma vez calculado o fator de relaxação para as componentes da velocidade o fator de relaxação para a correção da pressão é calculado por

$$\alpha_p = 1 - \alpha_v, \quad (3.61)$$

empregando-se o fator de relaxação da velocidade recém calculado.

Ainda com relação as expressões (3.57) a (3.60), o valor γ , sempre positivo, é usado para modificar o valor do expoente nas duas relações e suavizar a variação do fator de relaxação entre dois passos de iterações onde é calculado. Deve-se observar que variar os fatores de relaxação a cada iteração pode ser algo custoso e até mesmo ineficiente. Assim o algoritmo descrito pode ser empregado a cada iteração ou a cada n iterações a partir de um dado número de iterações iniciais. O valor de β também é ajustado de modo a prevenir variações muito grandes no seu valor. Assim, a variação de β deve ocorrer no intervalo entre 0.2 e 5.0.

3.5 Testes numéricos

Nesta seção são apresentados resultados de alguns testes numéricos do método de cálculo dos fatores de relaxação descrito anteriormente. Os exemplos numéricos apresentados foram implementados e executados usando-se a linguagem Python. O objetivo é mostrar que o método descrito neste trabalho pode reduzir o número de iterações do algoritmo SIMPLE e, conseqüentemente, o tempo de execução da solução do problema para determinados pares de parâmetros γ e n , sendo n o número de iterações que são realizadas até o cálculo de um novo fator de relaxação. Os problemas implementados são os de circulação, convecção natural e de circulação com fluxos de entrada e saída. Todos os problemas apresentados foram executados para malhas de 20×20 , 30×30 e 40×40 volumes de controle, número de Reynolds (Re) igual a 100, 1000 e 2000, valores iniciais $\alpha_v = 0.6$ e $\alpha_p = 0.4$ para os fatores de relaxação e usando como critério de parada a norma da diferença (expressões na Equação (3.33)), descritas anteriormente. Os tempos de execução apresentados são relativos aos tempos de execução com os fatores de relaxação fixos com valores $\alpha_v = 0.6$ e $\alpha_p = 0.4$.

3.5.1 Problema de circulação

A Figura 9 ilustra a solução para o problema de circulação com a malha de 20×20 volumes de controle. As Tabelas 1, 2 e 3 apresentam o tempo de execução para um

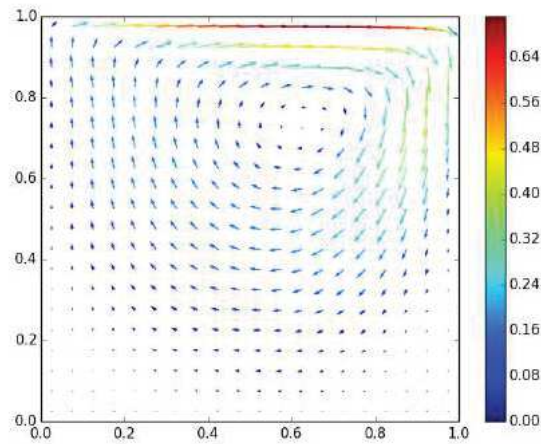


Figura 9 – Campo de velocidades do problema de circulação (em m/s).

conjunto de dados γ e n nas malhas 20×20 , 30×30 e 40×40 , respectivamente, para $Re = 100$.

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	0.9543	0.8183	0.8176	0.9728	0.9441	0.9861
$\gamma = 0.8$	0.9190	0.7045	0.7171	0.8630	0.8570	0.9521
$\gamma = 1.0$	0.8874	0.6273	0.6686	0.8144	0.8133	0.9089
$\gamma = 1.2$	0.8250	0.6154	0.6340	0.7538	0.7304	0.8516
$\gamma = 1.5$	0.7845	0.5263	0.5375	0.6641	0.7141	0.8010
$\gamma = 2.5$	0.7916	0.3927	0.5889	0.5233	0.6450	0.7844

Tabela 1 – Tempos de execução relativos, malha 20×20 , $Re = 100$.

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	0.8551	0.7651	0.7179	0.7935	0.7484	0.7739
$\gamma = 0.8$	0.7496	0.5534	0.5994	0.6896	0.6951	0.7316
$\gamma = 1.0$	0.7467	0.5183	0.5451	0.6720	0.6603	0.6956
$\gamma = 1.2$	0.7519	0.4881	0.4804	0.6480	0.6362	0.6583
$\gamma = 1.5$	0.7966	0.4331	0.4368	0.5791	0.5957	0.6010
$\gamma = 2.5$	0.8634	0.2418	0.2437	0.4244	0.3984	0.4298

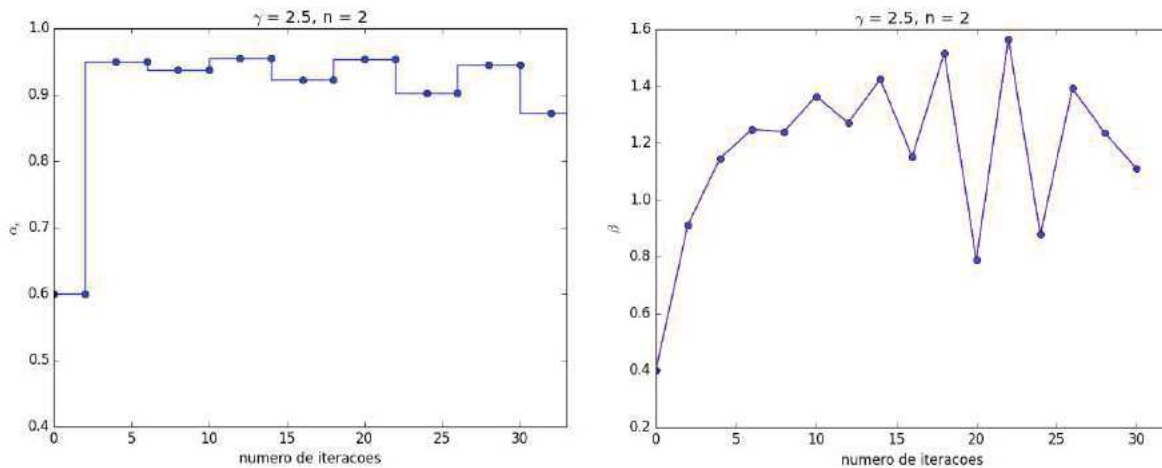
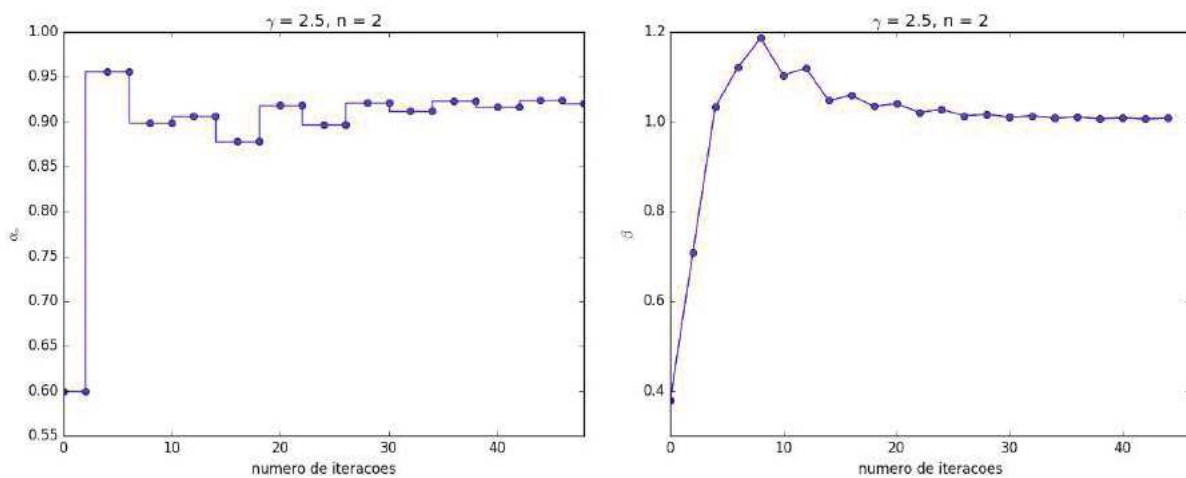
Tabela 2 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 100$.

O número de iterações com os parâmetros de relaxação fixos nas malhas 20×20 , 30×30 e 40×40 foram, respectivamente, 106, 191, e 286. Observa-se que nos três casos foi possível obter redução no tempo de execução para quase todos pares de parâmetros γ e n , sendo as maiores reduções de tempo em cada caso de: 60.72% na malha 20×20 ($\gamma = 2.5$ e $n = 2$ - redução de 106 para 32 iterações), 75.81% na malha 30×30 ($\gamma = 2.5$ e $n = 2$ - redução de 191 para 47 iterações) e 71.43% na malha 40×40 ($\gamma = 2.5$ e $n = 2$ - redução de 286 para 79 iterações).

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	0.8427	0.7267	0.7978	0.8309	0.8281	0.8656
$\gamma = 0.8$	0.8460	0.6169	0.6938	0.7928	0.7729	0.8429
$\gamma = 1.0$	0.8688	0.6229	0.6271	0.6720	0.7329	0.7452
$\gamma = 1.2$	0.8702	0.5608	0.5699	0.6970	0.6734	0.6844
$\gamma = 1.5$	0.9258	0.5025	0.4799	0.6090	0.5974	0.6202
$\gamma = 2.5$	1.1978	0.2856	0.2883	0.4422	0.4176	0.4545

Tabela 3 – Tempos de execução relativos, malha 40×40 , $Re = 100$.

As Figuras 10, 11 e 12 ilustram a variação do fator de relaxação da velocidade e do valor de β ao longo das iterações para os melhores casos obtidos em cada uma das três malhas.

Figura 10 – Malha 20×20 , α_v e β ao longo das iterações.Figura 11 – Malha 30×30 , α_v e β ao longo das iterações.

As Tabelas 4 e 5 exibem os tempos de execução para o problema na malha 30×30 com $Re = 1000$ e $Re = 2000$ respectivamente. Pode-se observar que neste caso, com

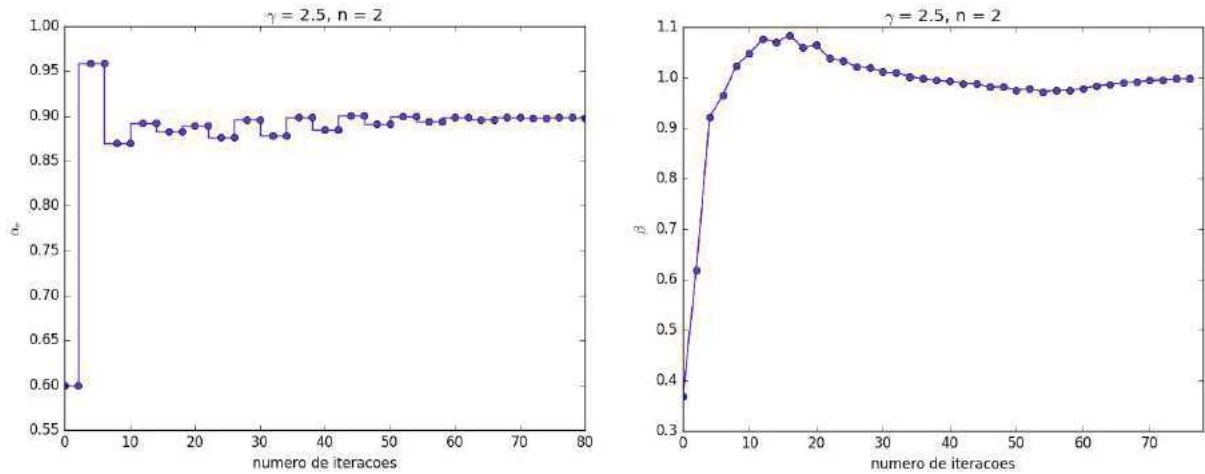


Figura 12 – Malha 40×40 , α_v e β ao longo das iterações.

número de Reynolds de alto valor, o método ainda é capaz de reduzir o tempo de execução e o número de iterações, sendo os melhores casos de redução do tempo de 42.40% ($\gamma = 2.5$ e $n = 10$ - redução de 139 para 67 iterações) para $Re = 1000$ e de 54.00% ($\gamma = 1.5$ e $n = 1$ - redução de 135 para 61 iterações) para $Re = 2000$.

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	0.7768	0.8111	0.8776	0.9921	0.8584	0.8371
$\gamma = 0.8$	0.7410	0.8081	0.8643	1.0423	0.8815	0.8487
$\gamma = 1.0$	0.7826	0.8233	0.8454	1.0522	0.8300	0.7546
$\gamma = 1.2$	0.6717	0.8118	0.7794	1.0751	0.7780	0.7390
$\gamma = 1.5$	0.6698	0.7703	0.7332	1.1231	0.7441	0.6280
$\gamma = 2.5$	1.1315	0.8849	0.7202	0.9328	0.7058	0.5759

Tabela 4 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 1000$.

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	0.7990	0.9098	0.9654	1.0340	0.8774	0.8344
$\gamma = 0.8$	0.7208	0.8798	0.9506	1.0521	0.8645	0.7533
$\gamma = 1.0$	0.6817	0.7965	0.9646	1.3680	1.0571	0.6750
$\gamma = 1.2$	0.7042	0.8559	0.9188	1.0645	0.7241	0.6106
$\gamma = 1.5$	0.4599	0.7336	0.8095	1.0086	0.7481	0.6156
$\gamma = 2.5$	0.7286	0.7450	0.8962	1.0287	0.8068	0.6359

Tabela 5 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 2000$.

As Figuras 13 e 14 exibem a variação do fator de relaxação da velocidade e do valor de β ao longo das iterações para os melhores casos obtidos para $Re = 1000$ e $Re = 2000$ respectivamente.

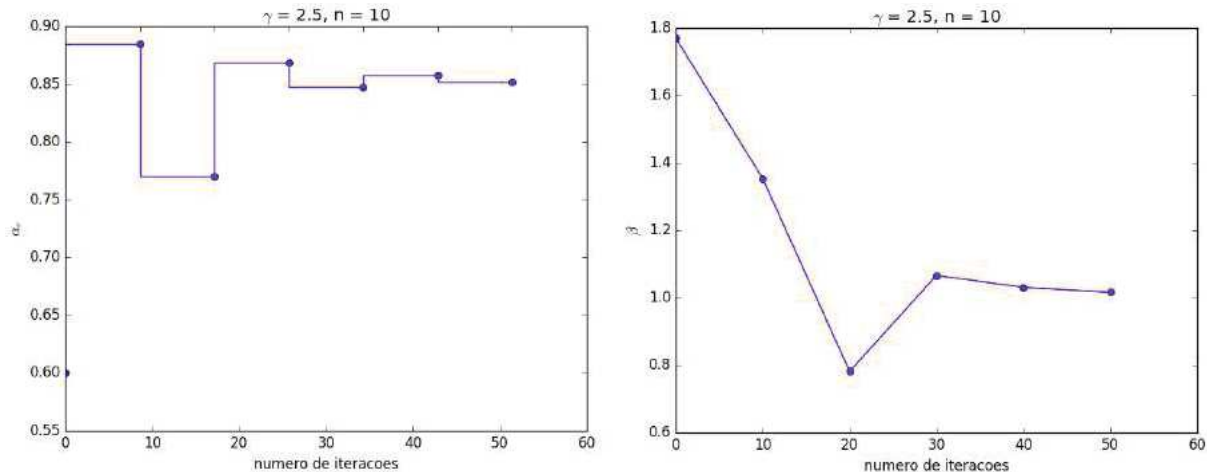


Figura 13 – Valores de α_v e β ao longo das iterações para $Re = 1000$.

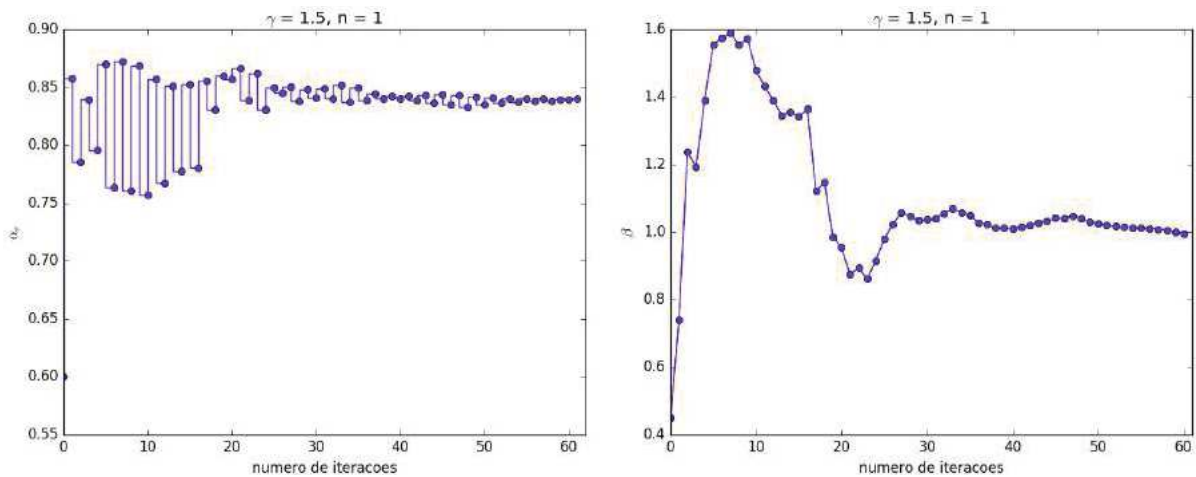


Figura 14 – Valores de α_v e β ao longo das iterações para $Re = 2000$.

3.5.2 Problema de convecção natural

A Figura 15 ilustra a solução para o problema de convecção natural com a malha de 20×20 volumes de controle. As Tabelas 6, 7 e 8 apresentam o tempo de execução para um conjunto de dados γ e n nas malhas 20×20 , 30×30 e 40×40 , respectivamente, para $Re = 100$.

O número de iterações com os parâmetros de relaxação fixos nas malhas 20×20 , 30×30 e 40×40 foram, respectivamente, 160, 305, e 484. Observa-se que nos três casos foi possível obter redução no tempo de execução para quase todos pares de parâmetros γ e n , sendo as maiores reduções de tempo em cada caso de: 54.27% na malha 20×20 ($\gamma = 1.5$ e $n = 2$ - redução de 160 para 67 iterações), 77.71% na malha 30×30 ($\gamma = 2.5$ e $n = 3$ - redução de 305 para 62 iterações) e 76.00% na malha 40×40 ($\gamma = 2.5$ e $n = 3$ - redução de 484 para 113 iterações). As Figuras 16, 17 e 18 ilustram a variação do fator de relaxação da velocidade e do valor de β ao longo das iterações para os melhores casos

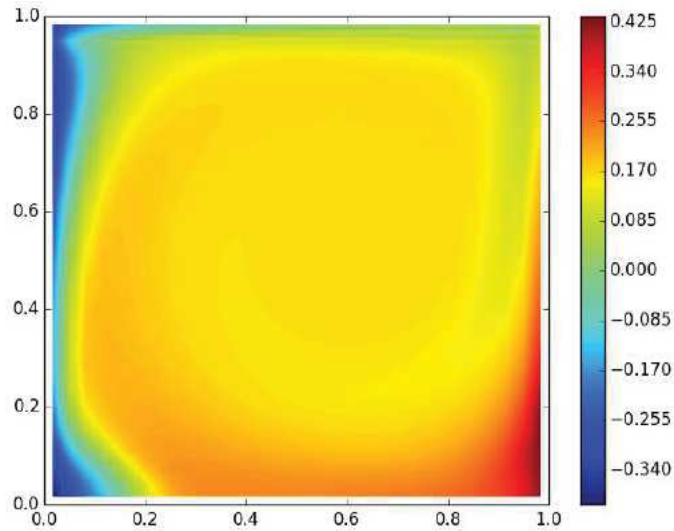


Figura 15 – Campo de temperaturas para o problema de convecção natural (em °C).

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	0.9022	0.7655	0.8000	0.8681	0.8812	0.9032
$\gamma = 0.8$	0.8726	0.6917	0.6590	0.7879	0.7734	0.8452
$\gamma = 1.0$	0.8018	0.5545	0.6012	0.7553	0.7197	0.8208
$\gamma = 1.2$	0.8007	0.5227	0.5483	0.6815	0.7051	0.8331
$\gamma = 1.5$	0.7665	0.4572	0.4765	0.7074	0.6997	0.8019
$\gamma = 2.5$	0.7820	0.4968	0.4696	0.4585	0.6190	0.7491

Tabela 6 – Tempos de execução relativos, malha 20×20 , $Re = 100$.

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	0.9170	0.7275	0.7247	0.8071	0.8081	0.8781
$\gamma = 0.8$	0.8491	0.5954	0.6591	0.7408	0.7744	0.8366
$\gamma = 1.0$	0.8356	0.5454	0.5680	0.7309	0.7154	0.7457
$\gamma = 1.2$	0.8348	0.4943	0.4955	0.6940	0.6775	0.6988
$\gamma = 1.5$	0.9136	0.4391	0.4501	0.6083	0.6256	0.6239
$\gamma = 2.5$	1.0205	0.2232	0.2228	0.4315	0.3925	0.4271

Tabela 7 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 100$.

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	0.9204	0.7531	0.7600	0.8022	0.8083	0.8247
$\gamma = 0.8$	0.8897	0.5969	0.6669	0.7853	0.7464	0.7653
$\gamma = 1.0$	0.8682	0.5799	0.5996	0.7160	0.6893	0.7033
$\gamma = 1.2$	0.8947	0.5139	0.5033	0.6414	0.6398	0.6442
$\gamma = 1.5$	1.0213	0.4612	0.4364	0.5685	0.5528	0.5778
$\gamma = 2.5$	1.0902	0.2426	0.2399	0.3864	0.3729	0.4176

Tabela 8 – Tempos de execução relativos, malha 40×40 , $Re = 100$.

em cada uma das três malhas. As Tabelas 9 e 10 apresentam os tempos de execução para

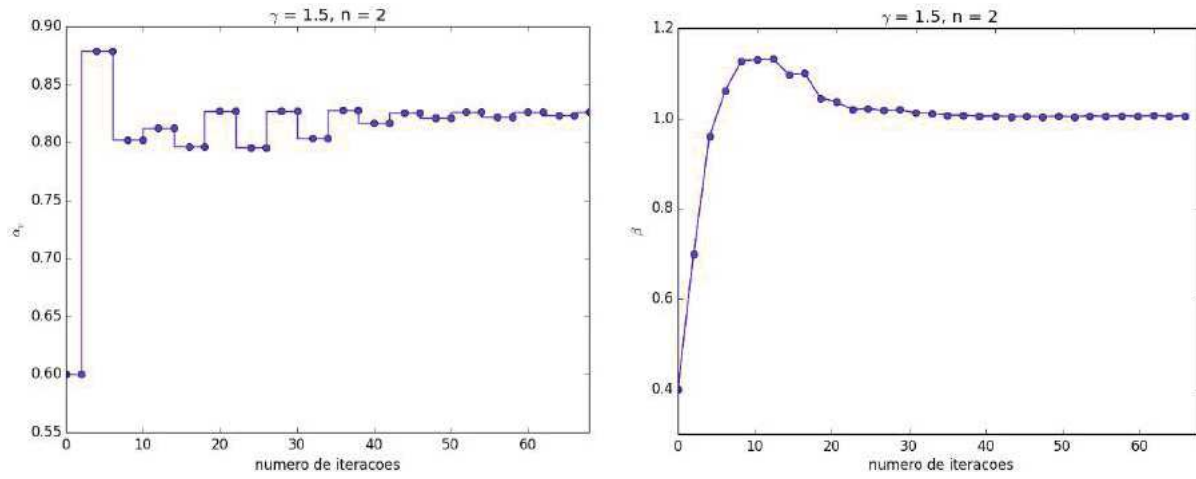


Figura 16 – Malha 20×20 , α_v e β ao longo das iterações.

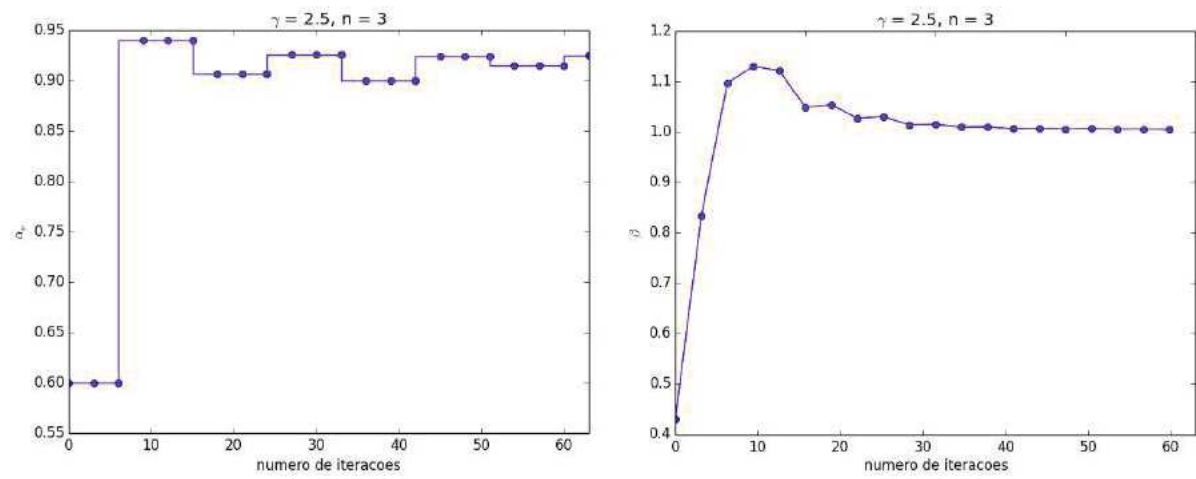


Figura 17 – Malha 30×30 , α_v e β ao longo das iterações.

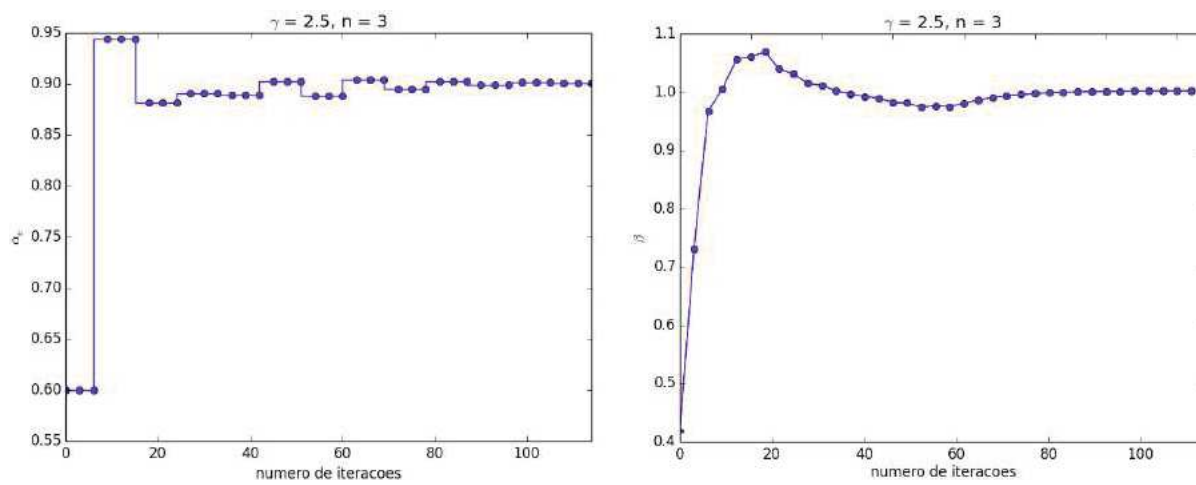


Figura 18 – Malha 40×40 , α_v e β ao longo das iterações.

o problema na malha 30×30 com $Re = 1000$ e $Re = 2000$ respectivamente. Novamente, com número de Reynolds de alto valor, o método é capaz de reduzir o tempo de execução e o número de iterações, sendo os melhores casos de redução do tempo de 52.65% ($\gamma = 1.0$ e $n = 2$ - redução de 126 para 51 iterações) para $Re = 1000$ e de 54.80% ($\gamma = 1.2$ e $n = 5$ - redução de 134 para 57 iterações) para $Re = 2000$. As Figuras 19 e 20 exibem a variação

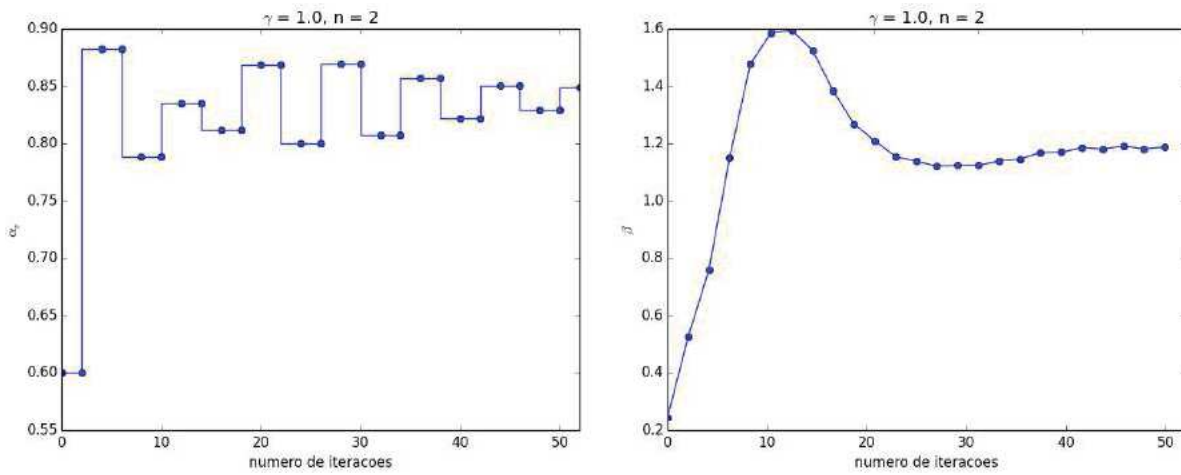
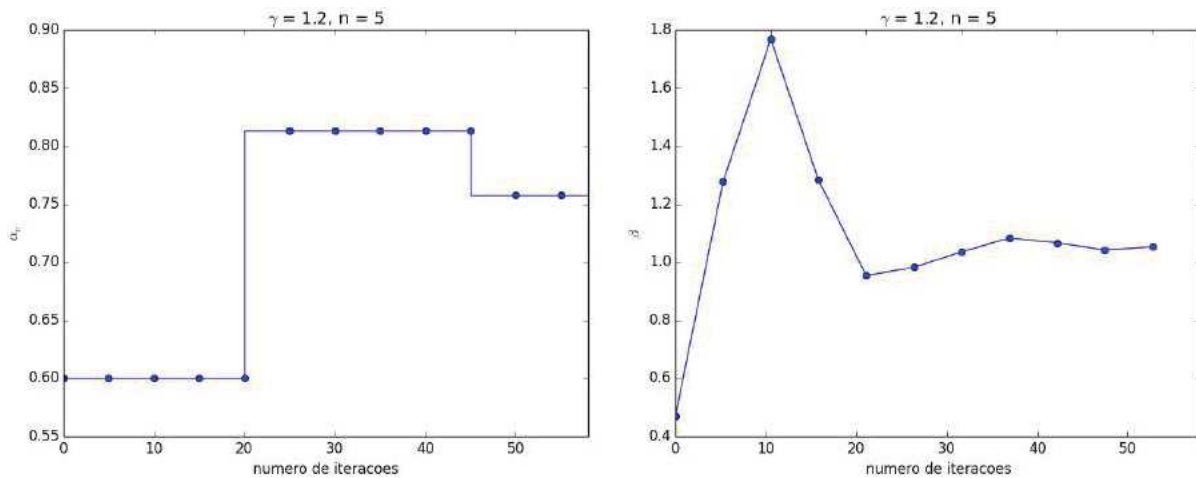
	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	0.7510	0.6683	0.7370	0.6153	0.9272	1.0611
$\gamma = 0.8$	0.6342	0.5215	0.5610	0.5477	0.9131	1.0961
$\gamma = 1.0$	0.5610	0.4734	0.5088	0.4914	0.8942	1.1125
$\gamma = 1.2$	0.5297	0.5916	0.4985	0.4873	0.88246	1.1401
$\gamma = 1.5$	0.4879	0.7046	0.4981	0.6135	0.8732	1.1900
$\gamma = 2.5$	1.6696	1.1913	1.2354	1.6670	1.0799	0.8765

Tabela 9 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 1000$.

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	0.7137	0.6559	0.6659	0.6381	1.0052	1.0768
$\gamma = 0.8$	0.5623	0.5874	0.5191	0.5886	1.0831	1.1457
$\gamma = 1.0$	0.5521	0.4807	0.4742	0.4997	1.1592	1.1761
$\gamma = 1.2$	0.4930	0.4802	0.4761	0.4519	1.0449	1.3353
$\gamma = 1.5$	0.4881	0.7055	0.5306	0.6345	1.1418	1.4086
$\gamma = 2.5$	1.3578	1.1287	1.4580	1.6770	1.3271	0.8522

Tabela 10 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 2000$.

do fator de relaxação da velocidade e do valor de β ao longo das iterações para os melhores casos obtidos para $Re = 1000$ e $Re = 2000$ respectivamente.

Figura 19 – Valores de α_v e β ao longo das iterações para $Re = 1000$.Figura 20 – Valores de α_v e β ao longo das iterações para $Re = 2000$.

3.5.3 Problema de circulação com fluxos de entrada e saída

A Figura 21 exibe a solução para o problema de circulação com fluxos de entrada e saída 20×20 volumes de controle. As Tabelas 11, 12 e 13 apresentam o tempo de execução

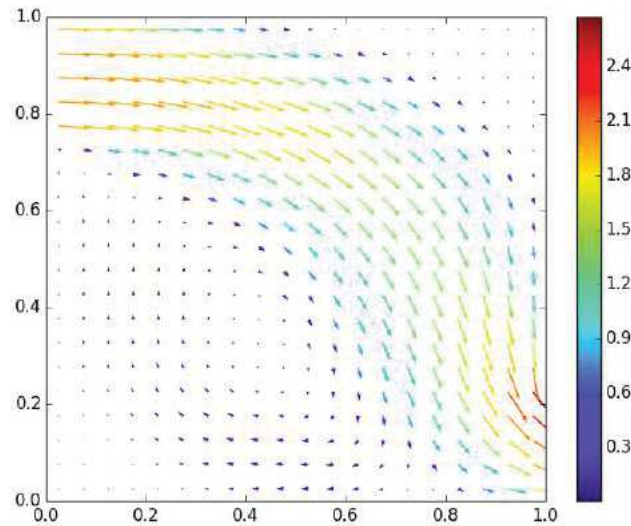


Figura 21 – Campo de velocidade para o problema de circulação com fluxos de entrada e saída (em m/s).

para um conjunto de dados γ e n nas malhas 20×20 , 30×30 e 40×40 , respectivamente, para $Re = 100$ e empregando o critério de parada pela norma da diferença das componentes da velocidade (Equação (3.33)).

O número de iterações com os parâmetros de relaxação fixos nas malhas 20×20 , 30×30 e 40×40 foram, respectivamente, 84, 163, e 216. Observa-se que nos três casos foi possível obter redução no tempo de execução para quase todos pares de parâmetros γ e n , sendo as maiores reduções de tempo em cada caso de: 34.73% na malha 20×20 ($\gamma = 1.2$ e $n = 3$ - redução de 84 para 47 iterações), 61.13% na malha 30×30 ($\gamma = 2.5$ e $n = 2$ - redução de 163 para 51 iterações) e 62.60% na malha 40×40 ($\gamma = 2.5$ e $n = 2$ - redução de 216 para 68 iterações). As Figuras 22, 23 e 24 ilustram a variação do fator de

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	0.8055	0.8784	0.7498	0.8053	0.8253	0.8612
$\gamma = 0.8$	0.7301	0.7796	0.6917	0.7693	0.7850	0.7821
$\gamma = 1.0$	0.7093	0.6891	0.6712	0.6779	0.7615	0.7386
$\gamma = 1.2$	1.0751	0.6943	0.6526	0.6641	0.7656	0.7883
$\gamma = 1.5$	0.8629	0.6868	0.8375	0.6721	0.7198	0.7112
$\gamma = 2.5$	0.8091	0.6565	0.7476	0.7746	0.7558	0.9223

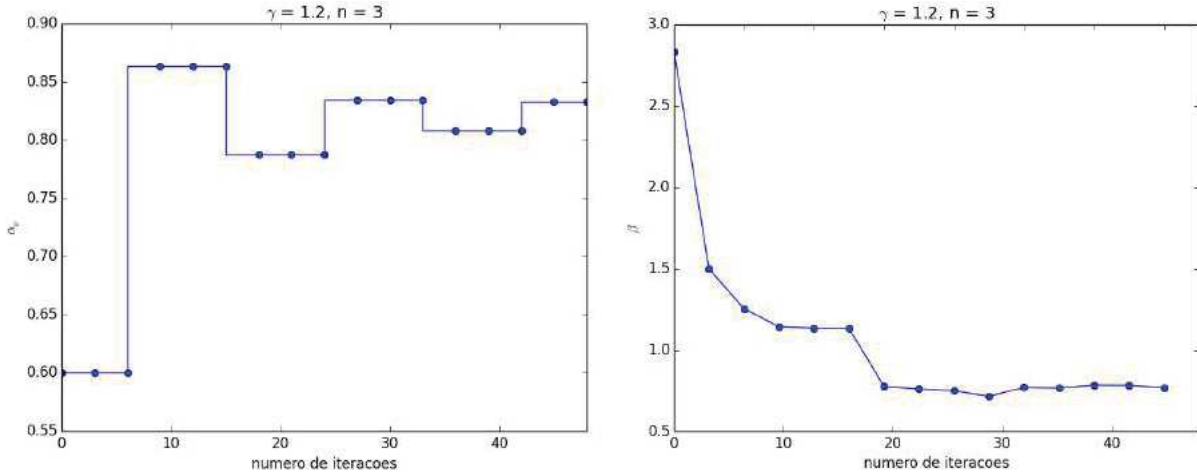
Tabela 11 – Tempos de execução relativos, malha 20×20 , $Re = 100$.

relaxação da velocidade e do valor de β ao longo das iterações para os melhores casos em cada uma das três malhas.

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	0.8665	0.8113	0.7443	0.7856	0.7774	0.9049
$\gamma = 0.8$	0.6371	0.6503	0.6271	0.6683	0.8374	0.7850
$\gamma = 1.0$	0.6213	0.5363	0.5305	0.6303	0.7652	0.7962
$\gamma = 1.2$	0.4701	0.4895	0.4817	0.5882	0.6734	0.7641
$\gamma = 1.5$	0.7603	0.4194	0.4586	0.5497	0.6749	0.6960
$\gamma = 2.5$	0.6049	0.3886	0.5457	0.4362	0.6796	0.6274

Tabela 12 – Tempos de execução na malha 30×30 , $Re = 100$.

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	0.7519	0.8175	0.6382	0.6669	0.8361	0.8305
$\gamma = 0.8$	0.6218	0.7891	0.5189	0.6124	0.7004	0.8164
$\gamma = 1.0$	0.5410	0.5984	0.4543	0.5018	0.7042	0.7819
$\gamma = 1.2$	0.4119	0.5095	0.5731	0.4994	0.6572	0.8026
$\gamma = 1.5$	0.3963	0.4515	0.4515	0.8566	0.4111	0.4751
$\gamma = 2.5$	0.7172	0.3739	0.4392	0.6973	0.3921	0.4073

Tabela 13 – Tempos de execução relativos, malha 40×40 , $Re = 100$.Figura 22 – Malha 20×20 , α_v e β ao longo das iterações.

As Tabelas 14 e 15 apresentam os tempos de execução para o problema na malha 30×30 com $Re = 1000$ e $Re = 2000$ respectivamente. neste caso, com número de Reynolds de alto valor, o método ainda é capaz de reduzir o tempo de execução e o número de iterações, sendo os melhores casos de redução do tempo de 45.32% ($\gamma = 2.5$ e $n = 8$ - redução de 163 para 75 iterações) para $Re = 1000$ e de 38.43% ($\gamma = 1.0$ e $n = 1$ - redução de 215 para 121 iterações) para $Re = 2000$.

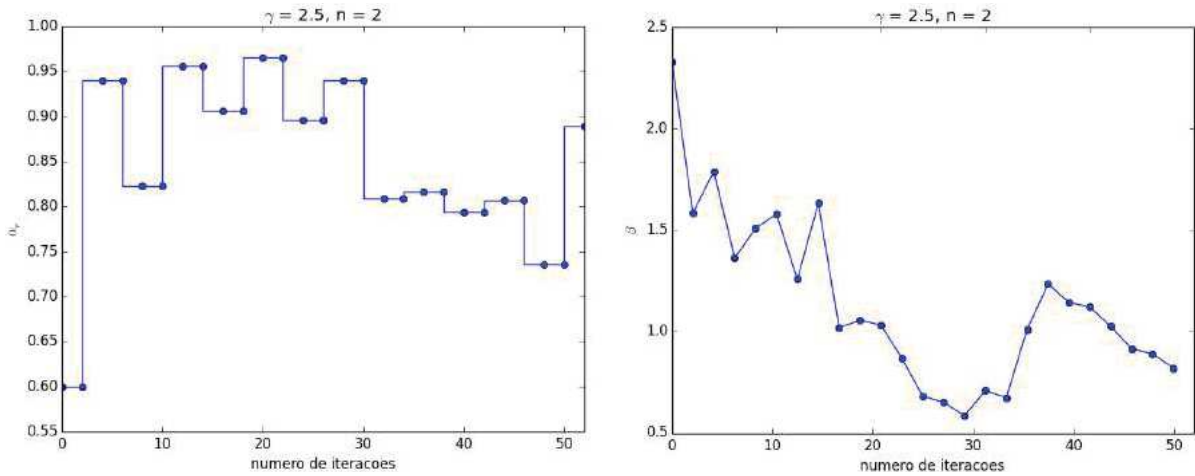


Figura 23 – Malha 30×30 , α_v e β ao longo das iterações.

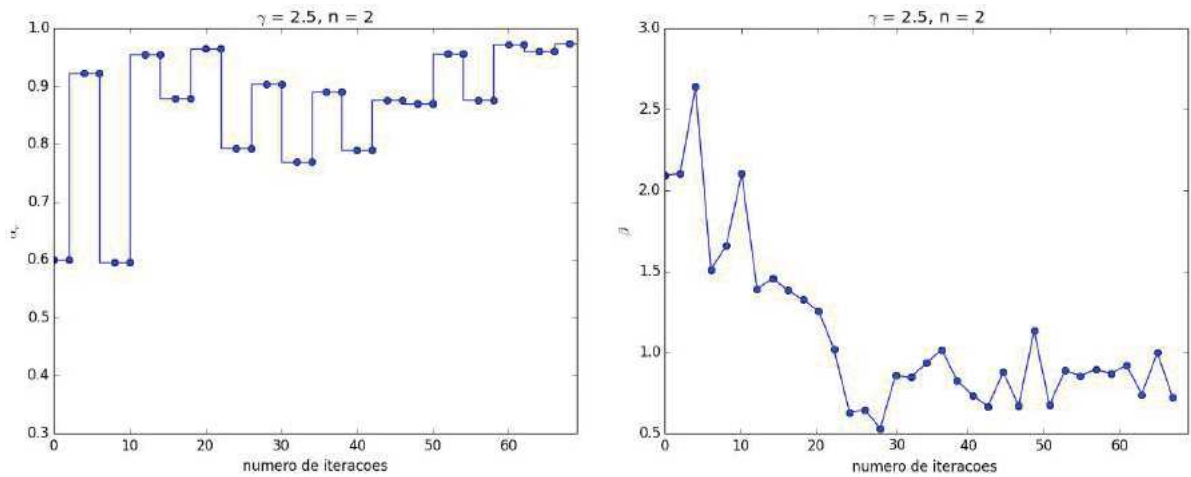


Figura 24 – Malha 40×40 , α_v e β ao longo das iterações.

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	1.0833	1.1447	1.3553	1.0124	0.8285	0.9710
$\gamma = 0.8$	0.9650	1.0588	0.9331	0.8129	0.7054	0.7194
$\gamma = 1.0$	1.0547	0.9225	0.8575	0.7985	0.6550	0.7192
$\gamma = 1.2$	1.0780	1.4400	0.9655	0.6800	0.7093	0.7182
$\gamma = 1.5$	1.4051	0.7816	1.1415	0.6800	0.7093	0.7182
$\gamma = 2.5$	1.4051	0.7816	1.3136	0.6532	0.5467	0.7061

Tabela 14 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 1000$.

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 5$	$n = 8$	$n = 10$
$\gamma = 0.5$	0.7206	0.8956	0.7742	0.8866	0.9385	0.8246
$\gamma = 0.8$	0.9679	0.9208	0.8754	0.7662	0.8299	0.7662
$\gamma = 1.0$	0.6156	1.1545	1.3245	0.8801	0.8590	0.8457
$\gamma = 1.2$	1.1033	1.0644	1.0041	0.8957	0.8341	0.6736
$\gamma = 1.5$	0.6698	1.2462	0.8548	0.6851	0.9353	0.6499
$\gamma = 2.5$	0.6455	0.7442	0.7678	0.9074	0.6546	0.6911

Tabela 15 – Tempos de execução relativos, malha 30×30 , $Re = 2000$.

As Figuras 25 e 26 exibem a variação do fator de relaxação da velocidade e do valor de β ao longo das iterações para os melhores casos obtidos para $Re = 1000$ e $Re = 2000$ respectivamente.

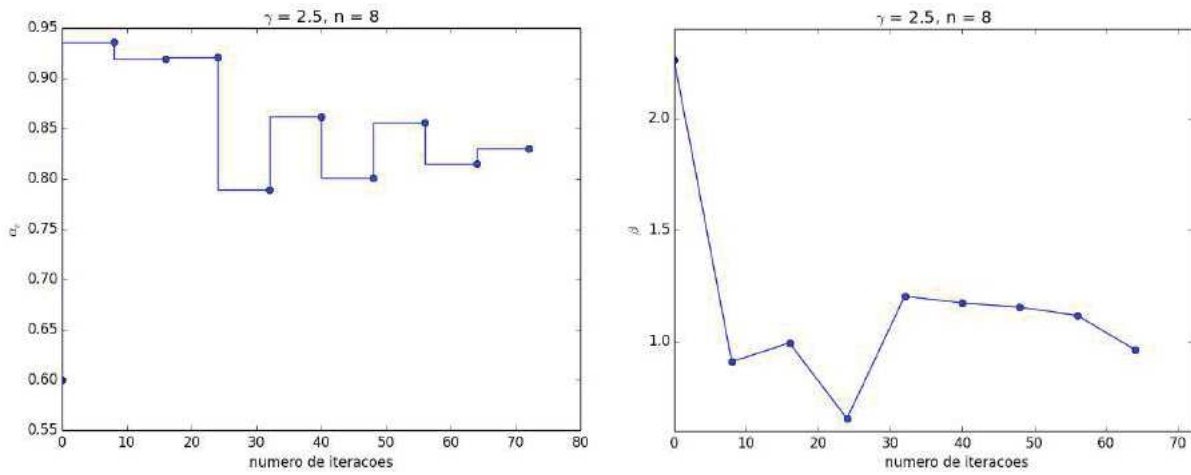


Figura 25 – Valores de α_v e β ao longo das iterações para $Re = 1000$.

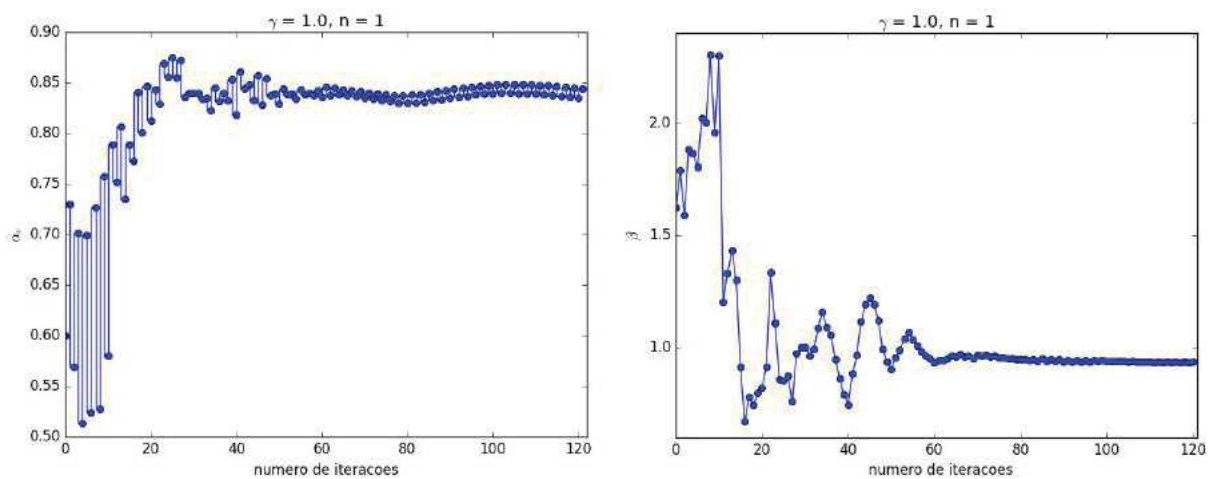


Figura 26 – Valores de α_v e β ao longo das iterações para $Re = 2000$.

3.5.4 Conclusões

Nesta parte do trabalho foi apresentado um método para cálculo de fatores de relaxação para as equações de movimento discretas empregadas no algoritmo SIMPLE. O método tem por objetivo calcular fatores de relaxação otimizados baseados na norma da diferença das velocidades obtidas entre dois níveis de iteração. O algoritmo de cálculo pode ser empregado a cada iteração consecutiva ou cada n iterações, sendo testados neste trabalho os valores para n : 1, 2, 3, 5, 8 e 10. O outro parâmetro usado no método, γ , visa controlar as variações dos fatores de relaxação calculados (Min e Tao, 2007). Os valores de γ testados foram: 0.5, 0.8, 1.0, 1.2, 1.5 e 2.5. De acordo com os dados e resultados obtidos nos testes apresentados, pode-se observar que o objetivo primário de reduzir o tempo de execução e o número de iterações é alcançado de modo relativamente satisfatório. O método foi capaz de reduzir o tempo e o número de iterações tanto para problemas com números de Reynolds de baixa magnitude (100) quanto para valores mais elevados (1000 e 2000). A relação entre γ e n pode ser melhor estudada visando encontrar padrões de valores que possam ser aplicados diretamente aos problemas, embora, neste trabalho, os valores de $\gamma \approx 2.5$ e $1 < n < 5$ tenham se mostrado adequados para os problemas estudado com $Re = 100$. Para $Re = 1000$ e $Re = 2000$, não foi possível obter um determinado padrão, mesmo que os testes tenham mostrado reduções de tempo e número de iterações. Os resultados aqui apresentados foram para três problemas incompressíveis (e térmicos) em regime permanente empregando o algoritmo SIMPLE para tratamento das não-linearidades e do acoplamento pressão velocidade.

4 MÉTODO DOS VOLUMES DE CONTROLE BASEADO EM ELEMENTOS FINITOS

4.1 Introdução

As equações diferenciais formuladas anteriormente, tais como da conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia podem ser agrupadas e escritas em termos de uma variável escalar genérica ϕ , representando assim a forma conservativa das equações governantes em escoamentos de fluidos. Esta equação, conhecida como equação de transporte, para a propriedade ϕ é:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{V}\phi) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) + S_\phi \quad (4.1)$$

onde Γ é o coeficiente de difusão e S_ϕ indica termos fonte.

Em geral, equações diferenciais como a Equação (4.1), só apresentam soluções analíticas fechadas para um número bastante limitado de casos. Assim, faz-se necessário a elaboração de técnicas de solução numérica para a resolução de tais problemas. A principal característica de soluções numéricas reside na obtenção da solução em um conjunto finito ou discreto de pontos, sendo os valores das variáveis dependentes obtidos apenas nestes pontos. Valores das soluções podem ser obtidos em outros pontos através de interpolação dos valores nodais conhecidos. Estes valores nodais são obtidos a partir da solução de um sistema de equações algébricas, que relacionam a variável dependente em um dado nó com seus pontos vizinhos.

Dentre as técnicas computacionais frequentemente empregadas para alcançar os objetivos descritos anteriormente, tem-se, como foco neste capítulo, o Método dos Volumes de Controle baseados em Elementos Finitos (em inglês, Control Volume Finite Element Method - CVFEM), uma variação do método dos volumes finitos clássico que engloba características tanto do Método dos Volumes Finitos (Finite Volume Method - FVM) e do Método dos Elementos Finitos (Finite Element Method - FEM).

O Método dos Elementos Finitos pode ser categorizado pelo emprego de malhas não estruturadas, que se adaptam facilmente a problemas com geometrias complexas. Entretanto, e métodos baseados em Galerkin contínuo não é garantido o princípio da conservação da propriedade de interesse em nível dos elementos. Por outro lado, o FVM é baseado na ideia de balanço de fluxos em volumes de controle elementares, sendo amplamente empregado na discretização de processos governados por equações de conservação e de transporte, uma vez que a descrição destas equações por si são formulações baseadas em balanços de fluxos.

O Método dos Volumes de Controle baseados em Elementos Finitos visa, portanto, combinar as características de conservatividade do Método dos Volumes Finitos com a flexibilidade geométrica das malhas do Método dos Elementos Finitos. A ideia central do

CVFEM consiste na construção de volumes de controle em torno dos nós de uma malha de elementos (triangulares neste trabalho) não estruturada, que possui grande flexibilidade geométrica. Nesta construção, os fluxos através das faces dos volumes de controle podem ser aproximados por funções de interpolação similares às empregadas no Método dos Elementos Finitos. Ao fazer o balanço destes fluxos, um conjunto de equações discretas em termos dos valores nodais da malha pode ser obtido baseado na representação física das equações governantes.

Neste capítulo serão apresentados detalhes da formulação do CVFEM, considerando-se a discretização de problemas bidimensionais de advecção-difusão, que serão estendidos para a solução das equações de Navier-Stokes.

4.2 Construção dos volumes de controle para o CVFEM

O primeiro passo na discretização geométrica de um problema pelo CVFEM consiste na divisão do domínio de interesse por meio de uma malha de elementos poligonais. A forma dos elementos pode ser arbitrária, porém, neste trabalho serão consideradas malhas compostas por elementos triangulares lineares, isto é, com apenas três nós.

Em seguida, para cada nó da malha é feito um processo de geração dos volumes de controle, nos quais a equação diferencial será integrada. O processo de criação destes volumes de controle se dará por meio do método das medianas, de acordo com [Voller \(2009\)](#); [Baliga e Patankar \(1980\)](#); [Schneider \(1998\)](#): o centro geométrico (baricentro) de cada triângulo é ligado aos pontos médios dos lados destes triângulos. O volume de controle criados desta forma será uma poligonal com o dobro de lados (número de faces do volume de controle) da quantidade de lados de elementos que chegam a um mesmo nó. A Figura 27, ilustra um trecho de malha exibindo volumes de controle criados pelo método das medianas para seus respectivos nós.

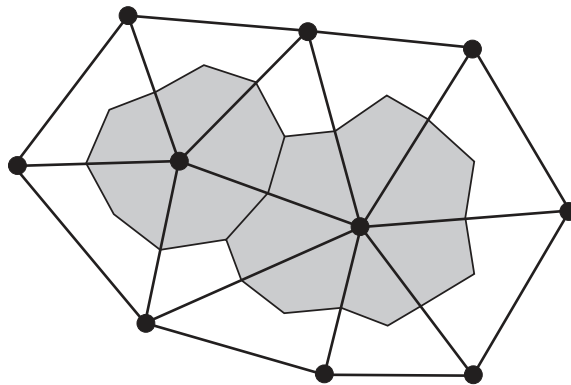


Figura 27 – Volumes de controle obtidos pelo método das medianas.

Na metodologia CVFEM empregam-se funções de interpolação similares às usadas no FEM. Além disso, como a metodologia CVFEM visa manter os princípios de conservação

das propriedades a nível dos volumes de controle, deve-se definir um volume elementar no qual será realizada a integração das equações diferenciais. Com esse objetivo, a Figura 28 à esquerda exibe um volume de controle onde as equações diferenciais serão integradas para se obter a equação discreta para o nó 1, correspondente à região hachurada.

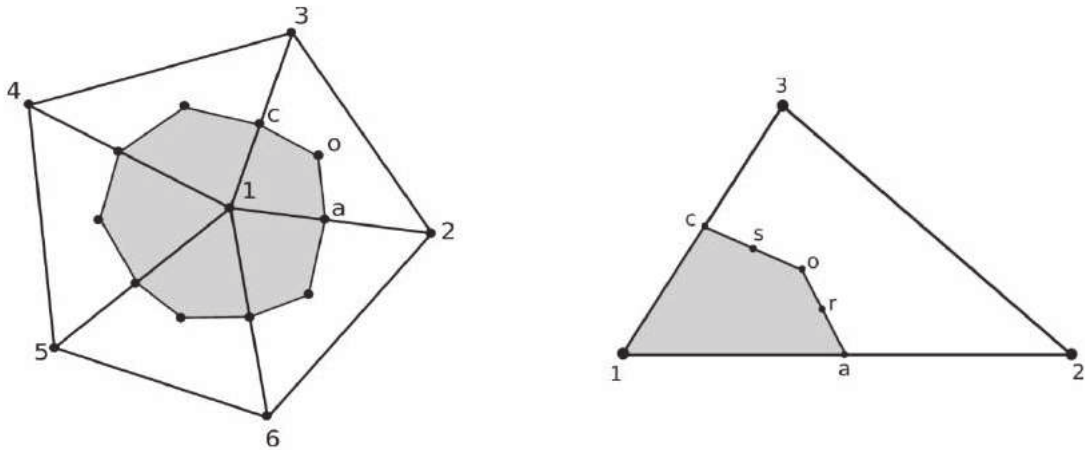


Figura 28 – Volume de controle completo e parcial em um elemento.

Na Figura 28 observa-se que os nós 2, 3, 4, 5 e 6 são os vizinho do nó 1. Enquanto os elementos que compõem o volume de controle são: 123, 134, 145, 156 e 162. Cada elemento deste pode contribuir de modo adicional para o volume total do volume de controle, uma vez que, em cada elemento, o ponto o como indicado pela Figura 28, corresponde ao baricentro ou centro geométrico do elemento triangular. Desta forma, sendo (x_1, y_1) , (x_2, y_2) e (x_3, y_3) as coordenadas cartesianas dos nós 1, 2, 3, respectivamente, cada elemento tem seu volume (área multiplicada por profundidade unitária) dado por:

$$V_e = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{vmatrix} = \frac{1}{2}(x_1y_2 + x_2y_3 + x_3y_1 - y_1x_2 - y_2x_3 - y_3x_1) \quad (4.2)$$

e a contribuição de cada elemento j , correspondente a área hachurada delimitada pela poligonal $1aoc$ na Figura 28 à direita, para o volume total do volume de controle em torno de um nó i é

$$V_i^j = \frac{1}{3}V_e. \quad (4.3)$$

Assim como feito para o cálculo do volume do volume de controle, a integração das equações diferenciais nestes volumes também pode ser feita em uma estratégia elemento por elemento, e as contribuições individuais de cada elemento que compõe um dado volume de controle, adicionadas apropriadamente.

4.3 Integração em um volume de controle e funções de interpolação

Considere a equação de transporte de ϕ dada na Equação (4.1) mas em regime estacionário, ou seja, sem a presença do termo transiente:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{V} \phi) - \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) = S_\phi. \quad (4.4)$$

Os fluxos difusivo e convectivo (ou advectivo) podem ser agrupados em termos de um fluxo total, \vec{J} de modo que a Equação (4.4) possa ser escrita como

$$\nabla \cdot \vec{J} = S_\phi, \quad (4.5)$$

com

$$\vec{J} = \vec{J}_A + \vec{J}_D = \rho \vec{V} \phi - \Gamma \nabla \phi \quad (4.6)$$

sendo \vec{J}_A o fluxo advectivo e \vec{J}_D o fluxo difusivo.

Um dos fundamentos de um método baseado em volumes finitos consiste em integrar uma equação diferencial, como a Equação (4.5), em um volume de controle tal como na Figura 28 à esquerda. Desta forma, integrando-se a Equação (4.5) no volume de controle, tem-se:

$$\int_V \nabla \cdot \vec{J} dV = \int_V S_\phi dV \quad (4.7)$$

que, pelo teorema da divergência de Gauss, se torna

$$\int_A \vec{J} \cdot \vec{n} dA = \int_V S_\phi dV, \quad (4.8)$$

sendo V o volume, A a área do volume de controle, e \vec{n} o vetor normal à área A apontando para fora do volume. Como o procedimento de integração sobre o volume de controle pode ser feito procedendo-se elemento por elemento, pode-se escrever a contribuição do elemento 123 da Figura 28 como

$$\begin{aligned} & \int_a^o \vec{J} \cdot \vec{n} dA + \int_o^c \vec{J} \cdot \vec{n} dA - \int_{1aoc} S_\phi dV \\ & + [\text{contribuições similares dos elementos em torno do nó 1}] \\ & + [\text{contribuições de condições de contorno, quando aplicáveis}] = 0. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Para se obter aproximações algébricas para a Equação (4.9), funções de interpolação para as variáveis dependentes, propriedades do material e para os termos fonte devem ser estabelecidas.

4.3.1 Interpolação para o termo difusivo

Para o termo difusivo, a variável dependente ϕ é interpolada linearmente em cada elemento, ou seja,

$$\phi^D = A^D x + B^D y + C^D, \quad (4.10)$$

onde o sobrescrito D indica que esta aproximação é para o termo difusivo, e os coeficientes A^D , B^D e C^D são determinados em termos das coordenadas x e y e do valor de ϕ nos três nós do elemento. Deste modo, seja o elemento 123 indicado na Figura 28. Avaliando-se ϕ nos seus nós, tem-se o seguinte sistema de equações resultante:

$$\begin{bmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^D \\ B^D \\ C^D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{bmatrix}, \quad (4.11)$$

cuja solução pode ser escrita como

$$\begin{bmatrix} A^D \\ B^D \\ C^D \end{bmatrix} = \frac{1}{2V_e} \begin{bmatrix} y_2 - y_3 & y_3 - y_1 & y_1 - y_2 \\ x_3 - x_2 & x_1 - x_3 & x_2 - x_1 \\ x_2y_3 - x_3y_2 & x_3y_1 - x_1y_3 & x_1y_2 - x_2y_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

com V_e dado pela Equação (4.2). Substituindo os valores dos coeficientes A^D , B^D e C^D calculados pela Equação (4.12) na expressão de interpolação (4.10), ϕ pode ser expresso em termos da funções de forma lineares, N_1^D , N_2^D e N_3^D como

$$\phi^D = N_1^D \phi_1 + N_2^D \phi_2 + N_3^D \phi_3 \quad (4.13)$$

com

$$\begin{bmatrix} N_1^D \\ N_2^D \\ N_3^D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \end{bmatrix} = \frac{1}{2V_e} \begin{bmatrix} y_2 - y_3 & x_3 - x_2 & x_2y_3 - x_3y_2 \\ y_3 - y_1 & x_1 - x_3 & x_3y_1 - x_1y_3 \\ y_1 - y_2 & x_2 - x_1 & x_1y_2 - x_2y_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (4.14)$$

Na expressão (4.14), L_1 , L_2 e L_3 são as coordenadas de área do triângulo 123.

4.3.2 Interpolação para a pressão

Quando o processo de discretização for para as Equações de Navier-Stokes, Equações (2.35)-(2.37) ou (2.38), é necessário a prescrição da função de interpolação para pressão. Adotando interpolação linear, pode-se escrever

$$p = A^p + B^p + C^p, \quad (4.15)$$

onde os coeficientes A^p , B^p e C^p são dados por

$$\begin{bmatrix} A^p \\ B^p \\ C^p \end{bmatrix} = \frac{1}{2V_e} \begin{bmatrix} y_2 - y_3 & y_3 - y_1 & y_1 - y_2 \\ x_3 - x_2 & x_1 - x_3 & x_2 - x_1 \\ x_2y_3 - x_3y_2 & x_3y_1 - x_1y_3 & x_1y_2 - x_2y_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{bmatrix}. \quad (4.16)$$

Deste modo, a interpolação das componentes do gradiente de pressão em um elemento é dada por

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_e = A^p \quad \text{e} \quad \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)_e = B^p. \quad (4.17)$$

4.3.3 Interpolações para o termo convectivo

Algumas aproximações diferentes podem ser empregadas para o termo convectivo. Nesta seção serão apresentadas três dessas técnicas: upwind, interpolação orientada ao escoamento (FLO) e interpolação linear com estabilização.

4.3.3.1 Upwind

Seja a integral do termo convectivo para um elemento como o da Figura 29. Ou seja, a partir da Equação (4.9), tem-se

$$\begin{aligned} \int_a^o \vec{J}_A \cdot \vec{n} dA + \int_o^c \vec{J}_A \cdot \vec{n} dA = \\ \int_a^o (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) \phi dA \Big|_a^o + \int_o^c (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) \phi dA \Big|_o^c = \\ \int_{f_1} (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) \phi dA \Big|_{f_1} + \int_{f_2} (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) \phi dA \Big|_{f_2}, \end{aligned} \quad (4.18)$$

onde f_1 e f_2 denotam as semi-faces 1 e 2 indicadas na Figura 29.

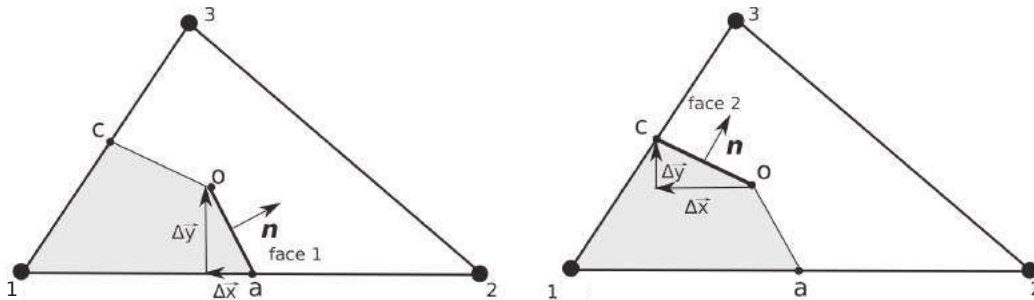


Figura 29 – Semi-faces e vetores normais a estas faces.

Assim, para aproximar o valor de ϕ nas semi-faces 1 e 2 do volume de controle, uma formulação baseada em *upwind* para a interpolação de ϕ no termo convectivo dentro do elemento é dada por

$$\phi_{f1} = \begin{cases} \phi_1 & \text{se } q_{f1} > 0 \\ \phi_2 & \text{se } q_{f1} < 0 \end{cases} \quad (4.19)$$

e

$$\phi_{f2} = \begin{cases} \phi_1 & \text{se } q_{f2} > 0 \\ \phi_3 & \text{se } q_{f2} < 0 \end{cases}, \quad (4.20)$$

onde $q_{f1} = (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) A \Big|_{f1}$ e $q_{f2} = (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) A \Big|_{f2}$. Esta aproximação sempre gera sistemas bem condicionados, porém, induz ao problema de dissipação numérica, tendendo a suavizar as curvas de solução de um problema.

4.3.3.2 Interpolação orientada ao escoamento (FLO)

O esquema de interpolação orientada ao escoamento (Flow-Oriented Interpolation - FLO) é baseado na solução analítica de um problema de advecção-difusão sobre um elemento de interesse.

A função de interpolação é definida a partir de um sistema de coordenadas cartesianas (X, Y) com a origem localizada no centroide do elemento e seu eixo X orientado na direção do vetor velocidade média do elemento. A Figura 30 ilustra este sistema cartesiano.

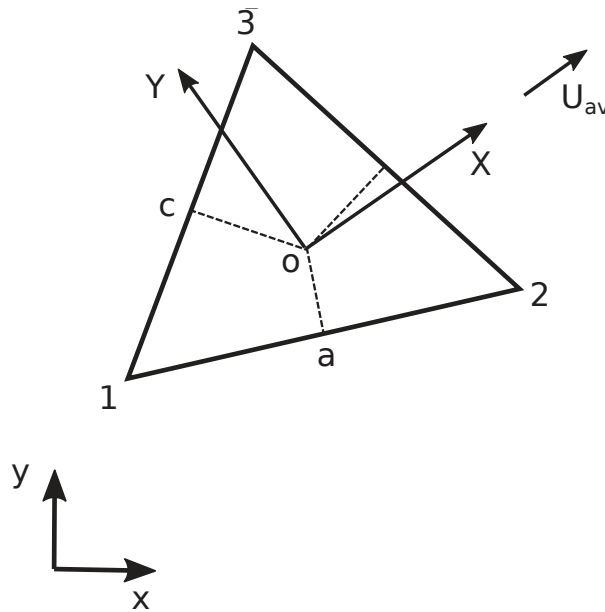


Figura 30 – Sistema cartesiano local ao elemento.

O vetor velocidade média para o elemento no sistema cartesiano (x, y) global é definido por

$$\vec{v}_{av} = (u_{av}, v_{av}), \quad (4.21)$$

com as suas componentes dadas por

$$u_{av} = \frac{1}{3}(u_1 + u_2 + u_3) \quad \text{e} \quad v_{av} = \frac{1}{3}(v_1 + v_2 + v_3). \quad (4.22)$$

No sistema cartesiano (X, Y) local ao elemento, o vetor velocidade média é definido como

$$\vec{V}_{av} = (U_{av}, V_{av}) = U_{av}, \quad (4.23)$$

com as componentes definidas por

$$U_{av} = \sqrt{u_{av}^2 + v_{av}^2} \quad \text{e} \quad V_{av} = 0. \quad (4.24)$$

A transformação do sistema (x, y) global para o sistema (X, Y) local ao elemento é feita por meio de uma translação seguida por uma rotação, cuja operacionalização pode ser

realizada pela seguinte transformação linear:

$$\begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix} = \frac{1}{U_{av}} \begin{bmatrix} u_{av} & v_{av} \\ -v_{av} & u_{av} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x - x_0 \\ y - y_0 \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

onde (x_0, y_0) são as coordenadas globais do centroide do elemento.

Com o propósito de obter a função de interpolação para ϕ , assume-se que V_{av} é constante sobre o elemento. Na ausência de termos fonte, equação de advecção-difusão para ϕ no elemento de interesse é dada por

$$\rho U_{av} \frac{\partial \phi}{\partial X} = \Gamma \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial Y^2} \right), \quad (4.26)$$

para a qual pode-se escrever a seguinte solução particular:

$$\phi^C = A^C \xi + B^C Y + C^C. \quad (4.27)$$

Na Equação (4.27), os sobrescritos C indicam que esta função será usada para interpolar ϕ no termo convectivo, enquanto que a coordenada ξ é dada por

$$\xi = \frac{\Gamma}{\rho U_{av}} \left(\exp \left(\frac{Pe(X - X_{max})}{X_{max} - X_{min}} \right) - 1 \right), \quad (4.28)$$

sendo Pe o número de Peclet elementar dado por

$$Pe = \frac{\rho U_{av}(X_{max} - X_{min})}{\Gamma}, \quad (4.29)$$

e os valores X_{max} e X_{min} são dados por

$$X_{max} = \max(X_1, X_2, X_3) \quad \text{e} \quad X_{min} = \min(X_1, X_2, X_3), \quad (4.30)$$

sendo $X_1, X_2,$ e X_3 as coordenadas X dos nós do elemento dados em seu sistema local.

Os coeficientes A^C, B^C e C^C são obtidos de modo similar aos coeficientes da função de interpolação para o termo difusivo, sendo dados por

$$\begin{bmatrix} A^C \\ B^C \\ C^C \end{bmatrix} = \frac{1}{2\Omega_\xi} \begin{bmatrix} Y_2 - Y_3 & Y_3 - Y_1 & Y_1 - Y_2 \\ \xi_3 - \xi_2 & \xi_1 - \xi_3 & \xi_2 - \xi_1 \\ \xi_2 Y_3 - \xi_3 Y_2 & \xi_3 Y_1 - \xi_1 Y_3 & \xi_1 Y_2 - \xi_2 Y_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{bmatrix}, \quad (4.31)$$

com

$$2\Omega_\xi = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \xi_1 & Y_1 & 1 \\ \xi_2 & Y_2 & 1 \\ \xi_3 & Y_3 & 1 \end{vmatrix} = \frac{1}{2} (\xi_1 Y_2 + \xi_2 Y_3 + \xi_3 Y_1 - Y_1 \xi_2 - Y_2 \xi_3 - Y_3 \xi_1). \quad (4.32)$$

A função de interpolação dada pela Equação (4.27) pode ser chamada de função de interpolação exponencial e define o esquema FLO. Esta função responde de acordo com a direção de V_{av} e com o número de Peclet do elemento. Quando $Pe \rightarrow 0$, ou seja, a natureza do problema é dominada pela difusão, a função se torna linear em X e Y . E quando $Pe \rightarrow \infty$, ou seja, o problema passa a ser dominado pela convecção, a função deveria se comportar como um esquema *upwind* ao longo de linhas paralelas ao eixo X e permanecer linear em Y .

4.3.3.3 Estabilização da solução com uma função de interpolação linear

No CVFEM, uma função de interpolação linear do tipo

$$\phi^C = A^C x + B^C y + C^C, \quad (4.33)$$

onde o conjunto de coeficientes, A^C , B^C e C^C dados analogamente a partir da Equação (4.12) para a função de interpolação linear para o termo difusivo, pode ser empregada na interpolação do termo convectivo. Porém, é de amplo conhecimento que esta prática leva a uma solução de comportamento oscilatório quando o problema se torna convectivo dominante, isto é, quando $Pe > 1$.

No contexto do Método dos Elementos Finitos (FEM), a formulação de Galerkin (baseada em diferenças centrais) leva ao mesmo comportamento de solução oscilatória do CVFEM, quando este tem o termo convectivo aproximado por uma função linear como na Equação (4.33). Ainda no âmbito do FEM, [Brooks e Hughes \(1982\)](#) apresentaram o Streamline Upwind/Petrov-Galerkin (SUPG), cuja ideia básica é adicionar uma quantidade de difusividade ou viscosidade artificial que tenha efeito somente na direção do escoamento.

Considerando a equação de advecção-difusão unidimensional dada por

$$u \frac{d\phi}{dx} - k \frac{d^2\phi}{dx^2} = 0, \quad (4.34)$$

sendo u a velocidade e k o coeficiente de difusão, o procedimento de estabilização para o esquema de diferenças centrais é obtido adicionando-se uma quantidade apropriada de difusividade artificial ao esquema de diferenças centrais. Se esta difusividade artificial for dada por

$$\bar{k} = \psi \frac{uh}{2}, \quad \psi = \coth(Pe) - \frac{1}{Pe}, \quad Pe = \frac{uh}{2k}, \quad (4.35)$$

onde h é o espaçamento entre os pontos nodais e $\coth(x)$ é a função cotangente hiperbólica, então a solução numérica obtida será nodalmente exata.

Para o caso bidimensional, o operador de difusividade artificial é construído tal que sua ação ocorre apenas na direção do escoamento. Deste modo, a difusividade artificial, \bar{k} , empregada no caso unidimensional é substituída por um tensor de difusividade artificial, $\bar{\mathbf{K}}$, para obter o efeito desejado. Assim, tem-se

$$\bar{\mathbf{K}} = \bar{k}(\vec{V}^* \otimes \vec{V}^*), \quad (4.36)$$

onde

$$\vec{V}^* = \frac{1}{\|\vec{V}\|} (u, v), \quad \|\vec{V}\| = \sqrt{u^2 + v^2}, \quad (4.37)$$

sendo \bar{k} uma difusividade artificial escalar e $\vec{V} = (u, v)$ o vetor velocidade do escoamento. O valor de \bar{k} no SUPG empregando-se um elemento quadrilateral como o da Figura 31 pode ser dado por

$$\bar{k} = \frac{1}{2}(\psi u_\psi h_\psi + \eta u_\eta h_\eta), \quad (4.38)$$

onde

$$\psi = \coth(Pe_\psi) - \frac{1}{Pe_\psi}, \quad \eta = \coth(Pe_\eta) - \frac{1}{Pe_\eta} \quad (4.39)$$

$$Pe_\psi = \frac{u_\psi h_\psi}{2k}, \quad Pe_\eta = \frac{u_\eta h_\eta}{2k} \quad (4.40)$$

$$u_\psi = \vec{e}_\psi \cdot \vec{V}, \quad u_\eta = \vec{e}_\eta \cdot \vec{V} \quad (4.41)$$

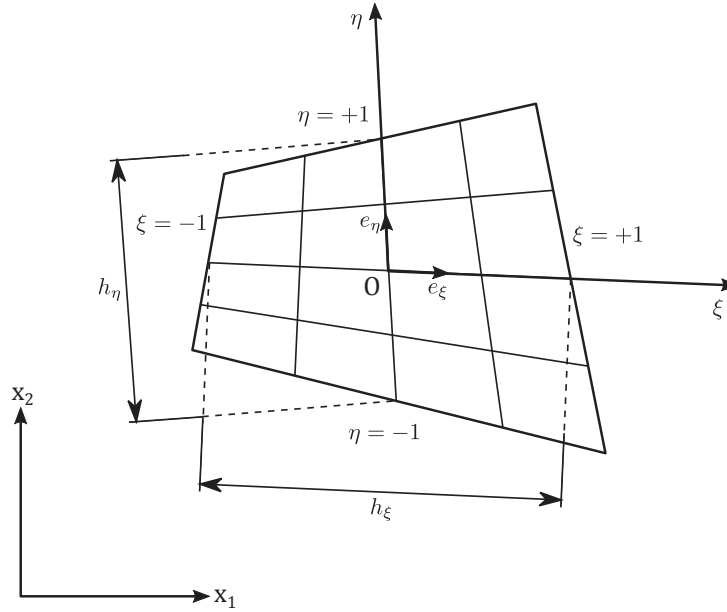


Figura 31 – Elemento quadrilateralo.

onde, de acordo com a Figura 31, Pe_ψ e Pe_η são os números de Peclet para as direções ψ e η respectivamente, u_ψ e u_η as componentes da velocidade \vec{V} nas direções ψ e η e os comprimentos h_ψ e h_η estão indicados na figura.

Neste trabalho, uma implementação similar às Equações (4.36) a (4.41) para o SUPG foi feita para estabilizar a função de interpolação linear para o termo convectivo, Equação (4.33) para o CVFEM empregando malhas de elementos finitos triangulares. De fato, a implementação segue os seguintes passos.

Um tensor de difusividade artificial, como o da Equação (4.36) é construído. A difusividade artificial escalar deste tensor é calculada por

$$\bar{k} = \psi v_0 h_0, \quad (4.42)$$

onde v_0 é a norma do vetor velocidade média $\vec{v} = (u_{av}, v_{av})$ do escoamento no elemento dada pelas Equações (4.21) e (4.22). O comprimento h_0 é definido por

$$h_0 = X_{max} - X_{min}, \quad (4.43)$$

sendo as definições de X_{max} e X_{min} dados pela Equação (4.30).

Os valores de ψ são, idealmente, calculados por

$$\psi = \coth(Pe_\Delta) - \frac{1}{Pe_\Delta} \quad (4.44)$$

sendo Pe_Δ , neste caso, o número de Peclet para o elemento triangular, definido como

$$Pe_\Delta = \frac{v_0 h_0}{k}, \quad (4.45)$$

onde h_0 é dado pela Equação (4.43) e v_0 a norma do vetor velocidade média $\vec{v} = (u_{av}, v_{av})$ do escoamento no elemento.

O cálculo de ψ como dado pela Equação (4.44) é computacionalmente ineficiente devido a dificuldade de se computar as funções exponenciais envolvidas na função cotangente hiperbólica quando o valor do número de Peclet se torna muito grande. Assim, duas aproximações para a Equação (4.44) são empregadas, conforme Brooks e Hughes (1982), dadas por

$$\psi = \begin{cases} Pe_\Delta/3, & \text{se } -3 \leq Pe_\Delta \leq 3 \\ \text{sgn}(Pe_\Delta), & \text{se } |Pe_\Delta| > 3 \end{cases} \quad (4.46)$$

e

$$\psi = \begin{cases} -1 - 1/Pe_\Delta, & \text{se } Pe_\Delta < -1 \\ 0, & \text{se } -1 \leq Pe_\Delta \leq 1 \\ 1 - 1/Pe_\Delta, & \text{se } Pe_\Delta > 1. \end{cases} \quad (4.47)$$

O cálculo de ψ dado pela Equação (4.46) é conhecido como *aproximação duplamente assintótica*, com $\text{sgn}(Pe_\Delta)$ definido como uma função sinal, que retorna -1 se $Pe_\Delta < 0$, 0 se $Pe_\Delta = 0$ e $+1$ se $Pe_\Delta > 0$. Já o valor de ψ calculado pela Equação (4.47) é conhecido como *aproximação crítica*. A Figura 32 exhibe o comportamento da Equação (4.44) como regra ótima, e das aproximações fornecidas pelas Equações (4.46) e (4.47).

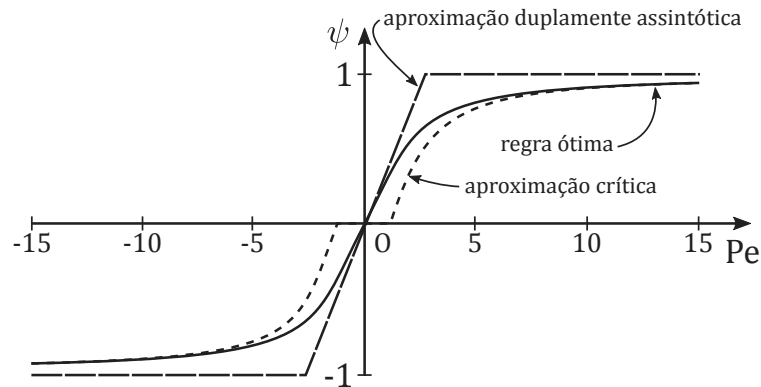


Figura 32 – Funções de aproximação para o cálculo de ψ .

Por fim, a condutividade térmica escalar original da equação é substituída pelo tensor de difusividade artificial, calculado pelas Equações (4.36) e (4.37). A difusividade artificial deste tensor, \bar{k} , calculada pela Equação (4.42) faz uso das aproximações duplamente assintótica ou crítica, fornecidas pelas Equações (4.46) e (4.47).

4.4 Aproximações algébricas dos termos das equações de conservação

Um conjunto de equações algébricas pode ser obtido para cada nó da malha computacional ao fazer a substituição dos termos adequados na Equação (4.9) pelas funções de interpolação apresentadas na Seção 4.3. Os termos e coeficientes da equação discreta são montados a partir de um procedimento elemento por elemento e suas contribuições somadas apropriadamente para cada volume de controle.

4.4.1 Cálculos preliminares

Seja o elemento 123 conforme indicado na Figura 29. A região hachurada $1aoc$ é volume de controle parcial no qual as equações de conservação são integradas no procedimento elemento por elemento. Os comprimentos $\Delta\vec{x}_{f1}$, $\Delta\vec{y}_{f1}$, $\Delta\vec{x}_{f2}$ e $\Delta\vec{y}_{f2}$ podem ser calculados em termos das coordenadas dos três nós do elemento por

$$\Delta\vec{x}_{f1} = \frac{x_3}{3} - \frac{x_2}{6} - \frac{x_1}{6} \quad \text{e} \quad \Delta\vec{y}_{f1} = \frac{y_3}{3} - \frac{y_2}{6} - \frac{y_1}{6}, \quad (4.48)$$

para a face 1, e

$$\Delta\vec{x}_{f2} = -\frac{x_2}{3} + \frac{x_3}{6} + \frac{x_1}{6} \quad \text{e} \quad \Delta\vec{y}_{f2} = -\frac{y_2}{3} + \frac{y_3}{6} + \frac{y_1}{6}, \quad (4.49)$$

para a face 2. As áreas de faces 1 e 2 são, portanto, calculadas por

$$A_{f1} = \sqrt{(\Delta\vec{x}_{f1})^2 + (\Delta\vec{y}_{f1})^2} \quad \text{e} \quad A_{f2} = \sqrt{(\Delta\vec{x}_{f2})^2 + (\Delta\vec{y}_{f2})^2}. \quad (4.50)$$

Os vetores normais a estas faces, calculados nos seus respectivos pontos médios (r e s da Figura 28) são

$$\vec{n}_{f1} = (n_x^{f1}, n_y^{f1}) = \left(\frac{\Delta\vec{y}_{f1}}{A_{f1}}, -\frac{\Delta\vec{x}_{f1}}{A_{f1}} \right) \quad (4.51)$$

e

$$\vec{n}_{f2} = (n_x^{f2}, n_y^{f2}) = \left(\frac{\Delta\vec{y}_{f2}}{A_{f2}}, -\frac{\Delta\vec{x}_{f2}}{A_{f2}} \right). \quad (4.52)$$

Quando ϕ for interpolado linearmente, tal como pela Equação (4.10), as componentes do gradiente de ϕ serão dadas por

$$\nabla\phi = \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}, \frac{\partial\phi}{\partial y} \right) = (A^D, B^D) \quad (4.53)$$

ou ainda, considerando as derivadas das funções de forma dadas pelas Equações (4.13) e (4.14), por

$$\begin{aligned} \frac{\partial\phi}{\partial x} &= N_{1x}^D\phi_1 + N_{2x}^D\phi_2 + N_{3x}^D\phi_3 \\ \frac{\partial\phi}{\partial y} &= N_{1y}^D\phi_1 + N_{2y}^D\phi_2 + N_{3y}^D\phi_3. \end{aligned} \quad (4.54)$$

4.4.2 Termo difusivo

Considere o fluxo difusivo, \vec{J}_D , que pode ser expressado por

$$\vec{J}_D = \Gamma \nabla \phi. \quad (4.55)$$

A integração deste fluxo no sub-volume de controle *1aoc* como da Figura 28 ou 29 e a aplicação do teorema da divergência, fornece

$$\begin{aligned} \int_A \Gamma \nabla \phi \cdot \vec{n} dA &= \int_a^o \Gamma \nabla \phi \cdot \vec{n} dA + \int_o^c \Gamma \nabla \phi \cdot \vec{n} dA \\ &\approx \Gamma \nabla \phi \cdot \vec{n} A|_{f_1} + \Gamma \nabla \phi \cdot \vec{n} A|_{f_2}, \end{aligned} \quad (4.56)$$

onde na última passagem fez-se uso da integração do ponto médio. Levando em consideração os cálculos preliminares da Seção 4.4.1, e assumindo que o coeficiente de difusão é avaliado no centroide e seu valor é constante sobre o elemento, pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \Gamma \nabla \phi \cdot \vec{n} A|_{f_1} &= \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \Delta \vec{y}_{f_1} - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \Delta \vec{x}_{f_1} \\ &= \Gamma \left(N_{1x}^D \phi_1 + N_{2x}^D \phi_2 + N_{3x}^D \phi_3 \right) \Delta \vec{y}_{f_1} \\ &\quad - \Gamma \left(N_{1y}^D \phi_1 + N_{2y}^D \phi_2 + N_{3y}^D \phi_3 \right) \Delta \vec{x}_{f_1} \end{aligned} \quad (4.57)$$

e

$$\begin{aligned} \Gamma \nabla \phi \cdot \vec{n} A|_{f_2} &= \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \Delta \vec{y}_{f_2} - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \Delta \vec{x}_{f_2} \\ &= \Gamma \left(N_{1x} \phi_1 + N_{2x} \phi_2 + N_{3x} \phi_3 \right) \Delta \vec{y}_{f_2} \\ &\quad - \Gamma \left(N_{1y} \phi_1 + N_{2y} \phi_2 + N_{3y} \phi_3 \right) \Delta \vec{x}_{f_2}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Substituindo as Equações (4.57) e (4.58) na Equação (4.56), reorganizando e agrupando os termos, a discretização do termo difusivo ou contribuição do termo difusivo sobre o sub-volume de controle *1aoc* é escrita como:

$$\int_A \Gamma \nabla \phi \cdot \vec{n} dA \approx -a_1^D \phi_1 + a_2^D \phi_2 + a_3^D \phi_3 \quad (4.59)$$

onde D indica a contribuição do termo difusivo para os coeficientes, sendo estes dados por:

$$\begin{aligned} a_1^D &= -\Gamma (N_{1x} \Delta \vec{y}_{f_1} + N_{1y} \Delta \vec{x}_{f_1} - N_{1x} \Delta \vec{y}_{f_2} + N_{1y} \Delta \vec{x}_{f_2}) \\ a_2^D &= \Gamma (N_{2x} \Delta \vec{y}_{f_1} - N_{2y} \Delta \vec{x}_{f_1} + N_{2x} \Delta \vec{y}_{f_2} - N_{2y} \Delta \vec{x}_{f_2}) \\ a_3^D &= \Gamma (N_{3x} \Delta \vec{y}_{f_1} - N_{3y} \Delta \vec{x}_{f_1} + N_{3x} \Delta \vec{y}_{f_2} - N_{3y} \Delta \vec{x}_{f_2}). \end{aligned} \quad (4.60)$$

4.4.3 Termo convectivo

4.4.3.1 upwind

O fluxo convectivo, \vec{J}_A pode ser expressado por

$$\vec{J}_C = -\rho \vec{V} \phi. \quad (4.61)$$

A integração deste fluxo no sub-volume de controle *1aoc* como da Figura 28 ou 29 e a aplicação do teorema da divergência, fornece

$$\begin{aligned} - \int_A (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) \phi dA &= - \int_a^o (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) \phi dA - \int_o^c (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) \phi dA \\ &\approx -(\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) \phi A|_{f1} - (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) \phi A|_{f2} \\ &= -q_{f1} \phi_{f1} - q_{f2} \phi_{f2}. \end{aligned} \quad (4.62)$$

Lembrando das Equações (4.19) e (4.20) que os valores de ϕ nas faces 1 e 2 são dados por

$$\phi_{f1} = \begin{cases} \phi_1 & \text{se } q_{f1} > 0 \\ \phi_2 & \text{se } q_{f1} < 0 \end{cases} \quad (4.63)$$

e

$$\phi_{f2} = \begin{cases} \phi_1 & \text{se } q_{f2} > 0 \\ \phi_3 & \text{se } q_{f2} < 0, \end{cases} \quad (4.64)$$

com $q_{f1} = (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) A|_{f1}$ e $q_{f2} = (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) A|_{f2}$, os últimos termos da Equação (4.62) podem ser escritos como

$$\begin{aligned} -q_{f1} \phi_{f1} &= -\max(q_{f1}, 0) \phi_1 + \max(-q_{f1}, 0) \phi_2 \\ -q_{f2} \phi_{f2} &= -\max(q_{f2}, 0) \phi_1 + \max(-q_{f2}, 0) \phi_3. \end{aligned} \quad (4.65)$$

Substituindo as expressões de q_{f1} e q_{f2} na Equação (4.62), reorganizando e agrupando termos, tem-se a discretização do termo convectivo por upwind dada por

$$- \int_A (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) \phi dA \approx -a_1^A \phi_1 + a_2^A \phi_2 + a_3^A \phi_3, \quad (4.66)$$

onde os coeficientes a_1^C , a_2^C e a_3^C são dados por

$$\begin{aligned} a_1^C &= \max(q_{f1}, 0) + \max(q_{f2}, 0) \\ a_2^C &= \max(-q_{f1}, 0) \\ a_3^C &= \max(-q_{f2}, 0). \end{aligned} \quad (4.67)$$

4.4.3.2 Interpolação orientada ao escoamento (FLO)

Da Seção 4.3, tem-se que no esquema de interpolação orientada ao escoamento, a variável escalar ϕ é interpolada pela função

$$\phi^C = A^C \xi + B^C Y + C^C. \quad (4.68)$$

Dessa forma, a partir da Equação (4.62) pode-se escrever

$$\begin{aligned} - \int_A (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) \phi dA &= - \int_a^o (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) \phi dA - \int_o^c (\rho \vec{V} \cdot \vec{n}) \phi dA \\ &= -q_{f1} \int_a^o \phi dA_{f1} - q_{f2} \int_o^c \phi dA_{f2} \\ &= -q_{f1} \int_a^o (A^C \xi + B^C Y + C^C) dA_{f1} \\ &\quad - q_{f2} \int_o^c (A^C \xi + B^C Y + C^C) dA_{f2}. \end{aligned} \quad (4.69)$$

A avaliação da integral para ϕ interpolado pela função dada na Equação (4.68) pode ser obtida por meio da regra de Simpson da seguinte forma para a face 1:

$$\begin{aligned} \int_a^o \phi dA_{f1} &= \int_a^o (A^C \xi + B^C Y + C^C) dA_{f1} \\ &= A^C \int_a^o \xi dA_{f1} + B^C \int_a^o Y dA_{f1} + C^C A_{f1}. \end{aligned} \quad (4.70)$$

Assim, para a primeira integral na Equação (4.70) pode-se escrever

$$\int_a^o \xi dA_{f1} = \bar{\xi}_{f1} A_{f1} \quad \text{com} \quad \bar{\xi}_{f1} = \frac{1}{6}(\xi_a + \xi_r + \xi_o), \quad (4.71)$$

onde ξ_a , ξ_r , e ξ_o são os valores de ξ calculados nos pontos de integração a , r e o , representados na Figura 28. Similarmente,

$$\int_a^o Y dA_{f1} = \bar{Y}_{f1} A_{f1} \quad \text{com} \quad \bar{Y}_{f1} = \frac{1}{6}(Y_a + Y_r + Y_o). \quad (4.72)$$

Para a face 2, o processo de integração segue passos similares para a face 1, obtendo-se assim

$$\int_o^c \xi dA_{f2} = \bar{\xi}_{f2} A_{f2} \quad \text{com} \quad \bar{\xi}_{f2} = \frac{1}{6}(\xi_o + \xi_s + \xi_c) \quad (4.73)$$

e

$$\int_o^c Y dA_{f2} = \bar{Y}_{f2} A_{f2} \quad \text{com} \quad \bar{Y}_{f2} = \frac{1}{6}(Y_o + Y_s + Y_c). \quad (4.74)$$

Combinado as Equações (4.70)-(4.74) e substituindo na Equação (4.69), tem-se:

$$\begin{aligned} -q_{f1} \int_a^o (A^C \xi + B^C Y + C^C) dA_{f1} - q_{f2} \int_o^c (A^C \xi + B^C Y + C^C) dA_{f2} = \\ -q_{f1} (A^C \bar{\xi}_{f1} + B^C \bar{Y}_{f1} + C^C) A_{f1} - q_{f2} (A^C \bar{\xi}_{f2} + B^C \bar{Y}_{f2} + C^C) A_{f1} \end{aligned} \quad (4.75)$$

Seguindo o trabalho de [Saabas \(1991\)](#) e [Venditti \(1998\)](#), substituindo os coeficientes A^C , B^C e C^C dados pela Equação (4.31) na Equação (4.75), agrupando e reorganizando os termos, obtém-se um conjunto de coeficientes a_1^C , a_2^C e a_3^C .

4.4.4 Termo fonte

Seja S_ϕ o termo fonte presente na Equação (4.4). Se a fonte depender de linearização, a integração deste termo fonte no em um sub-volume de controle como o (28) fornece:

$$\int_V S_\phi dV = \int_V (S_c + S_p \phi) dV = \int_{1aoc} (S_c + S_p \phi) dV_{1aoc} = C_1^S \phi_1 + D^S, \quad (4.76)$$

onde os coeficientes C_1^S e D^S são

$$C_1^S = [(S_p)_e^1] V_{elem}, \quad \text{e} \quad D^S = [(S_c)_e^1] V_{elem}, \quad (4.77)$$

sendo $(S_c)_e^1$ e $(S_p)_e^1$ os valores de S_p e S_p , respectivamente, avaliados no nó 1 do elemento 123 da Figura 28 e V_{elem} é o volume do elemento dado pela Equação (4.3).

4.4.5 Discretização para a equação de advecção-difusão

As parcelas relativas à discretização dos termos difusivo, convectivo e fonte obtidas ao longo das seções anteriores quando adicionadas representam a contribuição total do elemento 123 relativo ao sub-volume de controle 1aoc para o nó 1. Assim, representando esta contribuição total por I_{1aoc}^ϕ , pode-se escrever:

$$\begin{aligned} I_{1aoc}^\phi &= \int_a^o (\vec{J}_D + \vec{J}_A) \cdot \vec{n} dA + \int_o^c (\vec{J}_D + \vec{J}_A) \cdot \vec{n} dA - \int_{1aoc} S_\phi dV \\ &= I_{1aoc}^D + I_{1aoc}^A - I_{1aoc}^S \\ &= C_1^\phi \phi_1 + C_2^\phi \phi_2 + C_3^\phi \phi_3 + D^\phi, \end{aligned} \quad (4.78)$$

com I_{1aoc}^D , I_{1aoc}^A e I_{1aoc}^S representando as contribuições dos termos difusivo, convectivo e de fontes, respectivamente, conforme obtidas anteriormente.

Expressões similares a Equação (4.78) podem ser obtidas para cada um dos elementos que compõem o volume de controle associado ao nó i como na Figura 33.

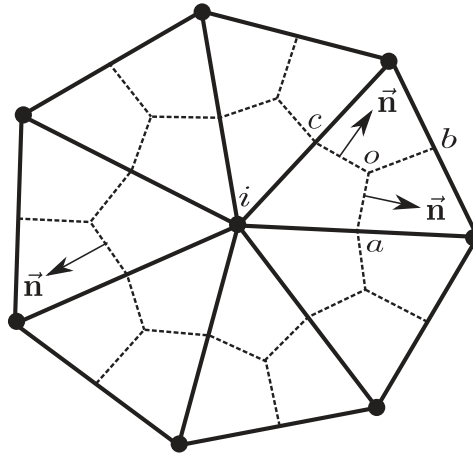


Figura 33 – Volume de controle associado ao nó i .

Somando-se estas contribuições, gera a equação discretizada completa para o nó i , que pode ser representada por

$$a_i^\phi \phi_i - \sum_{nb,i} a_{nb,i}^\phi \phi_{nb,i} = b_i^\phi, \quad (4.79)$$

onde nb, i refere-se a todos os nós na vizinhança do nó i .

4.4.6 Discretização para as equações de Navier-Stokes

As equações de Navier-Stokes para um fluido newtoniano incompressível, em componentes, dada pela Equações (2.35)-(2.37), ou em forma vetorial pela Equação (2.38), apresentam procedimento de discretização similar à equação de conservação de uma grandeza escalar ϕ , conforme apresentada anteriormente.

Uma das principais diferenças é a presença do termo de gradiente da pressão. Considerando as equações de movimento para as componentes u e v da velocidade, a integração do gradiente de pressão associado a estas equações em um sub-volume de controle $1aoc$ pode ser escrita como

$$\int_{1aoc} \left(-\frac{\partial p}{\partial x} \right) dV = - \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_e V_e \quad (4.80)$$

e

$$\int_{1aoc} \left(-\frac{\partial p}{\partial y} \right) dV = - \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)_e V_e, \quad (4.81)$$

onde $(\partial p/\partial x)_e$ e $(\partial p/\partial y)_e$ representam a discretização do gradiente de p em um elemento, podendo ainda serem dados em termos da Equação (4.17).

Uma vez que o processo de discretização do gradiente de pressão tenha sido obtido para cada elemento em um dado volume de controle, suas componentes sobre o este volume podem ser representadas por $(\overline{\partial p/\partial x})$ e $(\overline{\partial p/\partial y})$.

Tendo sido obtidas as aproximações e discretizações dos termos difusivo, convectivo, fontes e do gradiente de pressão, as equações discretas para as componentes u e v das equações de Navier-Stokes podem ser escritas como

$$a_i^u u_i - \sum_{nb,i} a_{nb,i}^u u_{nb,i} = b_i^u - \left(\frac{\overline{\partial p}}{\partial x} \right)_i V_i \quad (4.82)$$

e

$$a_i^v v_i - \sum_{nb,i} a_{nb,i}^v v_{nb,i} = b_i^v - \left(\frac{\overline{\partial p}}{\partial y} \right)_i V_i, \quad (4.83)$$

com V_i sendo o volume total do volume de controle associado ao nó i .

4.4.7 Interpolação das componentes da velocidade nos fluxos de massa

Para as componentes da velocidade, quando estas compõem fluxos de massa, como na equação de conservação da massa ou nos termos convectivos das equações de Navier-Stokes, uma interpolação baseada na forma discreta dessas últimas são empregadas. Assim, dividindo a Equação (4.82) por a_i^u e a Equação (4.83) por a_i^v , e isolando-se as componentes u_i e v_i , pode-se escrever

$$u_i = \hat{u}_i - d_i^u \left(\frac{\overline{\partial p}}{\partial x} \right)_i \quad \text{e} \quad v_i = \hat{v}_i - d_i^v \left(\frac{\overline{\partial p}}{\partial y} \right)_i, \quad (4.84)$$

onde \hat{u}_i e \hat{v}_i , conhecidas como pseudo-velocidades são dadas por

$$\hat{u}_i = \frac{1}{a_i^u} \left(\sum_{nb,i} a_{nb,i}^u u_{nb,i} + b_i^u \right) \quad \text{e} \quad \hat{v}_i = \frac{1}{a_i^v} \left(\sum_{nb,i} a_{nb,i}^v v_{nb,i} + b_i^v \right), \quad (4.85)$$

e, ainda,

$$d_i^u = \frac{V_i}{a_i^u} \quad \text{e} \quad d_i^v = \frac{V_i}{a_i^v} \quad (4.86)$$

são conhecidos como coeficientes do gradiente de pressão.

A partir destas definições, a função de interpolação para as componentes da velocidade no termos de fluxo de massa é definida, em cada elemento para cada componente da velocidade, como

$$u^m = \hat{u} - d_e^u \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \quad \text{e} \quad v^m = \hat{v} - d_e^v \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)_e, \quad (4.87)$$

As funções u^m e v^m são definidas sobre cada elemento, ao passo que u_i e v_i (Equação (4.84)) são definidos em cada nó i da malha. Para se obter o valor das funções de interpolação em locais específicos no elemento, as pseudo-velocidades dadas pela Equação (4.85) são interpoladas linearmente a partir de seus valores nodais. Os coeficientes do gradiente de pressão (Equação (4.86)) são tomados como a média aritmética dos três valores nodais e assumidos constantes sobre o elemento. Por fim, os termos do gradiente de pressão na Equação (4.87) são avaliados sobre o elemento, de acordo com a Equação (4.17), em vez de dos termos que representam o gradiente de pressão sobre o volume de controle, ou seja, os termos que aparecem nas expressões da Equação (4.84). De acordo com [Saabas \(1991\)](#) e [Venditti \(1998\)](#), este tratamento dos termos do gradiente de pressão são fundamentais para prevenir oscilações nos cálculos do campo de pressão.

4.4.8 Formulação e discretização da equação para a pressão

Considere a equação de conservação da massa, Equação (2.8). A integração desta equação sobre um volume de controle como da Figura 33 pode ser escrita como

$$\begin{aligned} & \int_a^o \rho \vec{V}^m \cdot \vec{n} dA + \int_o^c \rho \vec{V}^m \cdot \vec{n} dA \\ & + [\text{contribuições similares dos elementos em torno do nó } i] \\ & + [\text{contribuições de condições de contorno, quando aplicáveis}] = 0, \end{aligned} \quad (4.88)$$

onde o vetor $\vec{V}^m = (u^m, v^m)$ tem suas componentes definidas de acordo com a Equação (4.87). Para a primeira integral na Equação (4.88), correspondente a semi-face de integração $f1$ de limites a e o , tem-se

$$\begin{aligned} \int_a^o \rho \vec{V}^m \cdot \vec{n} dA &= \rho u^m \Delta \vec{y}_{f1} - \rho v^m \Delta \vec{x}_{f1} = \\ & \rho (u_r^m \Delta \vec{y}_{f1} - \rho v_r^m \Delta \vec{x}_{f1}), \end{aligned} \quad (4.89)$$

onde o subscrito r indica o ponto de integração r na Figura 28 e os valores de $\Delta \vec{x}_{f1}$ e $\Delta \vec{y}_{f1}$ são calculados pela Equação (4.48). Substituindo as funções de interpolação para u^m e v^m dadas pela Equação (4.87) na Equação (4.89), tem-se

$$\int_a^o \rho \vec{V}^m \cdot \vec{n} dA = \rho \left(\left[\hat{u}_r - d_e^u \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \right] \Delta \vec{y}_{f1} - \left[\hat{v}_r - d_e^v \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)_e \right] \Delta \vec{x}_{f1} \right). \quad (4.90)$$

Similarmente, para a semi-face delimitada pelos pontos o e c , tem-se

$$\int_o^c \rho \vec{V}^m \cdot \vec{n} dA = \rho \left(\left[\hat{u}_s - d_e^u \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \right] \Delta \vec{y}_{f2} - \left[\hat{v}_s - d_e^v \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)_e \right] \Delta \vec{x}_{f2} \right). \quad (4.91)$$

Substituindo as interpolações para o gradiente de pressão dadas pela Equação (4.17) na Equação (4.91), a contribuição do elemento 123 (Figura 28) de sub-volume de controle definido por $1aoc$, I_{1aoc}^p , para a equação da pressão discreta para o nó 1 pode ser escrita como

$$\begin{aligned} I_{1aoc}^p &= \int_a^o \rho \vec{V}^m \cdot \vec{n} dA + \int_o^c \rho \vec{V}^m \cdot \vec{n} dA \\ &= C_1^p p_1 + C_2^p p_2 + C_3^p p_3 + D^p. \end{aligned} \quad (4.92)$$

Derivando-se expressões similares à I_{1aoc}^p para cada elemento associado ao volume de controle em torno de um nó i , e substituindo na Equação (4.88), permite obter a equação discreta completa para a pressão em um nó i , podendo ser escrita como

$$a_i^p p_i - \sum_{nb,i} a_{nb,i} p_{nb,i} = b_i^p. \quad (4.93)$$

4.4.9 Condições de contorno

As equações discretas obtidas ao longo das seções anteriores são validas e completas para qualquer nó desde que este esteja no interior do domínio do problema. Para um dado nó pertencente ao contorno, como o nó i da Figura 34, tratamentos adequados devem ser aplicados à sua correspondente equação discreta para contabilizar a condição de contorno prescrita em tal nó.

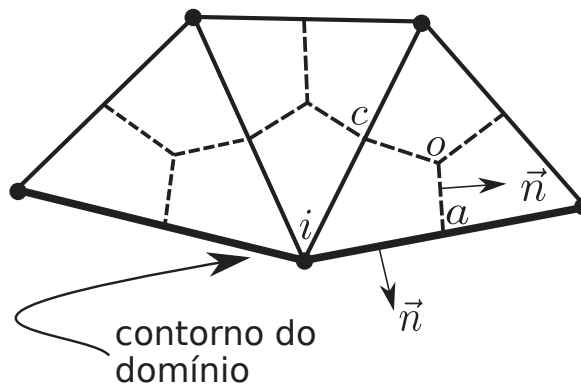


Figura 34 – Nó pertencente ao contorno de um domínio.

Considerando a discretização para uma grandeza escalar ϕ (deduções similares se aplicam às equações de Navier-Stokes, energia e pressão), e que o segmento ia da Figura 34 pertence ao contorno do problema, as seguintes condições de contorno podem ser aplicáveis.

4.4.9.1 Condição de Dirichlet

A condição de contorno de Dirichlet corresponde à prescrição de um valor fixo para a variável ϕ em uma determinada parte do contorno, podendo ser expressa como

$$\phi = \phi_0, \quad \text{em } \partial\Omega_\phi, \quad (4.94)$$

sendo ϕ_0 uma distribuição de ϕ sobre a parte do contorno denotada por $\partial\Omega_\phi$. Assim, para um nó i pertencente à região $\partial\Omega_\phi$, a correspondente equação discreta é sobrescrita, tal que seus coeficientes serão dados por

$$a_i^\phi = 1, \quad a_{nb,i}^\phi = 0 \quad \text{e} \quad b_i^\phi = [\phi_0]_i, \quad (4.95)$$

com a resultante equação escrita simplesmente como

$$\phi_i = [\phi_0]_i \quad (4.96)$$

4.4.9.2 Condição de Neumann

A condição de contorno de Neumann corresponde à prescrição da derivada normal de ϕ em uma parte do contorno denotada por $\partial\Omega_n$, ou seja,

$$\nabla\phi \cdot \vec{n} = \left(\frac{\partial\phi}{\partial n} \right)_0 \quad \text{em } \partial\Omega_n. \quad (4.97)$$

Dessa forma, o fluxo advectivo-difusivo total através da fronteira $\partial\Omega_n$ é dado por

$$\vec{J} \cdot \vec{n} = (\rho\vec{V}\phi - \Gamma\nabla\phi) \cdot \vec{n} = \rho V_n \phi - \Gamma \left(\frac{\partial\phi}{\partial n} \right)_0 \quad \text{em } \partial\Omega_n, \quad (4.98)$$

onde V_n é a componente da velocidade normal para fora da fronteira. Assim, a contribuição do segmento ia para o nó i na equação discreta será dada por

$$\int_i^a \vec{J} \cdot \vec{n} dA = \int_i^a \left[\rho V_n \phi - \Gamma \left(\frac{\partial\phi}{\partial n} \right)_0 \right] dA. \quad (4.99)$$

4.4.9.3 Condição de Robin

A condição de contorno de Robin, também conhecida como mista, envolve uma combinação linear da propriedade ϕ e de sua derivada normal para fora da fronteira $\partial\Omega_r$. Ou seja,

$$\nabla\phi \cdot \vec{n} + \lambda_1\phi = \lambda_2 \quad \text{em } \partial\Omega_r, \quad (4.100)$$

onde λ_1 e λ_2 são valores especificados ao longo de $\partial\Omega_r$. O fluxo advectivo-difusivo total através da fronteira $\partial\Omega_n$ neste caso é dado por

$$\begin{aligned} \vec{J} \cdot \vec{n} &= (\rho\vec{V}\phi - \Gamma\nabla\phi) \cdot \vec{n} \\ &= \rho V_n \phi - \Gamma (\lambda_2 - \lambda_1\phi) \\ &= (\rho V_n \phi + \Gamma\lambda_1)\phi - \Gamma\lambda_2 \quad \text{em } \partial\Omega_r. \end{aligned} \quad (4.101)$$

Portanto, a contribuição do segmento ia para a correspondente equação discreta para o nó i é dada por

$$\int_i^a \vec{J} \cdot \vec{n} dA = \int_i^a [(\rho V_n \phi + \Gamma \lambda_1) \phi - \Gamma \lambda_2] dA. \quad (4.102)$$

4.4.9.4 Outras prescrições de condições de contorno

Para a equação de conservação da massa, Equação (4.88), apenas fronteiras que possuem fluxo de entrada ou de saída de massa através delas terão contribuições diferentes de zero. Assim, a contribuição de fluxo de massa através do segmento ia para a correspondente equação discreta do nó i , pode ser dada por

$$\int_i^a \rho \vec{V} \cdot \vec{n} dA = \int_i^a \rho V_n dA, \quad (4.103)$$

sendo a componente normal da velocidade para fora da fronteira, V_n calculada com os valores nodais mais recentes de \vec{V} , e não com \vec{V}^m , que são usadas apenas nos cálculos de fluxo de massa através das fronteiras dos volumes de controle em nós no interior do domínio.

Para pontos nodais no contorno onde as componentes da velocidade sejam prescritas, tais como paredes fixas ou com fluxo de entrada, os coeficientes do gradiente de pressão, d^u e d^v são prescritos com valor zero, implicando em $u^m = \hat{u} = u_0$ e $v^m = \hat{v} = v_0$.

Em contornos com fluxo de saída, a componente normal do fluxo difusivo do escalar ϕ ou das componentes u e v da velocidade é considerada desprezível, correspondendo a uma condição de Neumann homogênea na parte de fluxo de saída $\partial\Omega_{out}$ prescrita como

$$\nabla\phi \cdot \vec{n} = \frac{\partial\phi}{\partial n} = 0 \quad \text{em} \quad \partial\Omega_{out}. \quad (4.104)$$

No caso das Equações de Navier-Stokes incompressíveis, os valores absolutos da pressão são irrelevantes, visto que apenas o seu gradiente aparece nas equações. Assim os valores da pressão são obtidos em torno de um constante arbitrária quando o campo de velocidades calculado a partir das equações de conservação da quantidade de movimento satisfaz a equação da continuidade. Assim, uma prática comum para promover a convergência de um algoritmo iterativo de solução é fixar um valor conveniente para a pressão em um dado ponto nodal, evitando também níveis arbitrariamente grandes de pressão durante o processo de solução.

4.4.10 Algoritmo e procedimentos de solução das equações

As equações que englobam as de Navier-Stokes e da energia formam um conjunto de equações não-lineares e acopladas entre si. Ao longo das sessões anteriores aproximações algébricas para estas equações foram descritas, restando agora apresentar um procedimento completo, envolvendo os passos de discretização, montagem dos sistemas de equações algébricas e tratamento das não-linearidades por meio de iterações.

Um método iterativo, de natureza segregada, baseado no algoritmo SIMPLER (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equation - Revised) de Patankar (1980) é empregado como procedimento de desenvolvimento e solução dos sistemas de equações discretas. As principais etapas deste algoritmo segue os passos descritos a seguir.

- (1) Obtenção da malha de elementos e criação de estruturas de dados relacionadas a ela; obtenção de propriedades físicas como difusividade térmica, viscosidade, densidade dentre outras; inicialização dos campos nodais de velocidade, temperatura e outros campos de interesse.
- (2) Calcular os coeficientes das equações de conservação da quantidade movimento linear (Equações (4.82) e (4.83)) sem incluir os referentes a discretização do gradiente pressão; adicionar condições de contorno que não sejam de Dirichlet.
- (3) Calcular as pseudo-velocidades, \hat{u} e \hat{v} , pela Equação (4.85) e os coeficientes do gradiente de pressão, d^u e d^v , pela equação (4.86); atribuir condições de contorno apropriadas para \hat{u} , \hat{v} , d^u e d^v quando houver prescrição de velocidades no contorno.
- (4) Calcular os coeficientes da Equação (4.93), montar e resolver o sistema resultante para a pressão p .
- (5) Calcular a discretização referente ao gradiente de pressão com a distribuição de p obtida no item 4; adicionar estas expressões ao termos independentes das equações de conservação da quantidade movimento linear calculadas no item 2.
- (6) Faça a relaxação das equações obtidas no item 5; atribua as condições de contorno de Dirichlet, quando presentes; resolva os sistemas para obter as novas distribuições de u e v .
- (7) Verifique a convergência, e repita os passos de 2 a 6 se necessário até a convergência ser verificada.
- (8) Calcule os coeficientes, aplique condições de contorno e resolva para outras variáveis dependentes que estejam presentes no problema.

4.5 Testes e resultados numéricos

Nesta seção, apresentam-se diversos problemas, testes e soluções numéricas implementando a metodologia CVFEM discutida neste Capítulo. Todos os exemplos deste Capítulo foram implementados em Python visando testar e aperfeiçoar a metodologia estudada. Em casos aplicáveis, as soluções numéricas obtidas serão comparadas com suas respectivas soluções analíticas.

4.5.1 Problemas de advecção-difusão básicos

Considere o problema de difusão estacionária unidimensional de uma grandeza escalar ϕ , com condições de contorno de Dirichlet, descrito em Voller (2009). Esta situação pode ser modelada pela seguinte equação:

$$\begin{cases} k \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0, & 0 < x < L \\ \phi(0) = \phi_1, & x = 0 \\ \phi(L) = \phi_2, & x = L \end{cases} \quad (4.105)$$

cuja solução analítica pode ser escrita como

$$\phi = (\phi_2 - \phi_1) \frac{x}{L} + \phi_1. \quad (4.106)$$

Considerando $\phi(x = 0) = \phi_1 = 1$ e $\phi(x = L) = \phi_2 = 0$ as condições de contorno, $L = 1$ o comprimento do domínio e a difusividade térmica $k = 1$. Este problema pode ser resolvido em uma geometria bidimensional, onde na direção y considera-se $\partial^2 \phi / \partial y^2 = 0$, tal que a solução torna-se essencialmente unidimensional para qualquer corte horizontal. A Figura 35 ilustra a solução numérica bidimensional do problema.

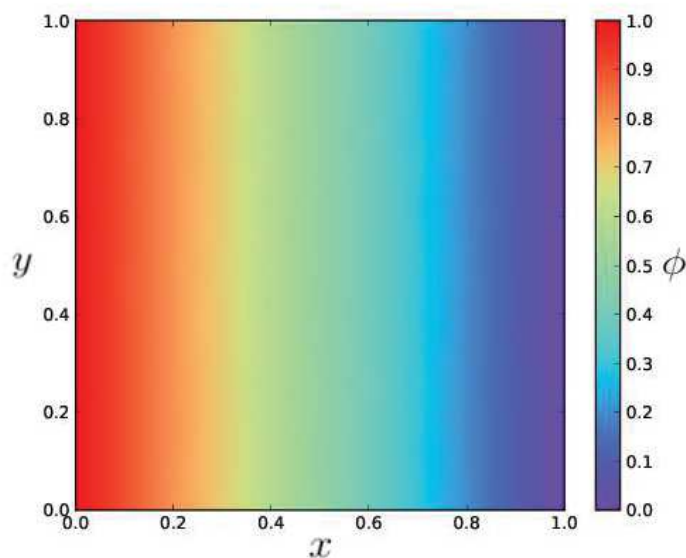


Figura 35 – Solução no domínio bidimensional.

A Figura 36 exhibe as soluções numérica e analítica do problema. Observa-se boa concordância entre os resultados.

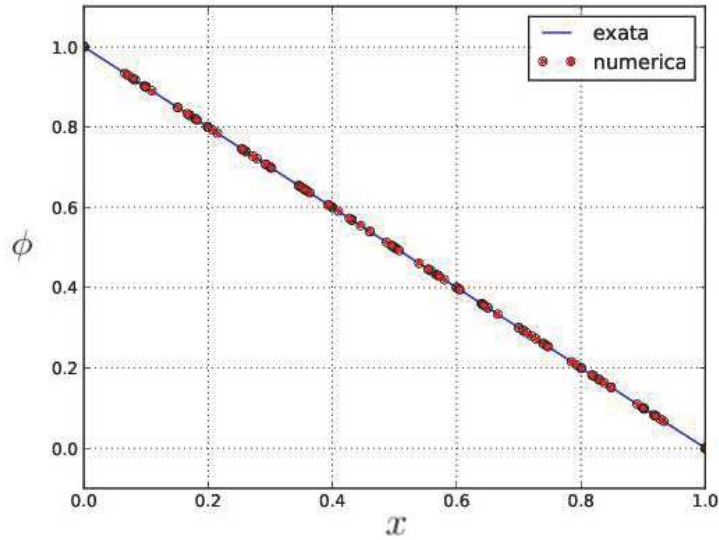


Figura 36 – Soluções analítica e numérica.

O próximo exemplo é um problema de difusão em regime transiente em um domínio semi-infinito, encontrado em [Voller \(2009\)](#), e pode ser descrito por

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} - k \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0, & 0 < x < L, \quad t > 0, \\ \phi(0) = \phi_1, & x = 0, \quad t > 0, \\ \phi(L) = \phi_2, & x = L, \quad t > 0, \\ \phi(0 < x < L) = \phi_0, & t = 0. \end{cases} \quad (4.107)$$

As condições de contorno são $\phi(x = 0, t > 0) = \phi_1 = 1$ e $\lim_{x \rightarrow \infty} \phi = \phi_2 = 0$, a condição inicial é $\phi(x > 0, t = 0) = \phi_2$ e $L = 20$. A implementação é feita em um domínio retangular, com o comprimento relativamente maior que a altura, visando simular o comportamento semi-infinito. Neste problema a solução analítica é dada por

$$\phi = (\phi_2 - \phi_1) \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{kt}} \right) + \phi_1, \quad (4.108)$$

onde $\operatorname{erf}(z)$ é a função erro. A Figura 37 exhibe a solução numérica bidimensional para o instante de tempo $t = 5s$.

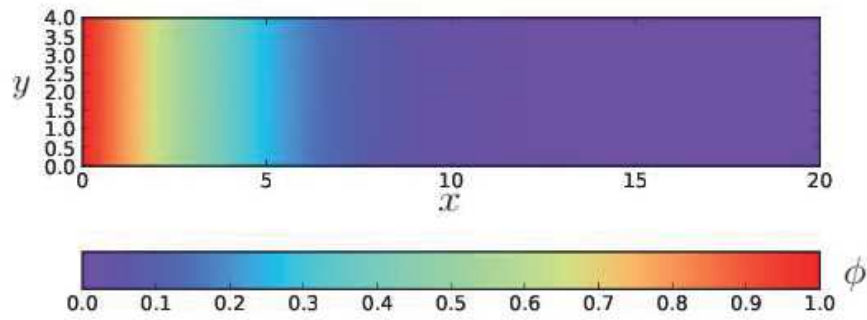


Figura 37 – Solução bidimensional para $t = 5s$.

A Figura 38 exibe as soluções numérica e analítica para os instantes $t = 1.25s$, $t = 2.5s$ e $t = 5.0s$

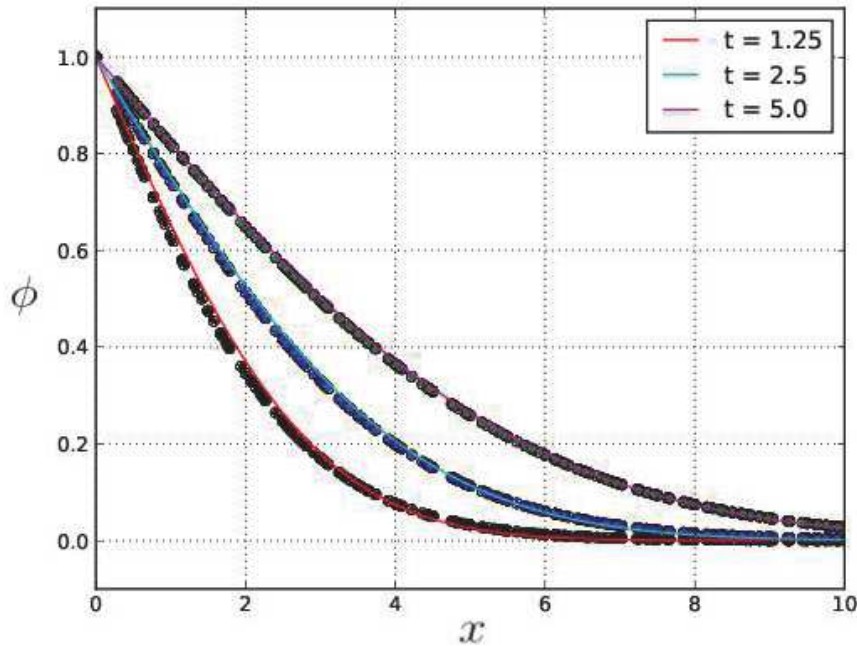


Figura 38 – Soluções numéricas e analíticas.

Observa-se também para este problema boa concordância entre as soluções analíticas e numéricas.

O próximo problema é de advecção-difusão transiente em um domínio semi-infinito, encontrado em [Voller \(2009\)](#). Este teste pode ser formulado por

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} - k \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0, & 0 \leq x \leq L, \quad t > 0, \\ \phi(0) = \phi_1, & t > 0, \\ \phi(L) = \phi_2, & t > 0, \\ \phi(0 < x < L) = \phi_0, & t = 0. \end{cases} \quad (4.109)$$

As condições de contorno são $\phi(x = 0, t > 0) = \phi_1 = 1$ e $\lim_{x \rightarrow \infty} \phi = \phi_2 = 0$, a condição inicial é $\phi(x > 0, t = 0) = \phi_1$ e u é uma dada velocidade. Os valores de u e k são tomados de acordo com o valor do número de Peclet que se deseja simular. Como no exemplo anterior, o domínio aqui também é construído de modo a simular uma geometria semi-infinita. A solução analítica deste problema pode ser escrita como

$$\phi = \frac{\phi_2}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - Pet}{2\sqrt{t}} \right) + \operatorname{erfc} \left(\frac{x + Pet}{2\sqrt{t}} \right) + e^{Pex} \right], \quad (4.110)$$

onde $\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z)$ é a função erro complementar e Pe é o número de Peclet. A Figura 39 exibe a solução analítica bidimensional para o instante de tempo $t = 5s$ e para número de Peclet $Pe = 0.5$.

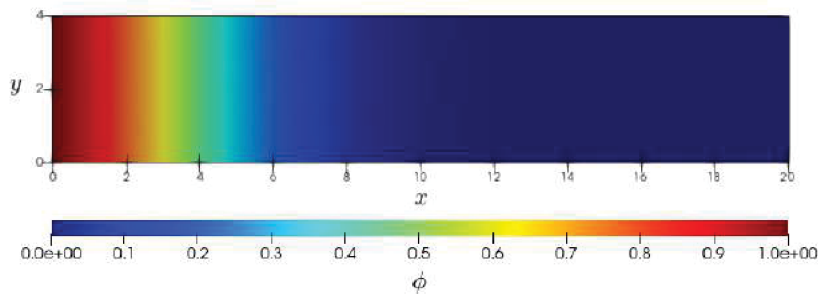


Figura 39 – Solução analítica bidimensional para $t = 5$ e $Pe = 0.5$.

Já a Figura 40 exibe as comparações entre a soluções analítica e para os esquemas linear, upwind e exponencial para o termo convectivo.

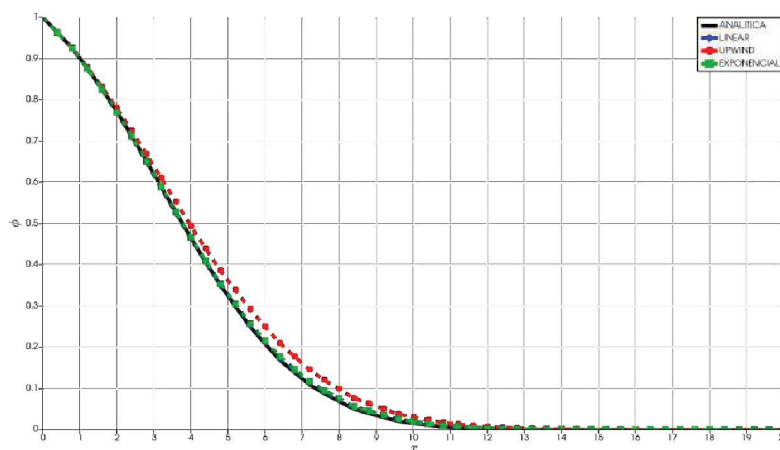


Figura 40 – Soluções analítica e numérica para $t = 5s$ e $Pe = 0.5$.

Pode-se observar na Figura 40 boa concordância entre as soluções, exceto para o esquema upwind que mesmo para um baixo número de Peclet já apresenta o comportamento característico de soluções upwind, que é a difusão numérica.

A Figura 41 exibe a solução analítica bidimensional para o instante de tempo $t = 5s$ e para número de Peclet $Pe = 1$.

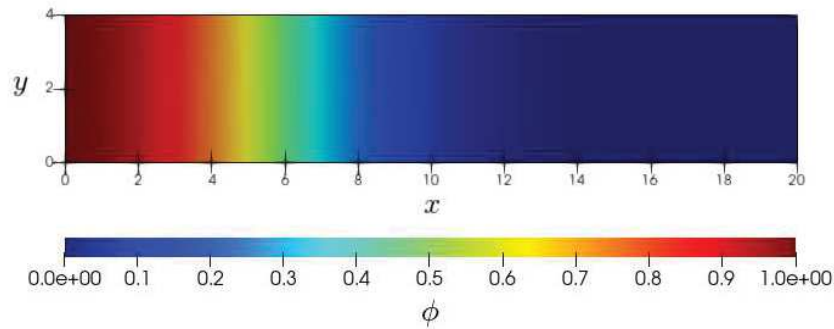


Figura 41 – Solução analítica bidimensional para $t = 5$ e $Pe = 1$.

Já a Figura 42 exibe as comparações entre a soluções analítica e para os esquemas linear, upwind e exponencial para o termo convectivo.

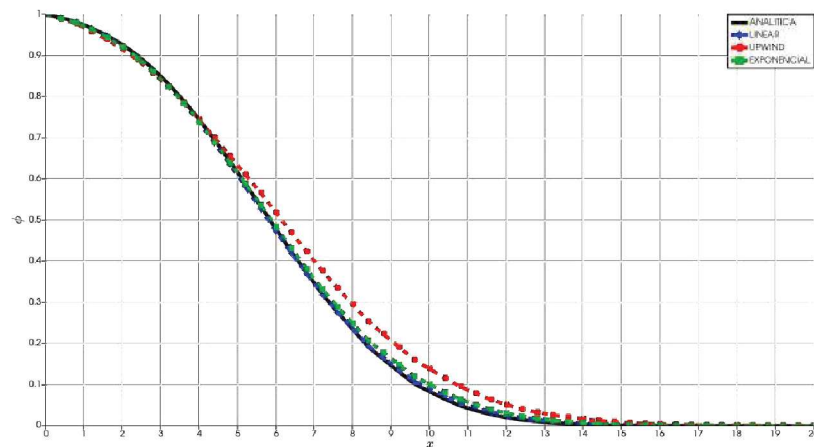


Figura 42 – Soluções analítica e numérica para $t = 5s$ e $Pe = 1$.

Neste caso já se começa a observar que a solução numérica usando a função de interpolação exponencial para o termo convectivo tende a se afastar um pouco da analítica. Também o esquema upwind aumentou um pouco mais sua difusão artificial em relação ao caso de $Pe = 1$.

Por fim, a Figura 43 exibe a solução analítica bidimensional para o instante de tempo $t = 5s$ e para número de Peclet $Pe = 2$.

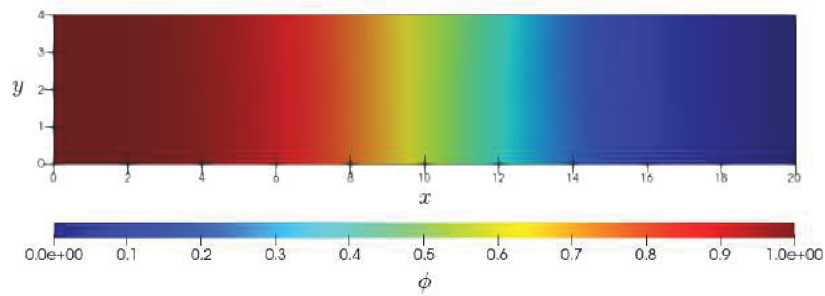


Figura 43 – Solução analítica bidimensional para $t = 5$ e $Pe = 2$.

Já a Figura 44 exibe as comparações entre a soluções analítica e para os esquemas linear, upwind e exponencial para o termo convectivo.

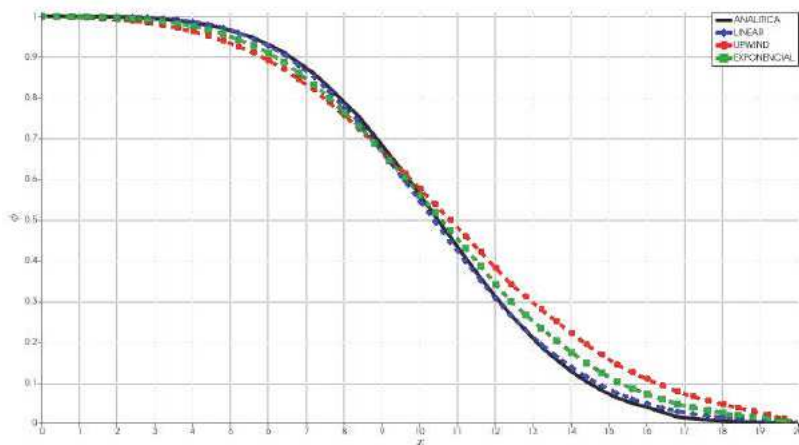


Figura 44 – Soluções analítica e numérica para $t = 5s$ e $Pe = 2$.

A partir do valor de $Pe = 2$ para cima, vai ser observado que a solução numérica com interpolação linear vai começar a oscilar, o upwind vai manter seu comportamento difusivo porém sem oscilações e a função exponencial terá um comportamento parecido com o upwind, entretanto, com menos difusividade numérica. A partir da Figura 44 estes comportamentos já começam a serem observados.

Neste teste, considere o problema de difusão de calor em uma geometria hexagonal com um furo no centro, descrito em [Versteeg e Malalasekera \(2007\)](#), cuja geometria e condições de encontram-se ilustradas na Figura 45.

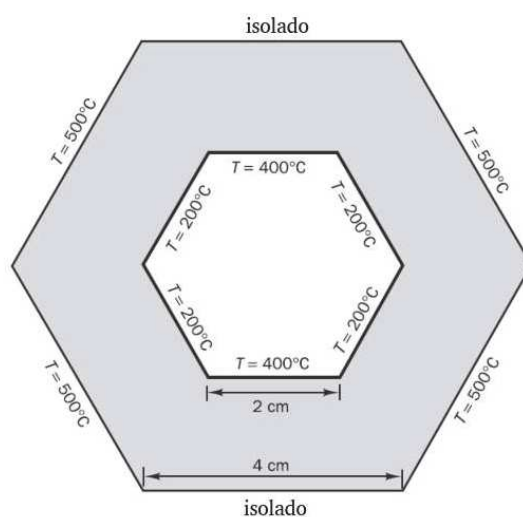


Figura 45 – Geometria hexagonal.

Os campos de temperatura obtidos numericamente para este problema em malhas com 54 e 180 nós são exibidas na Figura 46 e com 648 e 2448 nós na Figura 47.

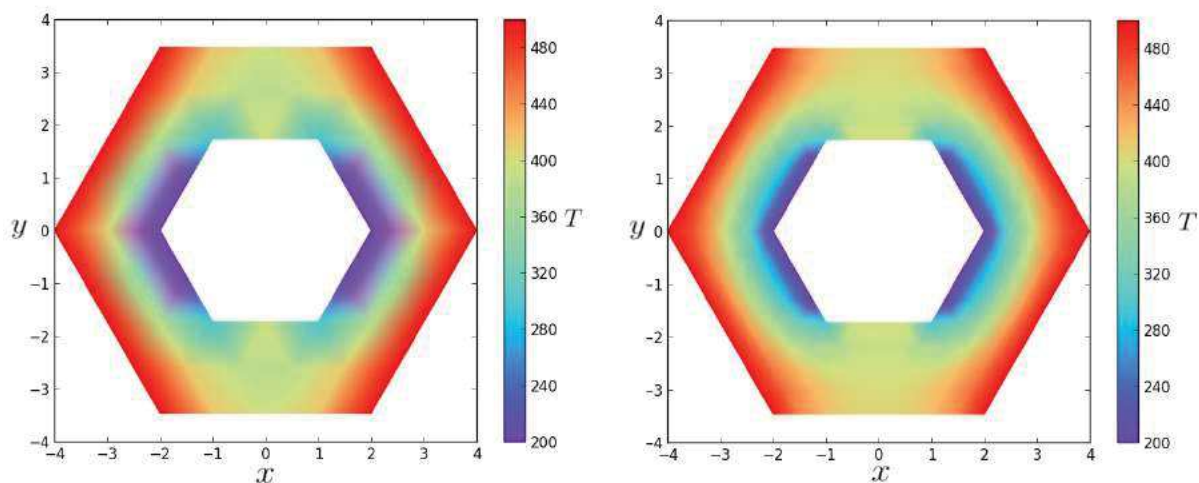


Figura 46 – Campos de temperatura: 54 nós (à esquerda) e 180 nós (à direita).

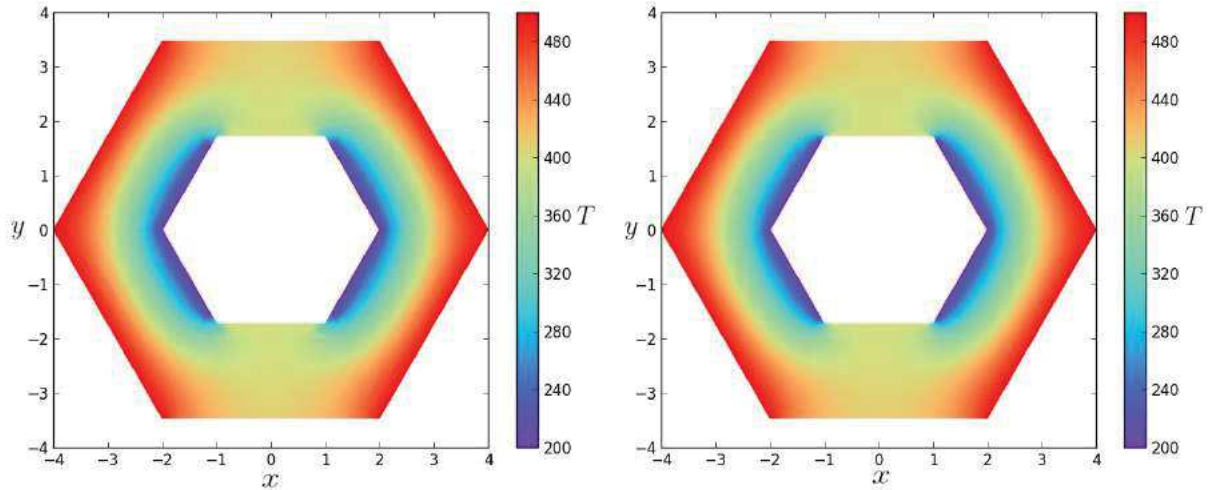


Figura 47 – Campos de temperatura: 648 nós (à esquerda) e 2448 nós (à direita).

E no último exemplo desta seção, considere o problema de condução em uma geometria correspondente a 1/4 de um anel, descrito em [Voller \(2009\)](#), cuja geometria e malha são exibidas na Figura 48. Para este problema, a equação de difusão unidimensional em coordenadas cilíndricas ([Lai et al., 2009](#)) é escrita como

$$\frac{d}{dr} \left(r \frac{d\phi}{dr} \right) = 0, \quad R_{int} \leq r \leq R_{ext}, \quad (4.111)$$

onde $r = R_{int}$ e $r = R_{ext}$ são os raios interno e externo, respectivamente, e cuja solução analítica é

$$\phi = \phi_{int} + (\phi_{ext} - \phi_{int}) \frac{\ln(r) - \ln(r_{int})}{\ln(r_{ext}) - \ln(r_{int})} \quad (4.112)$$

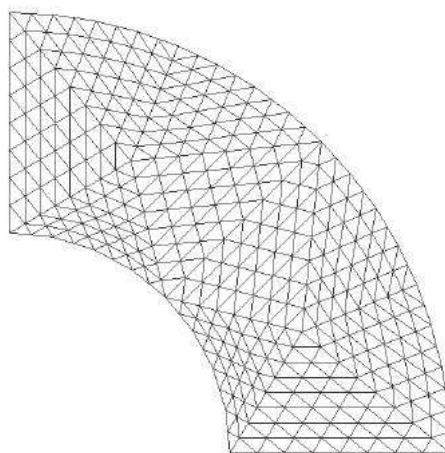


Figura 48 – Geometria e malha em 1/4 de anel.

Em duas dimensões, a equação em coordenadas cartesianas para este problema

pode ser escrita como

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0, \quad x \geq 0, \quad y \geq 0, \quad R_{int} \leq \sqrt{x^2 + y^2} \leq R_{ext}, \quad (4.113)$$

com as seguintes condições de contorno:

$$\begin{aligned} \phi &= \phi_{int} = 1, \text{ em } \sqrt{x^2 + y^2} = 1, \\ \phi &= \phi_{ext} = 0, \text{ em } \sqrt{x^2 + y^2} = 2, \\ \frac{\partial \phi}{\partial x} &= 0, \text{ em } x = 0, \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} &= 0, \text{ em } y = 0, \end{aligned} \quad (4.114)$$

A solução bidimensional deste problema é exibida na Figura 49.

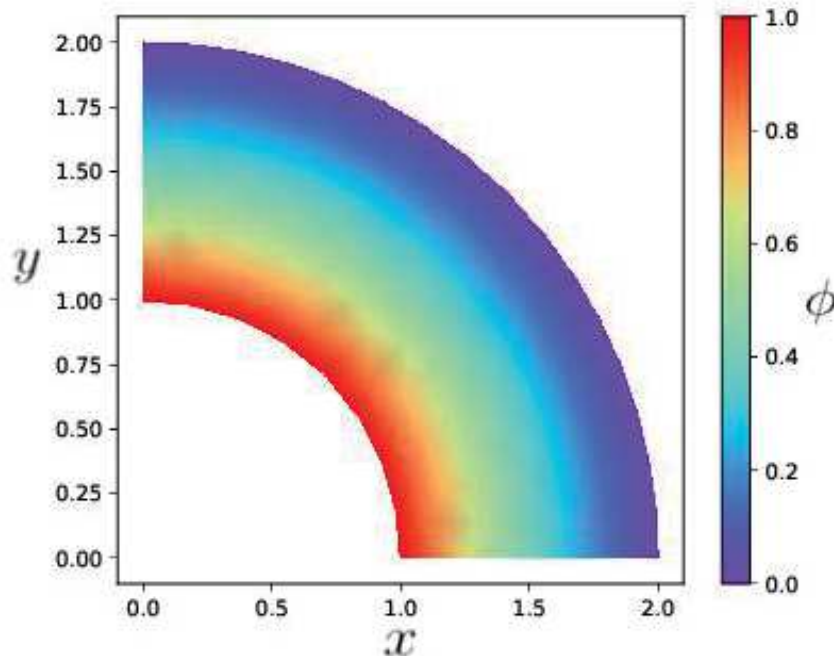


Figura 49 – Solução numérica bidimensional em 1/4 de anel.

E a Figura 50 compara as soluções analítica e numérica para um dado raio r , observando-se boa concordância entre os resultados.

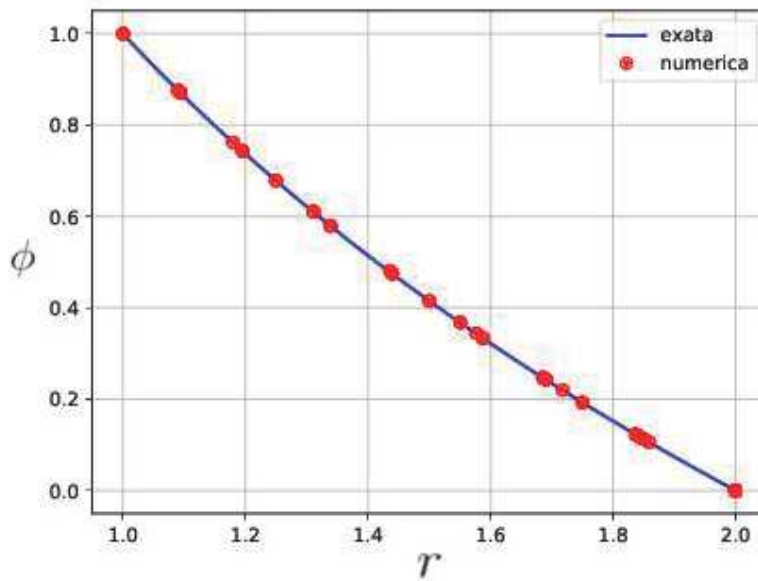


Figura 50 – Soluções analítica e numérica.

Estes dois últimos exemplos servem para ressaltar o fato de que o CVFEM pode lidar bem com geometrias diversas, simples ou mais complexas.

4.5.2 Estabilização da função de interpolação linear

Ao longo Seção 4.3.3.3 foi apresentado a função de interpolação linear para o termo convectivo no contexto do CVFEM. Esta função é equivalente à formulação do método de Galerkin no FEM e a formulação de diferenças centrais no Método de Diferenças Finitas e no Método dos Volumes Finitos clássico. Embora este tipo de interpolação seja de segunda ordem, sua aplicação só é efetiva em casos onde o número de Peclet é baixo. A medida que o valor do número de Peclet aumenta, o comportamento da solução numérica se torna altamente oscilatório e sem correspondência adequada com a real solução do problema. Porém, ainda na Seção 4.3.3.3, foi apresentado um esquema de estabilização para a função de interpolação linear no contexto do CVFEM, de modo similar ao SUPG apresentado em Brooks e Hughes (1982). Assim, nesta Seção, apresentam-se alguns resultados mostrando a efetividade da estabilização da função de interpolação linear para o termo convectivo no CVFEM.

O primeiro exemplo é uma comparação entre os resultados obtidos neste trabalho com os resultados de Brooks e Hughes (1982) para o SUPG. O problema é de advecção difusão bidimensional com o campo de velocidades inclinado no domínio. A Figura 51 indica a geometria e as condições de contorno usadas.

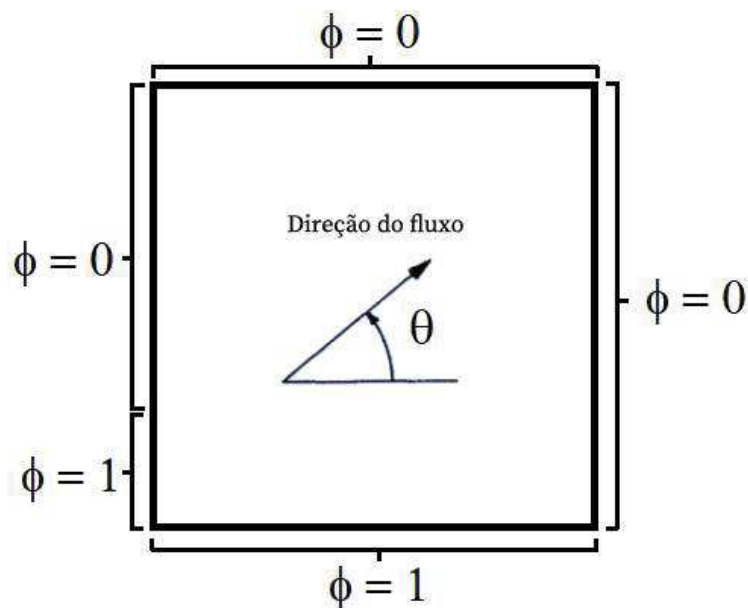


Figura 51 – Geometria e condições de contorno.

As componentes das velocidades são tomadas de modo que $\|\vec{V}\| = 1$. O coeficiente de difusão é tal que a magnitude do número de Peclet fica na ordem de 10^6 . Em [Brooks e Hughes \(1982\)](#), a malha utilizada foi de 10×10 elementos quadrados de tamanhos iguais, ao passo que neste trabalho empregou-se, para este exemplo, uma malha com um total de 248 elementos triangulares. As inclinações das velocidades correspondem aos ângulos $\theta = 22,5^\circ$, $\theta = 45^\circ$ e $\theta = 67,5^\circ$. Os resultados aqui obtidos com o CVFEM serão comparados com as soluções exata (E), upwind quadrático (QU), SUPG com um ou dois pontos de integração (SU1 e SU2 respectivamente), resultados estes dados em [Brooks e Hughes \(1982\)](#). As implementações no CVFEM correspondem aos esquemas central, central estabilizado, upwind e interpolação exponencial (FLO), conforme apresentadas ao longo das seções anteriores.

A Figura 52 ilustra a solução exata, segundo [Brooks e Hughes \(1982\)](#).

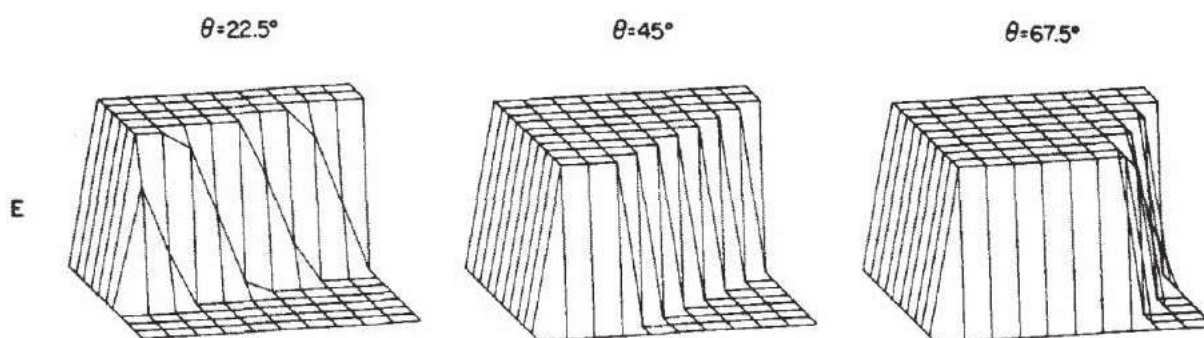


Figura 52 – Solução exata.

A Figura 53 exibe a solução numérica empregando-se interpolação linear para o termo convectivo.

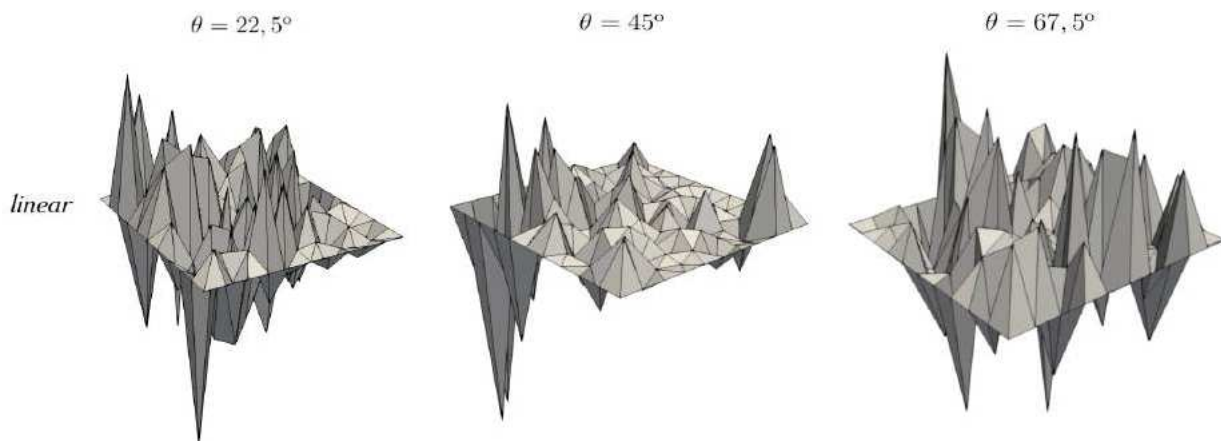


Figura 53 – CVFEM - interpolação linear.

Como era de se esperar, a solução empregando a interpolação linear tem apenas caráter ilustrativo pois apresenta grandes oscilações espúrias para quaisquer ângulos da velocidade sendo, portanto, sem utilidade prática.

A Figura 54 exibe a solução numérica empregando-se interpolação upwind para o termo convectivo.

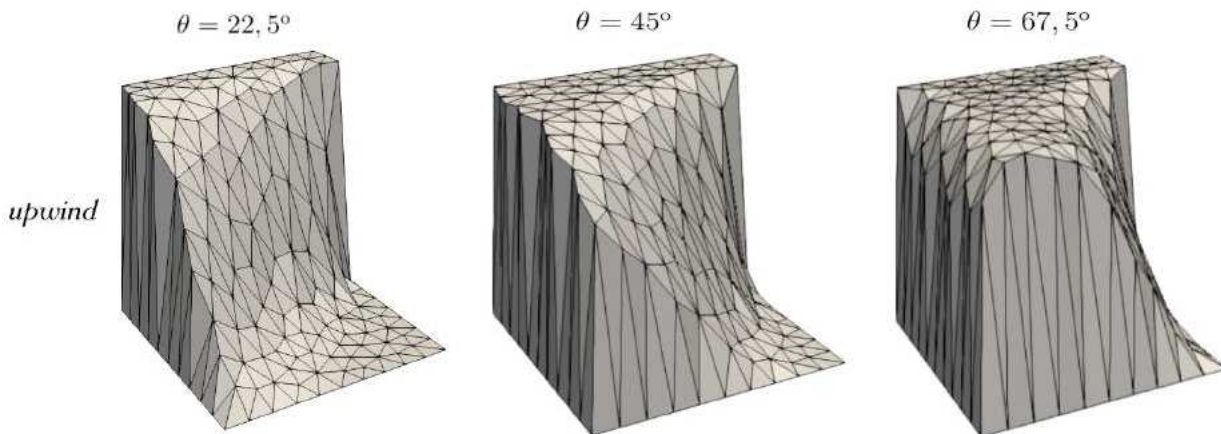


Figura 54 – CVFEM - upwind.

Observando-se a figura pode-se constatar que as soluções empregando-se upwind possuem comportamento obviamente muito melhor que a interpolação linear, de modo que, neste caso, não apresenta nenhum tipo de oscilação. Porém, um preço a se pagar por essa estabilidade é o fato do comportamento extra difusivo da solução que, como pode ser observado na figura, tende a suavizar muito as regiões de descontinuidade da solução.

Mesmo assim, este tipo de interpolação, costuma ser bem adequado e empregado para muitas aplicações.

Na Figura 55 tem-se a solução numérica empregando-se interpolação exponencial para o termo convectivo.

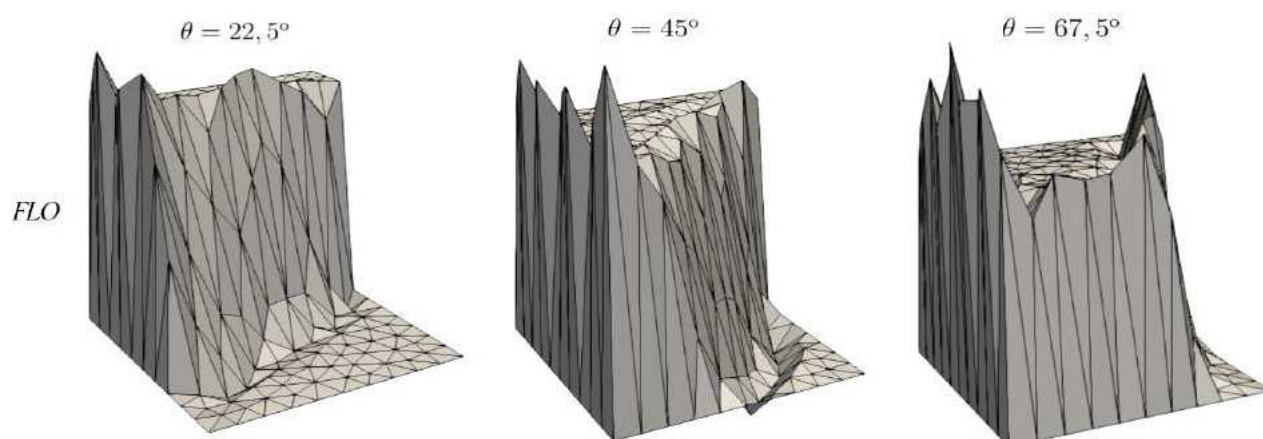


Figura 55 – CVFEM - interpolação exponencial (FLO).

Neste caso observa-se um comportamento de camada limite acentuado nos contornos a montante da velocidade, sendo o pior caso obtido para o ângulo $\theta = 67,5^\circ$, tanto em relação as descontinuidades quanto o comportamento de camada limite. Entretanto, nos demais casos, a interpolação representa um pouco melhor as regiões de descontinuidade, porém com algumas oscilações.

Por fim, a Figura 56 apresenta as soluções obtidas com a interpolação linear estabilizada.

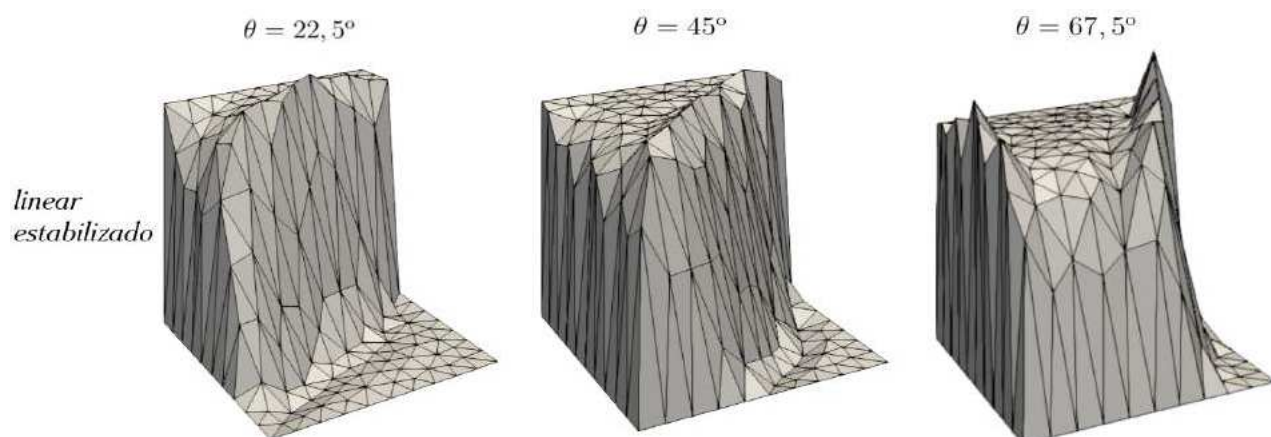


Figura 56 – CVFEM - interpolação linear com estabilização.

Pode-se dizer que estes são bons resultados quando comparados ao upwind e a

interpolação exponencial. Talvez com exceção para o ângulo $\theta = 67.5^\circ$, em que, além de uma ligeira camada limite na região do contorno a montante, possui uma grande oscilação na região de descontinuidade superior da solução. Já nos demais casos, a captação das regiões de descontinuidade ficam ótimas, apresentado apenas ligeira oscilação, porém sem as suavizações excessivas advindas do upwind.

Para termos de comparação, as Figuras 57, 58 e 59 ilustram as soluções de [Brooks e Hughes \(1982\)](#) para este problema.

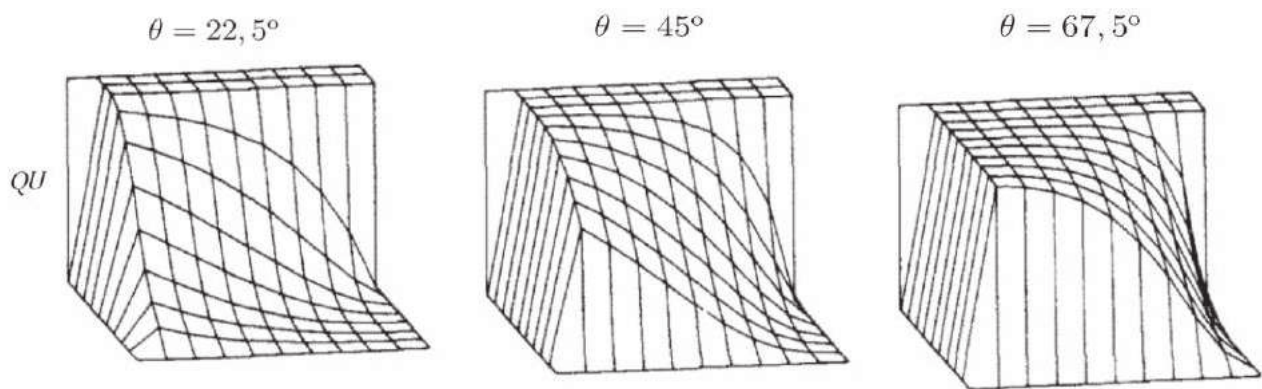


Figura 57 – Upwind quadrático.

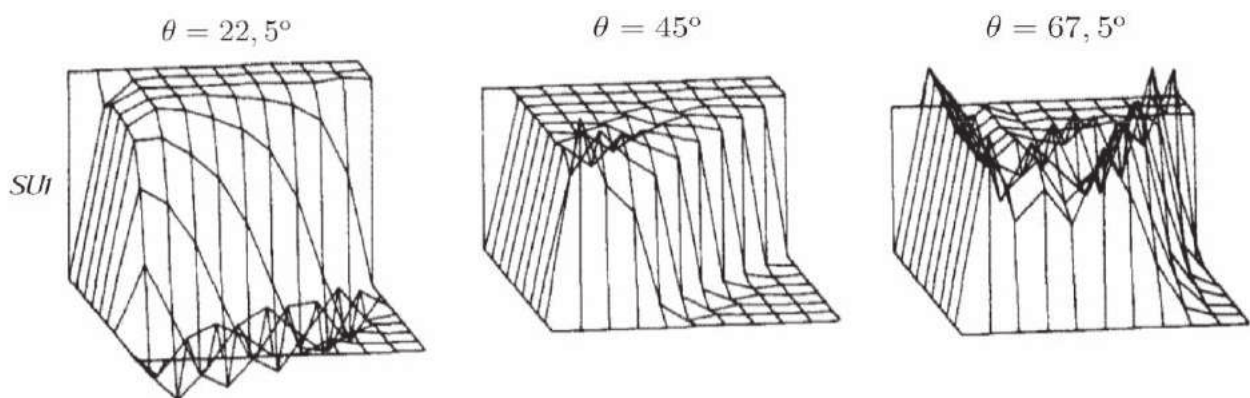


Figura 58 – SUPG - um ponto de integração.

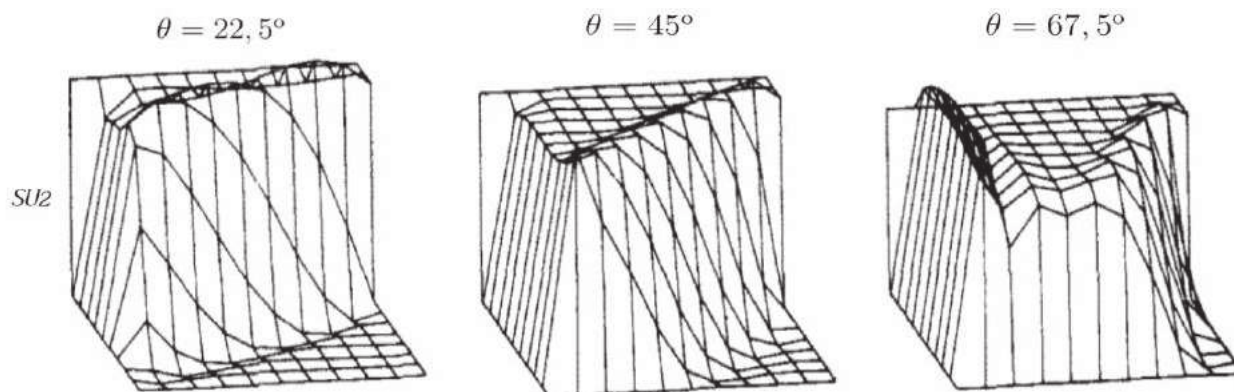


Figura 59 – SUPG - dois pontos de integração.

No caso upwind quadrático (QU), exibido na Figura 57, o comportamento das soluções se assemelha muito ao upwind empregado no CVFEM, com as mesmas características de suavidade nas soluções sem oscilações espúrias. O emprego do SUPG com um ou dois pontos de integração, ilustrados nas Figuras 58 e 59, apresentam um comportamento misto com relação aos resultados usando a interpolação linear estabilizada e a interpolação exponencial no CVFEM. Observa-se que no caso da interpolação exponencial, todos os ângulos apresentam comportamento de camada limite próximo aos contornos a montante da velocidade. Este comportamento de camada limite também é observado em [Brooks e Hughes \(1982\)](#), principalmente no ângulo $\theta = 67.5^\circ$ em ambas variações do SUPG, com um ou dois ponto de integração. Já o comportamento geral das soluções obtidas com o CVFEM para a interpolação linear com estabilização se assemelham muito com as soluções SU2 de [Brooks e Hughes \(1982\)](#).

Mais algumas comparações entre as soluções obtidas com o CVFEM podem ser observadas nas Figuras 60, 61, 62 e 63, que exibem os valores de ϕ ao longo de cortes no domínio.

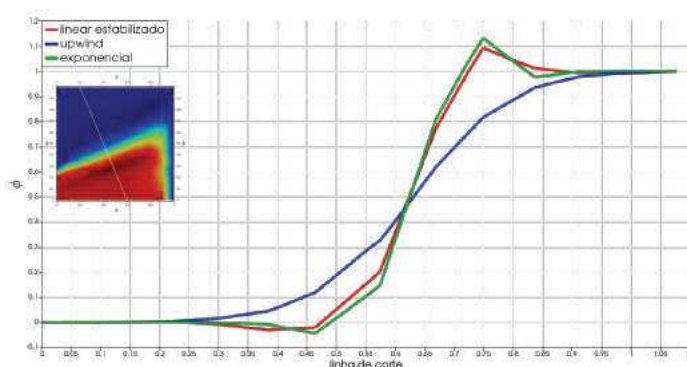


Figura 60 – CVFEM - comparação ao longo de um corte para $\theta = 22,5^\circ$.

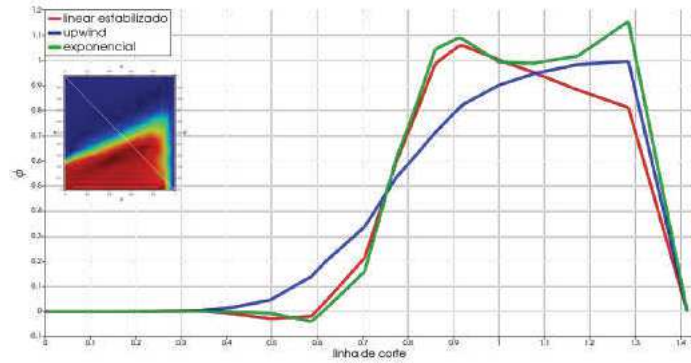


Figura 61 – CVPFEM - comparação ao longo de um corte para $\theta = 22,5^\circ$.

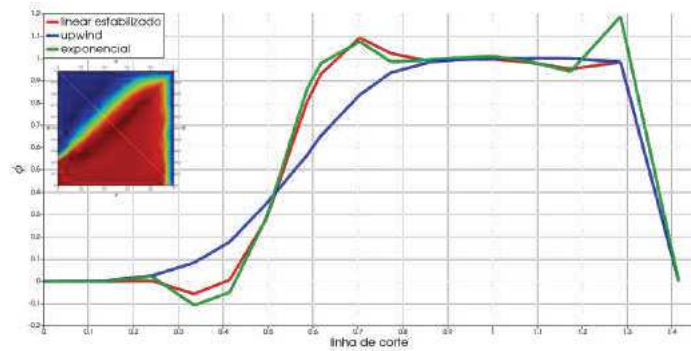


Figura 62 – CVPFEM - comparação ao longo de um corte para $\theta = 45^\circ$.

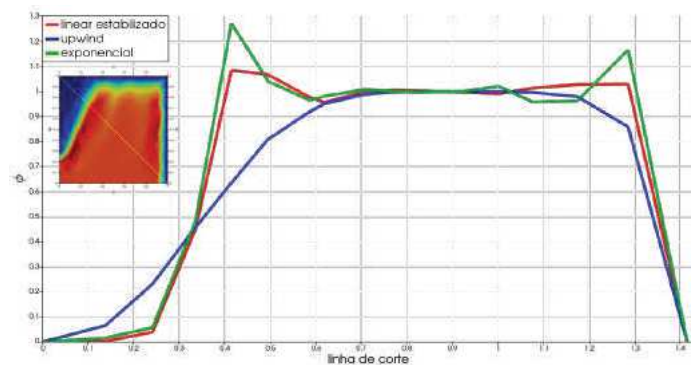


Figura 63 – CVPFEM - comparação ao longo de um corte para $\theta = 67,5^\circ$.

As Figuras 60 e 61 representam dois cortes diferentes com o intuito de captar o comportamento das soluções em diferentes regiões do domínio para o ângulo $\theta = 22,5^\circ$. Ao examinar estas figuras, fica evidente o comportamento anteriormente destacado do upwind, que não apresenta quaisquer oscilações mas suavizam muito o comportamento da solução. Com relação ao corte da Figura 60 fica evidente um comportamento muito similar da interpolação linear estabilizada com a exponencial. Porém, o segundo corte ilustrado na Figura 61 exibe uma diferença acentuada nos comportamentos das interpolações linear

estabilizada e exponencial próximo ao contorno. A explicação para isso é fato de que a interpolação exponencial apresentou camada limite próximo a este contorno, conforme ilustrado na Figura 55 e discutido anteriormente. Já nas Figuras 62 e 63 tem-se as soluções ao longo do corte indicado para os ângulos $\theta = 45^\circ$ e $\theta = 67,5^\circ$, respectivamente. Em ambos os casos nota-se comportamento similares das interpolações linear estabilizada e exponencial. Porém, ainda pode-se dizer que as soluções obtidas com a interpolação linear estabilizada são melhores que a interpolação exponencial.

4.5.3 Problema de circulação em cavidade

Nesta seção, o problema de circulação em cavidade, também conhecido como lid-driven cavity, será abordado. Este problema, que pode ser encontrado em diversas referências, como em [Soh e Goodrich \(1988\)](#), [Ghia et al. \(1982\)](#), [Gatski et al. \(1982\)](#), [Omari \(2013\)](#) e [Bruneau e Saad \(2006b\)](#), e também já foi estudado em [Odone et al. \(2014\)](#) no contexto do Método dos Volumes Finitos clássico. Este problema é amplamente utilizado para a verificação e validação de método e implementações computacionais. Neste trabalho, portanto, o foco é apresentar alguns resultados deste problema com a implementação em Python do CVFEM estudado nesta seção.

4.5.3.1 Implementação em estado estacionário

O problema de circulação em cavidade em estado permanente pode ser modelado pelas equações de conservação da quantidade de movimento linear e pela equação de conservação da massa, ou seja, pelo seguinte conjunto de equações:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{V} = 0 \\ \nabla \cdot (\rho \vec{V} u) - \nabla \cdot (\mu \nabla u) = -\frac{\partial p}{\partial x} \\ \nabla \cdot (\rho \vec{V} v) - \nabla \cdot (\mu \nabla v) = -\frac{\partial p}{\partial y}, \end{cases} \quad (4.115)$$

sendo $u = vx$ e $v = vy$. A implementação em Python segue do algoritmo apresentado na Seção 4.4.10. A geometria corresponde a uma cavidade quadrada unitária, e um esboço da malha utilizada e as condições de contorno do problema podem ser vistos na Figura 64. Em todos os exemplos estacionários executados a malha é composta de 1016 elementos triangulares lineares. O esquema de interpolação dos termos difusivos é linear e para os termos convectivos é upwind. Sendo o número de Reynolds definido por

$$Re = \frac{\rho V_m L}{\mu}, \quad (4.116)$$

onde V_m é uma velocidade de referência, e L é um comprimento característico. Para todos exemplos apresentados, $V_m = 1$, correspondendo à maior velocidade encontrada no problema, dada no contorno e $L = 1$, sendo este o comprimento dos lados da cavidade.

Assim cada teste é caracterizado por um dado número de Reynolds, variando-se a densidade ρ e a viscosidade μ . Os valores do número de Reynolds usados foram $Re = 100$, $Re = 400$, $Re = 1000$, $Re = 3200$ e $Re = 10000$.

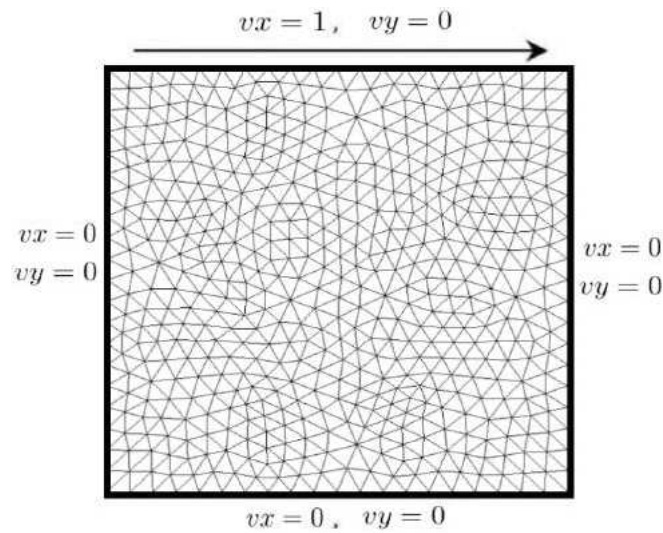


Figura 64 – Geometria e condições de contorno para o problema de circulação em cavidade.

A Figura 65 exibe os campos de velocidade e pressão $Re = 100$.

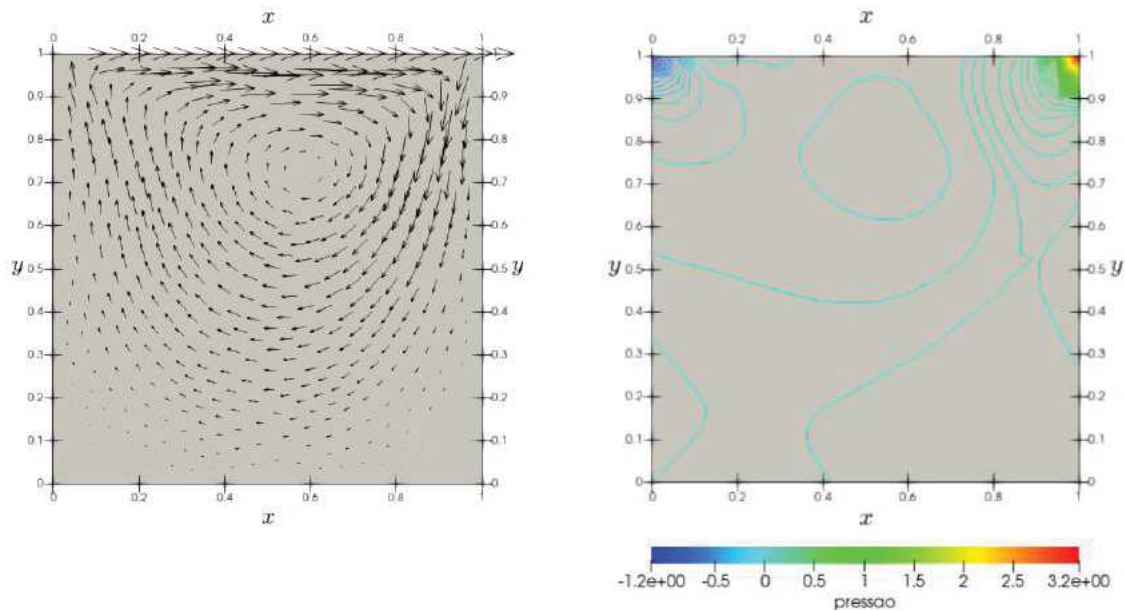


Figura 65 – Campos de velocidade e de pressão para $Re = 100$.

A Figura 66 exibe os valores das componentes vx e vy da velocidade ao longo das linhas $x = 0,5$ e $y = 0,5$, respectivamente, também para $Re = 100$.

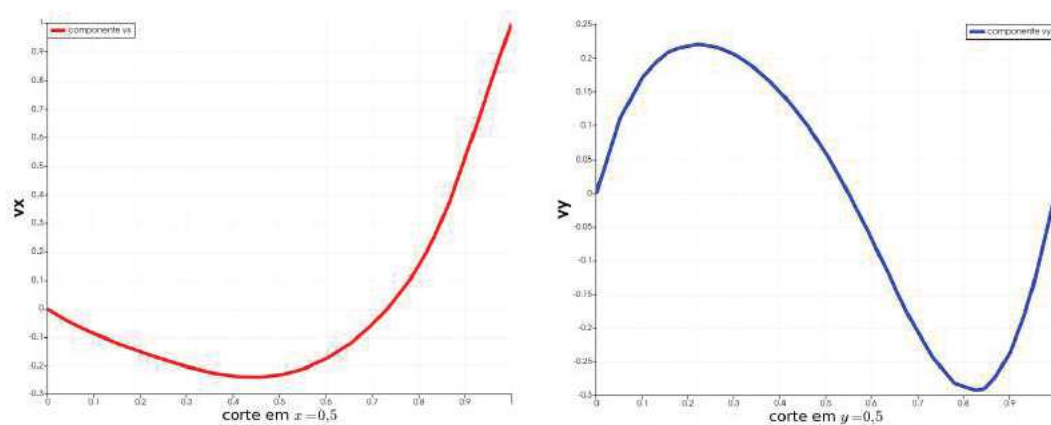


Figura 66 – Valores das componentes v_x e v_y para $Re = 100$.

A Figura 67 corresponde aos campos de velocidade e pressão e a Figura 68 os valores das componentes da velocidade para $Re = 400$.

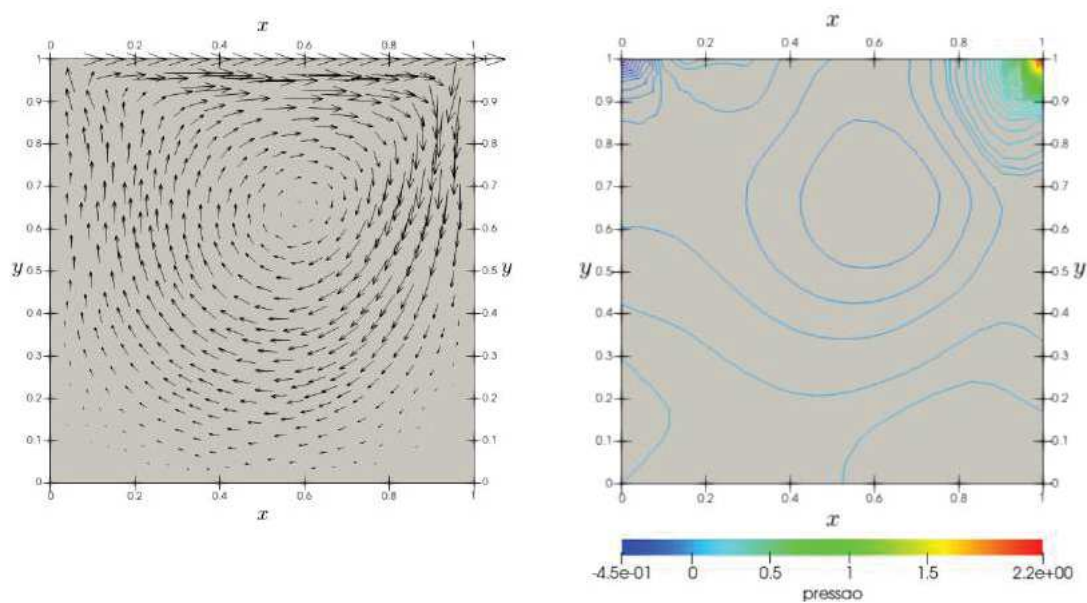


Figura 67 – Campos de velocidade e de pressão para $Re = 400$.

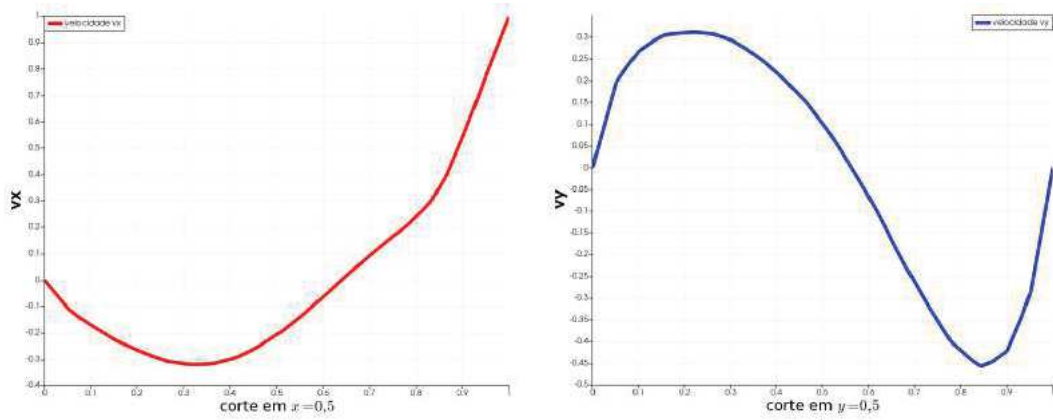


Figura 68 – Valores das componentes v_x e v_y para $Re = 400$.

A Figura 69 corresponde aos campos de velocidade e pressão e a Figura 70 os valores das componentes da velocidade para $Re = 1000$.

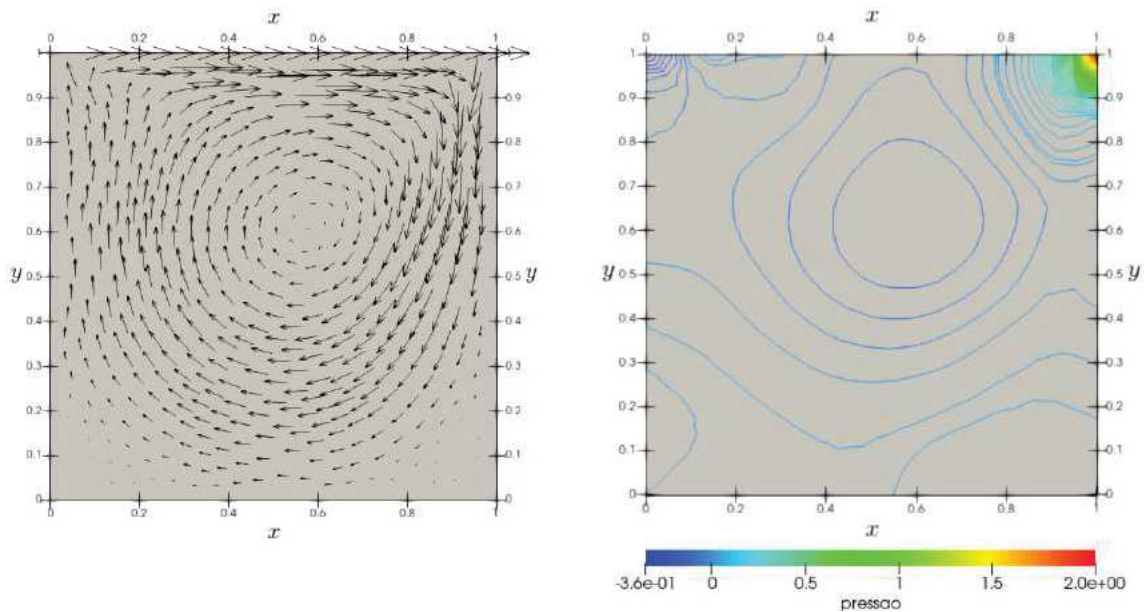


Figura 69 – Campos de velocidade e de pressão para $Re = 1000$.

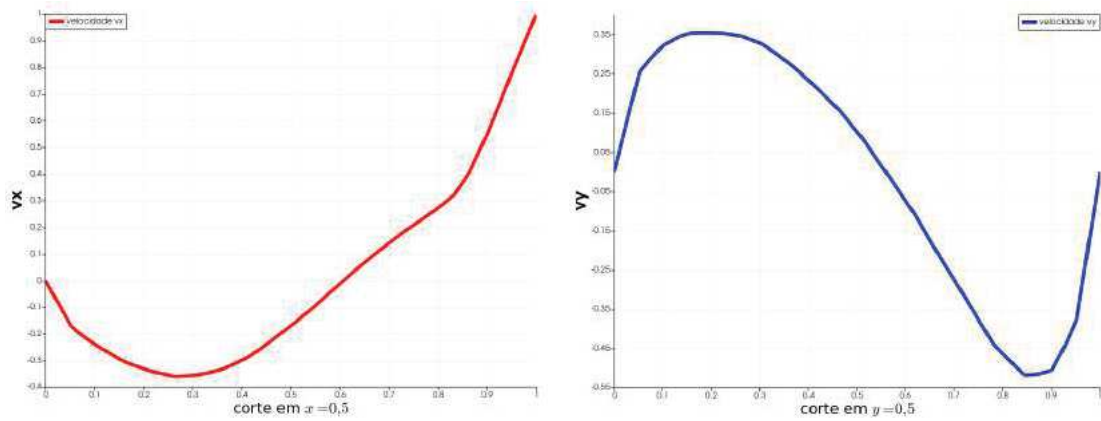


Figura 70 – Valores das componentes v_x e v_y para $Re = 1000$.

A Figura 71 corresponde aos campos de velocidade e pressão e a Figura 72 os valores das componentes da velocidade para $Re = 1000$.

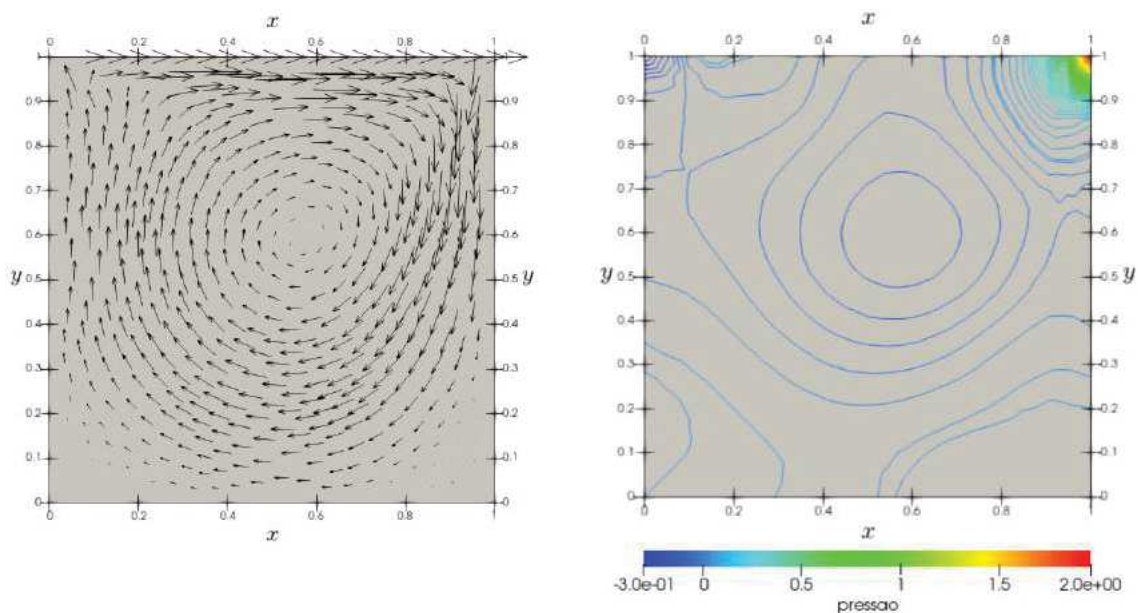


Figura 71 – Campos de velocidade e de pressão para $Re = 3200$.

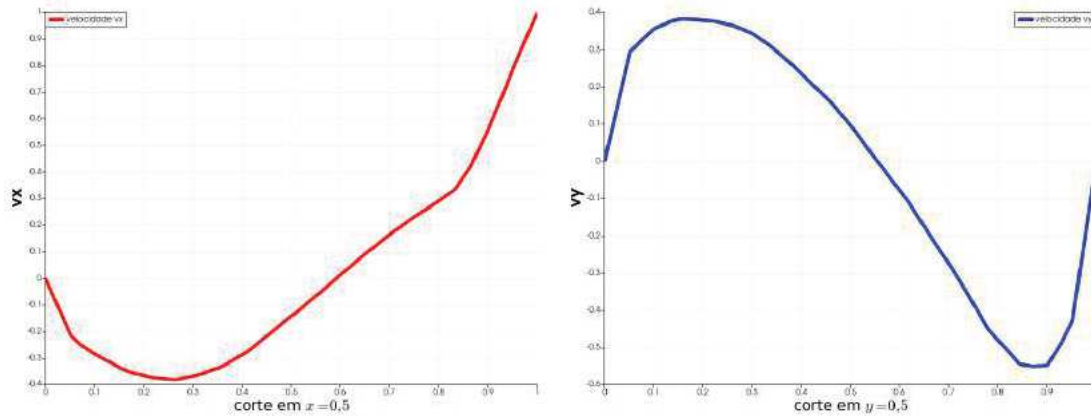


Figura 72 – Valores das componentes v_x e v_y para $Re = 3200$.

A Figura 73 corresponde aos campos de velocidade e pressão e a Figura 74 os valores das componentes da velocidade para $Re = 10000$.

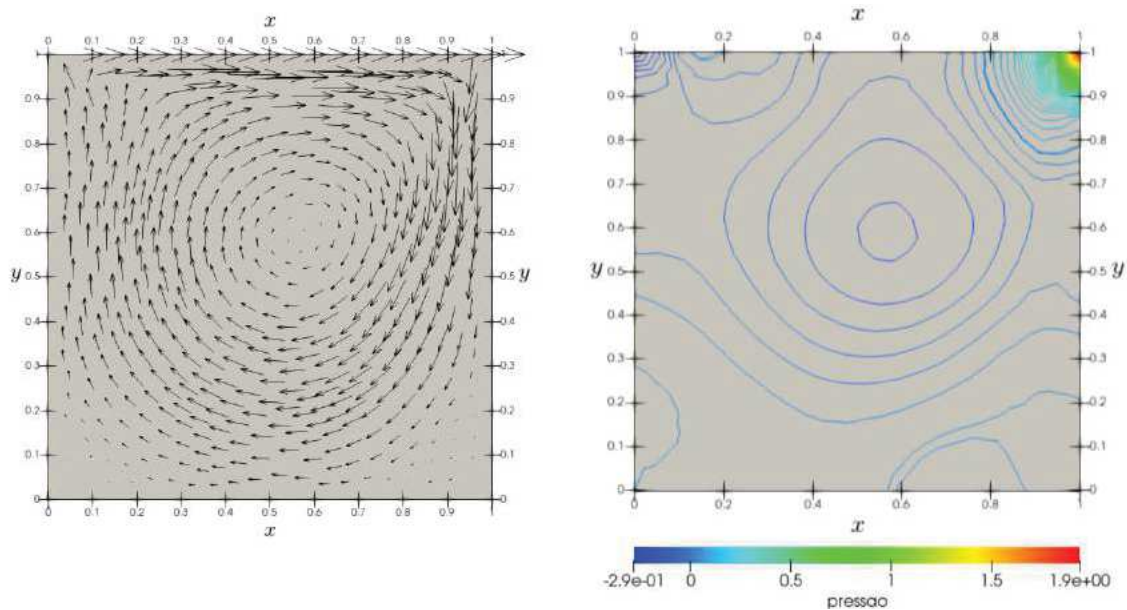


Figura 73 – Campos de velocidade e de pressão para $Re = 10000$.

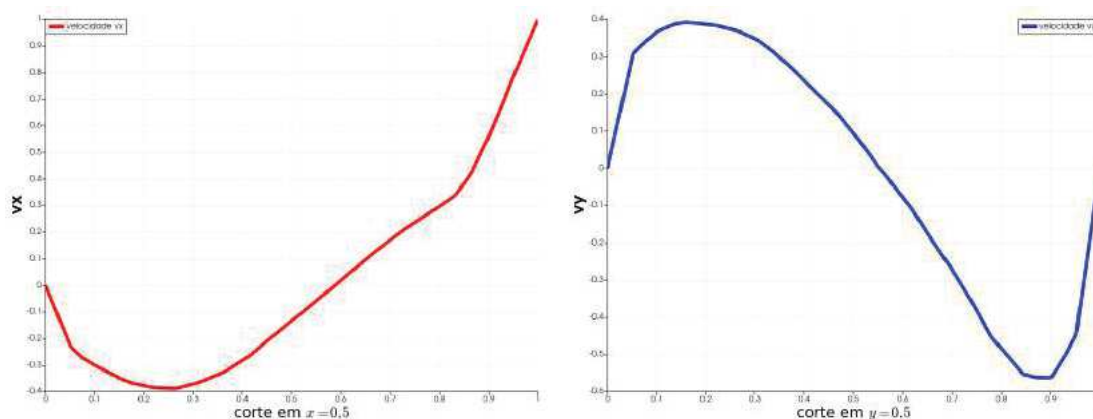


Figura 74 – Valores das componentes vx e vy para $Re = 10000$.

E, por fim, a Figura 75 exibe comparações dos perfis das componentes da velocidade para cada um dos números de Reynolds apresentados.

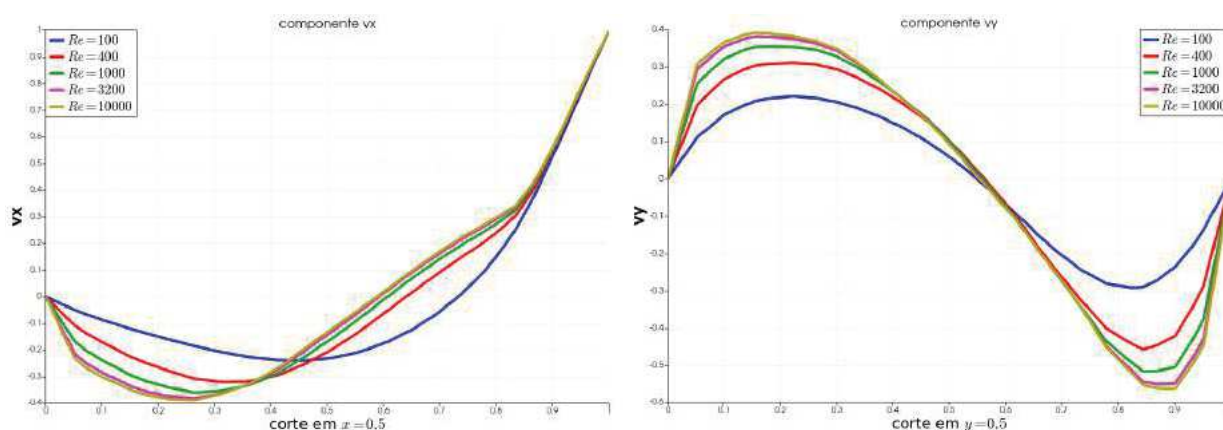


Figura 75 – Comparação das componentes da velocidade para diversos Reynolds.

4.5.3.2 Implementação em estado transiente

O problema de circulação em cavidade transiente pode ser modelado pelas equações de conservação da quantidade de movimento linear acrescidas do termo de variação temporal, $\partial\phi/\partial t$, e pela equação de conservação da massa, ou seja, pelo seguinte conjunto de equações:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{V} = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} u) - \nabla \cdot (\mu \nabla u) = -\frac{\partial p}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} v) - \nabla \cdot (\mu \nabla v) = -\frac{\partial p}{\partial y}, \end{cases} \quad (4.117)$$

com $u = vx$ e $v = vy$. Assim como no caso estacionário, a implementação segue o algoritmo da Seção 4.4.10, basicamente sendo aplicado a cada passo de tempo. A geometria e as condições de contorno são idênticas ao caso estacionário. A condição inicial corresponde

às componentes da velocidade dadas por $vx = vy = 0$ no interior da cavidade. A malha deste exemplo possui 4064 elementos triangulares lineares. O esquema de interpolação dos termos difusivos é linear e para os termos convectivos é upwind. Os resultados apresentados a seguir são para o número de Reynolds $Re = 3200$ para diversos instantes de tempo. O tempo máximo de execução foi de 5s com um passo de tempo de 0,01s.

Para ilustração deste exemplo, as Figuras 76, 77 e 78 ilustram os campos de velocidade em diversos instantes de tempo.

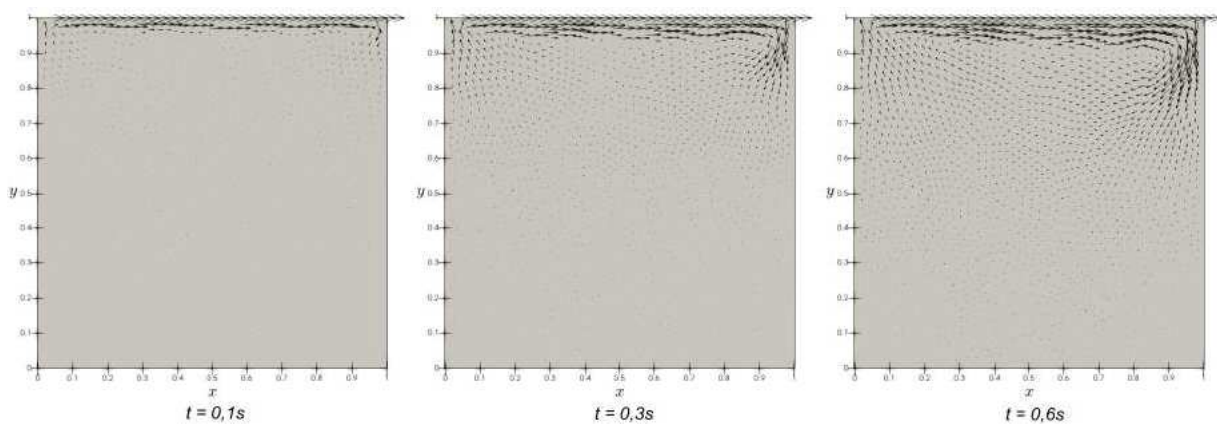


Figura 76 – Campo de velocidades para $Re = 3200$, $t = 0,1s$, $t = 0,3s$ e $t = 0,6s$.

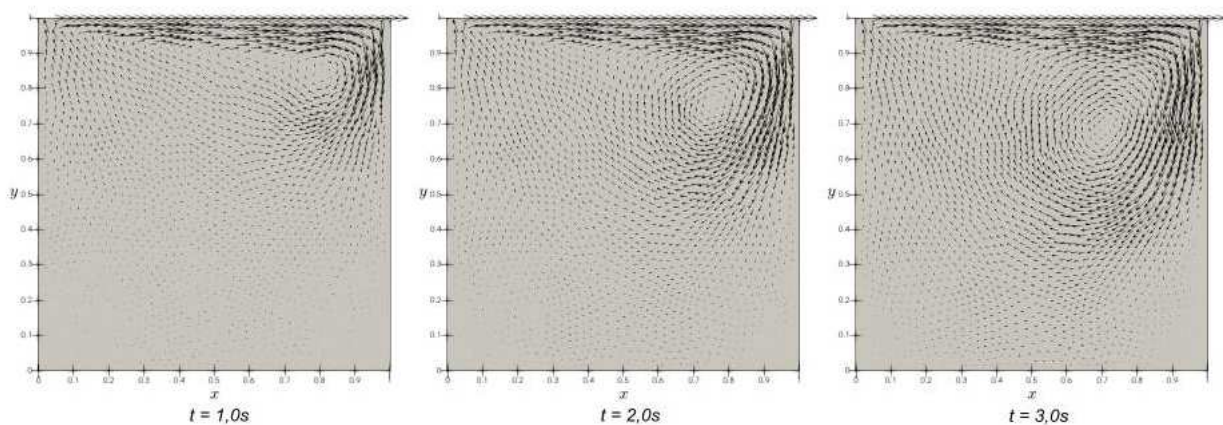


Figura 77 – Campo de velocidades para $Re = 3200$, $t = 1,0s$, $t = 2,0s$ e $t = 3,0s$.

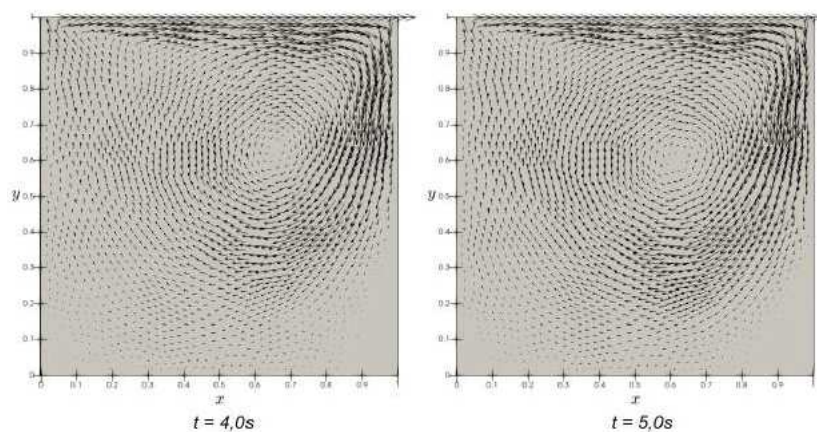


Figura 78 – Campo de velocidades para $Re = 3200$, $t = 4,0s$ e $t = 5,0s$.

A Figura 79 exibe os valores das componentes v_x e v_y em diversos instantes de tempo ao longo das linhas $x = 0,5$ para a componente v_x e $y = 0,5$ para a componente v_y . Por fim, as Figuras 80, 81 e 82 exibe contornos para o campo de pressão ao longo de

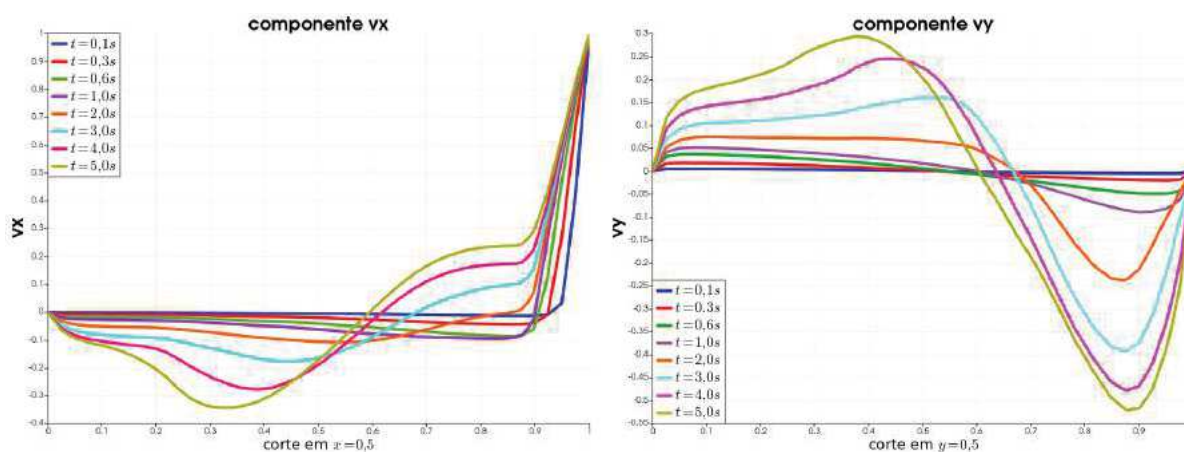


Figura 79 – Componentes v_x e v_y para $Re = 3200$.

diversos instantes de tempo.

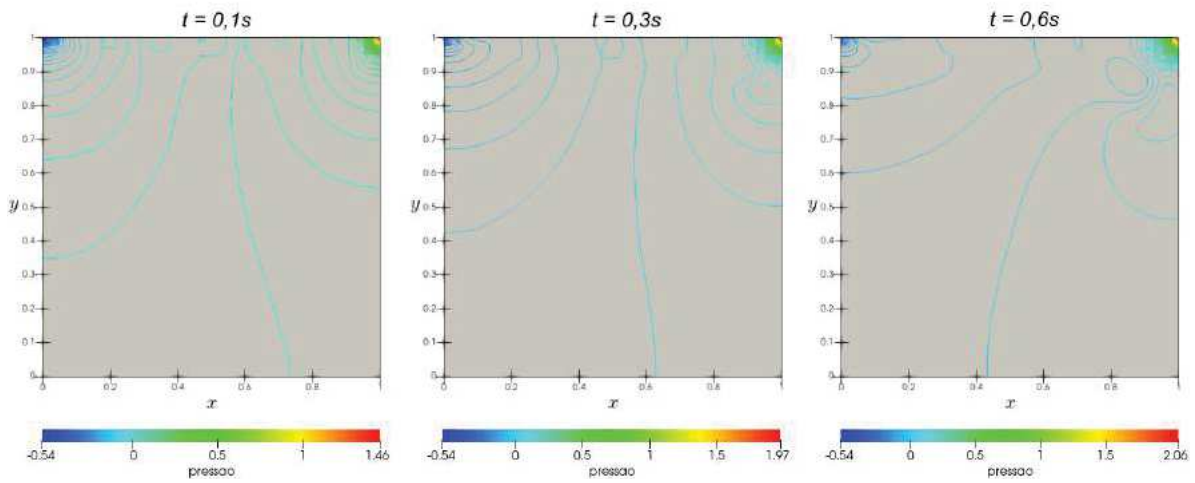


Figura 80 – Contornos da pressão para $Re = 3200$.

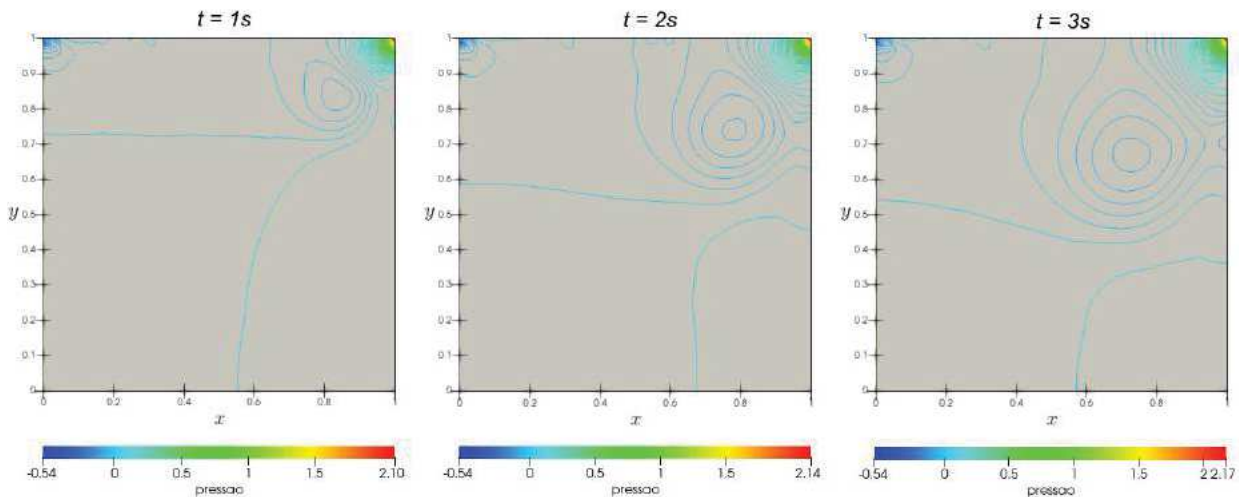


Figura 81 – Contornos da pressão para $Re = 3200$.

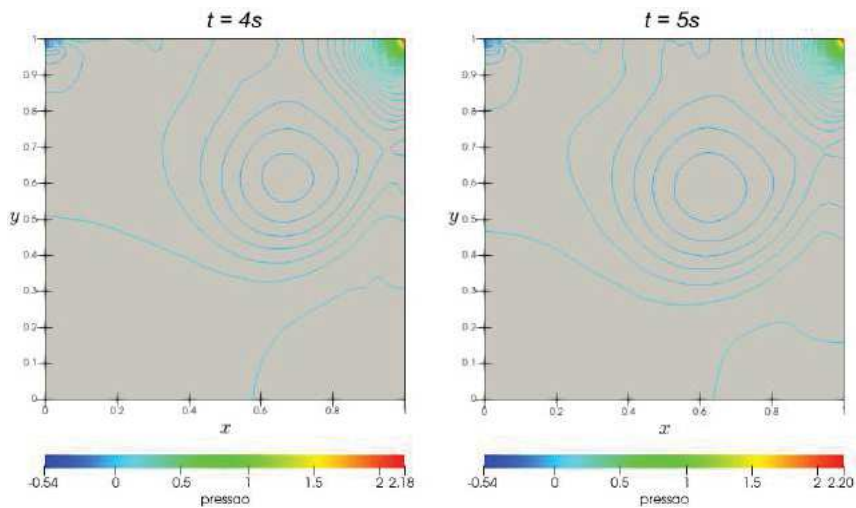


Figura 82 – Contornos da pressão para $Re = 3200$.

4.5.4 Problema de convecção natural em cavidade

O problema de convecção natural em cavidade tem aplicações como no aquecimento ou resfriamento de equipamentos industriais, ventilação com radiadores em ambientes internos, resfriamento de componentes elétricos e reatores e em trocadores de calor (Garooi et al., 2014). Sua fundamentação é baseada no empuxo e na troca de calor por convecção, na qual as regiões em que o fluido está mais aquecido tem sua densidade reduzida e, conseqüentemente, se suspende, ao passo e as regiões mais frias tem densidade mais elevada e tendem ir para regiões inferiores devido a presença da gravidade. Alguns trabalhos relacionados a este problema podem ser encontrados em Markatos e Pericleous (1984), Botella e Peyret (1998), Talebi et al. (2010), Barakos et al. (1994), Bruneau e Saad (2006a), Garooi et al. (2014) e Patterson e Imberger (1980).

O modelo matemático do problema de convecção natural em cavidade envolve o emprego das equações de conservação da quantidade de movimento linear, com a equação correspondente a componente da velocidade na direção da aceleração da gravidade acrescida de um termo de empuxo, sendo neste trabalho empregada a aproximação de Boussinesq. Além da equação de conservação da massa, a equação da energia também é empregada. Assim, a formulação pode ser resumida pelo seguinte conjunto de equações:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{V} = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} u) - \nabla \cdot (\mu \nabla u) = -\frac{\partial p}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} v) - \nabla \cdot (\mu \nabla v) = -\frac{\partial p}{\partial y} + S_b \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho T) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} T) - \nabla \cdot (k \nabla T) = 0, \end{cases} \quad (4.118)$$

onde S_b corresponde a aproximação de Boussinesq (Ferziger e Peric, 2002; Bejan e Kraus, 2003), dada por

$$S_b = \rho g \beta (T - T_{ref}) / c, \quad (4.119)$$

onde g é a aceleração da gravidade, β o coeficiente de expansão térmica e T_{ref} uma temperatura de referência.

A implementação segue o algoritmo da Seção 4.4.10, onde a cada passo de tempo, após a solução do acoplamento pressão-velocidade, é resolvida a equação da energia a partir do campo de velocidades obtido. Um esboço da malha utilizada, com 2592 elementos triangulares e das condições contorno pode ser visto na Figura 83 em que a geometria é um quadrado unitário.

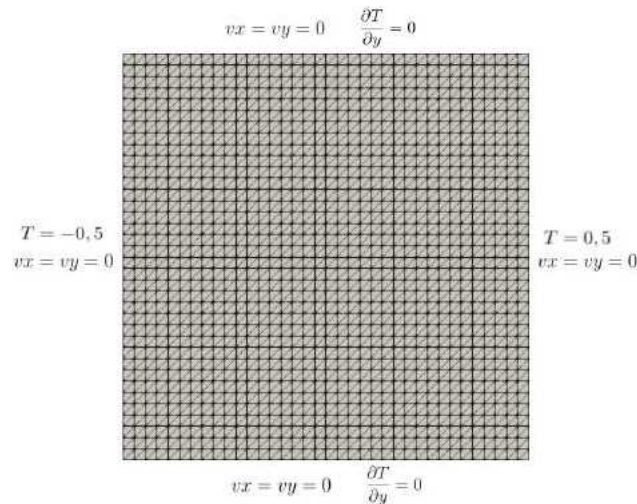


Figura 83 – Malha e condições de contorno para o problema de convecção natural.

As condições iniciais são $v_x = v_y = 0$ para a velocidade e $T = 0$ para a temperatura. Um valor característico deste tipo de problema, conhecido como número de Raleigh pode ser definido por

$$Ra = \frac{\rho^2 g \beta (T_h - T_c)}{\mu k}, \quad (4.120)$$

com $T_h = 0,5$ e $T_c = -0,5$. Usando os valores $\rho = 1$, $g = 10$, $\beta = 1,2 \times 10^{-4}$, $\mu = 1 \times 10^{-2}$ e $k = 1 \times 10^{-3}$, fornecem o valor de $Ra = 1,2 \times 10^7$ para o número de Raleigh, empregado na ilustração deste problema. O tempo máximo de execução é de 50 segundos com um passo de tempo de 0,2 segundos.

O conjunto das Figuras de 84 a 90 ilustram a evolução das isotermas e do campo de temperaturas para diversos instantes de tempo.

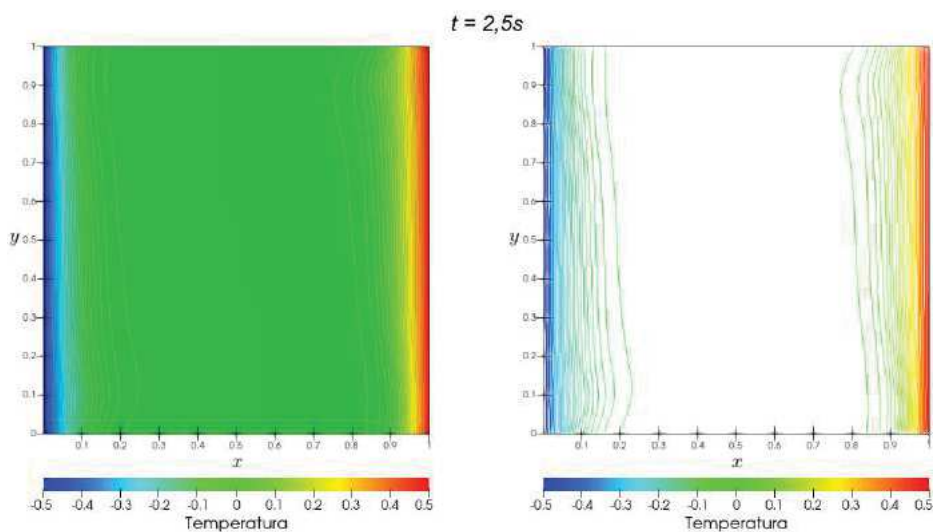


Figura 84 – Isotermas e campo de temperaturas, $t = 2,5s$.

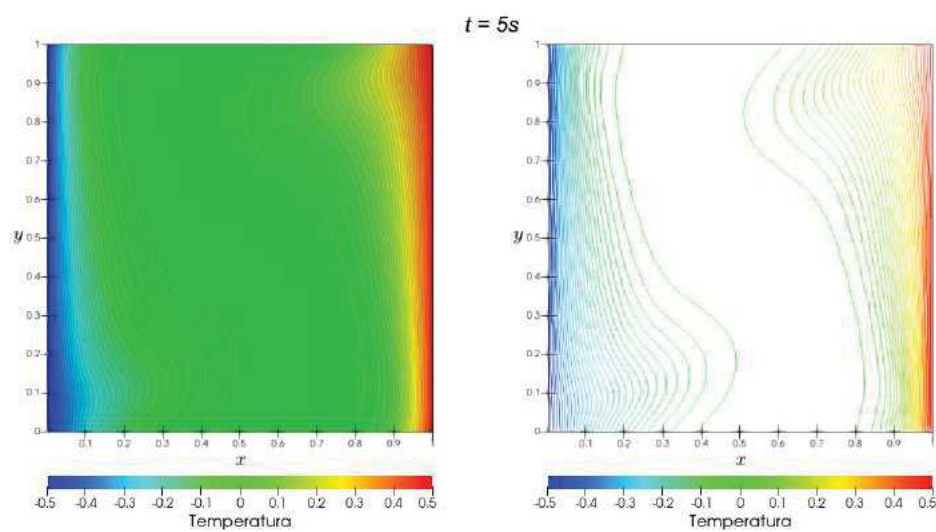


Figura 85 – Isotermas e campo de temperaturas $t = 5s$.

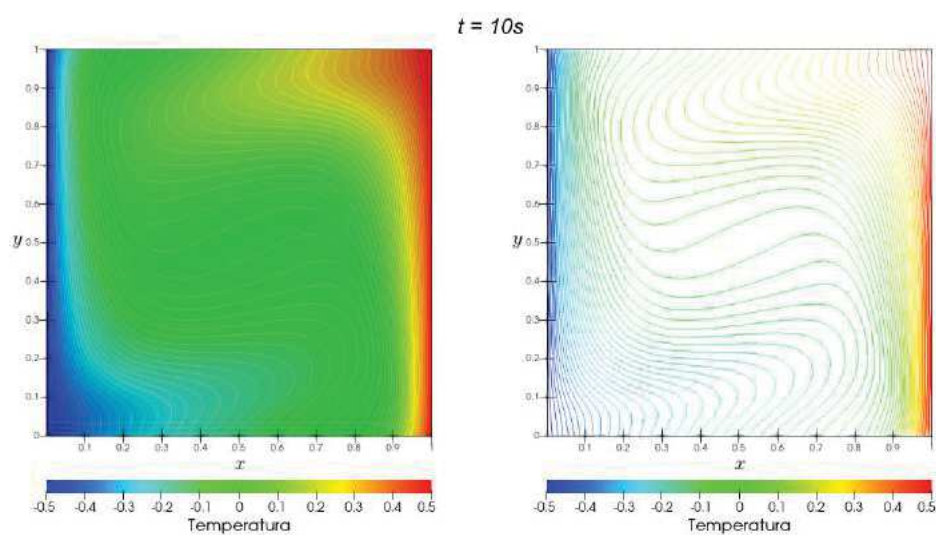


Figura 86 – Isotermas e campo de temperaturas, $t = 10s$.

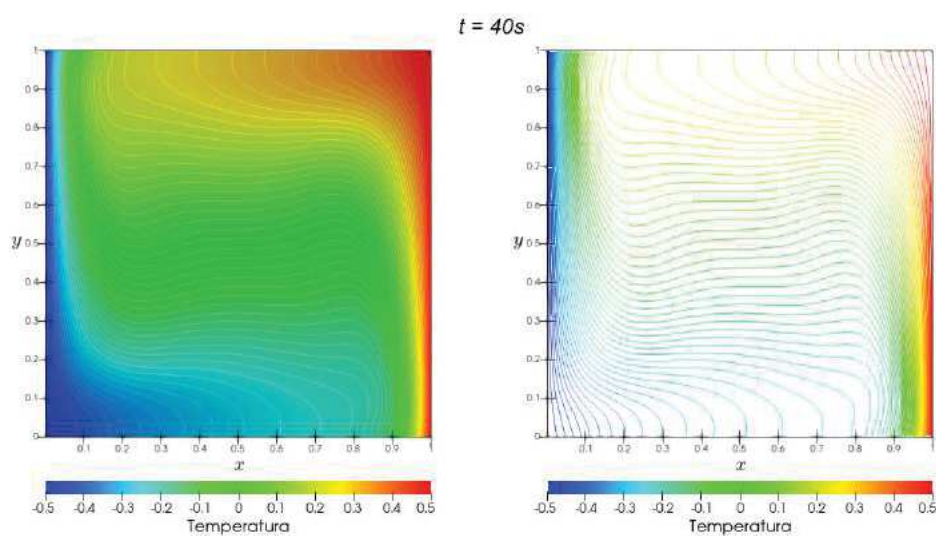
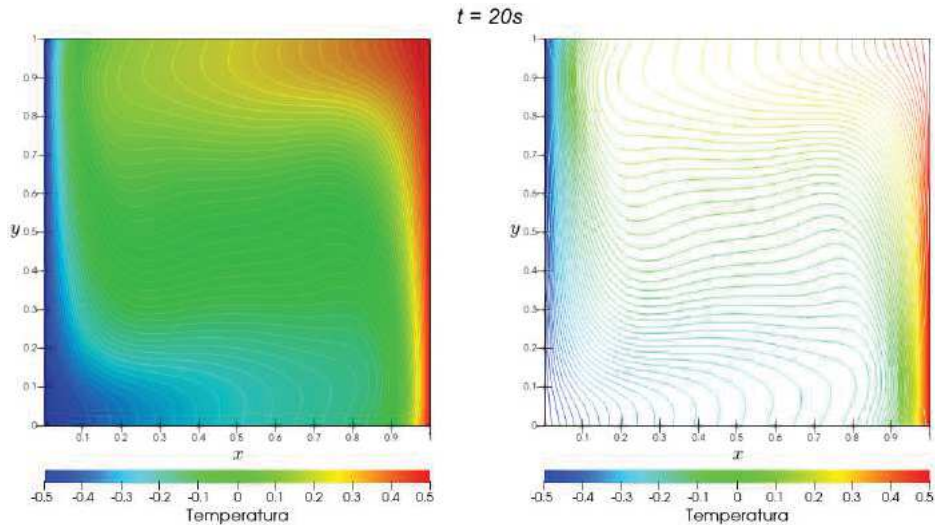
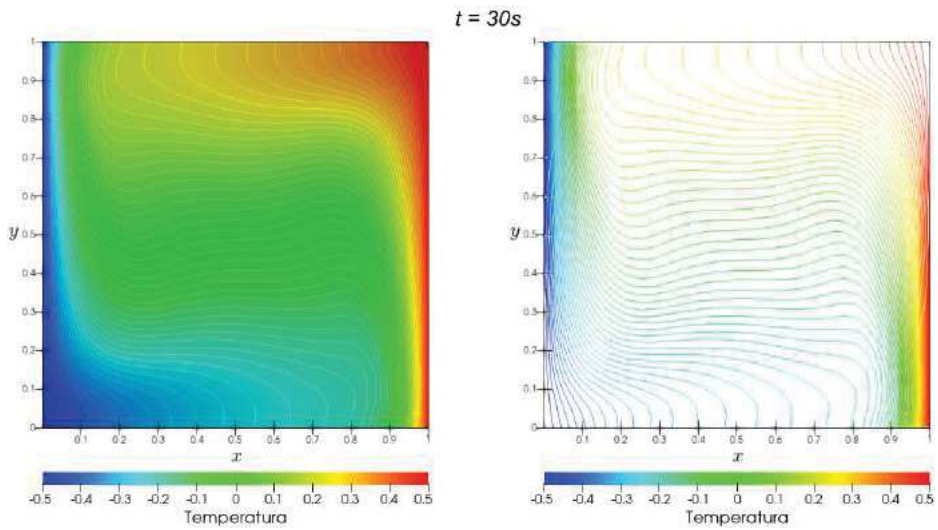
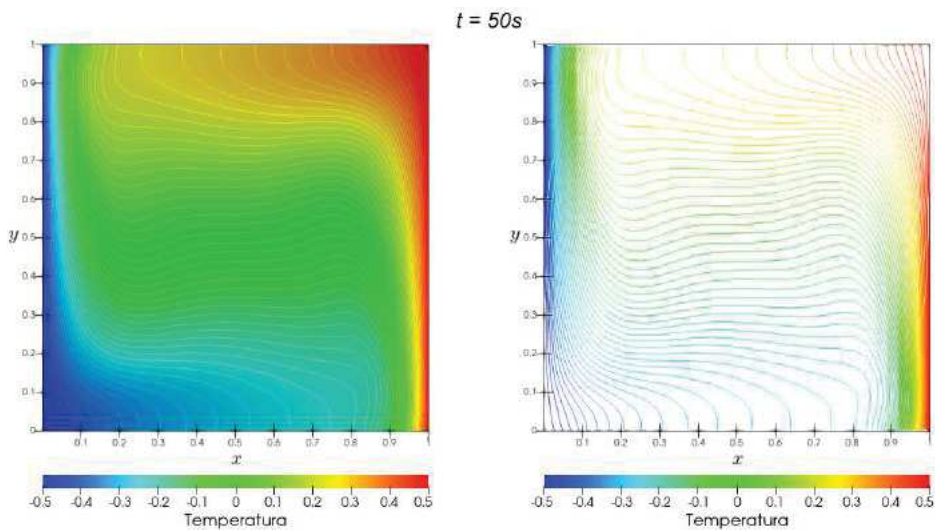


Figura 89 – Isotermas e campo de temperaturas, $t = 40s$.

Figura 87 – Isothermas e campo de temperaturas, $t = 20s$.Figura 88 – Isothermas e campo de temperaturas, $t = 30s$.Figura 90 – Isothermas e campo de temperaturas, $t = 50s$.

A Figura 91 exibe os valores das componentes v_x e v_y da velocidade ao longo de cortes passando pelo centro do domínio.

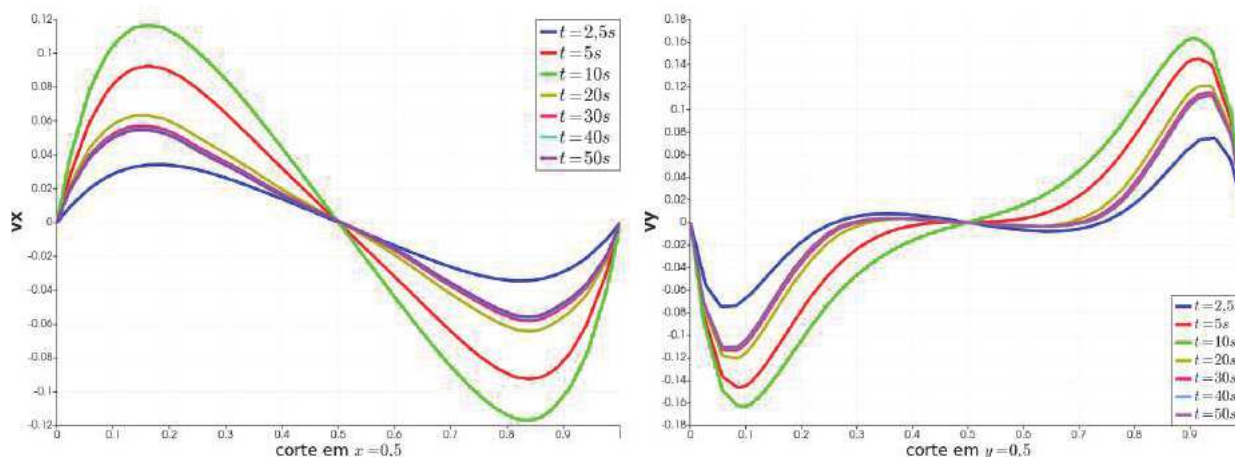


Figura 91 – Valores das componentes da velocidade.

4.5.5 Problema de mudança de fase pelo método da entalpia-porosidade

O método da entalpia-porosidade para problemas de mudança de fase já foi amplamente apresentado e estudado em Odone et al. (2013), Odone et al. (2015) e Odone et al. (2014). Também pode ser encontrado em trabalhos como Voller et al. (1985), Voller e Prakash (1987b), Voller et al. (1987), Voller e Prakash (1987a), Voller e Prakash (1987c), Brent et al. (1988), Voller et al. (1989) e Rady e Mohanty (1996). Nesta técnica, a região de transição de fase, conhecida como zona mista (ou zona mushy) é modelada como um meio pseudo-poroso. Nesta região, portanto, a porosidade fica definida em termos de uma quantidade chamada fração líquida, um indicativo percentual do quanto uma determinada célula computacional encontra-se em estado líquido ou sólido. O objetivo deste modelo é fazer com que as velocidades calculadas pelas equações de movimento se anulem a medida que o material se solidifica ou que forneçam valores adequados quando o material se funde. A implementação deste método consiste na adição de termos fonte nas equações de conservação da quantidade de movimento baseados na lei de Darcy e na equação de Carman-Kozeny.

Para escrever o modelo matemático, assume-se que o material em estado líquido se comporta como um fluido newtoniano incompressível, propriedades termofísicas constantes dentro das faixas de temperatura abordadas, exceto para a densidade, na qual sua variação com a temperatura será tratada por meio da aproximação de Boussinesq. Com estas hipóteses, o conjunto de equações diferenciais que modelam um processo de mudança de

fase pelo método da entalpia-porosidade pode ser escrito como

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (4.121)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} u) - \nabla \cdot (\mu \nabla u) = -\frac{\partial p}{\partial x} - Au \quad (4.122)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} v) - \nabla \cdot (\mu \nabla v) = -\frac{\partial p}{\partial y} - Av + S_b \quad (4.123)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} h) - \nabla \cdot (\alpha \nabla h) = S_h. \quad (4.124)$$

O termo S_b presente na Equação (4.123) corresponde a aproximação de Boussinesq, conforme ilustrado pela Equação (4.119).

No método da entalpia porosidade, o calor latente é levado em consideração na equação da energia atribuindo-se um valor nodal para o calor latente de acordo com a temperatura da célula. Durante a mudança de fase, o calor latente é ajustado para levar em conta a absorção ou liberação do calor latente por meio de um termo fonte na equação da energia.

A entalpia total de um material pode ser escrita como a soma da entalpia sensível com o conteúdo do calor latente. A entalpia sensível pode ser escrita como (Voller e Prakash, 1987a)

$$h = \int_{T_{ref}}^T c(\tau) d\tau = c(T - T_{ref}) \quad (4.125)$$

considerando-se que o calor específico c é constante e que T_{ref} é a temperatura de referência. O conteúdo do calor latente ou calor latente total é definido como uma função da temperatura, $\Delta H = f(T)$ restrito ao intervalo $0 < \Delta H < L$. A forma do termo fonte S_h na equação (4.124), pode ser obtida substituindo-se a relação (4.125) na equação da energia escrita para a entalpia total, $H = h + \Delta H$, ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} H) - \nabla \cdot (k \nabla T) = 0 \quad (4.126)$$

Operacionalizando-se a Equação (4.126) de modo a tornar a entalpia sensível sua variável principal, a Equação (4.124) e a expressão de S_h são obtidos, sendo o termo fonte dado por

$$S_h = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho \Delta H) - \nabla \cdot (\rho \vec{V} \Delta H) \quad (4.127)$$

O calor latente total tem valor igual a 0 quando o material é sólido a temperatura $T = T_m$ (a temperatura de fusão) no caso de mudança de fase isotérmica, ou quando a temperatura é $T = T_s$, temperatura na qual o material completa sua solidificação no caso de mudança de fase em uma faixa de temperaturas; o calor latente total tem valor igual a L (o calor latente de fusão) quando o material é líquido à temperatura $T = T_m$ no caso de mudança isotérmica ou $T = T_l$, temperatura na qual a solidificação se inicia, no caso de mudança não isotérmica.

Assim, o calor latente total pode ser calculado no caso de mudança de fase não isotérmica por

$$\Delta H = L \times f_L \quad (4.128)$$

onde f_L é uma quantidade definida como fração líquida da célula, representando um percentual do quanto da célula é ocupada pelo material no estado líquido que, no caso de mudança de fase não isotérmica é calculada por meio de uma relação com a temperatura. Entre diversos perfis possíveis, adota-se neste trabalho a relação linear

$$f_L = \begin{cases} 0, & \text{se } T < T_s \quad (\text{sólido}) \\ \frac{T - T_s}{T_l - T_s}, & \text{se } T_s \leq T \leq T_l \quad (\text{zona mista}) \\ 1, & \text{se } T > T_s \quad (\text{líquido}) \end{cases} \quad (4.129)$$

Com isso, da relação (4.129) obtêm-se:

$$\begin{cases} \text{se } f_L = 0, & (\text{sólido}), \quad T \leq T_s \quad \text{ou} \quad T < T_m \quad (\Delta H = 0) \\ \text{se } 0 < f_L < 1, & (\text{zona mushy}), \quad T_s < T < T_l \quad (0 < \Delta H < L) \quad \text{ou} \quad T = T_m \\ \text{se } f_L = 1, & (\text{líquido}), \quad T \geq T_l \quad \text{ou} \quad T > T_m \quad (\Delta H = L) \end{cases}$$

Observa-se que o caso de mudança de fase isotérmica pode ser considerado um caso particular da mudança não isotérmica, ou seja, quando $T_l = T_s = T_m$, levando a

$$f_L = \begin{cases} 0, & \text{se } T < T_m \quad (\text{sólido}) \Rightarrow \Delta H = 0 \\ 1, & \text{se } T > T_m \quad (\text{líquido}) \Rightarrow \Delta H = L \end{cases} \quad (4.130)$$

Quando $T = T_m$, tem-se $0 < \Delta H < L$ e esta região é definida como a interface sólido-líquido. Da relação (4.128) também pode-se obter a fração líquida por meio de

$$f_L = \frac{\Delta H}{L} \quad (4.131)$$

ou seja, dada uma distribuição de temperatura, pode-se obter a fração líquida diretamente da equação (4.131).

No método da entalpia-porosidade, as células computacionais da região de transição de fase (zona mista), ou seja, quando $0 < \Delta H < L$, são modeladas como um meio pseudo-poroso, onde a porosidade f_L diminui de 1 para 0 quando ΔH diminui de L para 0 no caso da solidificação, enquanto que ocorre o contrário na fusão. O modelo da zona *mushy* como um meio pseudo-poroso pode ser feito a partir da definição de termos fonte para as equações do movimento baseados na lei de Darcy para escoamentos em meios porosos e na equação de Karman-Kozeny. Assim, admite-se que o escoamento na zona *mushy* seja governado pela lei de Darcy:

$$\vec{V} = -\frac{K}{\mu} \nabla p \quad (4.132)$$

onde K é a permeabilidade, definida como uma função da porosidade f_L . A medida que a porosidade diminui, a permeabilidade e, conseqüentemente, as velocidades também

diminuem até o valor limite de zero a medida que a região mista se solidifica. A equação de Carman-Kozeny,

$$\nabla p = -C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3} \vec{V} \quad (4.133)$$

que pode ser derivada a partir da lei de Darcy, fornece um meio de escrever um termo fonte que tenha como efeito numérico fazer com que a zona mista tenha comportamento similar a um meio poroso. Assim, pode-se escrever os termos fonte das equações do movimento (4.122) e (4.122), Au e Av respectivamente, como

$$Au = -C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3 + q} u \quad \text{e} \quad Av = -C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3 + q} v. \quad (4.134)$$

O valor de A varia de zero a um grande valor a medida que a fração líquida f_L varia de 1 (célula completamente líquida) a 0 (célula completamente sólida) e, na prática, seu efeito numérico resulta que na região líquida os valores dos termos fonte Au e Av são nulos e as velocidades são computadas normalmente. Na região *mushy* o valor de A aumenta de modo que os termos fonte começam a dominar os termos transiente, difusivo e convectivo, fazendo com que seu comportamento se aproxime da lei de Darcy. A medida que o valor da fração líquida se aproxima de zero os termos fontes dominam completamente os demais termos das equações fazendo com que as velocidades computadas se aproximem do valor limite de zero como deve ser nas fases sólidas. Na expressão de A , equação (??), C é chamada constante da região mista cujo valor adotado nos testes aqui apresentados é $C = 1.6 \times 10^3$ e q é um valor pequeno a ser adotado cujo papel é evitar a divisão por zero no cálculo de A nesta expressão quando $f_L = 1$, tomado como $q = 1 \times 10^{-3}$.

Resumindo-se, o conjunto de equações que modelam o método da entalpia-porosidade para problemas de mudança de fase pode ser escrito como

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (4.135)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} u) - \nabla \cdot (\mu \nabla u) = -\frac{\partial p}{\partial x} - C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3 + q} u \quad (4.136)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} v) - \nabla \cdot (\mu \nabla v) = -\frac{\partial p}{\partial y} - C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3 + q} v + \rho g \beta (h - h_{ref}) / c \quad (4.137)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} h) - \nabla \cdot (\alpha \nabla h) = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho \Delta H) - \nabla \cdot (\rho \vec{V} \Delta H). \quad (4.138)$$

O exemplo numérico estudado encontra-se em [Voller e Prakash \(1987c\)](#), cujo um esboço da geometria, malha e condições de contorno são ilustrados na Figura 92.

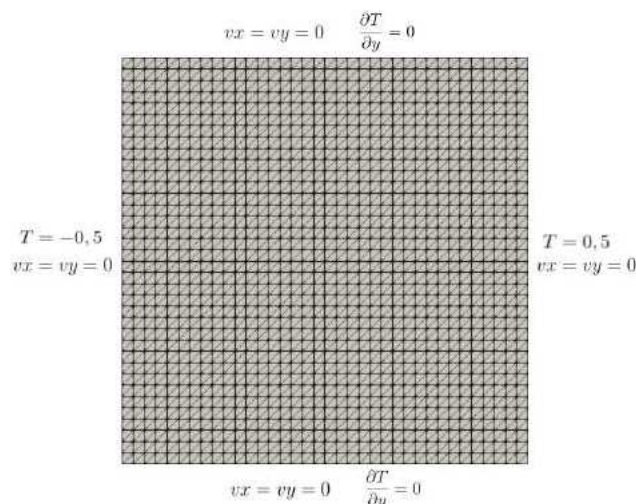


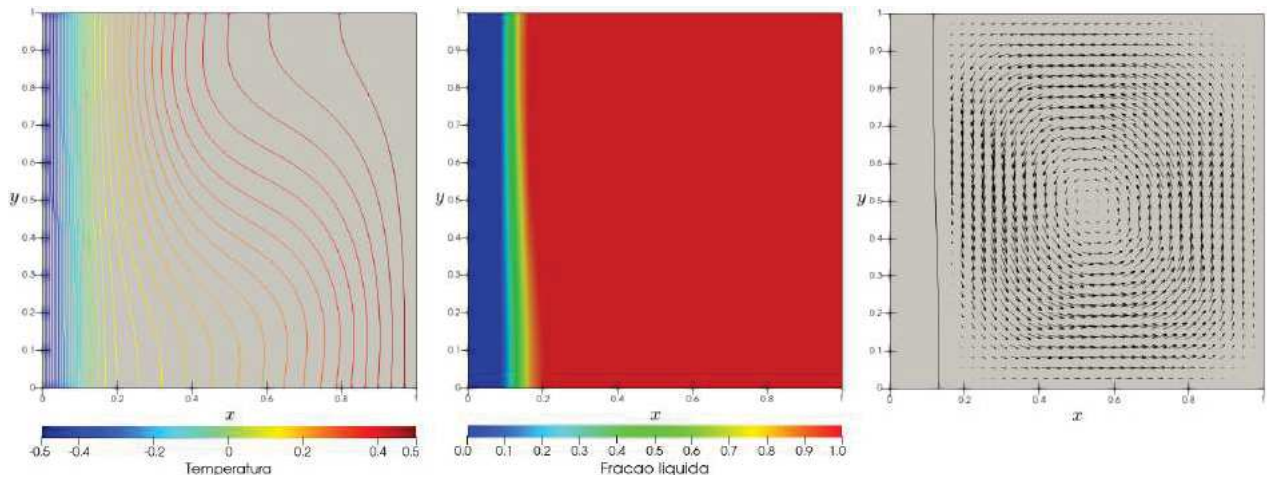
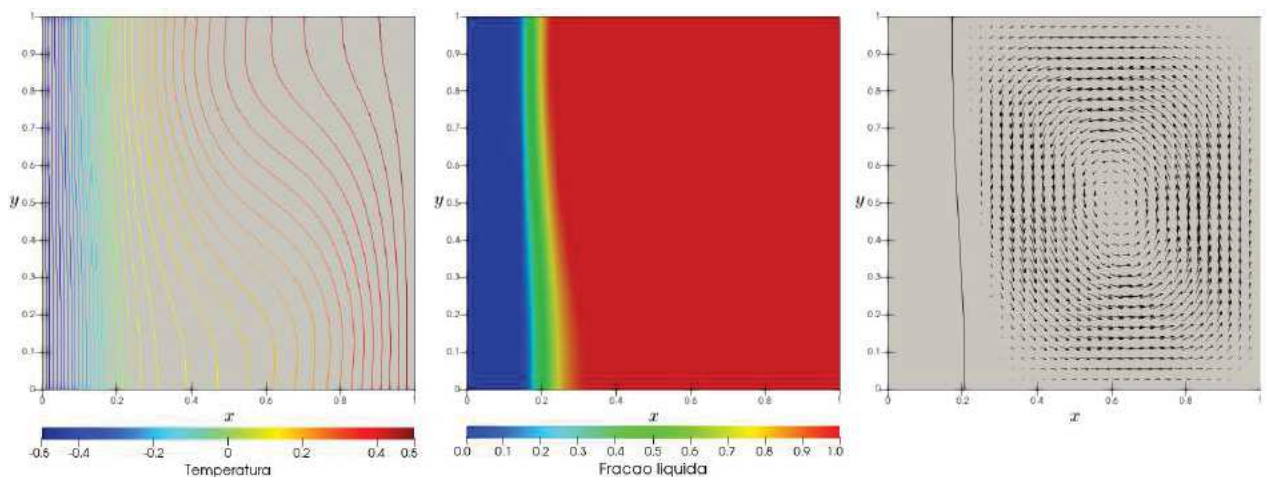
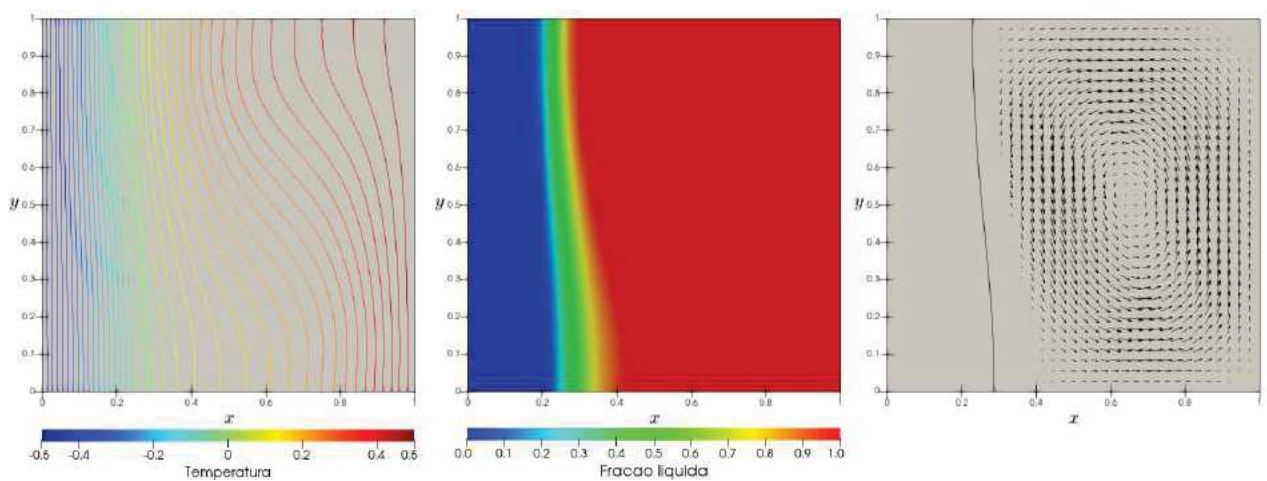
Figura 92 – Malha e condições de contorno para o problema de mudança de fase.

Trata-se de uma cavidade quadrada preenchida com um material inicialmente em estado líquido. A temperatura inicial é um valor acima de T_i , na qual a formação do sólido se inicia. No instante $t = 0$ a temperatura da parede esquerda ($x = 0$) é fixada em um valor menor que a temperatura T_s , valor na qual a formação do sólido se completa. As paredes superior e inferior da cavidade são mantidas isoladas termicamente. O processo de solidificação se inicia a partir da parede esquerda e uma zona mista pequena é formada e avança lentamente para a direita. As propriedades do material e outros parâmetros utilizados estão na Tabela 16. O tempo máximo de execução é de 1000 segundos com um

Tabela 16 – Dados para o problema de mudança de fase.

Dado	Valor	Unidade
Temperatura inicial	$T_i = 0.5$	$^{\circ}\text{C}$
Temperatura em $x = 0$	$T_C = -0.5$	$^{\circ}\text{C}$
Temperatura em $x = 1$	$T_H = 0.5$	$^{\circ}\text{C}$
Temperatura referência	$T_{ref} = 0.5$	$^{\circ}\text{C}$
Densidade	$\rho = 1$	Kg/m^3
Calor específico	$c = 1$	J/KgC
Viscosidade	$\mu = 1$	Kg/ms
Condutividade térmica	$k = 0.001$	$\text{w}/\text{m}\check{\text{C}}$
Coefficiente de expansão	$\beta = 0.01$	K^{-1}
Calor latente	$L = 5$	J/Kg
Gravidade	$g = 10$	m/s^2

passo de tempo fixo de 10 segundos. As Figuras 93, 94, 95, 96 e 97 exibem as isothermas, a fração líquida e o campo de velocidades com a curva correspondente a $f_L = 0.5$, indicando a fronteira de mudança de fase para os instantes de tempo indicados.

Figura 93 – Temperatura, fração líquida e campo de velocidades em $t = 100s$.Figura 94 – Temperatura, fração líquida e campo de velocidades em $t = 250s$.Figura 95 – Temperatura, fração líquida e campo de velocidades em $t = 500s$.

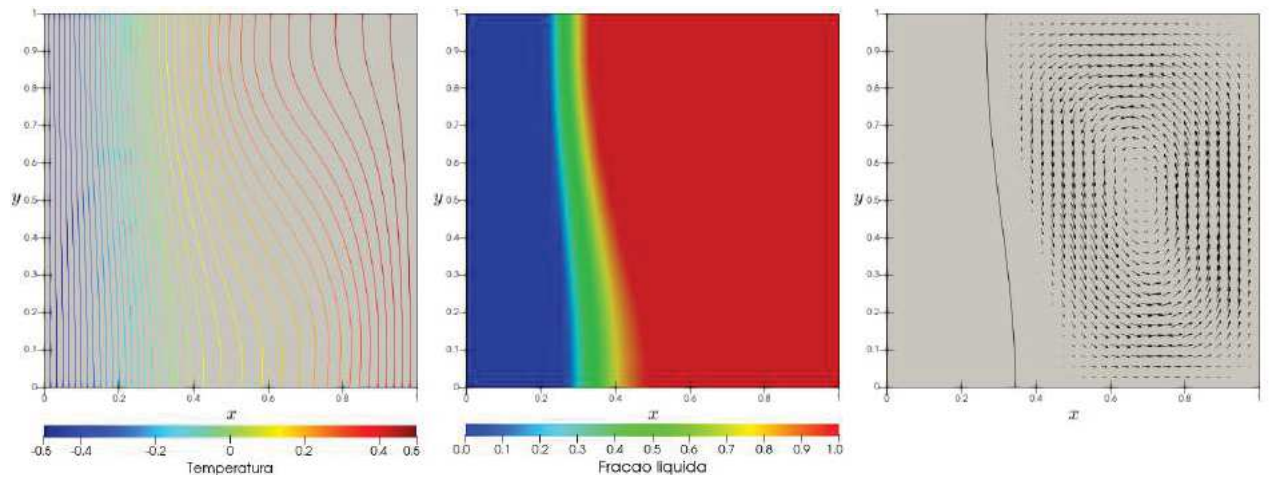


Figura 96 – Temperatura, fração líquida e campo de velocidades em $t = 750s$.

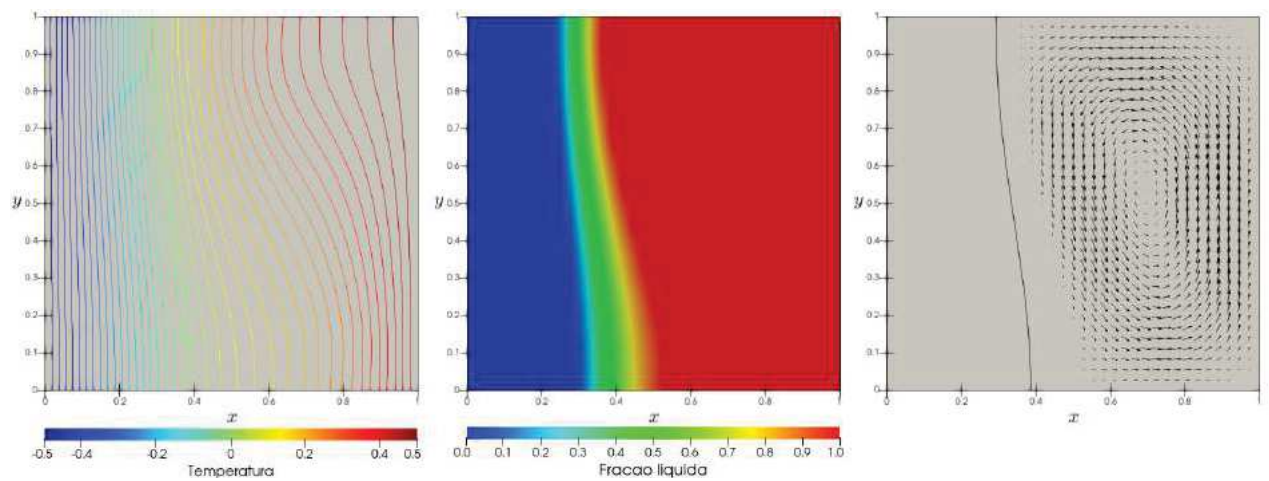


Figura 97 – Temperatura, fração líquida e campo de velocidades em $t = 1000s$.

A Figura 98 exibe as componentes da velocidade ao longo de cortes em $x = 0,5$ e $y = 0,5$.

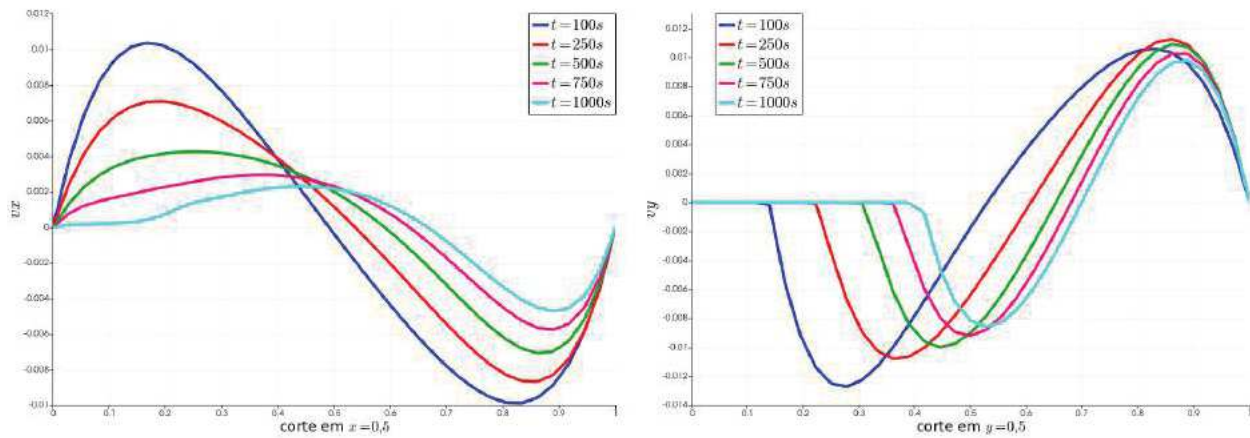


Figura 98 – Componente v_x da velocidade em diversos instantes de tempo.

Neste capítulo foi estudado o Método dos Volumes de Controle baseados em Elementos Finitos (CVFEM), uma variante do Método dos Volumes Finitos clássico para malhas não estruturadas de elementos triangulares. Sua principal característica consiste na combinação da flexibilidade geométrica do Método dos Elementos Finitos com propriedade conservativa do Método dos Volumes Finitos. Detalhes de sua formulação, como a construção dos volumes de controle, funções de interpolação, condições de contorno e algoritmos de resolução foram apresentados. Diversas aplicações foram ilustradas implementando a metodologia apresentada e seus resultados demonstraram sua capacidade de resolver problemas em malhas não estruturadas. Além disso, foi apresentado um método de estabilização da solução numérica empregando-se uma função de interpolação linear para o termo convectivo. Este método foi implementado no contexto do CVFEM para malhas de elementos triangulares, baseado na formulação original do SUPG por [Brooks e Hughes \(1982\)](#) para o Método dos Elementos Finitos. Os resultados desta aplicação foram bastante satisfatórios, mesmo para valores do número de Peclet de ordem elevada, algo que é impraticável se a função de interpolação linear for empregada sem nenhum tipo de estabilização.

5 O OPENFOAM E O PROBLEMA DE CARREGAMENTO DE GRANADAS

Neste capítulo apresenta-se o pacote de programas OpenFOAM, voltado a resolução de problemas gerais de mecânica do contínuo com ênfase em dinâmica dos fluidos computacional, com o intuito de aplica-lo na resolução de alguns problemas fundamentais na produção de materiais bélicos, como morteiros, mísseis e granadas de alto calibre.

5.1 Motivação

Em aplicações militares modernas, explosivos altamente energéticos e com baixa sensibilidade são desejáveis. Um dos materiais explosivos mais utilizados na manufatura de de projéteis é o TNT (ou 2,4,6-trinitro-tolueno), sendo de grande capacidade de detonação e de sensibilidade. O processo de manufatura de materiais energéticos frequentemente se utiliza do preenchimento de moldes de projéteis com material energético explosivo fundido e o posterior resfriamento do molde sobre determinadas condições para a solidificação do material fundido. Este processo é conhecido como carregamento. A Figura 99 exhibe o diagrama de um típico processo de carregamento de explosivos, no qual alguns dos principais equipamentos empregados são destacados.

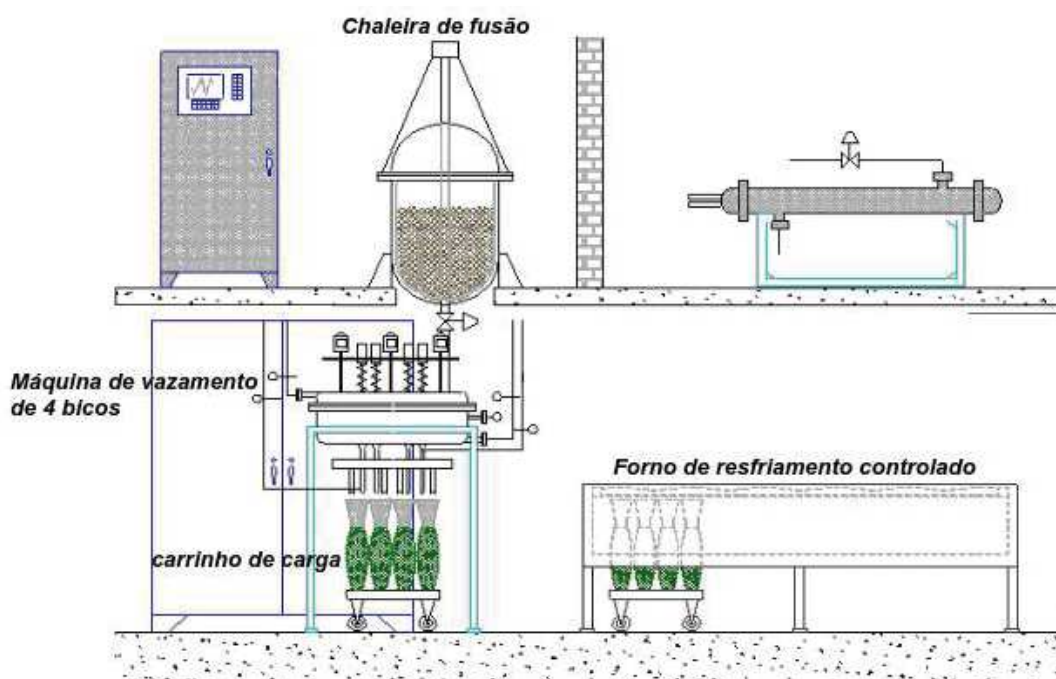


Figura 99 – Diagrama de um processo de carregamento.

O material energético fundido é armazenado em um tanque conhecido como chaleira de fusão. A partir da chaleira de fusão, o explosivo derretido é passado para um distribuidor, conhecido como máquina de vazamento de 4 bicos, responsável por vaziar o explosivo

fundido nos moldes das granadas. Os moldes estão posicionados sobre um carrinho de carga, o qual após o processo de preenchimento dos moldes é levado para o forno de resfriamento controlado, onde então são resfriados para solidificar o explosivo.



Figura 100 – Equipamentos usados no processo de carregamento.

Um procedimento típico de solidificação dos explosivos nos moldes é feito no forno de resfriamento. Este pode contar com um aparato aquecedor que deve ser posicionado na porção superior do projétil. O objetivo é manter o explosivo derretido nesta parte enquanto as partes inferiores do projétil são resfriadas de algum modo, como, por exemplo, com água ou ar. A Figura 101 exibe como este procedimento pode ser realizado. A ideia é obter um perfil de solidificação de baixo para cima e a partir das laterais do projétil, controlando assim a forma da frente de solidificação.

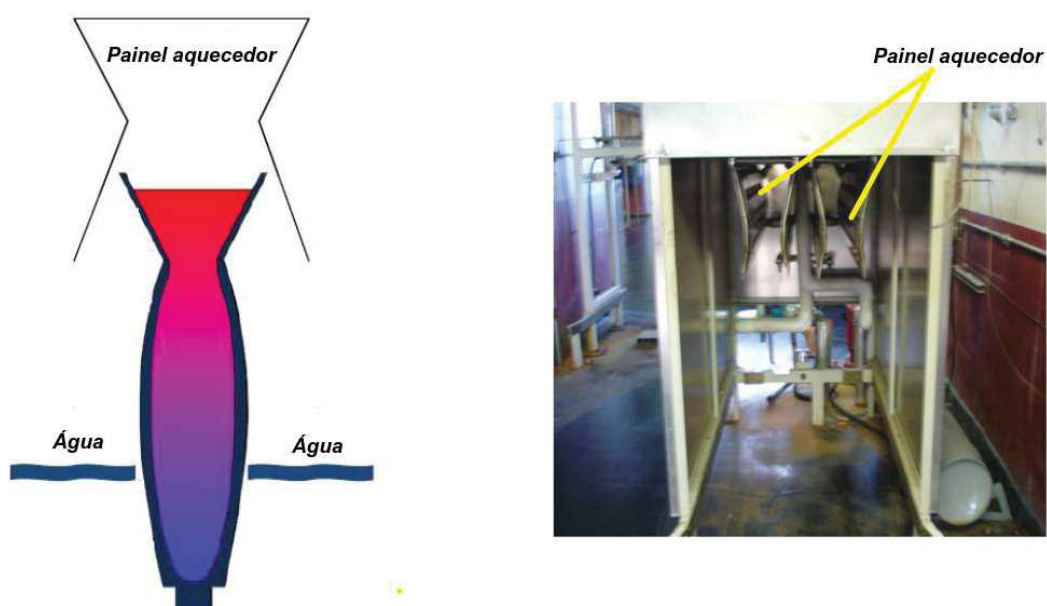


Figura 101 – Esquema de resfriamento no forno resfriador.

As condições de resfriamento aplicadas neste processo podem afetar significativamente a qualidade do produto final, sendo frequentemente observados efeitos de tensões residuais, formações de vazios, porosidades, bolhas de ar e descolamento do material solidificado de seu molde. A Figura 102 ilustra alguns destes defeitos que podem ocorrer no produto final solidificado.



Figura 102 – Alguns defeitos no explosivo final solidificado.

A ocorrência desses defeitos pode acarretar em acidentes catastróficos, pois, por exemplo, a presença de vazios no explosivo solidificado pode gerar a detonação prematura e explosões acidentais.

Além dos riscos e problemas citados, outros aspectos que podem influenciar negativamente a manufatura destes materiais são os custos financeiros e o tempo de produção. A detecção de falhas nos explosivos solidificados leva a necessidade de se fundir parcialmente ou totalmente o material para então solidificá-lo novamente. Em muitos casos pode ser necessário fazer o descarte completo do explosivo. Todos esses procedimentos podem acarretar em altos gastos financeiros além do desperdício de tempo e material. Esses custos são péssimos do ponto de vista comercial e devem, sempre que possível, serem minimizados.

Dessa forma, um dos objetivos deste capítulo é investigar o efeito da imposição de diferentes condições de resfriamento no perfil de solidificação do material energético em um molde de granada de morteiro de 81mm no intuito de minimizar alguns dos problemas citados. A implementação computacional destes testes será realizada por meio do pacote de código OpenFOAM, que será discutido nas próximas sessões.

5.2 O pacote OpenFOAM

OpenFOAM (Open Field Operation And Manipulation) é um conjunto de aplicações escrito em C++ voltado para a resolução de problemas de mecânica do contínuo

(Maric et al., 2014) e, em especial, para problemas de dinâmica dos fluidos. Possui licença GPLv3 que é aquela que permite que seu usuário o utilize e modifique sem incorrer em qualquer infração de direito autoral.

Sua robusta base de código contém módulos dedicados a atividades de pré-processamento, processamento e pós-processamento aplicáveis a diversos tipos de problemas computacionais. Também possui interfaces com outros programas, como o gerador de malhas **gmsh** e com o **ParaView** para pós-processamento dos resultados.

Historicamente, o OpenFOAM foi criado por Henry Weller no *Imperial College London* em 2004, juntamente com Chris Greenshields e Mattijs Janssens que fundaram a empresa OpenCFD Ltd., e tornaram este código aberto. Nos anos seguintes, a empresa dedicou-se a distribuir e realizar a manutenção do software. Em 2011, a OpenCFD foi adquirida pela Silicon Graphics Group (SGI), e esta foi adquirida pelo grupo ESI em 2012 (Chen et al., 2014). Na época da aquisição da OpenCFD pela SGI, foi criada a OpenFOAM Foundation, com o propósito de manter o código do software aberto e distribuí-lo ao público em geral. As versões produzidas pela ESI podem ser encontradas no site *openfoam.com*, enquanto que as versões lançadas pela OpenFOAM Foundation podem ser encontradas em *openfoam.org* (OpenFOAM, 2019).

Para a resolução de um problema através do OpenFOAM, é preciso criar um diretório (chamado de diretório de caso, ou *case directory*), com os seguintes sub-diretórios: *0*, *constant* e *system*. Em *0*, encontram-se as descrições das condições iniciais e de contorno do problema. Em *constant*, encontram-se informações da discretização do problema, como dados da malha (quando esta é fixa, no diretório *polymesh*) e propriedades de materiais (viscosidade, condutividade térmica, densidade, etc.). Em *system*, encontram-se configurações inerentes aos métodos numéricos, como o passo de tempo da simulação, o número de iterações, os métodos de discretização e de resolução dos sistemas lineares, e arquivos com informações de pré e pós-processamento, como a geração de malha e de gráficos. Durante a etapa de pré-processamento, todo este diretório de caso deve ser montado cuidadosamente, de modo a descrever corretamente a situação a ser interpretada pelo *solver* escolhido. Durante a etapa de processamento, o solver preencherá este diretório com outros diretórios, numerados de acordo com o passo de tempo para problemas transientes. A Figura 103 ilustra a estrutura típica de um diretório de caso que deve ser criada pelo usuário.

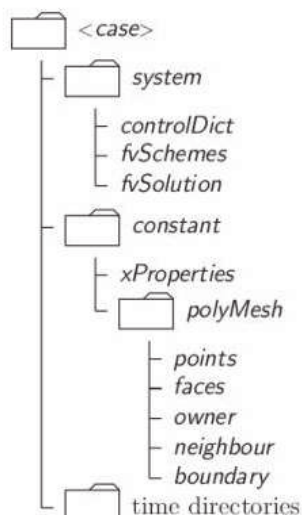


Figura 103 – Estrutura típica de um diretório de caso no OpenFOAM.

No OpenFOAM, *solvers* nada mais são que aplicações construídas com base nas suas bibliotecas cuja finalidade é receber como entrada os dados do diretório de caso e resolver um problema de acordo com sua descrição. Podem ser nativos, sendo distribuídos na instalação do pacote, ou serem criados e compartilhados entre seus usuários. Por ser uma plataforma de código aberto incentiva-se que os usuários criem e compartilhem seus próprios *solvers*. Toda instalação do OpenFOAM conta com um grande acervo de *solvers* nativos, capazes de resolver diversos casos de problemas da mecânica do contínuo: escoamentos incompressíveis, turbulentos, e supersônicos, tensões e deformações em materiais elásticos, combustão em motores alternativos, escoamentos provocados por rompimento de barragens (*dam breaking*), e até mesmo problemas de finança, como a Equação de Black-Scholes. Esta multiplicidade de aplicações decorre da flexibilidade deste código em permitir ao usuário a construção de *solvers* para a resolução de problemas diversos através da "montagem" adequada de seus módulos.

Geralmente, por serem específicos para os problemas que pretendem resolver, uma das etapas importantes de pré-processamento no OpenFOAM é justamente escolher o *solver* mais adequado para dado o problema, conforme as considerações feitas na modelagem. Sua escolha também influencia diretamente na estrutura do diretório caso, visto que o *solver* espera ler este de uma maneira bem específica.

No geral, os *solvers* são construídos de maneira a permitir que haja flexibilidade em seu uso. Por exemplo, a escolha dos métodos de discretização a serem utilizados num problema é feita inteiramente pelo usuário em *system/fvSchemes*, um arquivo com formato específico chamado **dicionário** (dictionary). Estes dicionários possuem uma sintaxe bem-estruturada, que depende da informação que disponibilizam. Por exemplo, o arquivo que descreve as condições iniciais e de contorno do campo de velocidade tem uma estrutura específica, enquanto os arquivos que descrevem a malha possuem

outra sintaxe. Internamente, a plataforma possui bibliotecas com a função de ler e escrever dicionários, realizando todas as operações de *input* e *output* necessárias de forma automatizada. Similarmente, a escolha dos métodos de resolução dos sistemas lineares do problema é também feita pelo usuário no dicionário em *system/fvSolutions*. Há ainda outras bibliotecas frequentemente presentes nos *solvers* da plataforma, como a *fvOptions*, a *thermophysicalProperties*, e bibliotecas dedicadas à modelagem de turbulência, cujo objetivo é justamente ampliar a variedade de problemas que um *solver* pode resolver. Por exemplo, um *solver* que trate problemas com turbulência normalmente inclui tratamentos do tipo *Reynolds-averaged simulation*, *large-eddy simulation*, $k - \epsilon$, $k - \omega$.

O OpenFOAM possui duas aplicações nativas dedicadas à geração de malhas. São elas o **blockMesh** e o **snappyHexMesh**. O primeiro possibilita a criação de malhas estruturadas com elementos hexaédricos enquanto que o *snappyHexMesh* é adequado para a criação de malha em torno de corpos, como na geração de malhas para o estudo de escoamento de ar em aerofólios ou no desempenho aerodinâmico de veículos. Além disto, possui, em sua instalação, programas para importar malhas geradas em outros *softwares* para o diretório de caso, como o *gmsH* e o *Fluent* (*gmsHToFoam* e *fluentMeshToFoam*, respectivamente). Em problemas de malha fixa, todas as informações pertinentes à malha encontram-se no diretório *constant/polyMesh*, organizada em uma série de dicionários, como mostrado na Figura 103. Uma particularidade relacionada ao tratamento de geometrias e malhas é que o OpenFOAM é construído de modo que toda malha e geometria a serem utilizadas com seus *solvers* devem ser em três dimensões. Soluções bidimensionais são possíveis graças a um tipo especial de condição de contorno denominada *empty*, que deve ser atribuída em planos cuja direção não se deseja ser levada em conta.

5.2.1 O solver *buoyantPimpleFoam* e o módulo *solidificationMeltingSource*

Para a implementação do modelo de resfriamento de material energético em moldes de granadas descrito anteriormente, faz-se uso de duas rotinas encontradas no OpenFOAM: o solver *buoyantPimpleFoam* e o módulo *solidificationMeltingSource*.

O *buoyantPimpleFoam* é um solver para resolução de problemas de escoamento com transferência de calor onde a presença dos efeitos de empuxo e convecção natural podem ser levados em conta. A implementação desse solver é baseada nos algoritmos PISO e SIMPLE (Versteeg e Malalasekera, 2007), compondo um algoritmo conhecido como PIMPLE, a ser visto em detalhes mais a frente, para o tratamento do acoplamento pressão-velocidade presente nas equações de conservação da quantidade de movimento linear.

Muitos *solvers* no OpenFOAM, como no caso do *buoyantPimpleFoam*, podem ser complementados por meio do *fvOptions*. Esta é uma biblioteca que permite ao usuário adicionar novos fenômenos ao modelo básico do solver para complementar sua aplicabilidade.

Uma das funções do *fvOptions* é implementar termos fonte adicionais para as equações além permitir configurar certas condições e restrições. Uma dessas possibilidades é a configuração do *solidificationMeltingSource* para o *buoyantPimpleFoam* que implementa os termos fonte do método da entalpia-porosidade para problemas de mudança de fase (Odone et al., 2013, 2014, 2015).

5.2.2 implementação do *buoyantPimpleFoam*

O *buoyantPimpleFoam* tem como base a implementação das equações de conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia.

A equação de conservação da massa é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (5.1)$$

onde ρ é a densidade e \vec{V} o vetor velocidade do escoamento.

A equação de conservação de movimento pode ser escrita, em notação vetorial, como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) = -\nabla p + \rho \vec{g} + \nabla \cdot (2\mu_{ef} D(\vec{V})) - \nabla \left(\frac{2}{3} \mu_{ef} (\nabla \cdot \vec{V}) \right), \quad (5.2)$$

sendo p a pressão estática, \vec{g} a aceleração da gravidade, μ_{ef} a viscosidade efetiva, correspondendo a soma das viscosidades molecular e turbulenta. O tensor taxa de deformação $D(\vec{V})$ é definido por

$$D(\vec{V}) = \frac{1}{2} (\nabla \vec{V} + (\nabla \vec{V})^T), \quad (5.3)$$

Em relação aos termos correspondentes ao gradiente de pressão e as forças gravitacionais, a implementação no OpenFOAM é feita rearranjando os termos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} -\nabla p + \rho \vec{g} &= -\nabla (p_{rgh} + \rho \vec{g} \cdot \vec{r}) + \rho \vec{g} \\ &= -\nabla p_{rgh} - (\vec{g} \cdot \vec{r}) \nabla \rho - \rho \vec{g} + \rho \vec{g} \\ &= -\nabla p_{rgh} - (\vec{g} \cdot \vec{r}) \nabla \rho, \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde $p_{rgh} = p - \rho \vec{g} \cdot \vec{r}$ sendo \vec{r} um vetor posição. O trecho de código na Figura 104 representa a implementação da equação de conservação da quantidade de movimento no OpenFOAM.

```

buoyantPimpleFoam/UEqn.H C++
1 // Solve the Momentum equation
2
3 MRF.correctBoundaryVelocity(U);
4
5 fvVectorMatrix UEqn
6 (
7     fvm::ddt(rho, U) + fvm::div(phi, U)
8     + MRF.DDt(rho, U)
9     + turbulence->divDevRhoReff(U)
10    ==
11    fvOptions(rho, U)
12 );
13
14 UEqn.relax();
15
16 fvOptions.constrain(UEqn);
17
18 if (pimple.momentumPredictor())
19 {
20     solve
21     (
22         UEqn
23         ==
24         fvc::reconstruct
25         (
26             (
27                 - ghf*fvc::snGrad(rho)
28                 - fvc::snGrad(p_rgh)
29             ) * mesh.magSf()
30         )
31     );
32
33     fvOptions.correct(U);
34     K = 0.5*magSqr(U);
35 }

```

Figura 104 – Implementação da equação de conservação de movimento no OpenFOAM.

A implementação da equação da energia no *buoyantPimpleFoam* pode ser escrita em termos da energia interna e ou da entalpia h como variável primária. Esta escolha pode ser explicitada com a palavra chave *energy* no arquivo *thermophysicalProperties*, conforme a Figura 105

```

constant/thermophysicalProperties C++
thermoType
{
    type          heRhoThermo;
    ...
    energy        sensibleEnthalpy or sensibleInternalEnergy;
}

```

Figura 105 – Selecionando a variável de solução da equação da energia.

Para o modelo escrito em termos da entalpia sensível h (*sensibleEnthalpy*) a equação da

energia é escrita como

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} h) + \frac{\partial(\rho K)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} K) - \frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot (\alpha_{ef} \nabla h) + \rho \vec{V} \cdot \vec{g}. \quad (5.5)$$

Para o caso da energia interna e (*sensibleInternalEnergy*) a equação da energia é escrita como

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} e) + \frac{\partial(\rho K)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} K) + \nabla \cdot (p \vec{V}) = \nabla \cdot (\alpha_{ef} \nabla e) + \rho \vec{V} \cdot \vec{g}. \quad (5.6)$$

Nas Equações 5.5 e 5.6, $K = |\vec{V}|^2/2$ é a energia cinética por unidade de massa. Já a entalpia por unidade de massa h é a soma da energia interna por unidade de massa e e a pressão cinemática, ou seja, $h = e + p/\rho$. A partir dessa definição, pode-se obter as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho e)}{\partial t} &= \frac{\partial(\rho h)}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} \\ \nabla \cdot (\rho \vec{V} e) &= \nabla \cdot (\rho \vec{V} h) - \nabla \cdot (p \vec{V}). \end{aligned} \quad (5.7)$$

A difusividade térmica efetiva α_{ef} é a soma das difusividades térmicas laminar e turbulenta:

$$\alpha_{ef} = \frac{\rho \nu_t}{Pr_t} + \frac{\mu}{Pr} = \frac{\rho \nu_t}{Pr_t} + \frac{k}{c}, \quad (5.8)$$

onde k é a condutividade térmica, c o calor específico à pressão constante. μ a viscosidade dinâmica, ν_t a viscosidade cinemática, Pr o número de Prandtl e Pr_t o número de Prandtl turbulento. A Figura 106 exibe a implementação da equação da energia no OpenFOAM.

```

buoyantPimpleFoam/EEqn.H
1 {
2   volScalarField& he = thermo.he();
3
4   fvScalarMatrix EEqn
5   (
6     fvm::ddt(rho, he) + fvm::div(phi, he)
7     + fvc::ddt(rho, K) + fvc::div(phi, K)
8     + (
9       he.name() == "e"
10      ? fvc::div
11        (
12          fvc::absolute(phi/fvc::interpolate(rho), U),
13          p,
14          "div(phi,v,p)"
15        )
16      : -dpdt
17    )
18    - fvm::laplacian(turbulence->alphaEff(), he)
19    ==
20    rho*(U&g)
21    + radiation->Sh(thermo)
22    + fvOptions(rho, he)
23  );
24
25  EEqn.relax();
26
27  fvOptions.constrain(EEqn);
28
29  EEqn.solve();
30
31  fvOptions.correct(he);
32
33  thermo.correct();
34  radiation->correct();
35 }

```

Figura 106 – Implementação da equação da energia no OpenFOAM.

5.2.3 Os algoritmos SIMPLE, PISO e PIMPLE no OpenFOAM

Os algoritmos responsáveis pelo tratamento do acoplamento pressão velocidade encontrados no OpenFOAM são o SIMPLE, PISO e o PIMPLE. Resumidamente, cada um desses algoritmos trabalham no contexto do OpenFoam do seguinte modo:

- SIMPLE: Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations. Empregado em problemas de regime estacionário.
- PISO: Pressure Implicit with Splitting of Operators. Empregado em problemas de regime transiente, com o passo de tempo controlado pelo número de Courant (Co).
- PIMPLE: fusão PISO-SIMPLE (Holzmann, 2019). Combinação entre os algoritmos SIMPLE e PISO, que permite a utilização de grandes passos de tempo ($Co \gg 1$).

5.2.3.1 O algoritmo SIMPLE

Os algoritmos baseados no SIMPLE dentro do OpenFOAM não possuem derivação em relação ao tempo, sendo este tipo de derivada considerado um limitador natural da solução. Assim, dado um intervalo de tempo Δt , a solução não deve avançar além desse passo de tempo. Assim, deve-se aplicar procedimentos de relaxação nas equações para alcançar estabilidade e evitar que o solver utilizando o SIMPLE acabe dando erros de ponto flutuante. As principais causas disso deve-se a ausência do limitador Δt e a inconsistência na formulação do SIMPLE, que despreza alguns termos (Versteeg e Malalasekera, 2007).

Nesse sentido, ajustar um passo de tempo vai apenas indicar o número de iterações a serem executadas em um loop do SIMPLE. Alterar o passo de tempo não terá influência na solução. Somente o número de iterações será afetado. Assim, é fundamental estipular fatores de relaxação adequados para as equações de modo a obter boas taxas de convergência e estabilidade das soluções.

5.2.3.2 O algoritmo PISO

As principais diferenças do PISO (Versteeg e Malalasekera, 2007) em relação ao SIMPLE é a inclusão do termo transiente e a consistência das equações relacionando o acoplamento pressão-velocidade. Desse modo, fatores de relaxação não são mais necessários. Porém, critérios para estabilidade ainda precisam ser garantidos. Dependendo do tipo de problema um dos critérios que deve ser obedecido é limitar o número de Courant Co em valores menores que um. Quando $Co < 1$, a informação de uma célula pode apenas alcançar uma célula vizinha dentro de um passo de tempo. Caso contrário, ou seja, $Co > 1$, a informação pode passar para duas ou três células vizinhas, o que não é permitido baseado em algum aspecto explícito. Portanto, o número de Courant deve ser mantido abaixo de um, podendo ser bem menor no início de uma simulação e incrementado com o tempo.

A definição do número de Courant é

$$Co = \frac{U \Delta t}{\Delta x} \quad (5.9)$$

onde U é a velocidade em uma célula, δt o passo de tempo e Δx o espaçamento entre duas células. No caso do OpenFOAM, o cálculo do número de Courant é baseado no volume da célula em vez da distância Δx .

De acordo com a Expressão 5.9, quanto maior for a velocidade local U ou o passo de tempo Δt , maior será o número de Courant. E também quanto menor for o espaçamento Δx , maior será o número de Courant. Assim, para garantir que $Co < 1$, o passo de tempo deve ser ajustado baseado no tamanho local da malha e no valor da velocidade em cada célula.

5.2.3.3 O algoritmo PIMPLE

O algoritmo PIMPLE que consiste na combinação do SIMPLE e do PISO é um dos mais utilizados para problemas transientes, tendo a vantagem de permitir valores do número de Courant $Co \gg 1$, ou seja, pode-se usar grandes valores para o passo de tempo.

O procedimento do PIMPLE pode ser resumido do seguinte modo. Em um passo de tempo, obtém-se uma solução em estado permanente como o emprego de fatores de relaxação. Isto é feito por meio dos chamados loops externos de correção, garantindo que as partes explícitas das equações tenham convergido. Após atingir uma tolerância dentro desse cálculo estacionário, este loop externo de correção é finalizado e parte-se para o próximo passo de tempo. Este processo repete-se até o tempo final de simulação.

A configuração e utilização do algoritmo PIMPLE no OpenFOAM é descrita a seguir. As configurações do algoritmo são descritas no dicionário *fvSolution*, criando-se nele um dicionário chamado PIMPLE:

```

1 PIMPLE
2 {
3     //- Settings that we can made
4 }
```

Figura 107 – Dicionário de controle do PIMPLE.

O dicionário pode ser criado vazio. Neste caso, o código irá trabalhar com valores padrão definidos no construtor da classe:

```

1 // * * * * * Constructors * * * * * //
2
3 Foam::pimpleControl::pimpleControl
4 (
5     fvMesh& mesh,
6     const word& dictName
7 )
8 :
9     solutionControl(mesh, dictName),
10    nCorrPIMPLE_(0),
11    nCorrPISO_(0),
12    corrPISO_(0),
13    turbOnFinalIterOnly_(true),
14    converged_(false)
15 {
16     read();
```

Figura 108 – Construtor com valores padrão para o PIMPLE.

Neste método construtor, todos os valores são inicializados com zero e dois valores booleanos são inicializados com *true* e *false*. No final da listagem, a função *read* irá ler os

valores no dicionário PIMPLE localizado no arquivo *fvSolution*. Se não houver valores a serem lidos, então os valores padrão são atribuídos. A função *read* está ilustrada na Figura 109

```

1 // * * * * * Protected Member Functions * * * * * //
2
3 void Foam::pimpleControl::read()
4 {
5     solutionControl::read(false);
6
7     // Read solution controls
8     const dictionary& pimpleDict = dict();
9     nCorrPIMPLE_ = pimpleDict.lookupOrDefault<label>
10    (
11        "nOuterCorrectors",
12        1
13    );
14     nCorrPISO_ = pimpleDict.lookupOrDefault<label>("nCorrectors", 1);
15     turbOnFinalIterOnly_ =
16         pimpleDict.lookupOrDefault<Switch>
17         (
18             "turbOnFinalIterOnly",
19             true
20         );
21 }

```

Figura 109 – Função de leitura da classe *pimpleControl*.

Os valores de *nOuterCorrectors* e *nCorrectors* são definidos com o valor 1. O valor de *turbOnFinalIterOnly* é definido com *true*. Se este valor é mantido ativo, uma equação de turbulência é resolvida dentro de cada loop externo. Caso contrário, esta equação é resolvida somente uma vez durante a última iteração externa. Observa-se também que *nOuterCorrectors* está relacionado com o PIMPLE e o *nCorrectors* (loops internos) ao PISO.

A função de leitura *read()* também faz a chamada de outra função *read(arg)* fora da classe *solutionControl*. Esta função em particular faz a inicialização de outros parâmetros fundamentais do algoritmo como *nNonOrthogonalCorrectors*, *momentumPredictor*, *transonic*, *consistent* dentre outros.

```

1 // * * * * * Protected Member Functions * * * * * //
2
3 void Foam::solutionControl::read(const bool absTolOnly)
4 {
5     const dictionary& solutionDict = this->dict();
6
7     // Read solution controls
8     nNonOrthCorr_ =
9         solutionDict.lookupOrDefault<label>
10        (
11            "nNonOrthogonalCorrectors",
12            0
13        );
14     momentumPredictor_ =
15         solutionDict.lookupOrDefault("momentumPredictor", true);
16     transonic_ = solutionDict.lookupOrDefault("transonic", false);
17     consistent_ = solutionDict.lookupOrDefault("consistent", false);
18
19     // Read residual information
20     const dictionary residualDict
21     (
22         solutionDict.subOrEmptyDict("residualControl")
23     );
24
25     // Residual controls not shown
26     ...

```

Figura 110 – Função de leitura de parâmetros adicionais.

Assim, ao inicializar o algoritmo PIMPLE com valores padrão, o seguinte conjunto de configurações será utilizado:

- $nOuterCorrectors$ ($nCorrPimple$) = 1;
- $nCorrectors$ ($nCorrPiso$) = 1;
- $nNonOrthogonalCorrectors$ ($corrPiso$) = 0;
- $turbOnFinalIterOnly$ = false;
- $momentumPredictor$ = true;
- $transonic$ = false;
- $consistent$ = false;
- Controles de resíduos não são configurados.

Estas são as funcionalidades básicas do algoritmo PIMPLE implementado no OpenFOAM. Outras informações podem ser consultadas em [Holzmann \(2019\)](#).

5.2.4 O módulo `solidificationMeltingSource`

O `fvOptions` é uma estrutura do OpenFOAM que permite ao usuário adicionar termos fonte às equações em tempo de execução de maneira simplificada. Uma das opções do `fvOptions` é o módulo `solidificationMeltingSource`, que adiciona termos fonte correspondentes ao método da entalpia-porosidade, brevemente discutido na Sessão 4.5.5 e encontrado em literaturas como Odone et al. (2013), Odone et al. (2014), Voller e Prakash (1987a), Brent et al. (1988) e Voller et al. (1987), por exemplo, permitindo a simulação de problemas de mudança de fase focado em solidificação e fusão de materiais.

Um aspecto da implementação do `solidificationMeltingSource` no OpenFOAM a ser destacado é o cálculo da fração líquida. No método construtor da classe, pode-se observar como o OpenFOAM inicializa e armazena a variável da fração líquida, chamada `alpha1_`:

```
alpha1_
(
    IOobject
    (
        name_ + ":alpha1",
        mesh.time().timeName(),
        mesh,
        IOobject::READ_IF_PRESENT,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh,
    dimensionedScalar(dimless, Zero),
    zeroGradientFvPatchScalarField::typeName
)
```

Figura 111 – Inicialização do campo de fração líquida.

A variável `alpha1_`, que é um campo escalar do tipo `volScalarField`, armazena os valores da fração líquida no interior das células (*internal field*) e ao longo do contorno da malha (*boundary field*). Sendo um campo escalar, seu valor pode ser lido e escrito nos diretórios de tempo presentes no diretório de caso de um problema. Na inicialização de um caso, o OpenFOAM procura ler os arquivos de dados dos diversos campos de um problema como temperatura, velocidade, pressão, dentre outros, na pasta de tempo inicial (por exemplo, pasta 0). Dentre estes campos, a fração líquida pode ser inicializada do mesmo modo. Como pode-se observar na Figura 111, o valor zero é atribuído como valor padrão para a fração líquida caso o usuário não prescreva outros valores no arquivo. Uma implicação desse valor padrão é que ele corresponde a um caso de derretimento de um material pois, neste caso, encontra-se inicialmente em estado sólido o que corresponde ao valor da fração líquida igual a zero. Esse valor não é meramente arbitrário mas sim particularizado, visto que o caso modelo de mudança de fase que vem na instalação do

OpenFOAM é o *windshield defrosting*, um problema de descongelamento (fração líquida inicial igual a zero) de pára-brisas de automóveis.

Essa limitação possui algumas implicações que o usuário precisa ter cuidado, visto que o OpenFOAM não calcula o campo de fração líquida inicial a partir de outros dados do problema como valores da temperatura inicial e de fusão do material. Ou ele atribui o valor inicial igual a zero ou ele lê outros valores adequados a partir da adequada prescrição em um arquivo de dados na pasta 0. Assim, se o usuário vai resolver um problema de solidificação (fração líquida inicial igual a um) e não prescreve um arquivo com esse valor, o OpenFOAM vai atribuir o valor inicial da fração líquida como zero (valor padrão) e o comportamento da solução do problema poderá ser comprometido.

Outro ponto a ser destacado refere-se a implementação de como a fração líquida é atualizada ao longo da solução. Em trabalhos como [Odone et al. \(2013\)](#), [Voller e Prakash \(1987a\)](#) e [Brent et al. \(1988\)](#) verifica-se um processo iterativo que atualiza simultaneamente o calor latente e a fração líquida. No OpenFOAM tal processo iterativo é substituído por uma simples atualização da fração líquida, sem um processo iterativo.

5.3 Comprovação do *buoyantPimpleFoam* em problemas de mudança de fase

Para verificar a capacidade do OpenFOAM em resolver adequadamente problemas de mudança de fase, serão testados dois casos, encontrados em [Rady e Mohanty \(1996\)](#) e [Gau e Viskanta \(1986\)](#).

O primeiro problema consiste no derretimento de um metal puro (gálio) em uma cavidade retangular medindo 8,89 cm de comprimento, 6,35 cm de altura e 3,81 cm de largura, descrito em [Gau e Viskanta \(1986\)](#). Neste primeiro caso, compara-se os perfis da frente de fusão obtidos experimentalmente por [Gau e Viskanta \(1986\)](#) com os perfis calculados numericamente pelo *solver buoyantPimpleFoam* do OpenFOAM com auxílio do *fvOptions* ajustado para problemas de mudança de fase. Neste problema, o gálio encontra-se inicialmente sólido à temperatura de 301,45K (28,3°C). As paredes superior e inferior da cavidade encontram-se isoladas termicamente. As paredes esquerda e direita são mantidas, respectivamente, às temperaturas fixadas de 311,15K (38°C) e 301,45K (28,3°C). Já o campo de velocidades é prescrito com a condição de não escorregamento em todas as paredes, ou seja, velocidade nula. A Figura 112 ilustra como fica o preenchimento das condições iniciais e de contorno deste problema para a temperatura e velocidade nos seus respectivos dicionários no OpenFOAM.

```

internalField uniform 301.45;
boundaryField
{
    left
    {
        type          fixedValue;
        value         uniform 311.15;
    }
    right
    {
        type          fixedValue;
        value         uniform 301.45;
    }
    top
    {
        type          fixedGradient;
        gradient      uniform 0;
    }
    bottom
    {
        type          fixedGradient;
        gradient      uniform 0;
    }
    frontAndBack
    {
        type          empty;
    }
}

```

```

internalField uniform (0 0 0);
boundaryField
{
    top
    {
        type          noSlip;
    }
    bottom
    {
        type          noSlip;
    }
    left
    {
        type          noSlip;
    }
    right
    {
        type          noSlip;
    }
    frontAndBack
    {
        type          empty;
    }
}

```

Figura 112 – Condições iniciais e de contorno para a temperatura (esquerda) e velocidade (direita).

As propriedades termofísicas do gálio são:

- temperatura de fusão 302,93K (29,78°C);
- calor específico 381,5 J/(kg K);
- condutividade térmica 32 W/(mK);
- viscosidade $1,81 \times 10^{-3}$ kg/ms;
- densidade 6093 m/s²;
- calor latente 80160 J/kg;
- coeficiente de expansão térmica $1.2 \times 10^{-4} K^{-1}$.

A simulação foi executada até um tempo máximo de 1200 segundos com um intervalo de tempo fixo de 0,01 segundos. O processo de derretimento inicia-se com a formação de uma frente de fusão a partir da parede esquerda que avança para a direita ao longo do tempo. A figura 113 ilustra o campo de velocidades com a frente de fusão (Fração líquida igual a 0,5) à esquerda e o campo de temperaturas à direita para os instante de tempo de 19 minutos (1140s).

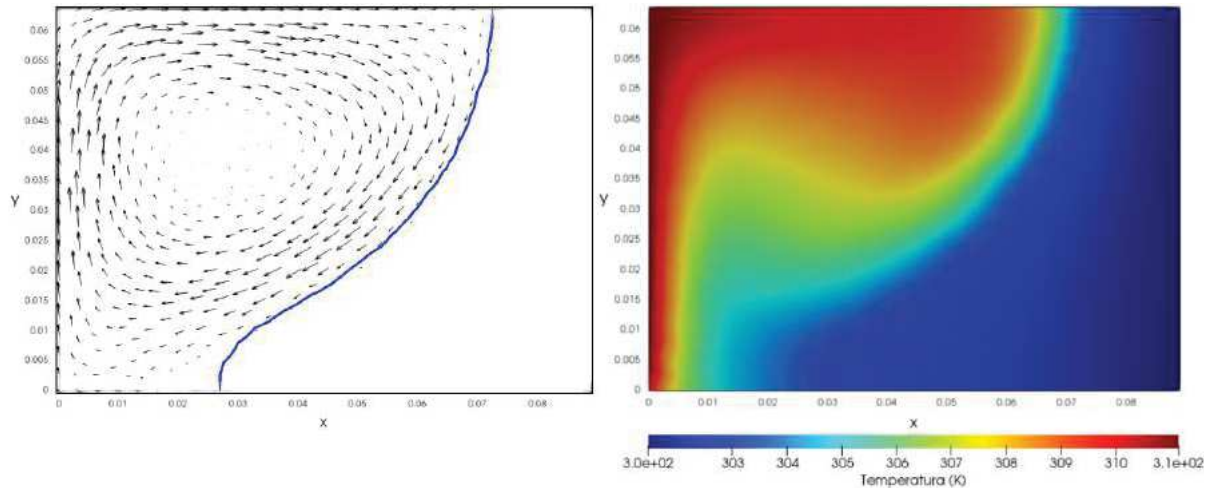


Figura 113 – Campo de velocidades, frente de fusão e temperaturas em 19 min.

A Figura 114 à esquerda exibe os perfis da frente de fusão nos diversos instantes de tempo (em minutos) indicados obtidas por [Gau e Viskanta \(1986\)](#). Na mesma figura, à direita, encontram-se as frentes de fusão nos mesmos instantes de tempo calculadas com o OpenFOAM.

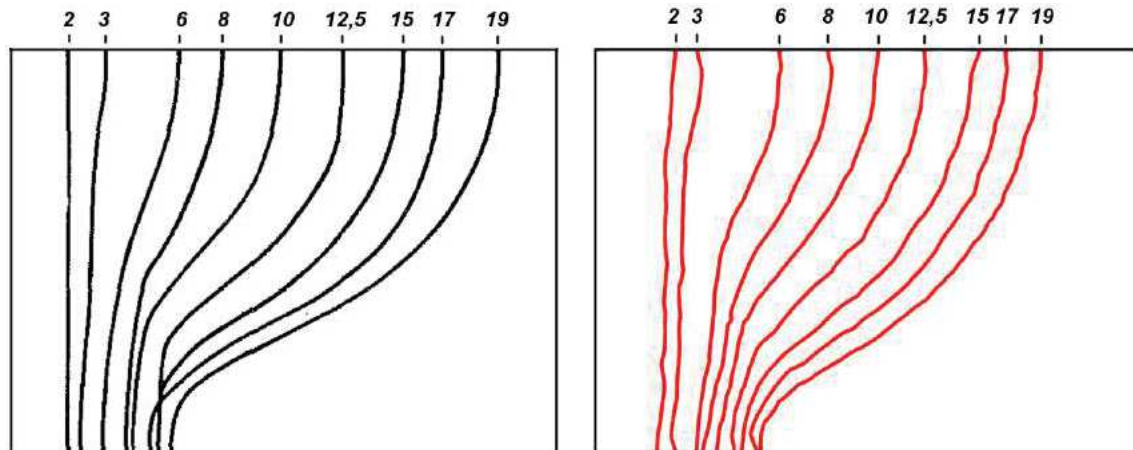


Figura 114 – Perfis da frente de fusão em diversos instantes de tempo.

Por fim, a Figura 115 exibe os perfis da frente de fusão obtidos por [Gau e Viskanta \(1986\)](#) e pela simulação com o OpenFOAM juntos, permitindo uma comparação mais direta entre os resultados.

O exame da Figura 115 mostra um bom comportamento das curvas obtidas com o OpenFOAM, embora não seja exatamente coincidentes em diversos instantes. Algumas justificativas para este comportamento deve-se ao fato da massa específica variar com a temperatura (assumida constante na simulação) ou algum tipo de isolamento térmico imperfeito nas paredes inferior e superior do domínio no experimento de [Gau e Viskanta](#)

(1986), permitindo troca de calor com o ambiente exterior. Outra diferença está relacionada a anisotropia do material que também não foi levada em conta na simulação.

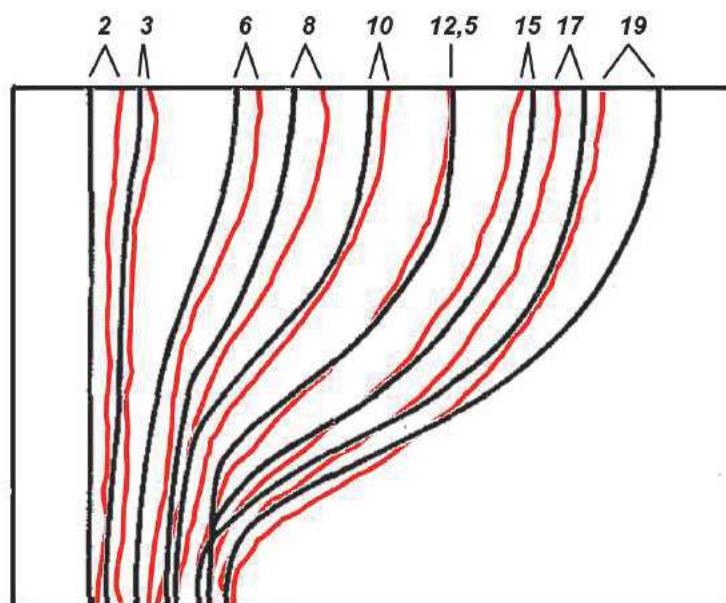


Figura 115 – Comparação da frente de fusão entre Gau e Viskanta (1986) e o OpenFOAM.

O segundo problema consiste da solidificação de estanho em uma cavidade retangular bidimensional, retratado em Rady e Mohanty (1996). Neste problema, Rady e Mohanty (1996) compara seus resultados com as medidas experimentais e os dados numéricos de Wolff e Viskanta (1988). As dimensões são 9 cm de comprimento e 6,8 cm de altura. O estanho encontra-se inicialmente em estado líquido à temperatura de 506,15K (233°C). As paredes inferior e superior da cavidade encontram-se isoladas termicamente. A parede lateral esquerda é mantida à 506,15K (233°C) e a parede direita é mantida à 502,15K (229°C). A condição de não escorregamento é aplicada para o campo de velocidades. O preenchimento dos dicionários correspondentes às prescrições das condições iniciais e de contorno no OpenFOAM são similares ao problema do derretimento do gálio apresentado anteriormente e, portanto, não será exibido. As propriedades do estanho empregadas são:

- temperatura de fusão 505,05K (231,9°C);
- calor específico 230 J/(kg K);
- condutividade térmica 60 W/(mK);
- viscosidade $3,887 \times 10^{-3}$ kg/ms;
- densidade 7300 m/s²;
- calor latente 50446,1 J/kg;

- coeficiente de expansão térmica $9,49 \times 10^{-4} K^{-1}$.

A duração máxima da simulação foi de 6825 s (1,896 hrs) com um passo de tempo variável com o valor inicial de 0,001s. Um frente de mudança de fase forma-se a partir da parede direita e avança para a esquerda conforme o tempo passa

A Figura 116 exhibe à esquerda o campo de velocidades e a frente de mudança de fase, e à direita o campo de temperaturas, no instante final de tempo.

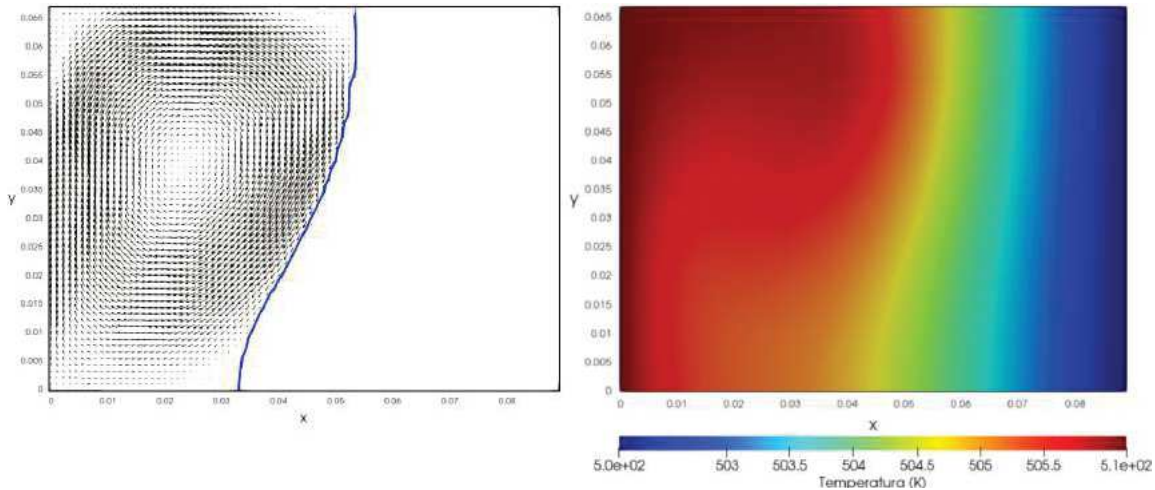


Figura 116 – Campo de velocidades, frente de fusão e temperaturas em 6825 s.

Na Figura 117 à esquerda encontra-se a forma da frente de mudança de fase em alguns instantes de tempo retiradas de [Rady e Mohanty \(1996\)](#), onde é comparado com os resultados experimentais e numéricos de [Wolff e Viskanta \(1988\)](#). Na mesma Figura à direita, encontra-se os perfis de mudança de fase nos seus correspondentes instantes de tempo obtidos com o OpenFOAM.

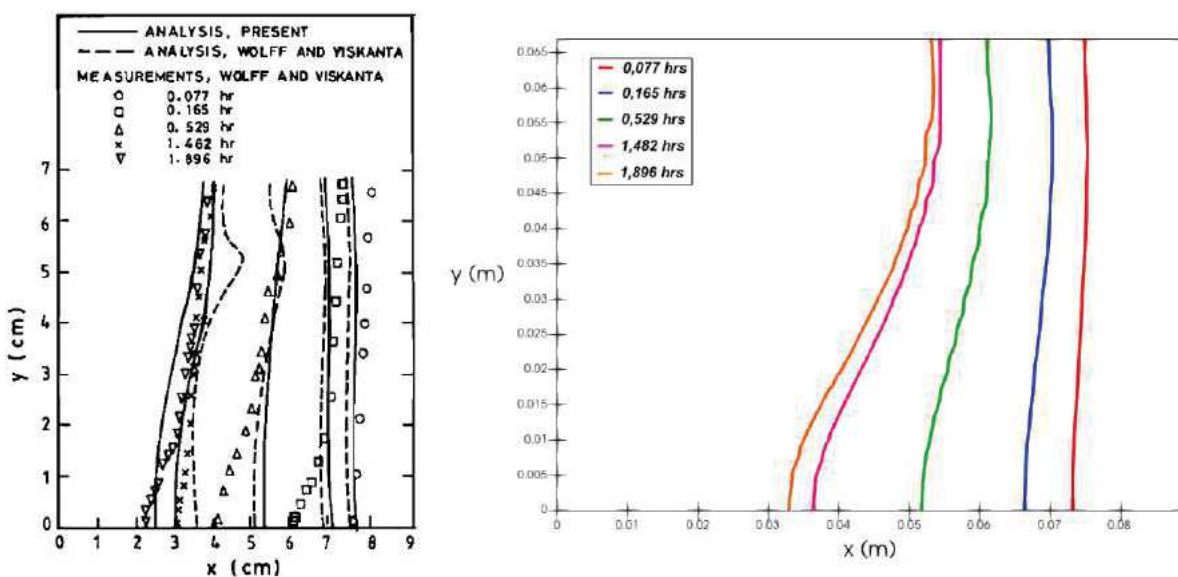


Figura 117 – Comparação dos perfis de solidificação em diversos instantes de tempo.

Pode-se observar uma boa relação com os resultados numéricos de [Rady e Mohanty \(1996\)](#) e com os resultados experimentais e numéricos de [Wolff e Viskanta \(1988\)](#). Mais uma vez as discrepâncias podem ser explicadas por conta de simplificações nos modelos numéricos empregados pelos autores em relação aos dados experimentais.

5.4 Análise da solidificação de explosivos em granadas

5.4.1 Caracterização dos explosivos TNT e composição B

Uma vez verificada a capacidade do OpenFOAM em resolver problemas de mudança de fase, passa-se ao principal objetivo deste capítulo: o efeito da imposição de diferentes condições de resfriamento na etapa de carregamento de explosivos fundidos em moldes de granadas. Assim, dois explosivos militares foram empregados nas simulações: o TNT (2,4,6-trinitro-tolueno) e a Composição B. O TNT possui emprego tanto militar quanto civil, com grande estabilidade química e possibilidade de armazenamento por longos períodos. Pode ser utilizado como reforçador de granadas, minas, torpedos, bombas de aviação, cargas de arrebentamento e como componente de dinamites e explosivos plásticos. Possui um aspecto em forma de escamas ou pó de cor amarela. Já a Composição B pertence a uma família de composições (A3, A4 e A5), sendo explosivos de baixa sensibilidade ao calor, choque e atrito. São empregados em granadas de artilharia e cabeças de guerra. Sua constituição é de aproximadamente 40% de TNT e 60% de RDX (ou exogênio). O aspecto dessas composições são de grãos arredondados ou aglomerados cristalinos isentos de forma agulhada nas cores marrom, rosa, azul e branca. A Figura 118 ilustra esses materiais.



Figura 118 – Aspectos do TNT (à esquerda) e das composições (à direita).

Para as simulações realizadas, considerou-se que ambos os explosivos se comportam como fluidos newtonianos incompressíveis, dentro da faixa de temperaturas abordada. As principais propriedades termo-físicas do TNT e da composição B encontram-se nas Tabelas 17 e 18, respectivamente, e podem ser consultadas em [Army \(1984\)](#).

Tabela 17 – Propriedades do TNT.

Dado	Valor	Unidade
Densidade (ρ)	1467	kg/m^3
Calor específico (c)	1478,41	J/kgK
Difusividade térmica (k)	0,2	W/mK
Viscosidade (μ)	$1,46 \times 10^{-2}$	kg/ms
Temperatura de fusão (T_m)	353,35 - 80,2	K - °C
Calor latente (L)	96558	J/kg
Coefficiente de expansão (β)	$3,1012 \times 10^{-4}$	K^{-1}
Número de Prandtl (Pr)	107,92	-

Tabela 18 – Propriedades da Composição B.

Dado	Valor	Unidade
Densidade (ρ)	1690	kg/m^3
Calor específico (c)	1334,256	J/kgK
Difusividade térmica (k)	0,2186	W/mK
Viscosidade (μ)	0,3133	kg/ms
Temperatura de fusão (T_m)	352,15 - 79	K - °C
Calor latente (L)	58938	J/kg
Coefficiente de expansão (β)	$9,681 \times 10^{-5}$	K^{-1}
Número de Prandtl (Pr)	1912,27	-

5.4.2 Descrição da geometria e das condições iniciais e de contorno

A geometria do molde utilizada foi a de uma granada de morteiro de 81 mm pertencente a fábrica de Juiz de Fora da Indústria de Material Bélico do Brasil, IMBEL. Devido as características do corpo da granada e das imposições das condições de contorno, adotou-se um comportamento axi-simétrico, de modo que apenas um pequeno setor do corpo da granada foi, efetivamente, usado nas simulações, no intuito de reduzir custos computacionais desnecessários. O fato do emprego de um setor de pequeno ângulo ($\approx 5^\circ$) em vez de um plano de axi-simetria deve-se a característica do OpenFOAM operar somente com geometrias em 3 dimensões, conforme mencionado na descrição do OpenFOAM ao longo deste capítulo. A Figura 119 exibe o modelo tridimensional e axi-simétrico da geometria utilizada.

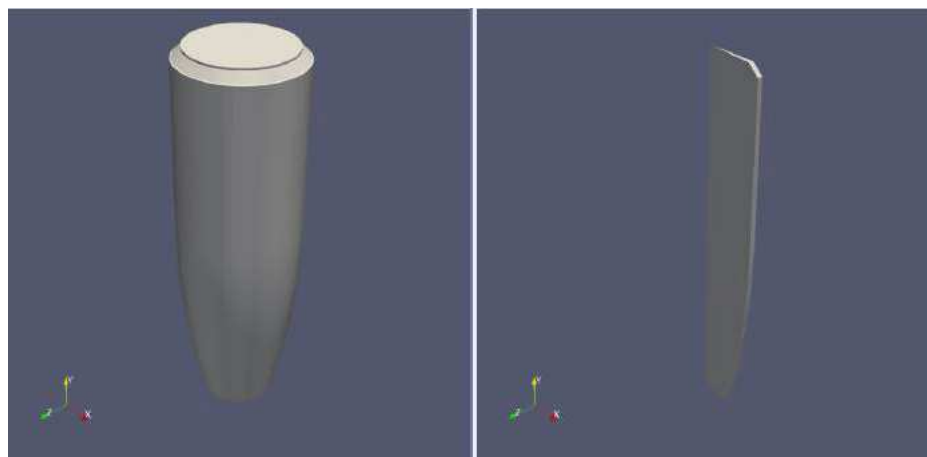


Figura 119 – Geometria tridimensional (à esquerda) e axi-simétrica (à direita).

A altura da cavidade interna da granada é 0,1877m e a medida do maior raio interno é 0,02975m. A divisão do contorno da geometria e a nomenclatura desses seguimentos atribuídas para o OpenFOAM são ilustradas na Figura 120.

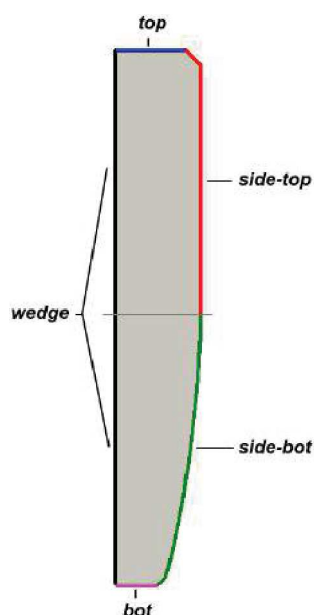


Figura 120 – Nomenclatura dos seguimentos que compõem a geometria.

A região denominada *top* representa o topo da granada, por onde assume-se que seu interior é constantemente alimentado com explosivo fundido à temperatura de fusão. Esta hipótese visa garantir a presença unicamente de explosivo líquido ou sólido no interior do domínio em todo instante de tempo considerado. Em processos reais de manufatura de explosivos, este tipo de condição é fundamental para evitar a formação de vazios devido a contração de material por causa das variações na densidade quando ocorre a passagem do estado líquido para sólido. Um modo de se fazer isso é acoplado-se um tipo de funil ao topo do molde e mantendo este preenchido como o explosivo fundido. As duas primeiras

sub-figuras encontradas na Figura 102 ilustram bem o caso quando o interior do molde do explosivo não é constantemente alimentado com o material fundido. No OpenFOAM, um tipo de condição de contorno denominada *pressureInletOutletVelocity* para a velocidade pode ser empregada para modelar este tipo de situação de preenchimento contínuo de material no interior do domínio. De acordo com [Foundation \(2020\)](#), esta condição prescreve gradiente nulo (*zeroGradient*) em todas as componentes quando ocorre fluxo para fora do domínio ou um valor fixo (*fixedValue*) quando o fluxo é para dentro do domínio. Além disso, a condição *pressureInletOutletVelocity* usualmente deve ser empregada em conjunto com a condição *totalPressure* para a pressão, correspondendo a casos onde ocorre fluxo para dentro do domínio e a velocidade de entrada não é conhecida.

A parte lateral do corpo da granada é dividida em dois segmentos, com um corte imaginário traçado horizontalmente à altura de 0,1015m em relação ao fundo da granada. A parte lateral superior, denominada *side-top*, frequentemente é mantida a algum tipo de aquecimento quando os projéteis se encontram no forno de resfriamento controlado (Figura 99). Usualmente este aquecimento da-se por convecção forçada, na qual algum tipo de fluido a uma certa temperatura é direcionado na superfície no projétil. A ideia é manter a temperatura do explosivo fundido controlada nesta região, de modo que a solidificação proceda do fundo para o topo do molde, evitando-se a formação de vazios indesejáveis no seu interior. Neste trabalho, a região *side-top* foi submetida à convecção forçada com diferentes temperaturas nos primeiros testes e depois submetida a convecção natural nos demais experimentos. A parte lateral inferior, denominada *side-bot*, foi submetida a convecção natural primeiramente nos testes iniciais e depois à convecção forçada. Assim, alterna-se a submissão das partes laterais superior e inferior à convecção natural e forçada. Por convecção natural, neste caso, entende-se que esta região foi submetida a convecção em que o fluido em contato encontra-se à temperatura ambiente. Esta modelagem pode corresponder a um aparato em que o corpo da granada fica parcialmente submerso em um líquido mantido à temperatura ambiente enquanto sua outra metade fica submetida a imposição de diferentes temperaturas de convecção (convecção forçada). No caso inverso, pode-se manter o ar em temperatura ambiente enquanto o líquido é aquecido a diferentes temperaturas. Um típico equipamento correspondente a essa descrição é o carrinho de carga na Figura 100, onde seu recipiente pode ser preenchido com líquido onde o projétil fica parcialmente submerso enquanto a parte superior fica exposta ao aquecedor do forno de resfriamento. Matematicamente, tanto a convecção forçada quanto a natural podem ser modeladas por uma condição de contorno de terceiro tipo ou de Robin ([Incropera et al., 2014](#)).

Por fim, para o fundo do molde, denominado *bot* adotou-se para o modelo como prescrição de condição de contorno o isolamento térmico e ao eixo de axi-simetria é imposta um tipo de condição de contorno especial presente no OpenFOAM denominada *wedge*, que indica ao solver que esta região é, justamente, um eixo de axi-simetria. ([Foundation, 2020](#))

Assim, as condições iniciais e de contorno para cada uma das principais variáveis do problema podem ser resumidas de acordo com a Tabela 19, sendo as mesmas utilizadas tanto para a simulação com o TNT quanto para a composição B.

Tabela 19 – Condições iniciais e de contorno das análises com o TNT e Composição B.

variável	T (K)	\vec{V}	p (Pa)
condições iniciais	358,15	(0 0 0)	0
top	358,15	<i>pressureInletOutletVelocity</i>	<i>totalPressure</i>
side-top	Robin	(0 0 0)	$\nabla p = 0$
side-bot	Robin	(0 0 0)	$\nabla p = 0$
bot	$\nabla T = 0$	(0 0 0)	$\nabla p = 0$

Para termos de conferência, no Apêndice , todas as condições iniciais e de contorno são exibidas exatamente como são descritas nos arquivos do OpenFOAM.

5.4.3 Experimentos executados e condição de contorno de Robin

A convecção, natural ou forçada, é representada pela lei de resfriamento de Newton e modelada numericamente como condição de contorno de Robin. Para sua formulação, é necessário a temperatura do fluido em contato com a superfície do molde (T_∞) e o coeficiente de convecção. Neste trabalho, a convecção é baseada no ar como o fluido que é direcionado e está em contato com a superfície lateral do corpo da granada e, portanto, o coeficiente de convecção será representado por h_{ar} . A formulação da condição de contorno de Robin usada neste trabalho é baseada nos trabalhos de [Incropera et al. \(2014\)](#) e [Soares](#), sendo os dados relevantes para os experimentos aqui executados tirados diretamente desses textos.

Para os experimentos realizados com a solidificação do TNT será empregado a nomenclatura E1 e, para a composição B, E2. Os experimentos com cada material são divididos em dois grupos. No primeiro grupo com o TNT, os experimentos são denominados de E1-1 até E1-5, caracterizados pela presença de convecção forçada com diferentes temperaturas do ar em contato com a lateral superior (*side-top*) do corpo da granada enquanto a lateral inferior (*side-bot*) é mantida em convecção natural. No segundo grupo, E1-6 até E1-9, essa situação é invertida, ou seja, a convecção forçada passa a atuar na lateral superior enquanto a lateral inferior fica sob convecção natural. De modo similar é caracterização dos experimentos com a composição B. Nos testes de E2-1 até E2-5, a lateral superior fica sob convecção forçada enquanto a lateral inferior é mantida em convecção natural e nos testes de E2-6 até E2-9 esta situação é invertida.

A Tabela 20 resume a caracterização dos experimentos executados. Em relação ao coeficiente de convecção, deve-se observar que quando ambas as regiões laterais superior e inferior encontram-se sob convecção natural, seu valor é $h_{ar} = 5,1067(W/K)$. Nos demais

casos, ou seja, com uma região sob convecção natural e a outra sob forçada, na região sob convecção natural o valor é $h_{ar} = 5,9139(W/K)$.

Tabela 20 – Experimentos executados.

Experimento	Tipo de convecção por região	Temperatura (K)	Coef. de convecção (W/K)
E1-1 / E2-1	side-top: natural	298,15	5,1067
	side-bot: natural	298,15	5,1067
E1-2 / E2-2	side-top: forçada	313,15	49,3178
	side-bot: natural	298,15	5,9139
E1-3 / E2-3	side-top: forçada	323,15	49,1484
	side-bot: natural	298,15	5,9139
E1-4 / E2-4	side-top: forçada	333,15	48,9919
	side-bot: natural	298,15	5,9139
E1-5 / E2-5	side-top: forçada	343,15	48,8474
	side-bot: natural	298,15	5,9139
E1-6 / E2-6	side-top: natural	298,15	5,9139
	side-bot: forçada	313,15	49,3178
E1-7 / E2-7	side-top: natural	298,15	5,9139
	side-bot: forçada	323,15	49,1484
E1-8 / E2-8	side-top: natural	298,15	5,9139
	side-bot: forçada	333,15	48,9919
E1-9 / E2-9	side-top: natural	298,15	5,9139
	side-bot: forçada	343,15	48,8474

5.4.4 Procedimentos e resultados

A geometria axi-simétrica utilizada foi discretizada com uma malha não-estruturada contendo 1877 nós e 1786 volumes. Um esboço dessa malha pode ser observado na Figura 121.

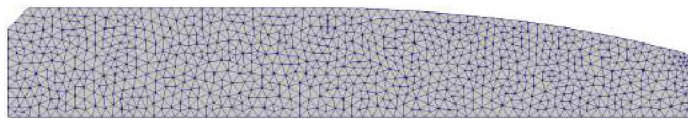


Figura 121 – Malha utilizada nos experimentos.

A discretização espacial consiste no esquema *upwind* para os termos convectivos, linear para os termos difusivos presentes nas equações de conservação de movimento e harmônico para os termos difusivos na equação de conservação da energia. A discretização temporal conta com o esquema implícito, adotando-se um passo de tempo adaptativo com valor inicial de 0,01s e de 1s como valor máximo, limitado a um número de Courant de 0,1. A execução de todos os casos foi feita com o *buoyantPimpleFoam* rodado em paralelo. O tempo máximo de simulação dos experimentos que são ilustrados neste texto é de 21600s (6hrs), sendo que em alguns casos o tempo necessário para a solidificação completa do

explosivo foi cerca de 28800s (8hrs). Os instantes de tempo nos quais são exibidos o avanço da frente de mudança de fase são: 1800s (0,5hrs), 3600s (1hr), 5400s (1,5hrs), 7200s (2hrs), 10800s (3hrs), 14400s (4hrs), 18000s (5hrs) e 21600s (6hrs) em todos os casos. As curvas que indicam a frente de mudança de fase correspondem a iso-curva da fração líquida de valor 0,5.

As Figuras 122 e 123 exibem os perfis de solidificação dos casos E1-1 até E1-5 nos instantes indicados. O caso E1-1, correspondendo a imposição de convecção natural em toda a lateral do projétil, é considerado o caso de controle. Observa-se que a forma da frente de solidificação neste caso é bastante regular em todos os instantes de tempo considerados. Os casos, E1-2 a E1-5, correspondem a imposição de convecção forçada na parte lateral superior em diferentes temperaturas enquanto a lateral inferior é mantida sobre resfriamento natural. Nestes testes, observa-se um avanço da frente de solidificação mais pronunciado nas regiões sob convecção forçada, evidenciado principalmente pelos casos E1-2 e E1-3.

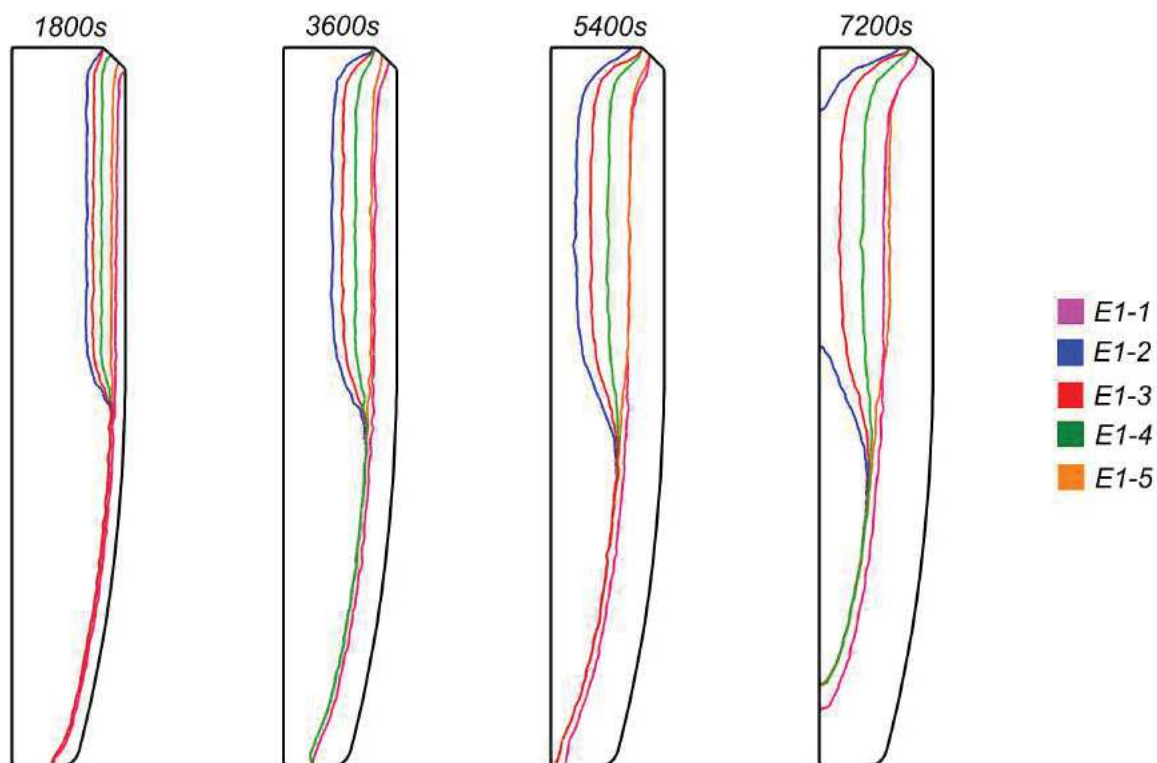


Figura 122 – Experimentos E1-1 a E1-5: frente de solidificação nos instantes 1800s, 3600s, 5400s e 7200s.

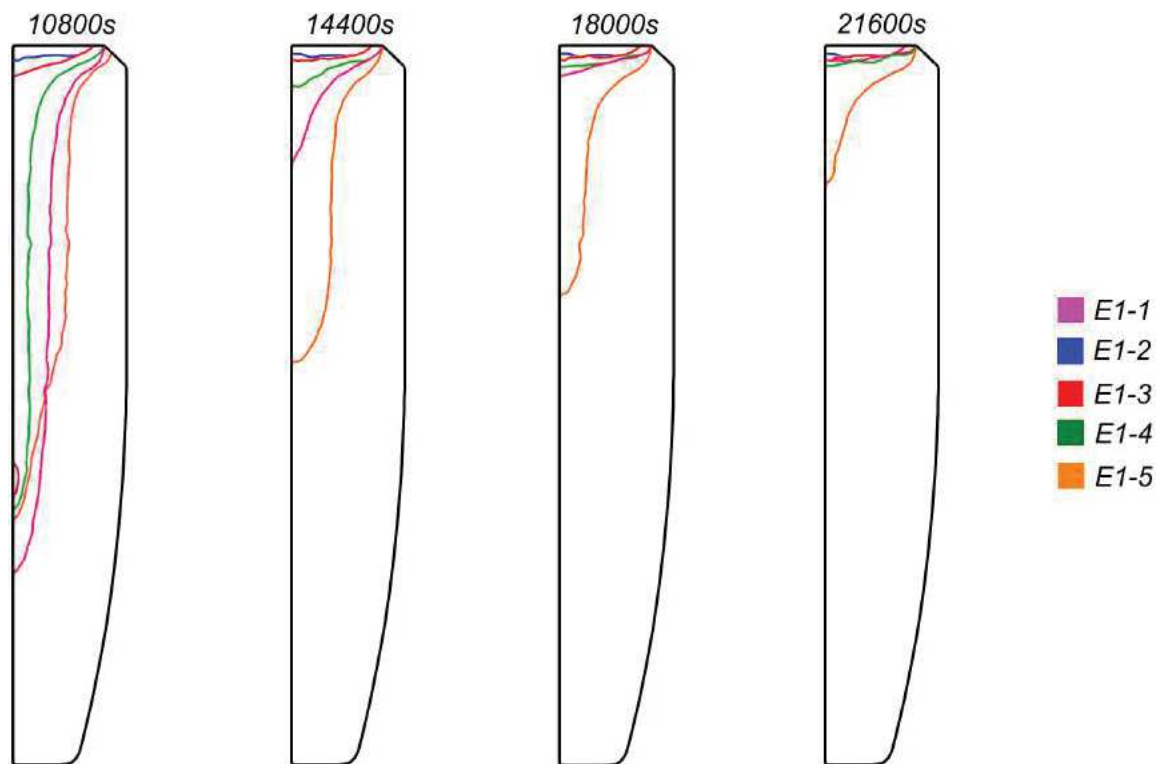


Figura 123 – Experimentos E1-1 a E1-5: frente de solidificação nos instantes 10800s, 14400s, 18000s e 21600s.

Entre os instantes 5400s e 7200s observa-se um comportamento indesejado do caso E1-2 em que parte do TNT já se solidificou completamente em uma porção na metade superior do interior da granada, resultando na formação de uma região contendo material em estado líquido cercado pelo material sólido. Embora na simulação computacional esta região tenha se solidificado posteriormente, na prática este comportamento poderia resultar em alguma formação de vazio e enfraquecimento desta região que, como discutido anteriormente, torna a utilização do projétil final perigosa, basicamente sendo necessário o descarte completo do produto final solidificado, acarretando em desperdícios de tempo, material e dinheiro. Observações similares podem ser feitas para o caso E1-3 em que entre os instantes 7200s e 10800s uma região de material líquido cercado por sólido se formou e que foi quase eliminada no instante 10800s e totalmente solidificada entre 10800s e 14400s nas simulações numéricas. Assim como no caso E1-2, este é um comportamento que deve ser evitado na manufatura do explosivo pois pode inviabilizar o seu uso e ser necessário o descarte do produto final. O caso E1-4 apresenta um dos melhores comportamentos de avanço da frente de solidificação em todos os instantes de tempo, onde a porção inferior do molde se solidifica de baixo para cima e da lateral para o interior enquanto a porção superior tem a solidificação controlada, apresentando um bom avanço da frente ao mesmo tempo em que não se solidifica antes das partes inferiores. O TNT apresenta-se praticamente todo solidificado em 18000s e totalmente em 21600s. O comportamento do experimento E1-5 é bastante similar ao caso E1-4, se solidificando primeiro na metade

inferior do molde nos instantes primários para então se solidificar por completo ao longo dos instantes finais. Porém neste caso o avanço da frente de solidificação nas porções superiores é muito mais lento se comparado ao caso E1-4 e aos demais casos, não tendo se solidificado completamente em 21600s, comportamento que só vem a ser atingido com mais de 28800s. Embora o perfil de solidificação deste caso seja desejado, o tempo necessário para a completa solidificação é consideravelmente longo, sendo desencorajado em situações práticas visto que outros testes apresentaram uma solidificação adequada com um tempo reduzido.

As Figuras 124 e 125 exibem os perfis da frente de solidificação dos casos E1-6 a E1-9 e do caso E1-1 como caso de controle nos instantes de tempo indicados. Nestes experimentos, a região lateral inferior do projétil foi submetida à convecção forçada em diferentes temperaturas enquanto a região lateral superior foi mantida sob convecção natural.

Assim como nos casos E1-1 a E1-5, os casos E1-6 a E1-9 apresentam um perfil da frente de solidificação mais pronunciado nas regiões correspondentes a condição de convecção forçada. O caso E1-6 apresenta o avanço mais rápido da frente de solidificação na porção inferior do projétil, enquanto a velocidade deste avanço vai se tornando mais lenta nos demais casos de convecção forçada. Diferentemente dos experimentos E1-1 a E1-5 em que, especificamente, os casos E1-2 e E1-3 apresentaram a formação de uma região líquida envolta de uma região de TNT solidificado, apenas o caso E1-9 apresentou comportamento similar. A formação desta região em estado líquido envolta de sólido se dá entre os instantes 10800s e 14400s se prolongando até um tempo pouco maior que 18000s. Pelos mesmos motivos dos casos E1-2 e E1-3, o comportamento do experimento E1-9 é totalmente indesejado em uma situação real de manufatura de explosivos. Pode-se considerar o comportamento dos demais casos como bastante adequados, pois o progresso da solidificação ocorre de baixo para cima se a formação sub-regiões líquidas e solidificando-se completamente entre os instantes 18000s e 21600s.

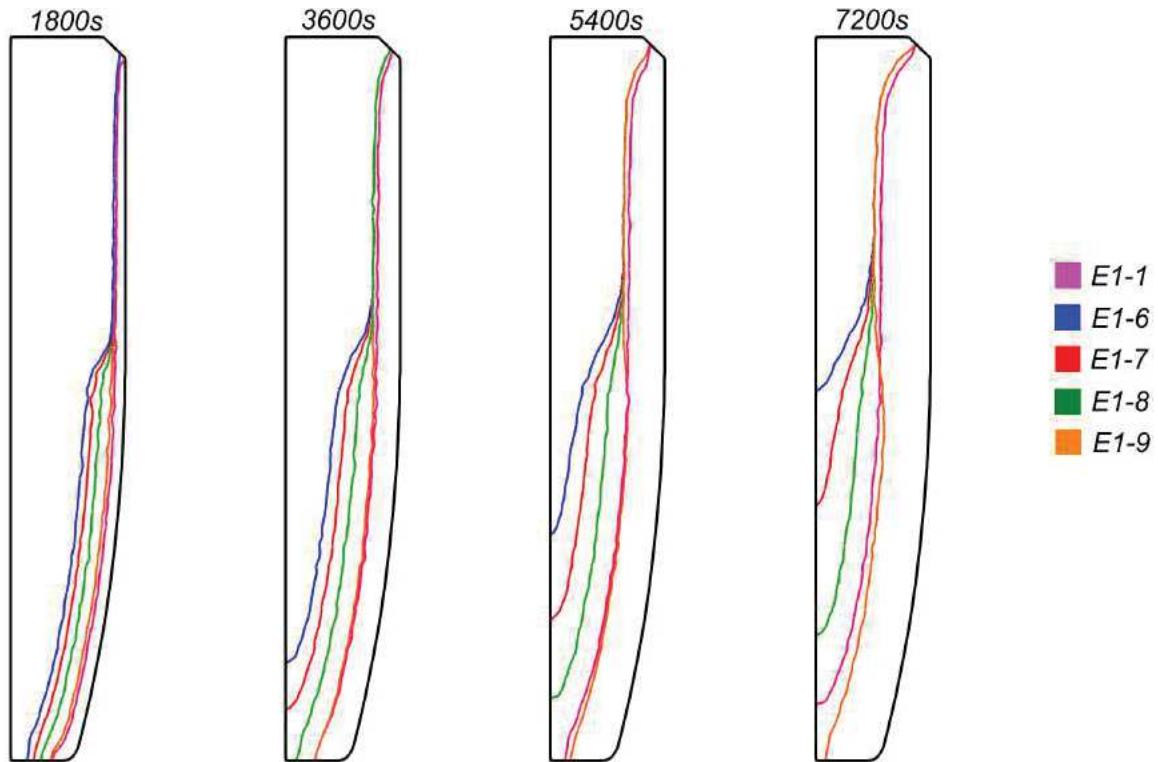


Figura 124 – Experimentos E1-6 a E1-9: frente de solidificação nos instantes 1800s, 3600s, 5400s e 7200s.

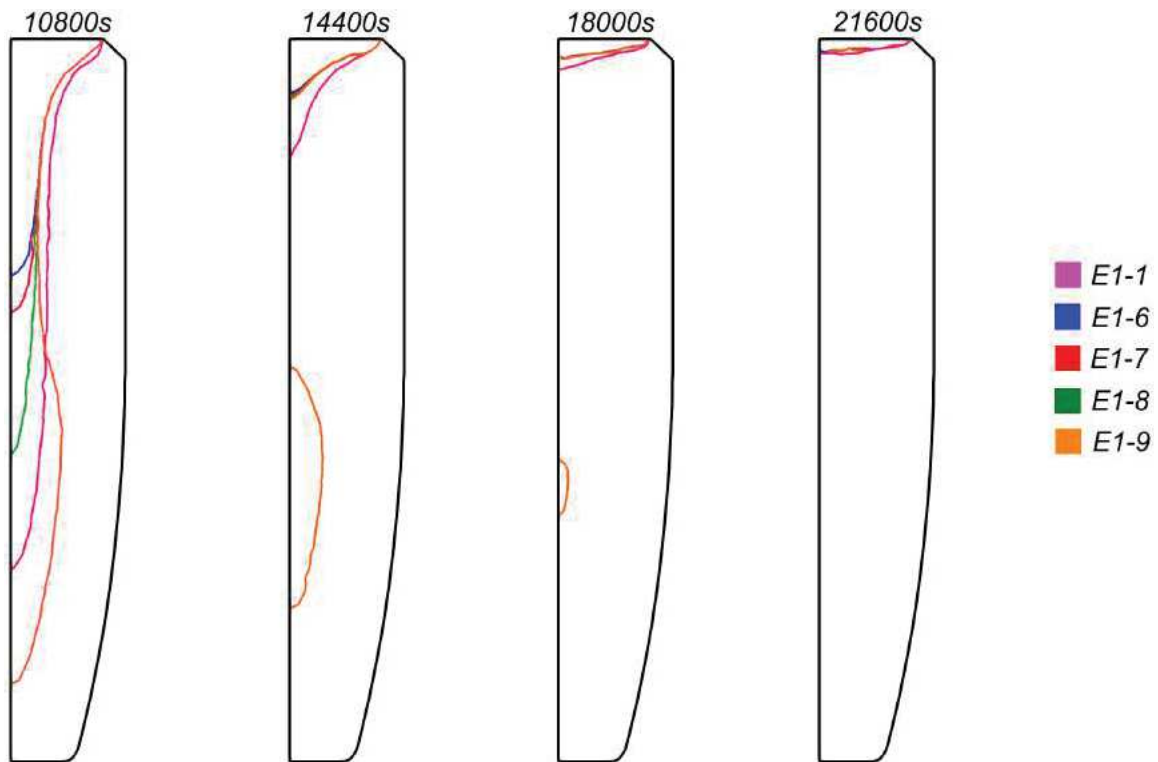


Figura 125 – Experimentos E1-6 a E1-9: frente de solidificação nos instantes 10800s, 14400s, 18000s e 21600s.

As Figuras 126 e 127 representam as frentes de solidificação dos experimentos E2-1 a E2-5, ou seja, com a composição B, nos instantes de tempo indicados. Observa-se o avanço proeminente da frente de solidificação principalmente nos casos E2-2 e E2-3, tanto que resultam na formação de uma região da composição B em estado líquido ilhada por regiões sólidas. Nos experimento E2-2 essa formação ilhada se dá entre os instantes 3600s e 5400s sendo posteriormente eliminada em algum momento entre os instantes 7200s e 10800s. Já no experimento E2-3 está formação ocorre entre os instantes 5400s e 7200s, e dissipa-se entre 72000s e 10800s. Assim como explicado no caso do TNT, a formação dessas regiões de material líquido ilhado por sólido é um comportamento inadequado e que deve ser evitado na manufatura real dos explosivos, pois este efeito é dificilmente dissipado tão bem no experimento real do que no caso numérico, o que certamente vai ocasionar desperdícios de tempo, materiais e dinheiro. O caso E2-5 apresenta o tempo de solidificação total mais longo pois, como pode ser observado, ainda não encontra-se totalmente solidificado com 21600s, sendo o tempo necessário para isso maior que 28800s.

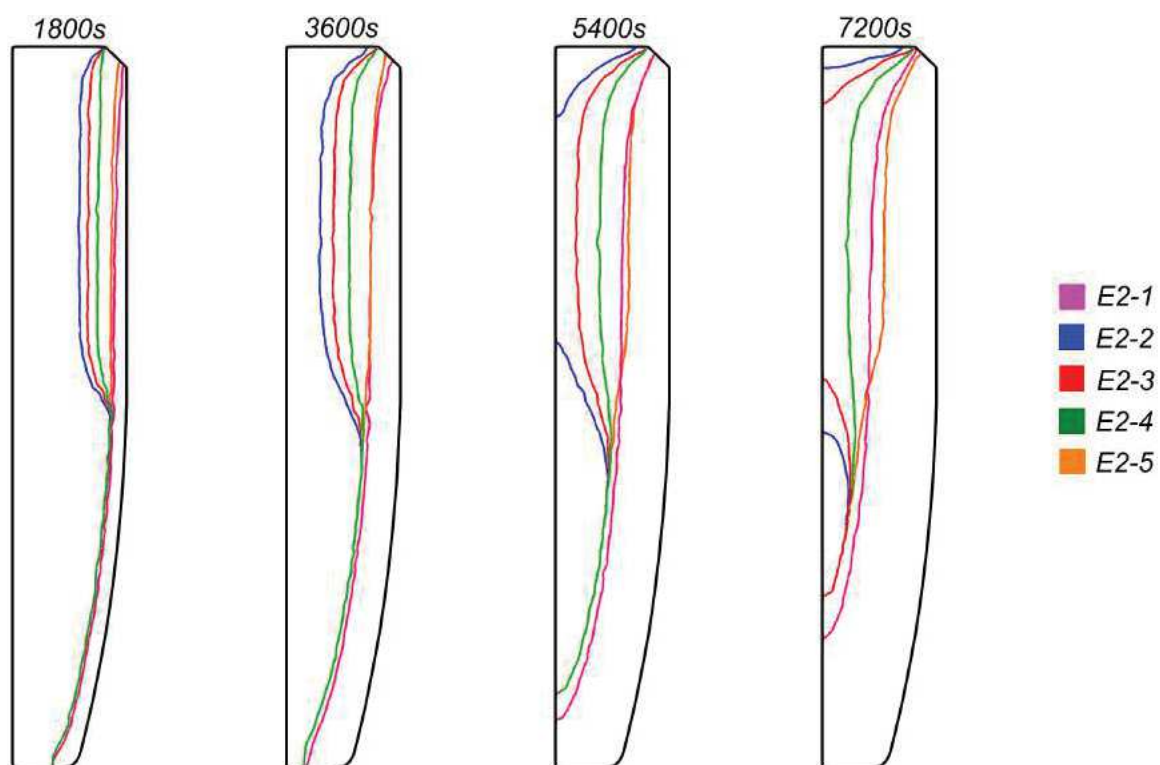


Figura 126 – Experimentos E2-1 a E2-5: frente de solidificação nos instantes 1800s, 3600s, 5400s e 7200s.

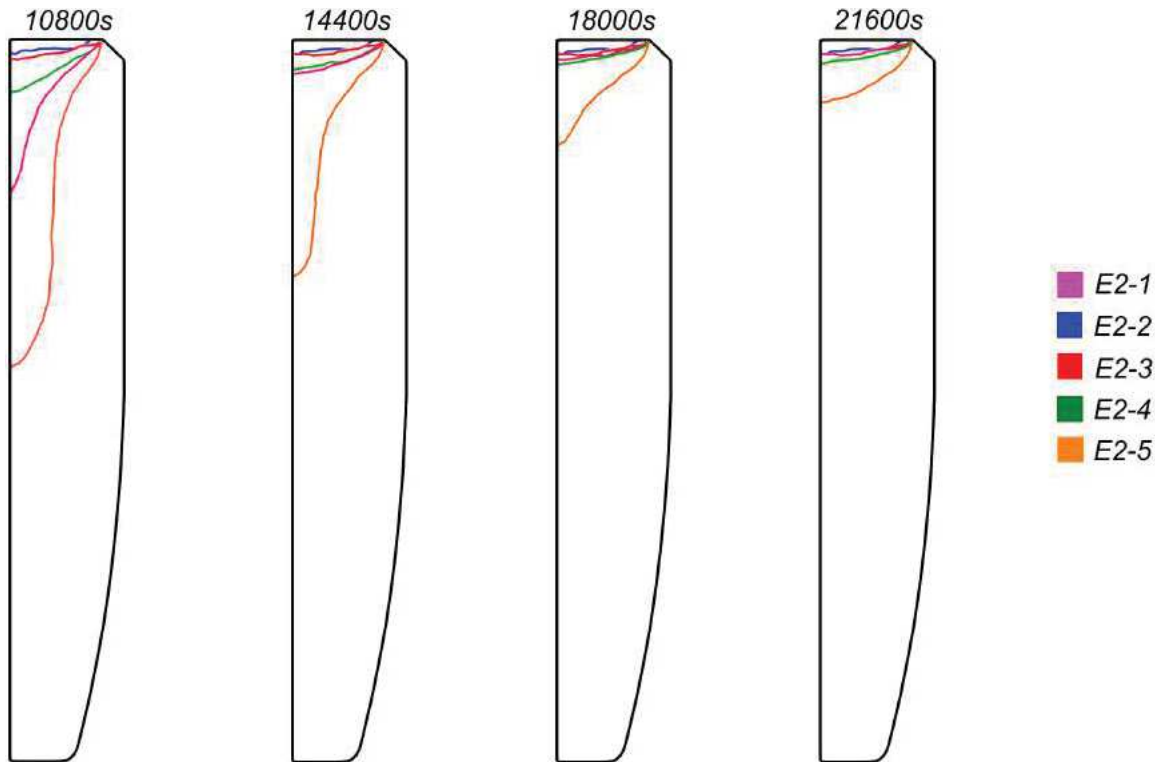


Figura 127 – Experimentos E2-1 a E2-5: frente de solidificação nos instantes 10800s, 14400s, 18000s e 21600s.

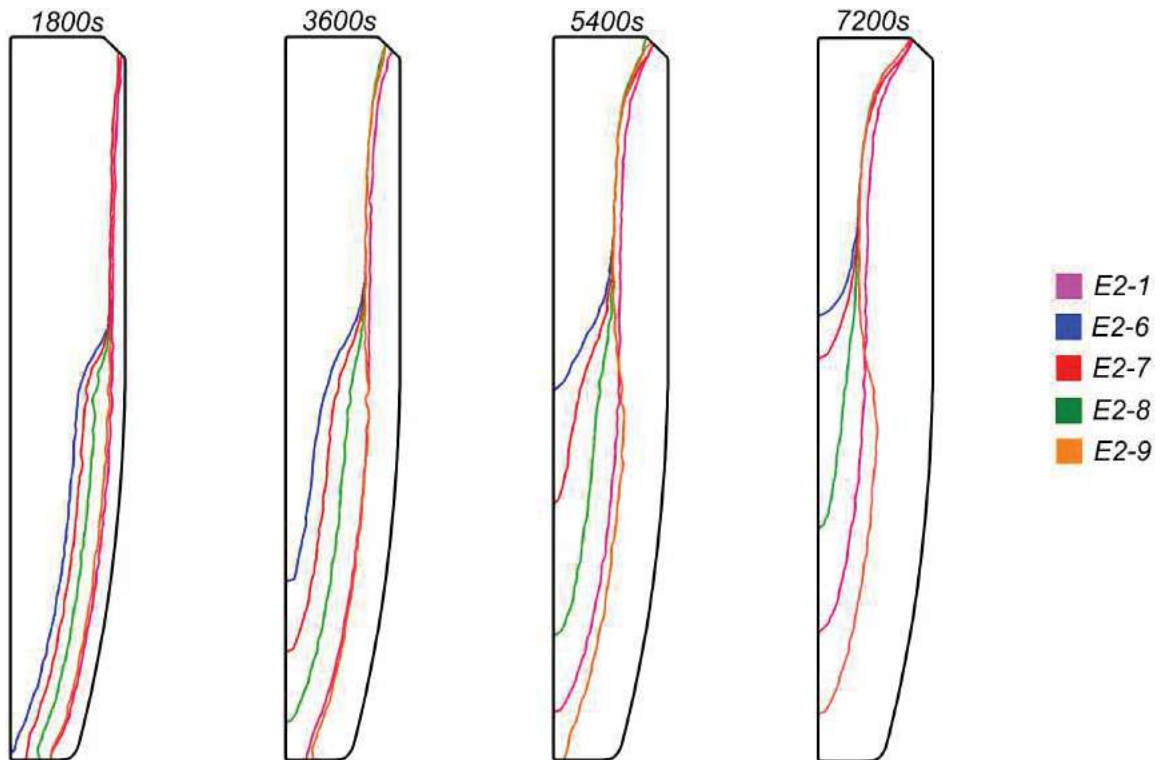


Figura 128 – Experimentos E2-6 a E2-9: frente de solidificação nos instantes 1800s, 3600s, 5400s e 7200s.

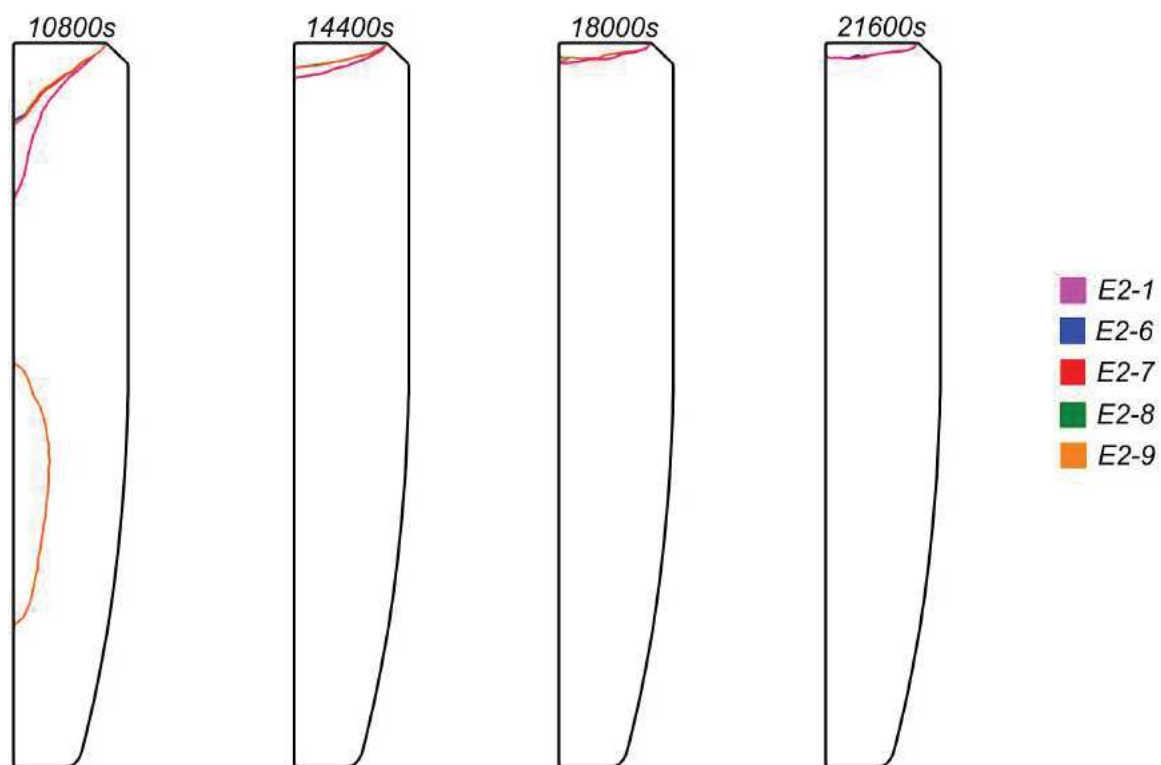


Figura 129 – Experimentos E2-6 a E2-9: frente de solidificação nos instantes 10800s, 14400s, 18000s e 21600s.

As Figuras 128 e 129 correspondem aos experimentos E2-6 a E2-9 e tomam como referência o caso de resfriamento natural E2-1. Observa-se a proeminência das curvas de solidificação nas regiões mantidas sob a convecção forçada que, nestes casos, são a lateral inferior do projétil. As observações sobre os casos E2-6 a E2-8 estão relacionadas aos tempos intermediários de solidificação pois são bem distintos entre 1800s e 7200s e bastante coincidentes a partir de 10800s, sendo que em cerca de 14400 a composição B encontra-se quase completamente solidificada em todo o interior do projétil. O caso E2-9 apresenta o comportamento a ser evitado, pois desenvolve a presença de uma região líquida ilhada por sólido. Para outras eventuais verificações relacionadas ao avanço da frente de mudança de fase, no Apêndice encontram-se os contornos da fração líquida individuais para cada um dos experimentos realizados com a solidificação de material explosivo em moldes de projéteis, cujos casos são resumidos na Tabela 20. Neste capítulo foi apresentado o OpenFOAM com foco em uma de suas aplicações, o *buoyantPimpleFoam* e o módulo *solidificationMeltingSource*. Foi estudado alguns detalhes de sua implementação visando compreender melhor algumas particularidades, potencialidade e eventuais limitações da aplicação. O principal objetivo do emprego deste programa foi o estudo da imposição de diferentes condições de resfriamento na evolução da frente de mudança de fase em um projétil de granada de grande calibre. De acordo com a descrição das etapas do processo de carregamento, empregou-se como principal condição de contorno a de Robin. Assim, a prescrição de diferentes temperaturas para o fluido em contato com o molde

foi um dos principais fatores que influenciaram tanto na forma quanto na evolução da frente de mudança de fase em cada caso. Foi evidente que a imposição de determinadas temperaturas no processo pode ocasionar a formação de vazios no interior material solidificado. Embora na solução numérica essas regiões vazias sejam eventualmente preenchidas, tal preenchimento dificilmente ocorre na situação de manufatura real do explosivo. Assim, essas soluções numéricas são vital importância para o processo real do explosivo pois fornecem indicações sobre formas adequadas de se realizar o resfriamento do material

6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Ao longo de todo este trabalho, procurou-se pesquisar e estudar diversos tópicos relacionados à mecânica do contínuo, com ênfase principal na dinâmica dos fluidos computacional. Uma das principais motivações dessas pesquisas foi a compreensão da fenomenologia envolvida em problemas de transferência de calor com mudança de fase ou, simplesmente como é mais conhecido, problemas de mudança de fase. Este é um fenômeno no qual todos tem alguma familiaridade no seu cotidiano, seja observando um cubo de gelo se derretendo e a água que se torna vapor em uma peça de roupa secando no varal, por exemplo. Mas o fenômeno de mudança de fase também possui aplicações importantíssimas em campos como a engenharia e indústrias, sendo especificamente mais importantes os processos de fusão e solidificação.

Um primeiro estudo desses processos usualmente inicia-se com os chamados problemas de Stefan, que modelam casos bem simplificados e com poucas utilidades práticas. Processos mais elaborados requerem o estudo das equações básicas da dinâmica dos fluidos, como as equações de conservação da quantidade de movimento, equações de Navier-Stokes e a equação da energia. Além disso, é necessário o estudo de métodos específicos que tratem do fenômeno de mudança de fase. Com isso, no Capítulo 2 foi apresentada uma formulação para as principais equações governantes da dinâmica dos fluidos, incluindo a equação da energia.

É um fato bastante conhecido que as equações como a de Navier-Stokes não apresentam soluções analíticas em suas formas mais gerais. Com isso, o estudo e desenvolvimento de métodos numéricos para a discretização e solução dessas equações são fundamentais e constituíram um dos pilares essenciais do presente trabalho. A técnica de discretização por meio da subdivisão do domínio do problema em volumes elementares e subsequente integração das equações nesses volumes, o Método dos Volumes Finitos foi amplamente trabalhado. Em sua formulação mais simples, a divisão do domínio é feita com uma malha regular e uniforme de elementos quadriláteros, nos quais ocorrem a integração das equações governantes e a aproximação de seus termos. Dada a complexidade das equações relacionadas, que envolvem não-linearidades e acoplamento de propriedades em equações diferentes, frequentemente são empregados métodos de caráter iterativo como procedimento de solução. No contexto do Método dos Volumes Finitos, uma família de métodos derivados do algoritmo SIMPLE (Patankar, 1980) é amplamente utilizada. Embora métodos como o SIMPLE resolvam bem as questões de acoplamento e não linearidades, este método possui simplificações em sua formulação que acabam tornando-se necessário o emprego de fatores de relaxação para evitar problemas de convergência na solução. Embora seja usual o emprego de valores fixos para estes fatores, pode essa não ser a melhor estratégia em muitos casos, pois podem afetar significativamente a velocidade de convergência e, conseqüentemente, o tempo de execução do processo. Assim, no Capítulo

3 foi estudado um método de variação dos fatores de relaxação ao longo de um processo de solução visando reduzir os tempos de execução. O método apresentado funcionou relativamente bem para os casos estudados, reduzindo o número de iterações e o tempo de execução em até 50% em alguns casos. O método e os resultados fizeram parte de um artigo apresentado e publicado pelo presente autor durante o ENIEF 2016 (Odone et al., 2016).

O Método dos Volumes Finitos clássico, apresentado tal como em Patankar (1980) e Versteeg e Malalasekera (2007), por exemplo, constituem a base do estudo deste método. Porém, o emprego de malhas regulares e estruturadas em geometrias complexas não é tão adequado, uma vez que se torna difícil cobrir adequadamente o domínio em questão com este tipo de malha. Conseqüentemente, geometrias mais complexas e que reproduzam com maior fidelidade algum problema do mundo real requerem o emprego de malhas de elementos não-estruturadas. No âmbito do Método dos Volumes Finitos, embora existam formulações para estes casos, ainda é bastante escassa a formulações e o emprego de tais métodos para malhas não-estruturadas. Tendo as formulações baseadas em volumes finitos grande apelo a conservatividade, uma das propriedades mais desejadas na formulação de um método numérico, é fundamental o desenvolvimento e emprego dessas formulações para malhas não estruturadas. Assim, outro do ponto de grande destaque neste trabalho foi o estudo e desenvolvimento do Método de Volumes de Controle baseados em Elementos Finitos (CVFEM), abordado ao longo do Capítulo 4. Trata-se de uma formulação onde volumes de controle são construídos de um modo bem específico a partir de uma malha de elementos não-estruturada. As equações, uma integradas nesses volumes finitos, tem seus termos aproximados por meio de funções de forma similares àquelas encontradas no Método dos Elementos Finitos. Um dos principais destaques da formulação do CVFEM apresentada, foi a elaboração de uma forma de estabilização da função de interpolação linear para os termos convectivos. É um fato bastante conhecido nas formulações de métodos numéricos que o emprego de funções de forma lineares em termos convectivos resultam em soluções altamente oscilatórias quando o número de Peclet ou equivalente aumenta de valor, e que em nada representam a solução real do problema. Porém, ao se aplicar um tipo de estabilização para este tipo de formulação, pode-se obter soluções tão boas ou até melhores que aquelas formuladas com discretizações populares como o *upwind*. De fato, pode-se constatar que os resultados advindos desta estabilização foram bastante satisfatórios, sendo comparados a estabilizações similares no contexto do Método dos Elementos Finitos. Ainda neste capítulo, apresentou-se a formulação do algoritmo SIMPLE empregando-se o CVFEM. O método foi empregado em diversos testes, desde problemas simples de advecção-difusão a problemas envolvendo escoamentos e também com mudança de fase, tomando como base uma formulação baseada no método da entalpia-porosidade para este tipo de problema. Os resultados destes testes mostraram boa confiabilidade das soluções obtidas com o CVFEM, porém ainda é necessário um maior refinamento em suas

implementações.

Uma das principais aplicações do estudo de problemas de mudança de fase foi tratado ao longo do Capítulo 5. Consiste na aplicação de diferentes condições de resfriamento de materiais energéticos fundidos em moldes de granadas de grosso calibre. Algumas das principais motivações desse estudo decorrem da necessidade de um cuidadoso processo de manufatura e monitoramento das etapas até o produto final. Se determinados procedimentos adequados não forem tomados, alguns tipos de defeitos podem inviabilizar o uso em campo dos explosivos fabricados pois podem levar a acidentes catastróficos como detonação sua prematura. Assim, para se evitar acidentes e desperdícios de matéria-prima, recursos financeiros e de tempo, pode ser de grande utilidade a simulação computacional dos processos de manufatura desses explosivos. Para esta finalidade, o pacote de utilidades computacionais voltado para aplicações em mecânica dos fluidos e do contínuo em geral, OpenFOAM, foi abordado. Dentre as mais diversas aplicações contidas em sua implementação, o solver *buoyantPimpleFoam* foi o destacado para resolver as simulações relacionadas ao processo de solidificação dos materiais explosivos em moldes. A implementação do processo de mudança de fase se deu por meio de um módulo chamado *fvOptions* que, dentre outras utilidades, pode ser usado para implementar termos fonte relacionados ao método da entalpia-porosidade para problemas de mudança de fase. Detalhes das implementações do módulo, do solver e seu algoritmo principal, PIMPLE, foram estudados e detalhados a fim de compreender bem suas principais funcionalidade, potencialidades e até mesmo algumas possíveis limitações. Sua aplicação em problemas de mudança de fase foi validada com a comparação de resultados numéricos e experimentais encontrados na literatura com seus resultados numéricos obtidos, o que permitiu sua aplicação aos problemas de solidificação de explosivos em moldes de granada. Essa análise consistiu no estudo do efeito da imposição de diferentes condições de resfriamento por convecção na evolução da frente de solidificação de dois explosivos fundamentais: o TNT e a composição B. Uma série de experimentos a diferentes temperaturas de convecção em uma geometria axi-simétrica de uma granada de morteiro de 81mm foi realizada com ambos explosivos. A análise dos resultados mostrou como a imposição de diferentes temperaturas de convecção podem afetar significativamente a forma e o tempo de evolução da frente de solidificação. Em alguns casos, foi constatado que certas condições devem ser evitadas a fim de se evitar problemas graves com o material solidificado.

O estudo da evolução da frente de solidificação em um processo complexo como a manufatura de materiais explosivos constitui um etapa importante da análise numérica desses processos, mas não a única a ser considerada. Além da consideração dos efeitos da transferência de calor, do escoamento e da mudança de fase, a análise de tensões desempenham um papel fundamental para a determinação da qualidade do material final solidificado. Assim, uma continuação direta do conteúdo deste trabalho, consiste na análise e desenvolvimento de métodos para tratamento das tensões térmicas residuais que

surtem no explosivo solidificado. Alguns modelos que podem ser empregados com essa finalidade podem ser encontrados em [Teskeredžić et al. \(2002\)](#), [Teskeredžić et al. \(2015a\)](#) e [Teskeredžić et al. \(2015b\)](#), por exemplo. A implementação poderá ser feita através do CVFEM apresentado neste texto e desenvolvida em Python, ou até mesmo por meio dos solvers apropriados para a análise de tensões encontrados no OpenFOAM. Ainda assim, será fundamental compreender bem a implementação desses códigos a fim de fazer modificações que permitam acoplar o problema de mudança de fase à análise de tensões.

REFERÊNCIAS

US Army. Military explosives tm 9-1300-214, 1984.

B. R. Baliga e S. V. Patankar. A new finite-element formulation for convection-diffusion problems. *Numerical Heat Transfer*, 3(4):393–409, 1980. doi: 10.1080/01495728008961767. URL <http://dx.doi.org/10.1080/01495728008961767>.

B. R. Baliga e S. V. Patankar. A control volume finite-element method for two-dimensional fluid flow and heat transfer. *Numerical Heat Transfer*, 6(3):245–261, 1983. doi: 10.1080/01495728308963086. URL <http://dx.doi.org/10.1080/01495728308963086>.

G. Barakos, E. Mitsoulis, e D. Assimacopoulos. Natural convection flow in a square cavity revisited: Laminar and turbulent models with wall functions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 18(7):695–719, 1994. doi: 10.1002/flid.1650180705. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/flid.1650180705>.

Adrian Bejan e Allan D Kraus. *Heat transfer handbook*, volume 1. John Wiley & Sons, 2003.

O. Botella e R. Peyret. Benchmark spectral results on the lid-driven cavity flow. *Computers and Fluids*, 27(4):421 – 433, 1998. ISSN 0045-7930. doi: [https://doi.org/10.1016/S0045-7930\(98\)00002-4](https://doi.org/10.1016/S0045-7930(98)00002-4). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793098000024>.

AD Brent, VR Voller, e K t J Reid. Enthalpy-porosity technique for modeling convection-diffusion phase change: Application to the melting of a pure metal. *Numerical Heat Transfer, Part A Applications*, 13(3):297–318, 1988.

Alexander N. Brooks e Thomas J.R. Hughes. Streamline upwind/ Petrov-galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 32(1):199 – 259, 1982. ISSN 0045-7825. doi: [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(82\)90071-8](https://doi.org/10.1016/0045-7825(82)90071-8). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0045782582900718>.

Charles-Henri Bruneau e Mazen Saad. The 2d lid-driven cavity problem revisited. *Computers and Fluids*, 35(3):326 – 348, 2006a. ISSN 0045-7930. doi: <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2004.12.004>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793005000368>.

Charles-Henri Bruneau e Mazen Saad. The 2d lid-driven cavity problem revisited. *Computers and Fluids*, 35:326–348, 2006b.

Ashok V. Chatwani e Ali Turan. Technical note improved pressure-velocity coupling algorithm based on minimization of global residual norm. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 20(1):115–123, 1991. doi: 10.1080/10407799108944997.

Goong Chen, Qingang Xiong, Philip J Morris, Eric G Paterson, Alexey Sergeev, e Y Wang. Openfoam for computational fluid dynamics. *Not. AMS*, 61(4):354–363, 2014.

J. P. Van Doormaal e G. D. Raithby. Enhancements of the simple method for predicting incompressible fluid flows. *Numerical Heat Transfer*, 7(2):147–163, 1984. doi: 10.1080/01495728408961817.

Joel H. Ferziger e Milovan Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 2002.

The OpenFOAM Foundation. Openfoam user guide, version 8, 2020. URL <https://cfd.direct/openfoam/user-guide>.

Farooq Garoosi, Saba Garoosi, e Kamel Hooman. Numerical simulation of natural convection and mixed convection of the nanofluid in a square cavity using buongiorno model. *Powder Technology*, 268:279 – 292, 2014. ISSN 0032-5910. doi: <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2014.08.006>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591014007062>.

T. B. Gatski, C. E. GROSCH, e M. E. ROSE. A numerical study of the two-dimensional navier-stokes equations in vorticity-velocity variables. *Journal od Computational Physics*, 48:1–22, 1982.

C. Gau e R. Viskanta. Melting and solidification of a pure metal on a vertical wall. *Journal of Heat Transfer-transactions of The Asme - J HEAT TRANSFER*, 108, 02 1986. doi: 10.1115/1.3246884.

U. Ghia, K. N. Ghia, e C. T. Shin. High-re solutions for incompressible flow using the navier-stokes equations and a multigrid method. *Journal od Computational Physics*, 48: 387–411, 1982.

Tobias Holzmann. *Mathematics, Numerics, Derivations and OpenFOAM®*. 11 2019.

F.P. Incropera, D.P. Dewitt, T.L. Bergman, e A.S. Lavine. *Fundamentos De Transferência De Calor E De Massa*. LTC, 2014. ISBN 9788521625049. URL <https://books.google.com.br/books?id=HOUfvgAACA AJ>.

R.I Issa. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of Computational Physics*, 62(1):40 – 65, 1986. ISSN 0021-9991. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(86\)90099-9](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(86)90099-9). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999186900999>.

W Michael Lai, David H Rubin, David Rubin, e Erhard Krempl. *Introduction to continuum mechanics*. Butterworth-Heinemann, 2009.

R. Marek e J. Straub. Hybrid relaxation - a technique to enhance the rate of convergence of iterative algorithms. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 23(4):483–497, 1993a. doi: 10.1080/10407799308914912.

R. Marek e J. Straub. Hybrid relaxation —a technique to enhance the rate of convergence of iterative algorithms. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 23(4):483–497, 1993b. doi: 10.1080/10407799308914912. URL <http://dx.doi.org/10.1080/10407799308914912>.

Tomislav Maric, Jens Hopken, e Kyle Mooney. *The OpenFOAM Technology Primer*. Sourceflux, 2014.

N.C. Markatos e K.A. Pericleous. Laminar and turbulent natural convection in an enclosed cavity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 27(5):755 – 772, 1984. ISSN 0017-9310. doi: [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(84\)90145-5](https://doi.org/10.1016/0017-9310(84)90145-5). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0017931084901455>.

C.H. Min e W.Q. Tao. An under-relaxation factor control method for accelerating the iteration convergence of flow field simulation. *Engineering Computations*, 24(8):793–813, 2007. doi: 10.1108/02644400710833314.

Tadashi Morii e Karen Vierow. The soar method for automatically optimizing simple relaxation factors. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 38(3):309–332, 2000. doi: 10.1080/10407790050192799.

F Moukalled, L Mangani, e M Darwish. *The finite volume method in computational fluid dynamics: an advanced introduction with OpenFOAM and Matlab*. Fluid mechanics and its applications. Springer, Cham, 2016. URL <https://cds.cern.ch/record/2062562>.

Maicon W. N. Odone, Elson M. Toledo, Luis Paulo Silva Barra, e Carlos Eduardo Silva. Um estudo numérico sobre o método entalpia-porosidade na solução de problemas de mudança de fase. *XXXIV Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering, 2013, Goiânia - GO, Brasil*, 2013. URL <http://www.swge.inf.br/sitecilamce2013/cd/PDFS/CILAMCE2013-0604.PDF>.

Maicon W. N. Odone, Elson M. Toledo, e Luis Paulo Silva Barra. Estudos numéricos na solução de problemas de mudança de fase. *Dissertação de Mestrado. Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional, UFJF, Brasil*, 2014. URL http://www.ufjf.br/pgmc/files/2009/08/Dissertaç~{a}o_MaiconOdone.pdf.

Maicon W. N. Odone, Elson M. Toledo, Luis Paulo Silva Barra, e Lorrann Ferreira Maroco Sutter. Uma implementação do método dos volumes finitos para solução de problemas de mudança de fase. *XXXVI Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering, 2015, Rio de Janeiro - RJ, Brasil*, 2015.

Maicon W. N. Odone, Elson M. Toledo, e Luis Paulo Silva Barra. Um estudo sobre a influência dos fatores de relaxação na convergência da solução de problemas incompressíveis. *Mecánica Computacional, Volume XXXIV. Number 27. Heat And Mass Transfer (A)*, 2016. URL <http://www.cimec.org.ar/ojs/index.php/mc/article/viewFile/5107/5039>.

Maicon W. N. Odone, Ophir Valiante Duarte Neto, Elson M. Toledo, Luis Paulo Silva Barra, e Aline Cruz Soares. A study of continuum mechanics and phase change problems and it's numerical modelling using openfoam. *XL Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering, 2019, Natal - RN, Brasil*, 2019.

Reyad Omari. Cfd simulations of lid driven cavity flow at moderate reynolds number. *European Scientific Journal*, 9(15), 2013.

OpenFOAM. About OpenFOAM | CFD Direct, Jul 2019. URL <https://cfd.direct/openfoam/about>. [Online; acessado em 20 de Julho de 2019].

Suhas Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. CRC Press, 1980.

- John Patterson e Jorg Imberger. Unsteady natural convection in a rectangular cavity. *Journal of Fluid Mechanics*, 100(1):65–86, 1980. doi: 10.1017/S0022112080001012.
- C. Prakash e S. V. Patankar. A control volume-based finite-element method for solving the navier-stokes equations using equal-order velocity-pressure interpolation. *Numerical Heat Transfer*, 8(3):259–280, 1985. doi: 10.1080/01495728508961854. URL <http://dx.doi.org/10.1080/01495728508961854>.
- M. A. Rady e A. K. Mohanty. Natural convection during melting and solidification of pure metals in a cavity. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 29(1):49–63, 1996.
- Juntaek Ryoo, Z. Dragojlovic, e D. A. Kaminski. Control of convergence in a computational fluid dynamics simulation using anfis. *IEEE Transactions on Fuzzy Systems*, 13(1):42–47, 2005. doi: 10.1109/TFUZZ.2004.839656.
- H. J. Saabas e B. R. Baliga. Co-located equal-order control-volume finite-element method for multidimensional, incompressible. fluid flow -part i: Formulation. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 26(4):381–407, 1994a. doi: 10.1080/10407799408914936. URL <https://doi.org/10.1080/10407799408914936>.
- H. J. Saabas e B. R. Baliga. Co-located equal-order control-volume finite-element method for multidimensional, incompressible, fluid flow—part ii: Verification. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 26(4):409–424, 1994b. doi: 10.1080/10407799408914937. URL <https://doi.org/10.1080/10407799408914937>.
- H.J. Saabas. *A Control Volume Finite Element Method for Three-dimensional, Incompressible, Viscous Fluid Flow [microform]*. Canadian theses. Thesis (Ph.D.)—McGill University, 1991. ISBN 9780315720190. URL <https://books.google.com.br/books?id=i42pSgAACAAJ>.
- F. A. Schneider. Solução numerica de escoamentos bidimensionais em malhas não-estruturadas pelo metodo dos volumes finitos. *Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Brasil*, 1998. URL <https://repositorio.ufsc.br/xmlui/handle/123456789/158198>.
- E. Shurina, O. Solonenko, e T. Vojtovich. Technologies of finite volume – finite element method for the solution of convection-diffusion problems on unstructured grids. *Vychislitel'nye Tekhnologii*, 7, 01 2002.
- A. C. Soares. Modelagem numérica da solidificação em moldes: Aplicação a granadas de grande calibre. Master's thesis.
- W. Y. Soh e John W. Goodrich. Unsteady solution of incompressible navier-stokes equations. *Journal od Computational Physics*, 79:113–134, 1988.
- Farhad Talebi, Amir Mahmoudi, e Mina Shahi. Numerical study of mixed convection flows in a square lid-driven cavity utilising nanofluid. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 37:79–90, 01 2010. doi: 10.1016/j.icheatmasstransfer.2009.08.013.
- A. Teskeredžić, I. Demirdžić, e S. Muzaferija. Numerical method for heat transfer, fluid flow, and stress analysis in phase-change problems. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 42(5):437–459, 2002. doi: 10.1080/10407790190054021. URL <http://dx.doi.org/10.1080/10407790190054021>.

- A. Teskeredžić, I. Demirdžić, e S. Muzaferija. Numerical method for calculation of complete casting processes—part i: Theory. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 68(4):295–316, 2015a. doi: 10.1080/10407790.2015.1033296. URL <http://dx.doi.org/10.1080/10407790.2015.1033296>.
- A. Teskeredžić, I. Demirdžić, e S. Muzaferija. Numerical method for calculation of complete casting processes—part ii: Validation and application. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 68(4):317–335, 2015b. doi: 10.1080/10407790.2015.1033325. URL <http://dx.doi.org/10.1080/10407790.2015.1033325>.
- D. A. Venditti. *An h-Adaptive Control-Volume Finite Element Method for Steady, Two-Dimensional Fluid Flow and Heat Transfer*. Canadian theses. Thesis (Ph.D.)—McGill University, 1998.
- H.K. Versteeg e W. Malalasekera. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. Pearson Education Limited, 2007. ISBN 9780131274983. URL <https://books.google.com.br/books?id=RvBZ-UMpGzIC>.
- V. R. Voller. *Basic Control Volume Finite Element Methods For Fluids And Solids*. Iisc Research Monographs (Book 1). World Scientific Publishing Company, 2009. ISBN 9812834982.
- Vaughan R Voller e C Prakash. A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30(8):1709–1719, 1987a.
- Vaughan R Voller e C Prakash. A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30(8):1709–1719, 1987b.
- Vaughan R Voller, AD Brent, e C Prakash. The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 32(9):1719–1731, 1989.
- V.R. Voller e C. Prakash. A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30(8):1709 – 1719, 1987c. ISSN 0017-9310. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0017-9310\(87\)90317-6](http://dx.doi.org/10.1016/0017-9310(87)90317-6). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0017931087903176>.
- VR Voller, NC Markatos, e M Cross. Techniques for accounting for the moving interface in convection/diffusion phase change. *Numerical Methods in Thermal Problems*, 4: 595–609, 1985.
- VR Voller, M Cross, e NC Markatos. An enthalpy method for convection/diffusion phase change. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24(1):271–284, 1987.
- F. Wolff e R. Viskanta. Solidification of a pure metal at a vertical wall in the presence of liquid superheat. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 31(8):1735 – 1744, 1988. ISSN 0017-9310. doi: [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(88\)90285-2](https://doi.org/10.1016/0017-9310(88)90285-2). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0017931088902852>.

H. Zhou. A mass-weighted upwind-based control volume finite-element method for steady two-dimensional viscous compressible flows. *Masters Thesis. Engineering and Applied Science, Faculty of Engineering, University of Southampton*, 1997. URL <http://research.library.mun.ca/5318/>.


```

1  /*----- C++ -----*/
2
3  // Field
4  // Operation
5  // And
6  // Manipulation
7
8  FoamFile
9  {
10     version      2.0;
11     format       ascii;
12     class        volScalarField;
13     object       p_rgh;
14 }
15 // ..... //
16 dimensions      [1 -1 -2 0 0 0 0];
17 internalField   uniform 0;
18 boundaryField
19 {
20     bot
21     {
22         type      fixedGradient;
23         gradient  uniform 0;
24     }
25     top
26     {
27         type      totalPressure;
28         p0        uniform 0;
29     }
30     side-top
31     {
32         type      fixedGradient;
33         gradient  uniform 0;
34     }
35     side-bot
36     {
37         type      fixedGradient;
38         gradient  uniform 0;
39     }
40     front
41     {
42         type      wedge;
43     }
44     back
45     {
46         type      wedge;
47     }
48 }
49 // ..... //

```

Figura 131 – Condições iniciais e de contorno: arquivo p_rgh.

```

1  /*-----*-----*-----*-----*-----*-----*-----*-----*-----*
2
3  //      //      //      //      //      //      //      //      //      //
4  //      //      //      //      //      //      //      //      //      //
5  //      //      //      //      //      //      //      //      //      //
6  //      //      //      //      //      //      //      //      //      //
7  //      //      //      //      //      //      //      //      //      //
8  FoamFile
9  {
10     version      2.0;
11     format       ascii;
12     class        volScalarField;
13     object       sms1:alpha1;
14 }
15 // .....
16 dimensions      [0 0 0 0 0 0 0];
17 internalField   uniform 1;
18 boundaryField
19 {
20     side-top
21     {
22         type      zeroGradient;
23     }
24     side-bot
25     {
26         type      zeroGradient;
27     }
28     top
29     {
30         type      zeroGradient;
31     }
32     bot
33     {
34         type      zeroGradient;
35     }
36     front
37     {
38         type      wedge;
39     }
40     back
41     {
42         type      wedge;
43     }
44 }
45 // .....

```

Figura 132 – Condições iniciais e de contorno: arquivo solidificationMeltingSource1:alpha1.

Contornos da fração líquida de todos os testes executados

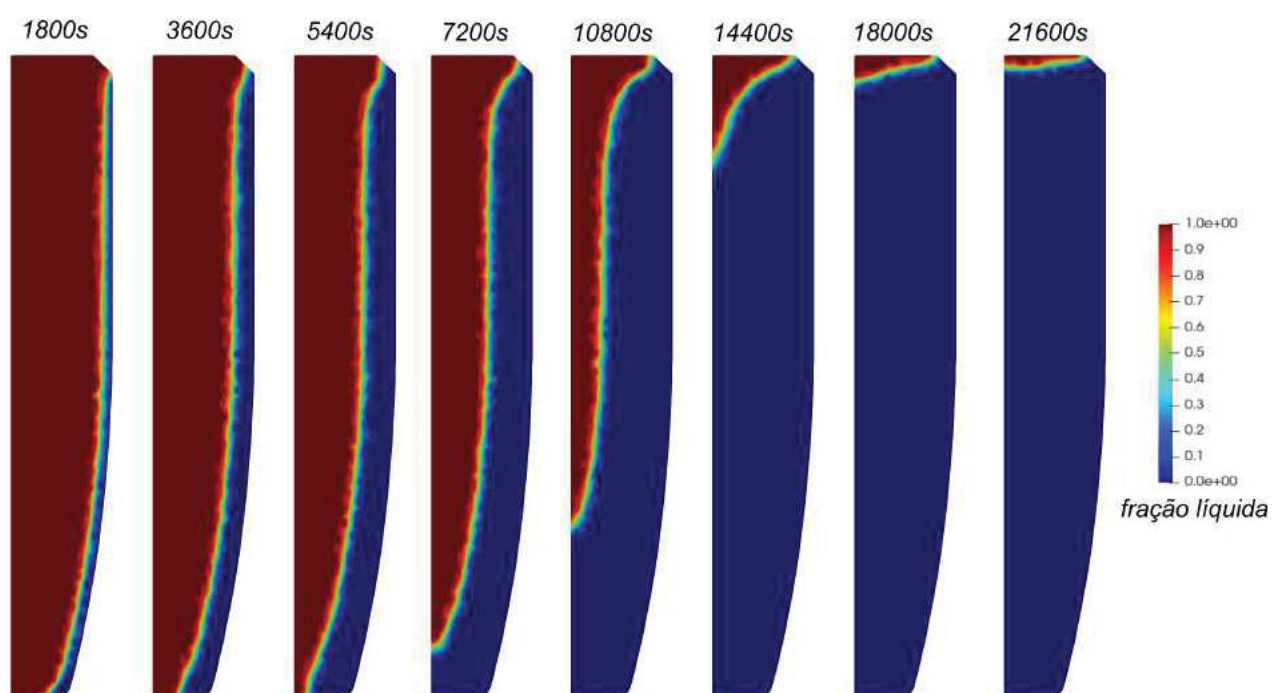


Figura 135 – Contornos da fração líquida - experimento E1-1.

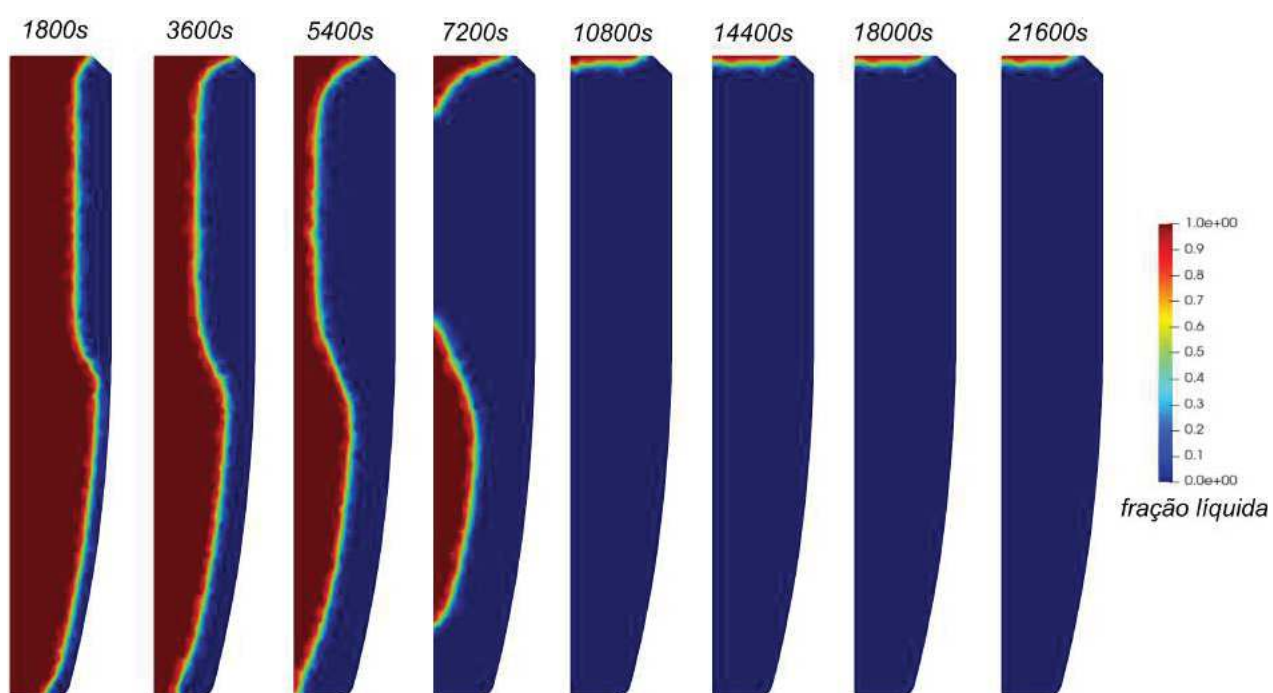


Figura 136 – Contornos da fração líquida - experimento E1-2.

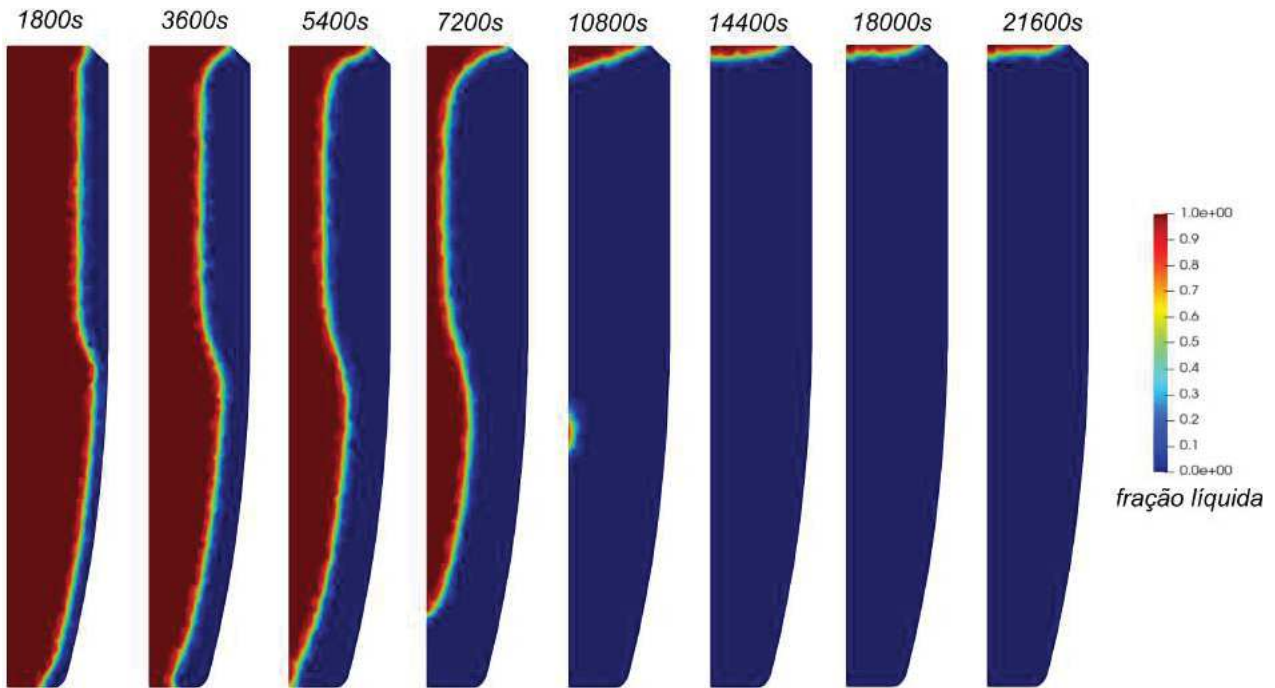


Figura 137 – Contornos da fração líquida - experimento E1-3.

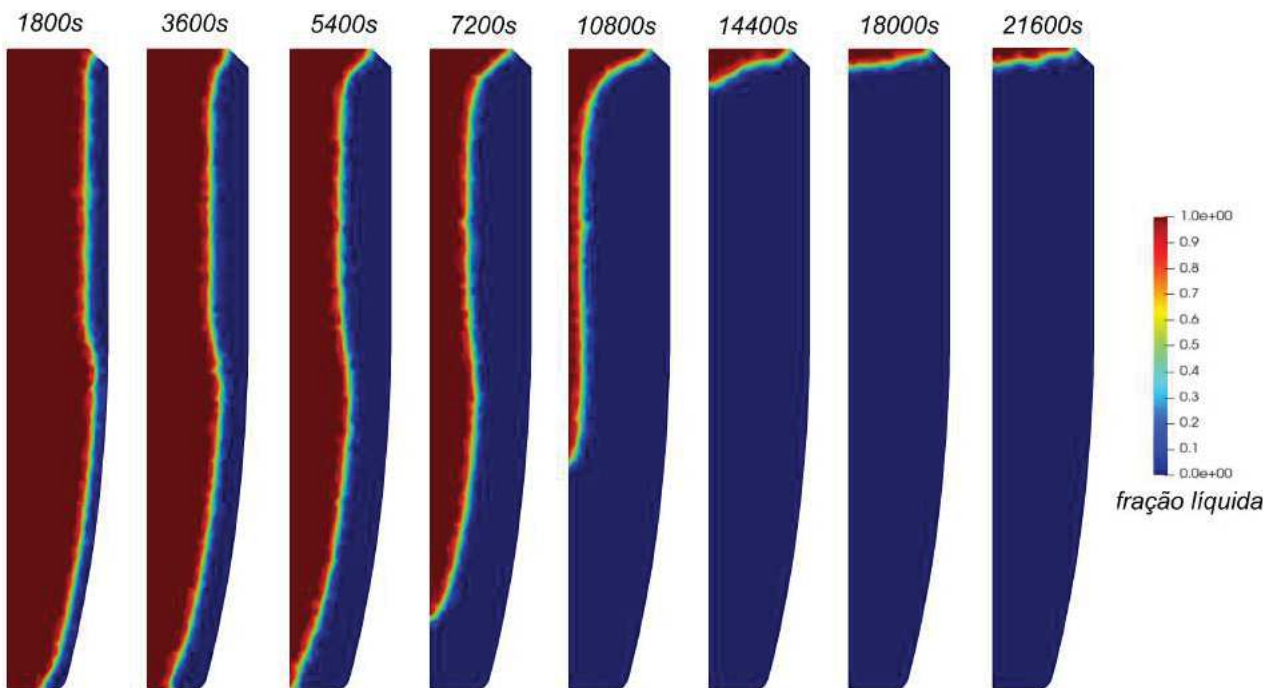


Figura 138 – Contornos da fração líquida - experimento E1-4.

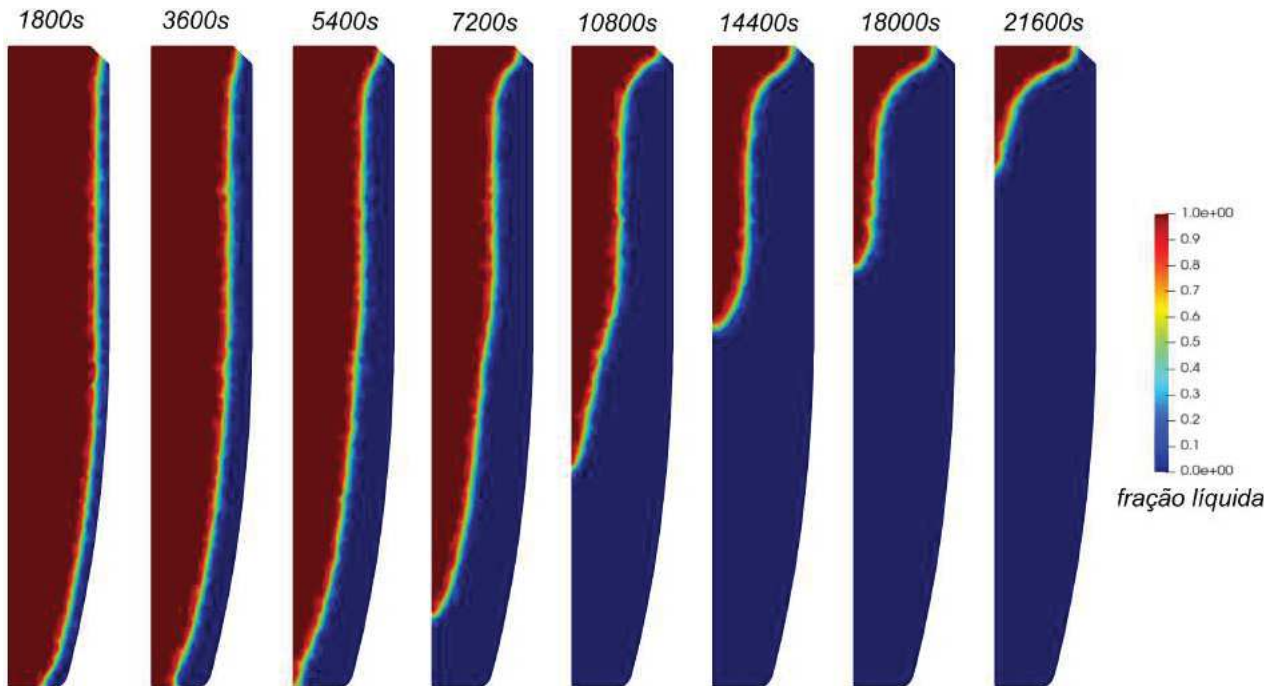


Figura 139 – Contornos da fração líquida - experimento E1-5.

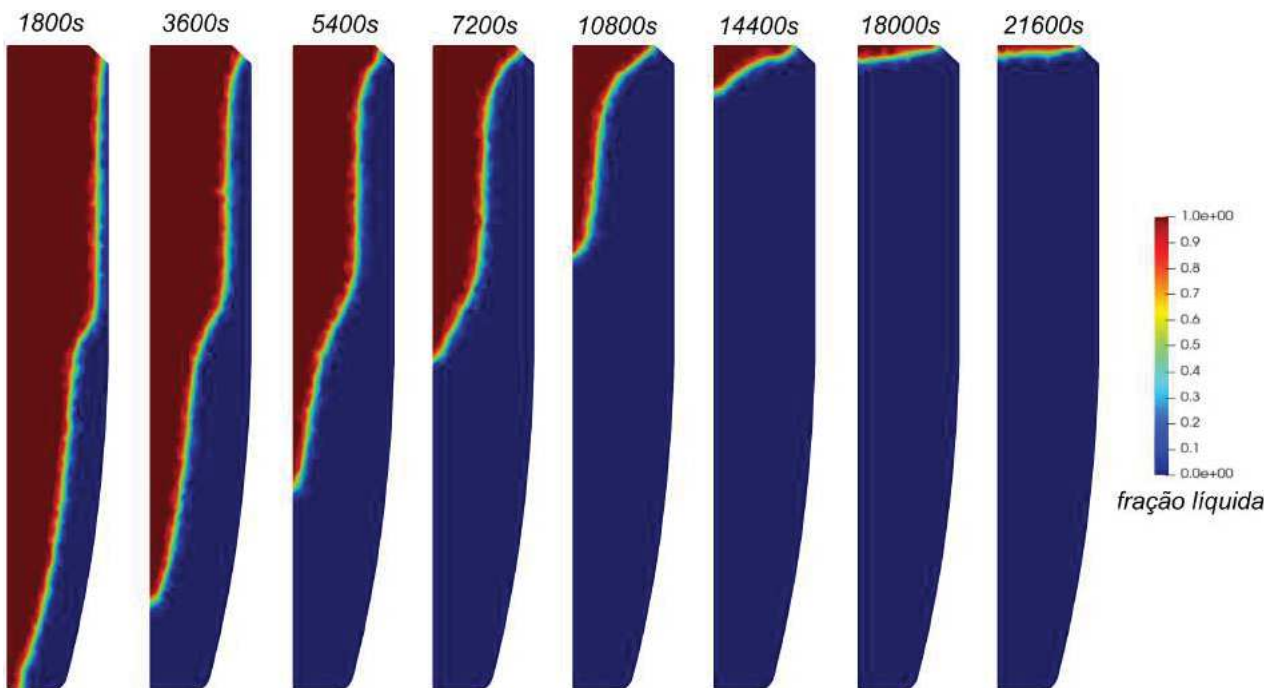


Figura 140 – Contornos da fração líquida - experimento E1-6.

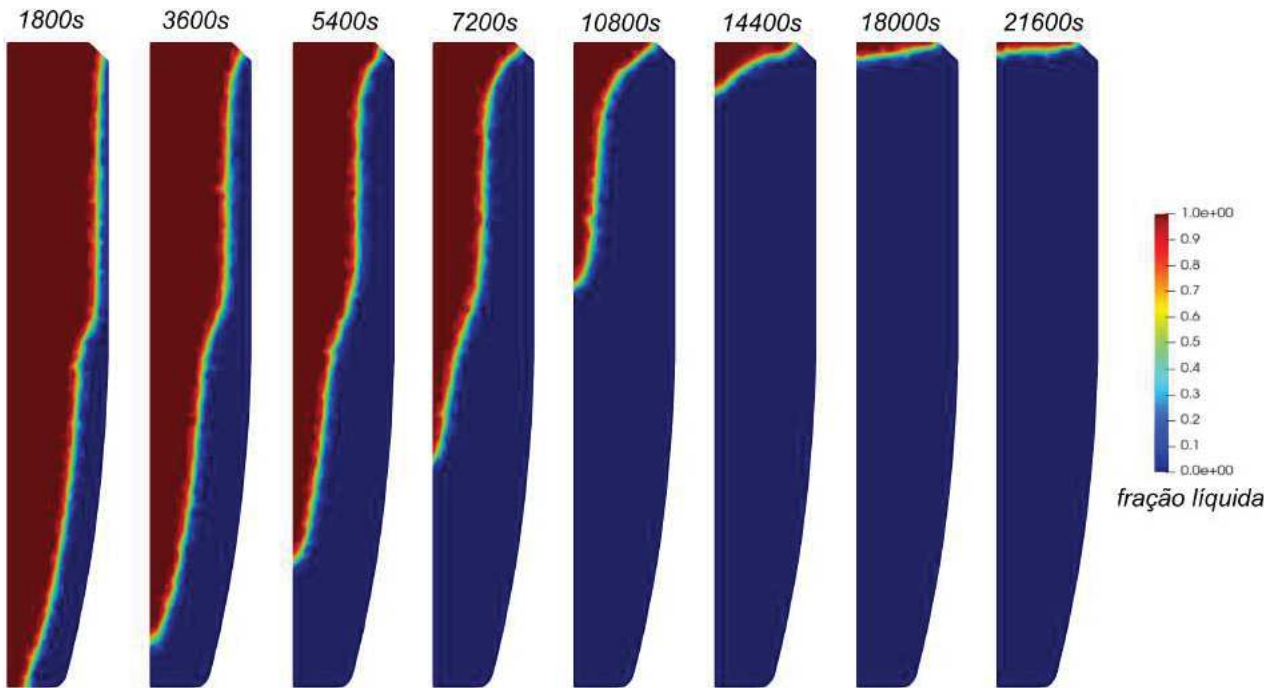


Figura 141 – Contornos da fração líquida - experimento E1-7.

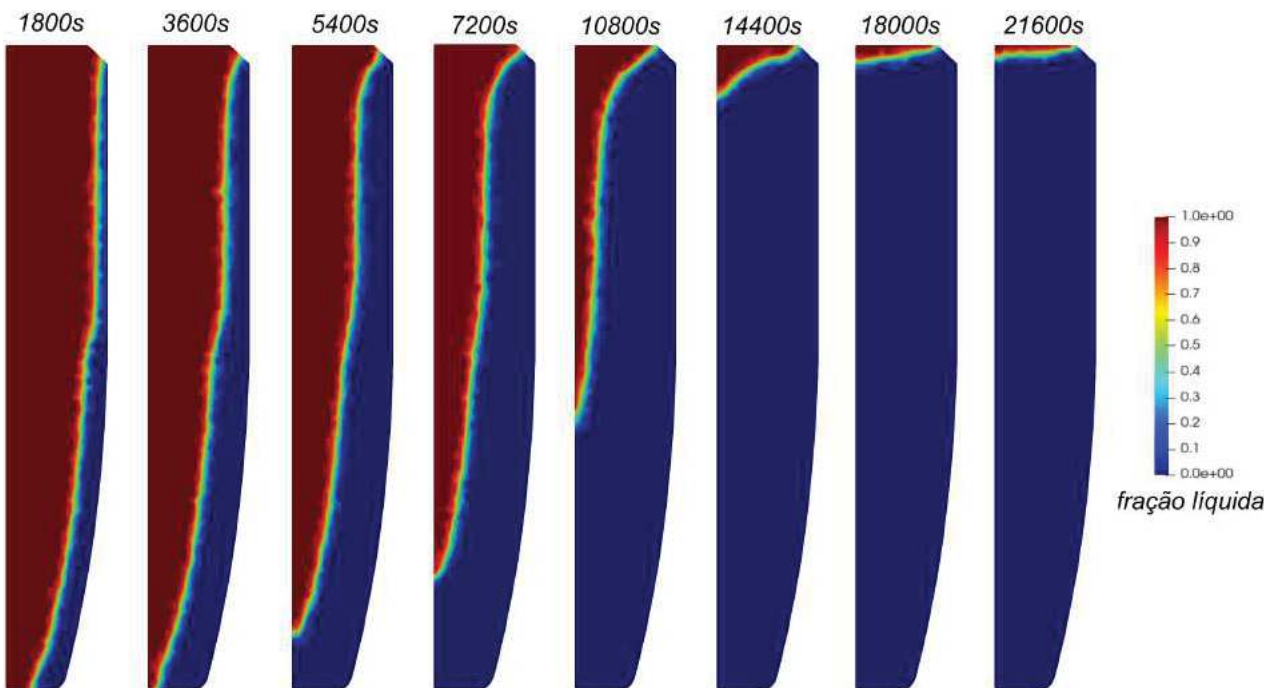


Figura 142 – Contornos da fração líquida - experimento E1-8.

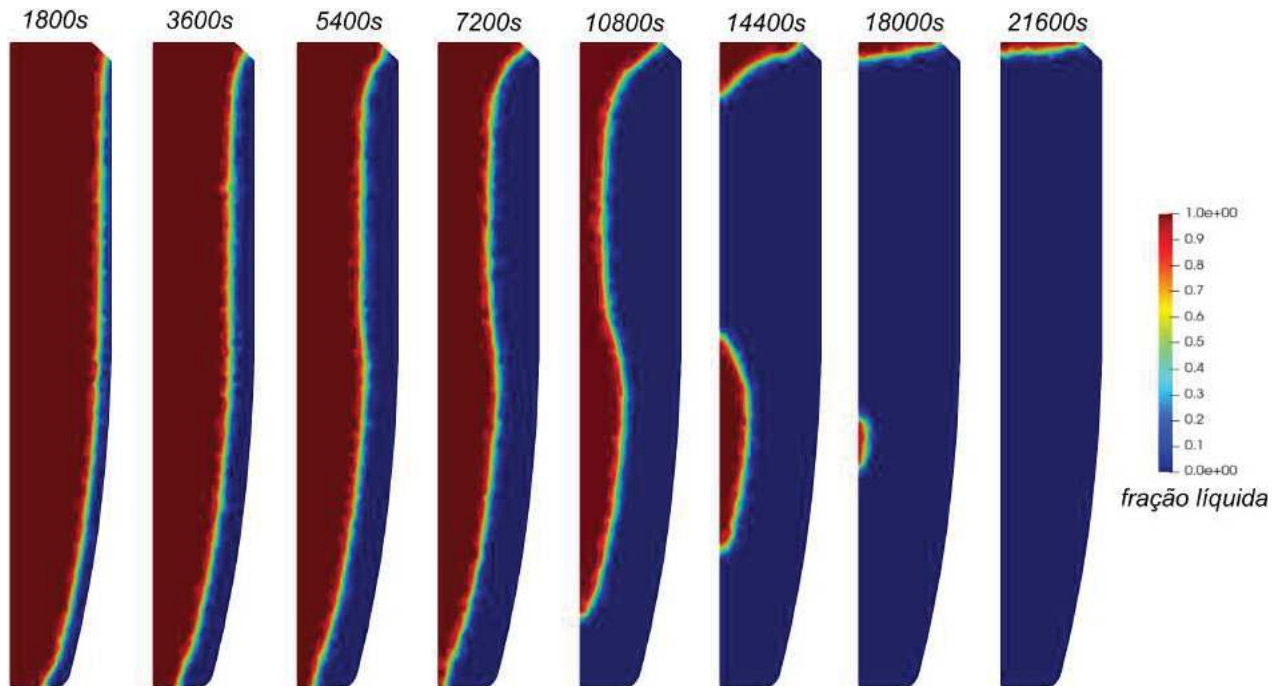


Figura 143 – Contornos da fração líquida - experimento E1-9.

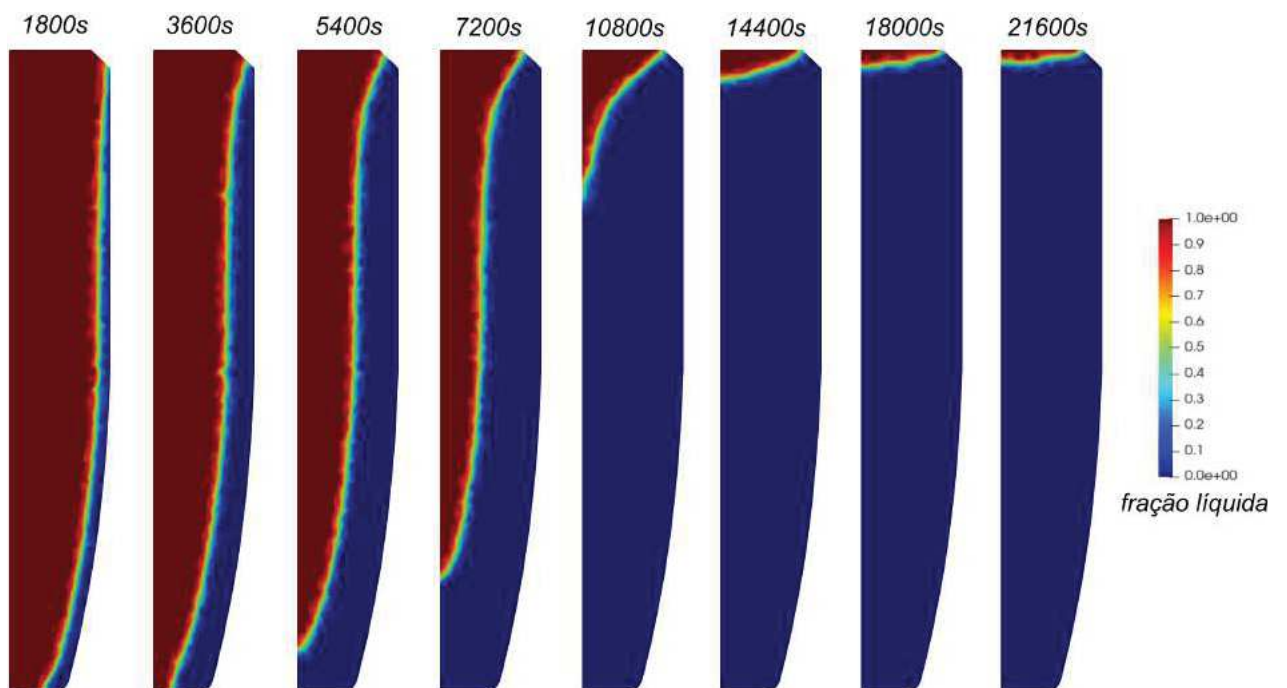


Figura 144 – Contornos da fração líquida - experimento E2-1.

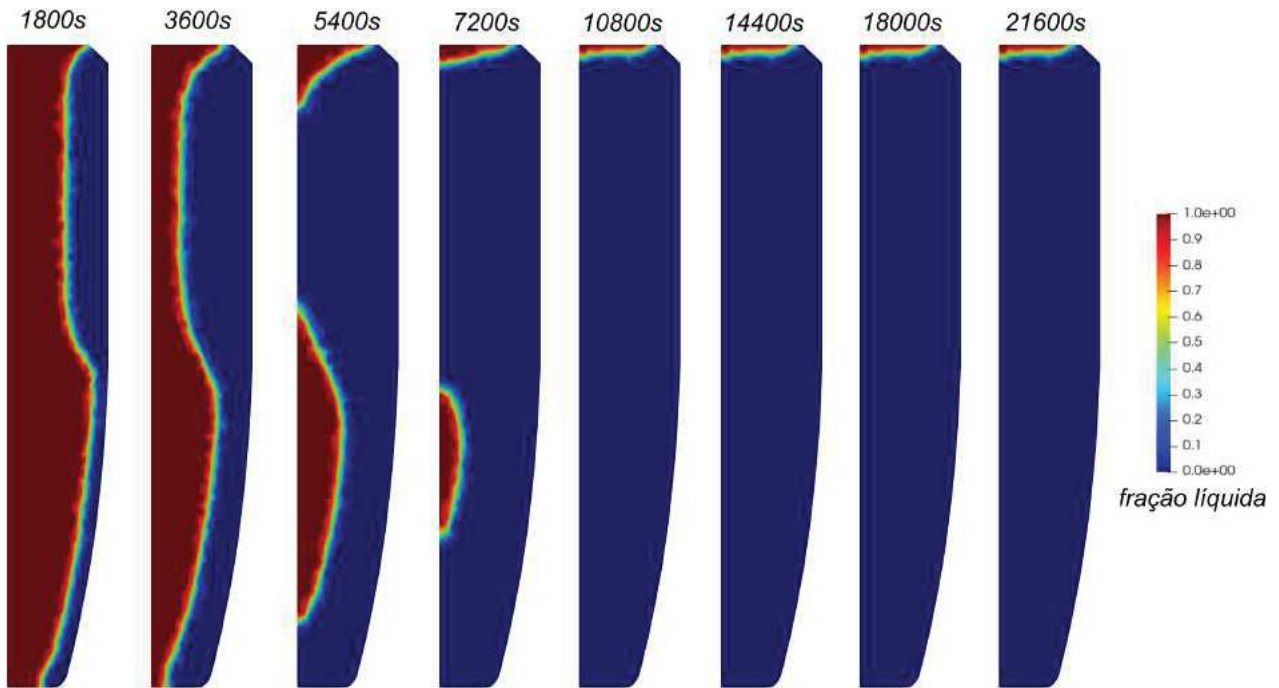


Figura 145 – Contornos da fração líquida - experimento E2-2.

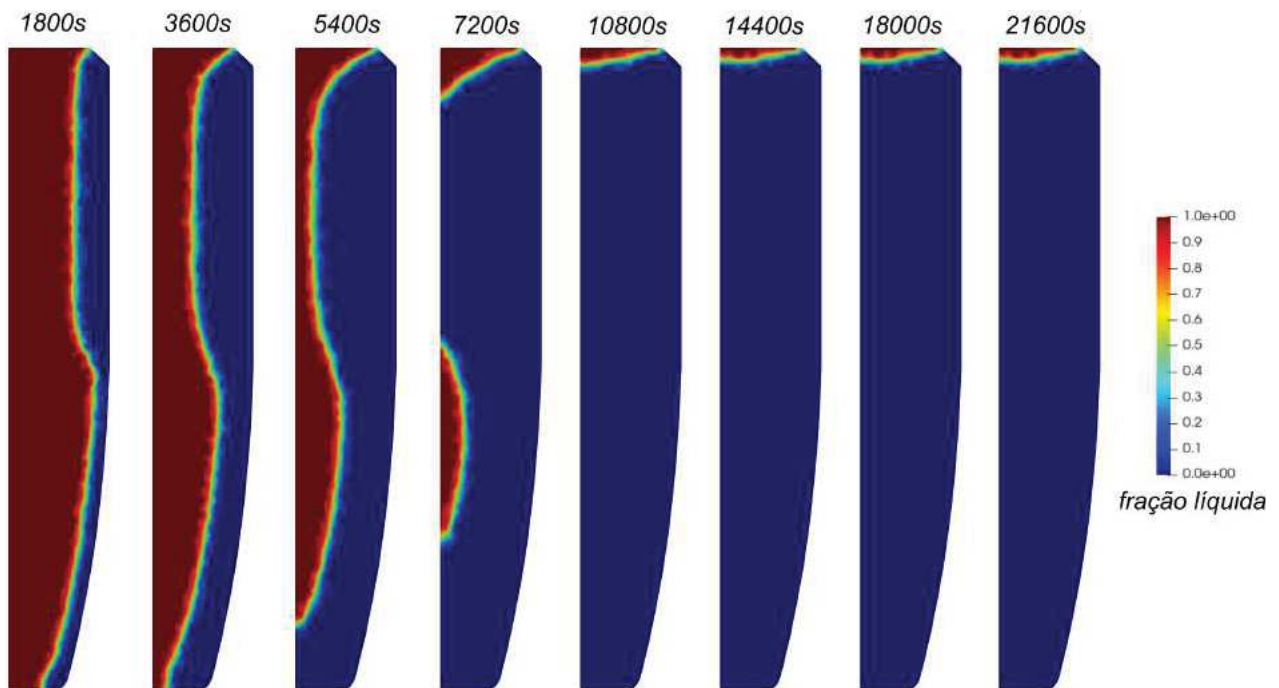


Figura 146 – Contornos da fração líquida - experimento E2-3.

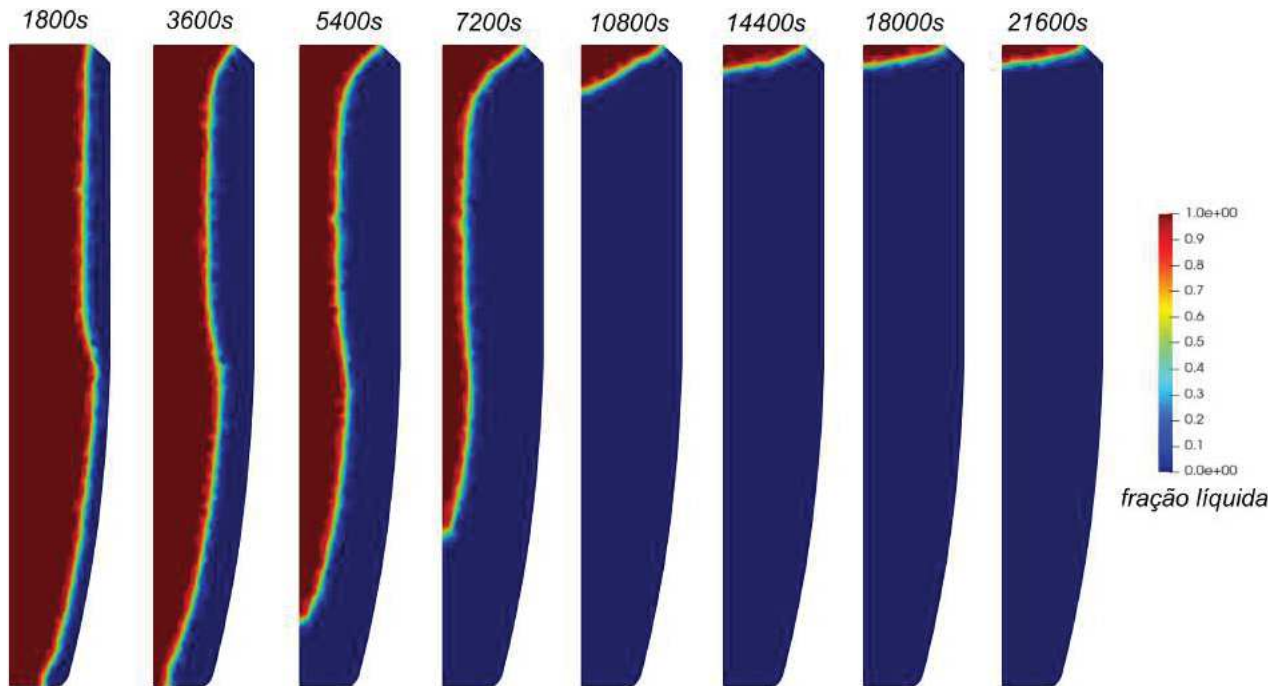


Figura 147 – Contornos da fração líquida - experimento E2-4.

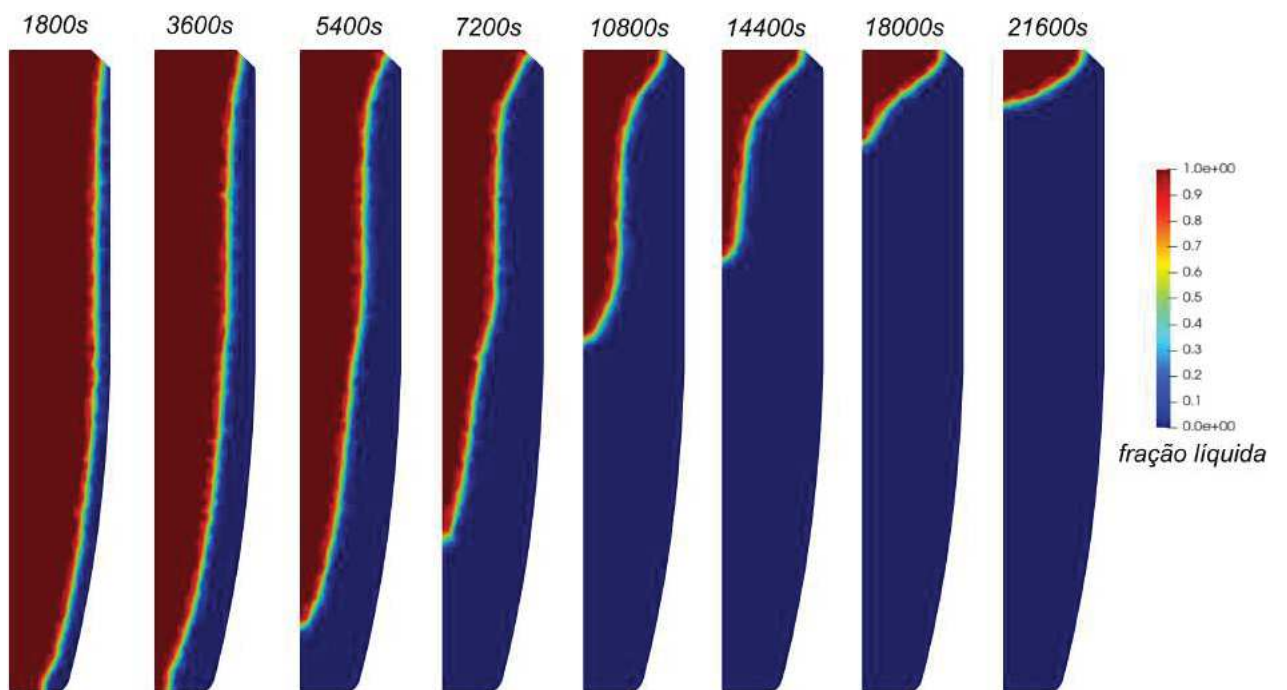


Figura 148 – Contornos da fração líquida - experimento E2-5.

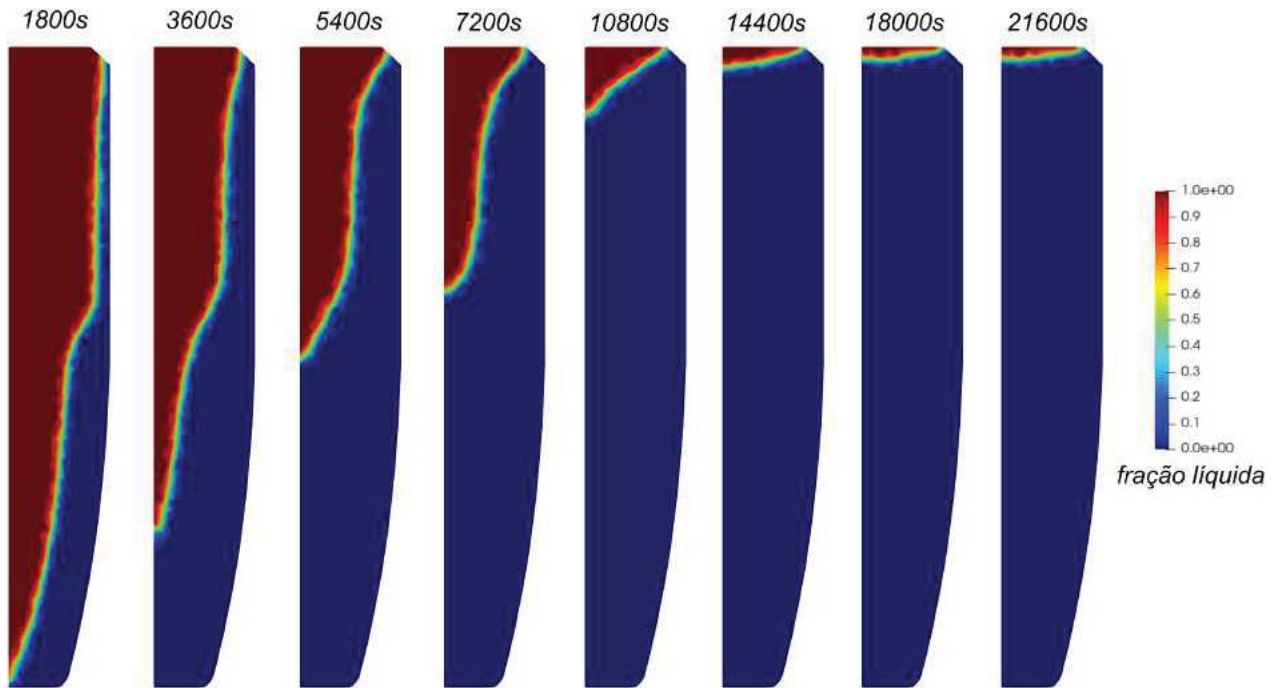


Figura 149 – Contornos da fração líquida - experimento E2-6.

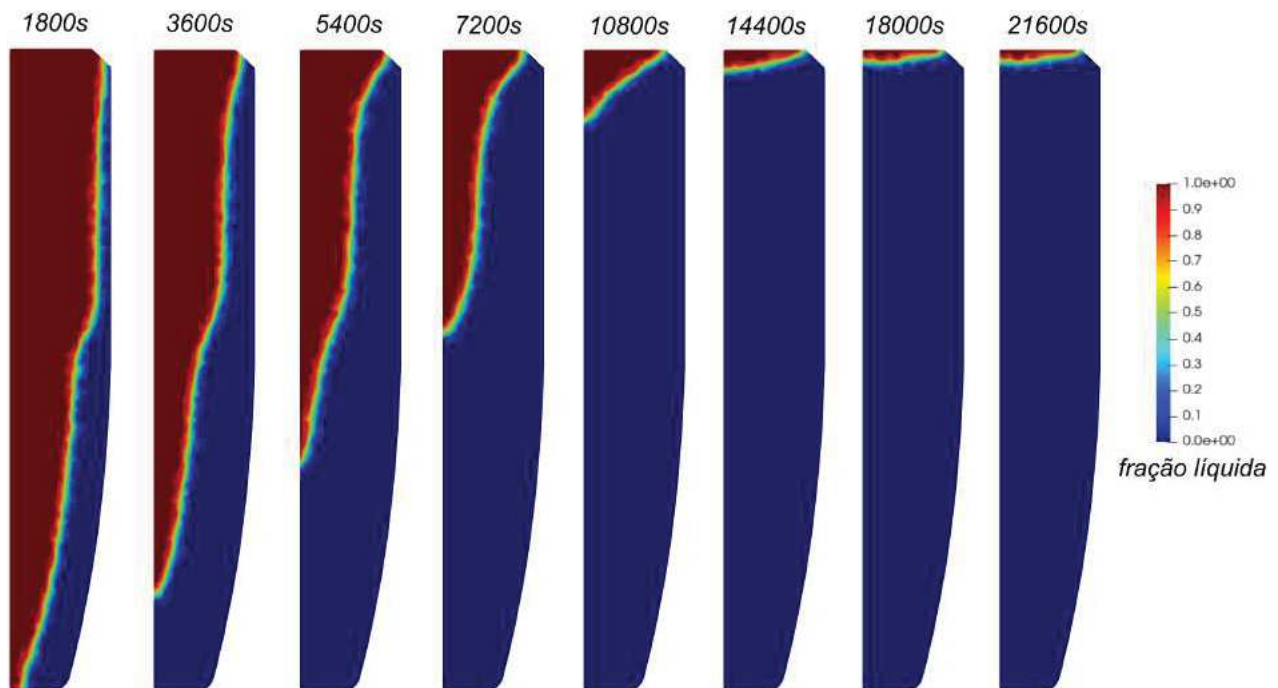


Figura 150 – Contornos da fração líquida - experimento E2-7.

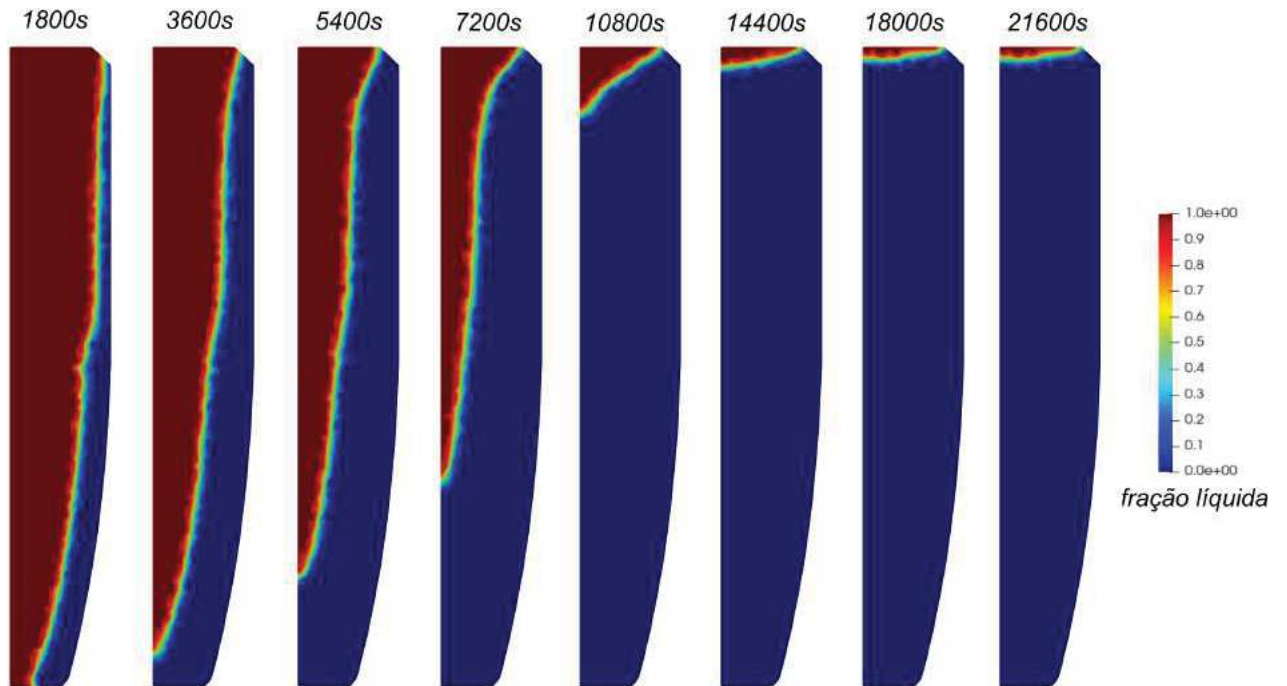


Figura 151 – Contornos da fração líquida - experimento E2-8.

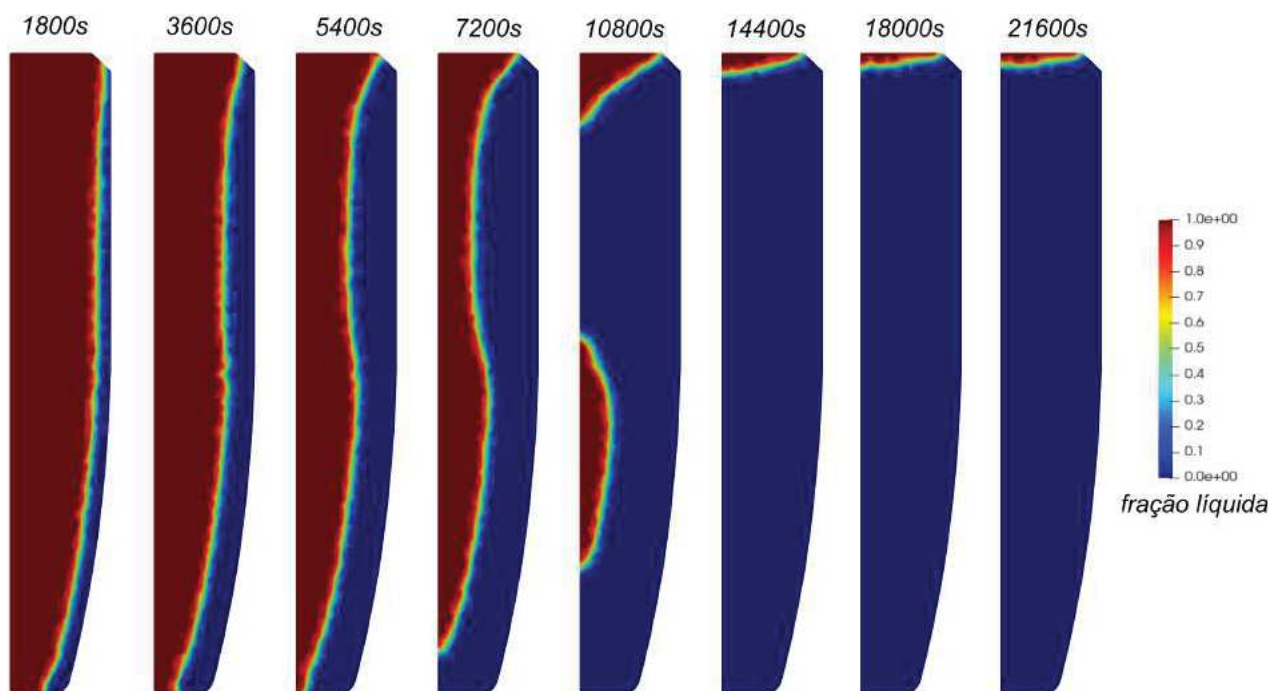


Figura 152 – Contornos da fração líquida - experimento E2-9.